



HAL
open science

Développement d'un modèle de Boltzmann sur gaz réseau pour l'étude du changement de phase en présence de convection naturelle et de rayonnement

Johann Miranda Fuentes

► **To cite this version:**

Johann Miranda Fuentes. Développement d'un modèle de Boltzmann sur gaz réseau pour l'étude du changement de phase en présence de convection naturelle et de rayonnement. Autre [cond-mat.other]. INSA de Lyon, 2013. Français. NNT : 2013ISAL0032 . tel-00961213

HAL Id: tel-00961213

<https://theses.hal.science/tel-00961213>

Submitted on 19 Mar 2014

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.

Thèse

**DÉVELOPPEMENT D'UN MODELE DE BOLTZMANN SUR GAZ
RESEAU POUR L'ÉTUDE DU CHANGEMENT DE PHASE EN
PRESENCE DE CONVECTION NATURELLE ET DE
RAYONNEMENT**

Présentée devant
L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon

Pour obtenir
Le grade de docteur

Formation doctorale : Énergétique
École doctorale : Mécanique, Énergétique, Génie Civil, Acoustique

Par
Johann MIRANDA FUENTES

Soutenue le 21 mai 2013 devant la Commission d'examen

Jury

Rapporteur	G. FRAISSE	Professeur (Université de Savoie)
Rapporteur	H. NAJI	Professeur (Université d'Artois)
Examineur	M. EL GANAOUI	Professeur (Université de Lorraine)
Examineur	D. QUENARD	Ingénieur, chef de division (CSTB)
Directeur de thèse	K. JOHANNES	Maître de Conférences (UCBL Lyon 1)
Directeur de thèse	F. KUZNIK	Maître de Conférences HDR (INSA de Lyon)
Directeur de thèse	J. VIRGONE	Professeur (UCBL Lyon 1)
Invité	M. COSNIER	Ingénieur (CSTB)

INSA Direction de la Recherche - Ecoles Doctorales – Quinquennal 2011-2015

SIGLE	ECOLE DOCTORALE	NOM ET COORDONNEES DU RESPONSABLE
CHIMIE	CHIMIE DE LYON http://www.edchimie-lyon.fr Insa : R. GOURDON	M. Jean Marc LANCELIN Université de Lyon – Collège Doctoral Bât ESCPE 43 bd du 11 novembre 1918 69622 VILLEURBANNE Cedex Tél : 04.72.43 13 95 directeur@edchimie-lyon.fr
E.E.A.	ELECTRONIQUE, ELECTROTECHNIQUE, AUTOMATIQUE http://edeaa.ec-lyon.fr Secrétariat : M.C. HAVGODOUKIAN eea@ec-lyon.fr	M. Gérard SCORLETTI Ecole Centrale de Lyon 36 avenue Guy de Collongue 69134 ECULLY Tél : 04.72.18 60 97 Fax : 04 78 43 37 17 Gerard.scorletti@ec-lyon.fr
E2M2	EVOLUTION, ECOSYSTEME, MICROBIOLOGIE, MODELISATION http://e2m2.universite-lyon.fr Insa : H. CHARLES	Mme Gudrun BORNETTE CNRS UMR 5023 LEHNA Université Claude Bernard Lyon 1 Bât Forel 43 bd du 11 novembre 1918 69622 VILLEURBANNE Cédex Tél : 04.72.43.12.94 e2m2@biomserv.univ-lyon1.fr
EDISS	INTERDISCIPLINAIRE SCIENCES-SANTE http://ww2.ibcp.fr/ediss Sec : Safia AIT CHALAL Insa : M. LAGARDE	M. Didier REVEL Hôpital Louis Pradel Bâtiment Central 28 Avenue Doyen Lépine 69677 BRON Tél : 04.72.68 49 09 Fax :04 72 35 49 16 Didier.revel@creatis.uni-lyon1.fr
INFOMATHS	INFORMATIQUE ET MATHEMATIQUES http://infomaths.univ-lyon1.fr	M. Johannes KELLENDONK Université Claude Bernard Lyon 1 INFOMATHS Bâtiment Braconnier 43 bd du 11 novembre 1918 69622 VILLEURBANNE Cedex Tél : 04.72. 44.82.94 Fax 04 72 43 16 87 infomaths@univ-lyon1.fr
Matériaux	MATERIAUX DE LYON Secrétariat : M. LABOUNE PM : 71.70 –Fax : 87.12 Bat. Saint Exupéry Ed.materiaux@insa-lyon.fr	M. Jean-Yves BUFFIERE INSA de Lyon MATEIS Bâtiment Saint Exupéry 7 avenue Jean Capelle 69621 VILLEURBANNE Cédex Tél : 04.72.43 83 18 Fax 04 72 43 85 28 Jean-yves.buffiere@insa-lyon.fr
MEGA	MECANIQUE, ENERGETIQUE, GENIE CIVIL, ACOUSTIQUE Secrétariat : M. LABOUNE PM : 71.70 –Fax : 87.12 Bat. Saint Exupéry mega@insa-lyon.fr	M. Philippe BOISSE INSA de Lyon Laboratoire LAMCOS Bâtiment Jacquard 25 bis avenue Jean Capelle 69621 VILLEURBANNE Cedex Tél :04.72.43.71.70 Fax : 04 72 43 72 37 Philippe.boisse@insa-lyon.fr
ScSo	ScSo* M. OBADIA Lionel Sec : Viviane POLSINELLI Insa : J.Y. TOUSSAINT	M. OBADIA Lionel Université Lyon 2 86 rue Pasteur 69365 LYON Cedex 07 Tél : 04.78.69.72.76 Fax : 04.37.28.04.48 Lionel.Obadia@univ-lyon2.fr

*ScSo : Histoire, Géographie, Aménagement, Urbanisme, Archéologie, Science politique, Sociologie, Anthropologie

*Douter de tout ou tout croire sont deux solutions également
commodes qui, l'une comme l'autre, nous dispensent de réfléchir*
POINCARÉ

Résumé

La réduction des émissions de gaz à effet de serre (GES) passe par la réduction des consommations d'énergie. Puisqu'en France le bâtiment résidentiel et tertiaire est le plus grand consommateur d'énergie, il est considéré comme « le principal gisement d'économies d'énergie exploitable immédiatement ». La source principale d'énergie que représente le soleil reste encore sous exploitée du fait son intermittence. Le stockage de la chaleur se montre comme une solution au décalage entre disponibilité et demande d'énergie. Parmi les techniques de stockage, le stockage latent a la capacité de stocker une quantité d'énergie par unité de volume plus importante qu'un système sensible.

Le projet INERTRANS a proposé le développement d'une façade innovante, associant une isolation translucide et le stockage latent avec un matériau à changement de phase (MCP). La fusion du MCP s'accompagne de différents phénomènes, à savoir, la convection naturelle et l'absorption ou transmission du rayonnement. Le couplage de l'ensemble de ces phénomènes n'a pas été étudié dans la littérature.

Dans cette thèse un modèle numérique 2D pour l'étude du changement de phase a été développé. Ce modèle utilise la méthode de Boltzmann sur réseau (LB) à temps de relaxation multiple (MRT), pour la résolution du champ de vitesse et la méthode des différences finies, pour la résolution du champ de températures. Le changement de phase a été traité par la formulation enthalpique. L'originalité est l'application de ce modèle hybride au problème de changement de phase avec convection naturelle, d'une part, et au changement de phase avec convection naturelle et rayonnement, d'autre part.

Pour vérifier notre modèle sans la présence de rayonnement, un cas de référence de la littérature a été simulé. Il s'agit de la fusion des deux MCP, l'étain et l'octadécane, à faible et fort nombre de Prandtl, respectivement. La simulation de l'étain a confirmé un écoulement multicellulaire, qui commence par quatre cellules qui se fusionnent ensuite en trois puis en deux cellules. La simulation de l'octadécane a montré une forte influence de la convection avec un front de fusion qui se déforme sur toute la cavité. Le nombre de Nusselt pour l'octadécane avec convection est plus de trois fois le Nusselt sans convection.

Ensuite, la simulation de l'acide gras de la brique INERTRANS a montré que la convection ne doit pas être négligée, car le flux prédit avec convection peut être jusqu'à trois fois plus grand que le flux prédit sans convection. En outre, le flux sur la paroi froide augmente aussi et la fraction fondue est près du double qu'en conduction seule.

Puis, la méthode de Boltzmann sur réseau appliquée aux transferts radiatifs a été étudiée. Il se trouve, qu'à l'état actuel cette méthode n'est pas compétitive par rapport à une méthode classique des ordonnées discrètes (MOD).

Enfin, nous avons couplé la MOD pour le calcul du flux radiatif avec la méthode LB pour le calcul du champ de vitesses et des différences finies pour l'équation de l'énergie, afin de résoudre les transferts couplés changement de phase, convection et rayonnement. Le rayonnement grande longueur d'onde n'a pas d'influence notable sur les transferts thermiques. Le rayonnement courte longueur d'onde augmente les transferts thermiques, pourtant, cet effet n'est pas aussi important que l'augmentation due à la convection pour le matériau choisi. Puisqu'aucune solution de référence n'existe dans la bibliographie, nos résultats peuvent désormais servir d'éléments de comparaison pour de futurs travaux. Une validation expérimentale constituerait une perspective nécessaire.

Mots-clefs : convection naturelle, façades translucides, fusion avec convection naturelle, fusion avec rayonnement, matériaux à changement de phase (MCP), matériaux isolants transparents (TIM), méthode de Boltzmann sur réseau (LBM), rayonnement.

Abstract

Reduction of greenhouse gas emissions requires reduction of energy consumption. In France, residential and commercial buildings are the largest consumer of energy, so they are considered the main source of energy savings immediately.

The sun, as the main energy source is still underexploited because its intermittency. Energy storage appears as a solution to the gap between energy availability and energy demand. Among storage techniques, latent heat storage offers higher energy storage density than sensible heat storage.

INERTRANS project has proposed the development of an innovative facade, coupling transparent insulation and energy storage with a fatty acid phase change materials (PCM). Melting of PCM comprises different phenomena, namely, natural convection in the liquid phase and radiation absorption or transmission. The coupling of all this phenomena is not still studied in scientific literature.

In this thesis, a 2D numerical model for studying phase change has been developed. This model uses the lattice Boltzmann method (LBM) with multiple relaxation time (MRT) to resolve velocity field, and finite differences for the temperature field. Phase change is treated with the enthalpy formulation. The original contribution is application of this hybrid approach to the phase change with natural convection, on the one hand, and to the phase change with natural convection and radiation, on the other hand.

To verify the model without radiation, a test case taken from literature has been simulated. It concerns the melting of two PCM with a low and high Prandtl number, the tin and octadecane, respectively. Tin melting simulation confirms multiple cells flow, starting with four rolls which merges in three then two rolls. Octadecane simulation shows high convection effect, with a melting front deforming all along the cavity height. Nusselt number plot for octadecane melting with convection is more than three times with conduction only.

Then, INERTRANS' fatty acid simulation shows that convection shall not be neglected, because predicted heat flux with convection may be up to three times that predicted with conduction only. Furthermore, heat flux through cold wall is also increased and melted fraction is almost twice than with conduction only.

The lattice Boltzmann method applied to radiative heat transfer has also been explored. It turns out that in its current state, this method is not competitive compared to a conventional discrete ordinates method (DOM).

Finally, we coupled the DOM for radiation heat flux, with the LBM for velocity field calculation and finite differences for the energy equation to solve the coupling between phase change, convection and radiation. Long wavelength radiation has no noticeable effect on heat transfer. Short wavelength radiation increases heat transfer, however, this increase is not as important as that produced by convection for this kind of material. Since no reference solution exists in the literature, our results can now serve as a basis for future work. An experimental validation would be a necessary perspective.

Keywords: lattice Boltzmann method (LBM), melting with natural convection, melting with radiation, natural convection, phase change materials (MCP), radiation, translucent wall, transparent insulation material (TIM)

Resumen

La reducción de emisiones de gases de efecto invernadero implica la reducción del consumo energético. Puesto que en Francia los edificios residenciales y de servicios son los más grandes consumidores de energía, estos son considerados como el campo principal de ahorros inmediatos de energía.

La energía solar es aún subutilizada debido a su intermitencia. El almacenamiento de energía es una solución al conflicto entre demanda y oferta de energía. Entre las técnicas de almacenamiento, el almacenamiento de calor latente ofrece una mayor cantidad de energía por unidad de volumen que el almacenamiento de calor sensible.

El proyecto INERTRANS propuso el desarrollo de una fachada innovadora, que asocia aislamiento translucido y almacenamiento de calor latente por medio de un material con cambio de fase (PCM). La fusión de un PCM implica diferentes fenómenos, a saber, la convección natural y la absorción o transmisión de la radiación. Estos fenómenos acoplados no han sido estudiados en la literatura.

En esta tesis se desarrolló un modelo numérico 2D para la simulación del cambio de fase. Este modelo utiliza el método de Boltzmann en red (LB) con tiempo de relajación múltiple (MRT) para la solución del campo de velocidades y el método de diferencias finitas para la solución del campo de temperaturas. El cambio de fase es tratado con una formulación entálpica. La originalidad es por un lado, aplicación de este modelo híbrido al problema de cambio de fase con convección natural, y por otro lado, al problema de cambio de fase con convección natural y radiación.

Para verificar el modelo sin radiación, se simuló un caso de referencia de la literatura. Se trata de la fusión de dos PCM, el estaño y el octadecano, caracterizados por un pequeño y un grande número de Prandtl, respectivamente. La simulación del estaño confirmó un flujo multicelular, que comienza con cuatro células que se juntan en tres y luego en dos. La simulación del octadecano mostró una fuerte influencia de la convección con un frente de fusión que se deforma a lo largo de la cavidad. Para el octadecano, el número de Nusselt con convección es más del triple que sin convección.

La simulación del ácido graso del proyecto INERTRANS mostró que no se puede despreciar la convección, ya que el flujo predicho con convección puede ser hasta tres veces más grande que sin convección. Además, el flujo sobre la pared fría aumenta también y la fracción fundida es más del doble que en conducción sola.

Se estudió también el método de Boltzmann en red aplicado a la transferencia de calor por radiación. Se encontró que en su estado actual este método no es competitivo con respecto a un método clásico de ordenadas discretas (DOM).

Finalmente, el DOM para el cálculo de flujo radiativo fue acoplado al LBM para el cálculo del campo de velocidades y al método de diferencias finitas para la ecuación de la energía, con el fin de resolver la transferencia de calor durante el cambio de fase con convección y radiación. La radiación de grandes longitudes de onda tiene poca influencia sobre la transferencia de calor. La radiación de corta longitud de onda aumenta la transferencia de calor, sin embargo, este efecto no es tan importante como el aumento producido por la convección, en el material utilizado. Como no existen soluciones de referencia, nuestros resultados pueden servir desde ahora como elemento de comparación de trabajos futuros. Una validación experimental es una perspectiva necesaria.

Palabras clave : convección natural, fachada translúcida, fusión con convección natural, fusión con radiación, material aislante transparente, material con cambio de fase, método de Boltzmann en red, radiación.

Nomenclature

\vec{c}_i	vitesse LB	
c_p	chaleur spécifique	J/(kgK)
D	dimension d'espace	
f_i	fonction de distribution	
f_i^{eq}	fonction de distribution d'équilibre	
f_L	fraction liquide	
I	luminance	W/(m ² sr)
I_b	fonction de Planck	W/(m ² sr)
\vec{j}	quantité de mouvement	kg/(m ² s)
L_h	chaleur latente	J/kg
$P_{\alpha\beta}$	tenseur de contraintes	Pa
\vec{q}	vecteur de flux de chaleur	W/m ²
$s(t)$	position du front de fusion	m
s_m	direction d'ordonnée discrète	
t	temps	s
T_F	température de fusion	°C
\vec{u}	vitesse macroscopique	m/s
u_x	composante x de la vitesse macroscopique	m/s
u_y	composante y de la vitesse macroscopique	m/s
w_m	poids des ordonnées discrètes	sr
W_i	poids de la distribution d'équilibre	

Nombres adimensionnels

Fo	nombre de Fourier	$\alpha t/L^2$
Nu	nombre de Nusselt	hL/κ
Pl	nombre de Planck	$\kappa\Delta T/\sigma_B T^3$
Pr	nombre de Prandtl	ν/α
Ra	nombre de Rayleigh	$g\beta\Delta T L^3/\nu\alpha$
Ste	nombre de Stefan	$c_p\Delta T/L_h$

Lettres grecques

α	diffusivité thermique	m ² /s
β	coefficient de dilatation thermique	K ⁻¹
γ	coefficient d'interpolation de la méthode des ordonnées discrètes	
$\delta_{\alpha\beta}$	delta de Kronecker	
Δx	discrétisation de l'espace	m
Δt	discrétisation du temps	s
ε	émissivité	
κ	conductivité thermique	W/(mK)
κ_a	coefficient d'absorption	m ⁻¹
β_e	coefficient d'extinction	m ⁻¹

λ	longueur d'onde	m
μ_m	cosinus directeur	
ν	viscosité cinématique	m ² /s
ω	albédo	
ψ_k	invariants de collision	
ρ	masse volumique	kg/m ³
$\vec{\xi}$	vitesse microscopique	
σ_B	constante de Stefan-Boltzmann	W/(m ² K ⁴)
σ_s	coefficient de diffusion	m ⁻¹
τ	temps de relaxation	
τ_λ	épaisseur optique	

Indices

E	est
LB	unités LB
m	quantité moyenne
N	nord
S	sud
x	composante en x
y	composante en y
W	ouest

Exposants

* valeur adimensionnelle

Les vecteurs, sont également identifiés par un indice en lettres grecques. Par exemple, le vecteur de vitesse \vec{u} , est également noté u_α , dont l'indice α est x , y , ou z , le cas échéant.

Acronymes

CLO	courte longueur d'onde
ETR	équation de transfert radiatif
FDM	méthode des différences finies (<i>finite difference method</i>)
FVM	méthode des volumes finis (<i>finite volume method</i>)
GLO	grande longueur d'onde
LB	Boltzmann sur réseau (<i>lattice Boltzmann</i>)
LBM	méthode de Boltzmann sur réseau (<i>lattice Boltzmann method</i>)
LGCA	automates cellulaires de gaz sur réseau (<i>lattice gas cellular automata</i>)
MCP	matériau à changement de phase
MOD	méthode des ordonnées discrètes (<i>discrete ordinate method</i>)
MRT	temps de relaxation multiple (<i>multiple relaxation time</i>)
MST	milieu semi-transparent
PDF	fonction de distribution monoparticulaire (<i>particle distribution function</i>)
TIM	matériaux isolants transparents (<i>transparent insulation materials</i>)

Table des matières

Table des figures	xxiii
Liste des tableaux	xxv
Introduction générale	1
1 Études préliminaires et mise en place de la problématique	5
1.1 Stockage de la chaleur	5
1.1.1 Stockage de chaleur sensible	6
1.1.2 Stockage de chaleur latente	6
1.1.2.1 Matériaux à changement de phase	7
1.1.3 Applications des MCP au bâtiment	8
1.1.3.1 Systèmes actifs de stockage	8
1.1.3.2 Systèmes passifs de stockage	9
1.2 Façade alliant inertie et éclairage naturel	10
1.2.1 Matériaux isolants transparents	10
1.2.2 Façades translucides	11
1.2.3 Paroi Inertrans	16
1.2.3.1 Phénomènes physiques en jeu	16
1.3 Modélisation du changement de phase	18
1.3.1 Hypothèses simplificatrices	19
1.3.1.1 Fluide Newtonien	19
1.3.1.2 Hypothèse de Boussinesq	19
1.3.1.3 Surface libre	21
1.3.2 Nombres adimensionnels	21
1.3.3 Méthodes numériques	22
1.3.3.1 Méthode à suivi de l'interface	22
1.3.3.2 Méthodes à maillage fixe	22
1.4 Étude bibliographique sur le changement de phase	24
1.4.1 Études expérimentales	24
1.4.2 Études numériques	28
1.4.2.1 Comparaison des différentes méthodes	28
1.4.3 Fusion avec rayonnement	29
1.5 Conclusion	30
2 Méthode de Boltzmann sur réseau	33
2.1 Historique	33
2.2 L'équation de Boltzmann	34
2.2.1 Opérateur de collision	35
2.2.1.1 Invariants de collision	37
2.2.1.2 Fonction d'équilibre	37
2.2.2 Équations macroscopiques	37
2.3 Boltzmann sur réseau	39

2.3.1	Opérateur LBGK	40
2.3.2	Opérateur MRT	41
2.3.3	Équations macroscopiques : développement de Chapman-Enskog	42
2.3.4	Conditions aux limites	43
2.4	Modèles thermiques	44
2.4.1	Vitesses multiples	45
2.4.2	Double distribution	46
2.4.3	Modèle hybride	46
2.5	Étude bibliographique sur le changement de phase avec LBM	47
2.5.1	Méthode de champ de phase	47
2.5.2	Méthode enthalpique	48
2.6	En résumé...	49
3	Changement de phase avec convection naturelle	51
3.1	Modélisation de la convection seule	51
3.1.1	Présentation du problème	51
3.1.2	Écoulement par la méthode de Boltzmann sur réseau	52
3.1.3	Équation de l'énergie par la méthode des différences finies	54
3.1.4	Conditions aux limites	55
3.1.5	Algorithme de résolution	56
3.1.6	Résultats	56
3.2	Modélisation du changement de phase en présence de convection naturelle	59
3.2.1	Écoulement par la méthode de Boltzmann sur réseau	60
3.2.2	Équation de l'énergie par la méthode des différences finies	61
3.2.3	Conditions aux limites	62
3.2.4	Algorithme de résolution	62
3.2.5	Résultats	63
	3.2.5.1 Faible nombre de Prandtl	64
	3.2.5.2 Fort nombre de Prandtl	69
3.3	Fusion de l'acide gras	73
3.3.1	Résultats	74
3.4	Conclusion	76
4	Transferts radiatifs	79
4.1	Introduction	79
4.2	Équation des transferts radiatifs	80
4.3	Bibliographie concernant le couplage rayonnement et LBM	81
4.4	Méthode des ordonnées discrètes	82
4.4.1	Choix des ordonnées	84
4.4.2	Relations de fermeture	85
4.5	Méthode de Boltzmann sur réseau pour l'ETR	86
4.6	Comparaison des méthodes pour le rayonnement	87
4.6.1	Rayonnement dans une cavité	87
4.6.2	Résultats	87
4.7	Conclusion	89
5	Changement de phase avec convection naturelle et rayonnement	91
5.1	Modélisation de la convection et rayonnement grande longueur d'onde	91
5.1.1	Présentation du problème	91

5.1.2	Équation des transferts radiatifs par la méthode des ordonnées discrètes	93
5.1.3	Équation de l'énergie par la méthode des différences finies	94
5.1.4	Conditions aux limites	95
5.1.5	Algorithme de résolution	95
5.1.6	Résultats	97
5.2	Fusion avec rayonnement grande longueur d'onde	98
5.2.1	Résultats	99
5.3	Fusion avec rayonnement courte longueur d'onde	101
5.3.1	Équation de l'énergie par la méthode des différences finies	101
5.3.2	Équation des transferts radiatifs par la méthode des ordonnées discrètes	102
5.3.3	Conditions aux limites	103
5.3.4	Algorithme de résolution	103
5.3.5	Résultats	104
5.4	Conclusion	107
Conclusions et perspectives		109
Bibliographie		113
Annexes		123
A Matrices de l'opérateur MRT		123
A.1	Réseau 2D à 9 vitesses	123
B Développement de Chapman-Enskog		125
B.1	Équation de diffusion	126
B.2	Équation de Navier-Stokes	127
B.2.1	Avec force externe	130
C Vérification et validation des solutions numériques		133
C.1	Estimation de l'erreur	133
C.1.1	Extrapolation de Richardson	133
C.1.2	Indice de convergence de maillage	134
C.1.3	Ordre de convergence	134
D Fragment du code développé		137
E Article soumis à la revue <i>Applied Energy</i>		139

Table des figures

1	Évolution de la température de la surface de la Terre	1
2	Évolution de la consommation finale d'énergie, par secteur en France	2
1.1	Schéma du mur capteur	6
1.2	Classification des MCP	8
1.3	Schéma du plancher chauffant	9
1.4	Schéma du mur Trombe	10
1.5	Classification des matériaux isolants transparents	11
1.6	Mur avec MCP et isolant transparent	12
1.7	Température à 1/3 de la surface extérieure du matériau à changement de phase (MCP) durant le mois de janvier	12
1.8	Température optimale de fusion	13
1.9	Façade avec double vitrage et MCP transparent	14
1.10	Flux mesurés sur une façade translucide	14
1.11	Simulation d'une façade translucide pour la période d'hiver et d'été	15
1.12	Schéma de la façade Glassx	16
1.13	Paroi Inertrans	16
1.14	Différents régimes lors de la fusion avec convection naturelle	17
1.15	Détail de la brique du mur Inertrans	17
1.16	Influence de la convection naturelle suivant l'épaisseur	18
1.17	Relation entre enthalpie et température pour un matériau pur	23
1.18	Résultat analytiques pour la fusion de l'octadécane	27
2.1	Réseaux dans LGCA	33
2.2	Espace de phase	35
2.3	Schéma des collisions binaires	36
2.4	Ensemble de vitesses utilisés	39
2.5	Différentes applications du bounce back	44
3.1	Schéma du problème de convection naturelle dans une enceinte	52
3.2	Schéma de la discrétisation spatiale	53
3.3	Diagramme de flux du problème de convection naturelle	57
3.4	Convection de l'air - résultats à différents Rayleigh	59
3.5	Schéma du problème de fusion avec convection naturelle dans une cavité	60
3.6	Schéma des conditions aux limites de l'écoulement	62
3.7	Diagramme de flux du problème de fusion	63
3.8	Fusion de l'étain - Lignes de courant avec 100 × 100 nœuds	64
3.9	Fusion de l'étain - Lignes de courant avec 150 × 150 nœuds	65
3.10	Fusion de l'étain - Lignes de courant avec 225 × 225 nœuds	66
3.11	Fusion de l'étain - nombre de Nusselt avec 225 × 225 nœuds	67
3.12	Fusion de l'étain - Lignes de courant avec 400 × 400 nœuds	68
3.13	Fusion de l'étain - Nusselt à la paroi chauffée	69

3.14	Fusion de l'octadécane - Nusselt suivant le temps de relaxation et 100 × 100 nœuds	70
3.15	Ordre de convergence du nombre de Nusselt	70
3.16	Fusion de l'octadécane - résultats avec 225 × 225 nœuds	71
3.17	Fusion de l'octadécane - Isothermes	72
3.18	Fusion de l'octadécane - Nusselt et fraction fondue	73
3.19	Acide gras - Schéma	74
3.20	Acide gras - isothermes et lignes de courant	75
3.21	Acide gras - Flux et fraction fondue	76
4.1	Discrétisation angulaire suivant la méthode	83
4.2	Schéma pour le calcul du champ des luminances en 2D	84
4.3	Schéma du cas test	88
4.4	Flux adimensionnel sur la paroi sud	88
5.1	Schéma du problème de convection naturelle et rayonnement dans une cavité 2D différentiellement chauffée	92
5.2	Schéma du maillage MOD et LBM	93
5.3	Diagramme de flux du problème de convection et rayonnement	96
5.4	Convection et rayonnement GLO - Isothermes	97
5.5	Schéma du problème de fusion de l'acide gras avec rayonnement GLO	98
5.6	Coefficient d'absorption spectrale de l'octadécane	99
5.7	Fusion de l'acide gras avec rayonnement GLO - Flux	100
5.8	Fusion de l'acide gras avec rayonnement GLO - Fraction fondue	100
5.9	Fusion de l'acide gras avec rayonnement GLO - Évolution du front de fusion	101
5.10	Schema de la fusion avec rayonnement CLO	102
5.11	Diagramme de flux du problème de fusion avec convection et rayonnement	104
5.12	Acide gras - flux et fraction fondue	105
5.13	Fusion de l'acide gras avec rayonnement CLO - Isothermes	106
5.14	Fusion de l'acide gras avec rayonnement CLO - Lignes de courant	106
5.15	Fusion de l'octadécane - Isothermes en 3D avec 101 × 101 × 11 nœuds	110

Liste des tableaux

1.1	Comparaison des différents types de stockage	7
1.2	Corrélations pour la fraction fondue	26
3.1	Résultats du problème de convection	60
3.2	Cas test de fusion	61
3.3	Vitesses maximales avec 100×100 nœuds	65
3.4	Vitesses maximales avec 150×150 nœuds	66
3.5	Vitesses maximales avec 225×225 nœuds	67
3.6	Vitesses maximales avec 400×400 nœuds	67
3.7	Temps de calcul du problème de fusion de l'étain	68
3.8	Étude du maillage pour la fusion de l'octadécane	71
3.9	Propriétés de l'acide gras	73
4.1	Directions et poids de la quadrature S_4	85
4.2	Comparaison des méthodes	89
5.1	Étude du maillage du problème de convection et rayonnement GLO de l'air dans une cavité 2D - coefficient d'absorption $\kappa_a = 5.0$	97

Introduction générale

Le changement climatique est à l'heure actuelle l'une des préoccupations majeures dans le monde. En effet, les scénarii concernant l'évolution de la température de la surface de la Terre prédisent une augmentation de cette dernière comprise entre 2 °C et 6 °C pour les plus pessimistes (FIG. 1).

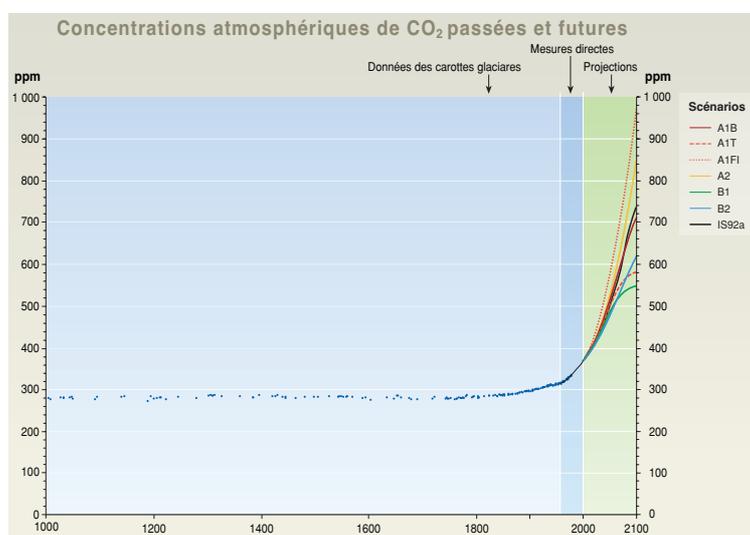


FIGURE 1: Évolution de la température de la surface de la Terre (GIEC2001)

Aussi pour éviter ce scénario, différents pays dont la France ont signé des accords internationaux - Kyoto par exemple - visant à réduire leurs émissions de gaz à effet de serre (GES) au niveau de 1990 et notamment leurs émissions de CO_2 ; gaz reconnu comme le principal contributeur au réchauffement climatique. En France, 95% des rejets de CO_2 sont liés à la combustion des produits d'origine fossile [1], source d'énergie pour les transports, l'industrie, le chauffage des maisons... Il vient donc immédiatement que la réduction des émissions de GES passe par la réduction des consommations d'énergie.

En France, le bâtiment résidentiel et tertiaire est le premier secteur consommateur d'énergie. Par exemple, en 2010, il représentait 44% de l'énergie finale consommée [2]. Du fait de l'accroissement du parc des bâtiments, de la demande accrue de confort et de la diversification des usages de l'électricité, cette consommation n'a cessé d'augmenter au fil du temps (voir FIG. 2).

Au travers du Grenelle de l'Environnement, le gouvernement français a décidé de renforcer les exigences concernant la performance énergétique des bâtiments, qui a été considéré comme « le principal gisement d'économies d'énergie exploitable immédiatement ». Ainsi, un des objectifs cités dans la loi Grenelle est : « de réduire les consommations d'énergie du parc des bâtiments existants d'au moins 38% d'ici à 2020 ». Pour les bâtiments neufs, cela s'est traduit récemment par un renforcement de la réglementation thermique RT2012 avec une consommation

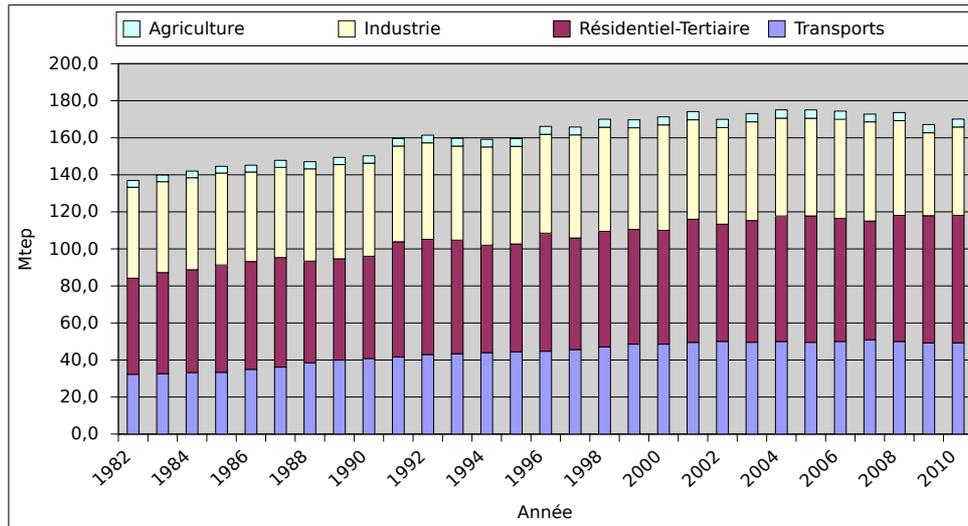


FIGURE 2: Évolution de la consommation finale d'énergie, par secteur en France [2]

d'énergie primaire inférieure à $50 \text{ kWh}_{ep} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{an}^{-1}$ modulée en fonction de la zone thermique.

La voie classique adoptée jusqu'à présent pour réduire les consommations d'énergie dans le bâtiment est d'augmenter fortement l'isolation afin de réduire au maximum les déperditions à travers l'enveloppe. L'isolation par l'extérieur est plébiscitée afin de bénéficier d'une masse thermique conséquente à l'intérieur pour stocker/déstocker l'énergie et contribuer ainsi au confort. Le couple isolation renforcée/stockage d'énergie thermique passive doté d'une ventilation double flux et associé à une perméabilité à l'air de l'enveloppe correcte ($Q_{4Pa} < 0,8 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$ de surface déperditive) conduit généralement à un bâtiment économe en énergie.

Récemment Chesné *et al.* [3] remettent en question cette idée et montrent que quel que soit le climat ou le niveau d'isolation, des ressources telles que le soleil ou la voûte céleste sont systématiquement sous exploitées alors que ces dernières pourraient suffire à couvrir les besoins à tout instant. Les auteurs rappellent par ailleurs que l'utilisation de l'enveloppe du bâtiment est un concept primordial dans l'architecture bioclimatique. Il est par conséquent nécessaire de poursuivre des travaux de recherches sur la conception de façade bioclimatique favorisant notamment l'utilisation de la première ressource disponible que représente le soleil. Il est intéressant de souligner ici que ces conclusions rejoignent le choix fait dans la RT2012, à savoir de maximiser la ressource solaire en imposant en particulier une surface vitrée minimum équivalente à $\frac{1}{6}$ de la SHON(RT).

Le projet INERTRANS financé dans le cadre du programme PREBAT de l'ANR propose le développement d'une façade innovante s'inscrivant directement dans cette problématique d'efficacité énergétique et d'exploitation optimale des ressources environnementales. Cette paroi associe un isolant translucide à une couche de Matériau à Changement de Phase (MCP) qui outre les fonctions d'isolation et de stockage a pour objectif de contribuer au confort visuel. La mise en place d'une telle façade dans le bâtiment est soumise à la connaissance de son comportement, de sa performance et de son impact énergétique dans le bâtiment. Or, cette connaissance n'est accessible que par la modélisation numérique. Il est donc nécessaire de s'assurer de la disponibilité et de la fiabilité d'un modèle numérique susceptible de représenter la physique d'une telle paroi. En particulier lors de la fusion et de la cristallisation du MCP, ce dernier peut être soumis à différents modes de transferts de chaleur en fonction de la présence ou non

d'ensoleillement et ainsi modifier considérablement la cinétique du changement d'état [4]. C'est pourquoi cette thèse est dédiée au développement d'un modèle de Boltzmann sur gaz réseau pour l'étude du changement de phase en présence de convection naturelle et de rayonnement.

Le présent manuscrit est articulé en cinq chapitres. Le premier expose largement le contexte de l'étude en proposant une synthèse concernant les façades "bioclimatiques" et les méthodes numériques utilisées pour la modélisation du changement d'état solide-liquide. Un bref rappel théorique sur le stockage de chaleur est également inclus dans cette section. Le deuxième chapitre présente la méthode numérique de Boltzmann sur gaz réseau tandis que le troisième chapitre décrit le modèle développé en LBM couplé à de la convection naturelle. Le quatrième chapitre s'intéresse à la modélisation des transferts radiatifs en utilisant la méthode LBM. Enfin le cinquième et dernier chapitre traite l'étude du changement de phase en présence de transferts couplés.

Chapitre 1

Études préliminaires et mise en place de la problématique

Une des alternatives pour atteindre l'objectif de réduire la consommation d'énergie dans le bâtiment est d'améliorer la performance énergétique de son enveloppe. Cette enveloppe a comme fonction principale, l'isolation, c'est-à-dire, réduire les échanges de chaleur entre l'environnement et l'intérieur du bâtiment, ainsi que protéger les occupants du vent, de la pluie, et d'autres conditions externes, et en même temps, elle doit contribuer aux confort thermique, visuel et acoustique.

Pour mieux satisfaire ces fonctions, le concept d'enveloppe hybride a été proposé [4]. Cette enveloppe, outre l'isolation, participe à la gestion de l'énergie. Pour ce faire, le couplage de plusieurs produits et techniques est nécessaire. Parmi ces techniques, le stockage de la chaleur dans le bâtiment a suscité beaucoup d'intérêt, comme nous le voyons par les nombreuses études menées à ce sujet et recensées par exemple dans [5].

Ainsi, ce chapitre présente une introduction aux techniques de stockage de la chaleur, ainsi que leur application au bâtiment dans la section 1.1.

Dans la section 1.2 nous parlerons d'un type de paroi conçue pour le stockage de la chaleur, tout en laissant passer la lumière naturelle. Le fonctionnement de cette paroi et les phénomènes physiques mis en jeu y seront présentés. Le changement d'état solide-liquide est un point clé du fonctionnement de ces façades. Aussi, la modélisation thermique de telles parois passe nécessairement par la modélisation du changement d'état.

La section 1.3 porte, par conséquent, sur les modèles mathématiques décrivant le phénomène de changement de phase, ainsi que les méthodes pour sa résolution numérique.

Enfin, dans la section 1.4, nous présentons l'état de l'art à propos du changement de phase avec convection naturelle dans des enceintes rectangulaires, nous faisons une analyse des travaux existants, qui va orienter le travail développé au cours de cette thèse.

1.1 Stockage de la chaleur

Le stockage de la chaleur permet de remédier au décalage entre disponibilité et demande d'énergie. En particulier, le stockage de la chaleur dans les façades des bâtiments permet d'amortir les fluctuations de température et ainsi de réduire la demande de chauffage ou de climatisation. Nous introduirons ensuite, le concept de stockage sensible et latent de la chaleur, qui sont les deux types de stockage de chaleur qui nous intéressent dans cette étude, ainsi que ses applications.

1.1.1 Stockage de chaleur sensible

Le principe du stockage par chaleur sensible est basé sur l'augmentation de température d'un matériau, qui rendra la chaleur emmagasinée lorsqu'il est en contact avec un environnement plus froid. La quantité de chaleur emmagasinée (Q) dépend de la quantité de matériau, de sa chaleur spécifique (c_p) et de la différence entre la température initiale (T_i) et finale (T_f), ainsi [6] :

$$Q = \int_{T_i}^{T_f} mc_p dT \quad (1.1)$$

Les matériaux avec une grande chaleur spécifique sont préférables, afin de réduire la taille du système et/ou l'écart de température. Par exemple, avec un écart de température donné ($\Delta T = 15$ K), le volume de pierre ($c_p = 1000$ J/kg K) serait près du double du volume d'eau ($c_p = 4200$ J/kg K), nécessaire pour stocker la même quantité d'énergie (cf. TAB. 1.1).

Mur capteur

Une application simple de stockage par chaleur sensible est le mur capteur (cf. FIG. 1.1). Ce mur est un système composé d'un vitrage devant une paroi en béton. Le rayonnement solaire chauffe la lame d'air contenue entre le vitrage et la paroi et la chaleur est absorbée par la surface extérieure de la paroi. Ensuite, la chaleur est transmise vers l'intérieur, par conduction au sein de la paroi, et enfin par convection et rayonnement vers la pièce. Ces transferts se font sur un intervalle de temps de l'ordre de quelques heures, suivant l'épaisseur de la paroi, atteignant jusqu'à 11 h pour une paroi de 40 cm d'épaisseur [7]. Les problèmes constatés concernant ce type de mur sont des surchauffes en été et de grandes déperditions thermiques en hiver lorsqu'il y a peu d'ensoleillement.

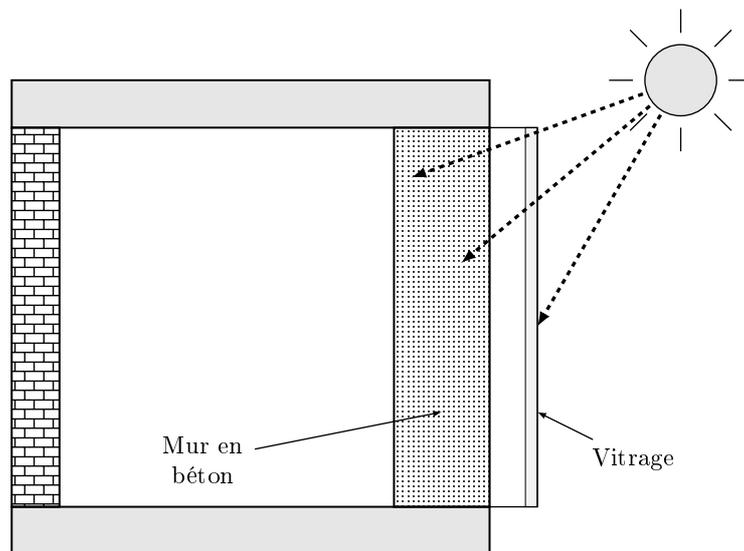


FIGURE 1.1: Schéma du mur capteur

1.1.2 Stockage de chaleur latente

Le stockage par chaleur latente est basé sur l'absorption ou la restitution de l'énergie lors du changement de phase. Les matériaux utilisés pour le stockage

par chaleur latente sont alors appelés matériaux à changement de phase MCP. La quantité de chaleur stockée est donnée par [6] :

$$Q = \int_{T_i}^{T_m} mc_p dT + m f_l L_h + \int_{T_m}^{T_f} mc_p dT \quad (1.2)$$

Parmi les avantages des MCP citons leur capacité à stocker, sur un faible écart de température, une quantité d'énergie par unité de volume plus importante qu'un matériau à stockage sensible. Ainsi pour stocker la même quantité d'énergie, il faudra un volume 11 fois plus important de pierre (stockage sensible) que de MCP inorganique, ou encore un volume 5 fois plus important de pierre que de MCP organique (voir TAB. 1.1). En outre, le stockage/déstockage de chaleur est isotherme, ou sur une plage de températures connue, permettant un contrôle des gradients de température entre le dispositif de stockage et la pièce à chauffer/refroidir. L'utilisation des MCP permet alors de réduire la taille des dispositifs de stockage, et son intégration dans le bâtiment est un moyen de réduire les fluctuations de température, et par conséquent, de diminuer les demandes de chauffage ou de climatisation.

TABLE 1.1: Comparaison des différents types de stockage ($\Delta T = 15K$) [8]

Propriété	Pierre	Eau	MCP Organique	MCP Inorganique
Masse volumique (kg/m ³)	2240	1000	800	1600
Chaleur spécifique (kJ/kg K)	1.0	4.2	2.0	2.0
Chaleur latente (kJ/kg)	-	-	190	230
Masse pour stocker 10 ⁶ kJ (kg)	67000	16000	5300	4350
Volume pour stocker 10 ⁶ kJ (m ³)	30	16	6.6	2.7
Volume relative (au MCP inorganique)	11	6	2.5	1.0

Parmi les différentes transformations possibles, le changement liquide-gaz se caractérise par de grandes quantités de chaleur stockées. Cependant, du fait des grandes variations de volume, son application dans le secteur du bâtiment est limitée. Le changement d'état solide-liquide est celui qui offre le plus de possibilités d'application au bâtiment, donc désormais, nous nous bornerons aux matériaux exploitant ce type de transformation. Nous parlerons par la suite, des types de MCP, de leur propriétés, et de leur avantages et inconvénients.

1.1.2.1 Matériaux à changement de phase

Comme nous l'avons dit précédemment, ces matériaux stockent de l'énergie lors du changement de phase et cela à une température fixe (pour les matériaux purs). La température de fusion idéale dépend évidemment de l'application visée. Néanmoins, pour des applications liées au bâtiment, les MCP doivent présenter certaines caractéristiques telles qu'une chaleur latente élevée pour stocker le plus d'énergie possible, et une conductivité thermique élevée afin de favoriser les transferts par conduction dans le matériau et ainsi favoriser le stockage/destockage de chaleur.

Certains défauts des MCP sont à éviter, notamment, la surfusion et la fusion non congruente. La surfusion se présente lorsque le liquide est refroidi au-dessous

de sa température de cristallisation. À cet instant le MCP reste momentanément à l'état liquide, en empêchant le déstockage d'énergie. La fusion non congruente se présente quand la répétition du cycle fusion/solidification produit une ségrégation des phases, qui affecte les propriétés thermiques, en particulier, en dégradant la chaleur latente.

Les MCP existants peuvent être classés en quatre groupes, inorganiques, organiques, matériaux purs et mélanges (voir fig.1.2). Ils couvrent une large gamme de températures et chacun a ses avantages et ses inconvénients.

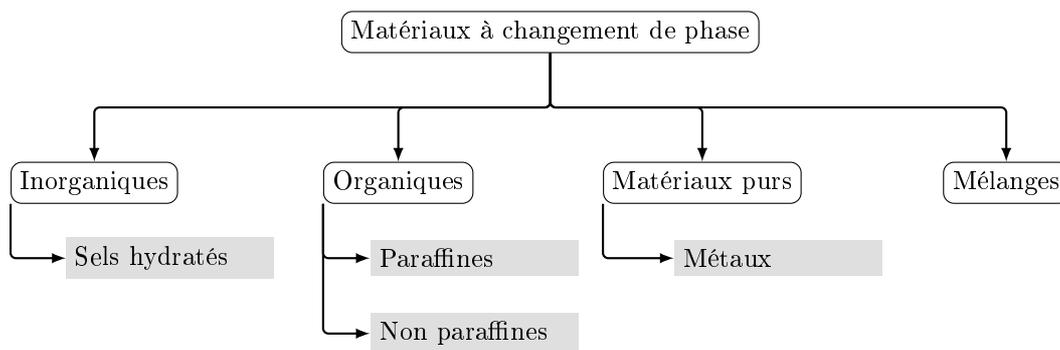


FIGURE 1.2: Classification des MCP

Parmi les inorganiques, nous avons les sels hydratés. Les sels hydratés sont un mélange de sels inorganiques et d'eau, qui présentent de fortes chaleurs latentes et de fortes conductivités thermiques. Cependant, ils corrodent les enveloppes métalliques et ils ont propension à la surfusion et leur fusion est non congruente.

Comme MCP organiques, nous avons les paraffines et les non paraffiniques. Les paraffines présentent des chaleurs latentes plus petites que celles des inorganiques, elles ont de faibles conductivités thermiques, elles corrodent les enveloppes plastiques et elles sont inflammables. En revanche, leur fusion est congruente, donc le cycle fusion/solidification se répète sans ségrégation des phases et ils présentent peu ou pas de surfusion. Parmi les non paraffiniques, nous avons les acides gras, dont les propriétés sont semblables aux paraffines, mais avec une chaleur latente plus élevée et ils sont plus chers.

Parmi les matériaux purs se trouvent généralement les métaux avec une basse température de fusion (le gallium par exemple $T_F = 29.78^\circ\text{C}$ [9]) et ils se caractérisent par une grande conductivité thermique. En revanche, leur chaleur latente par unité de masse est faible, d'où leur faible emploi.

Enfin, les eutectiques sont un mélange de deux ou plusieurs composants, chacun avec fusion congruente. Ce mélange peut être composé de MCP organiques et/ou inorganiques et ils ne présentent pas de ségrégation. La température de fusion est constante et correspond à la minimale du mélange.

L'utilisation de ces matériaux dans les bâtiments a permis la conception des différents systèmes de stockage de chaleur latente, qui peuvent être classés en actifs et passifs.

1.1.3 Applications des MCP au bâtiment

1.1.3.1 Systèmes actifs de stockage

Dans la quasi totalité des cas, le système actif est utilisé pour délester le réseau électrique durant les périodes de consommation de pointe ; l'énergie électrique est donc préférentiellement utilisée en heure creuse lorsqu'elle est à moindre coût pour être stockée sous forme de chaleur latente. Le principe est de fondre ou de solidifier

un MCP en heure creuse pour le solidifier en heure pleine et ainsi restituer la chaleur à la pièce.

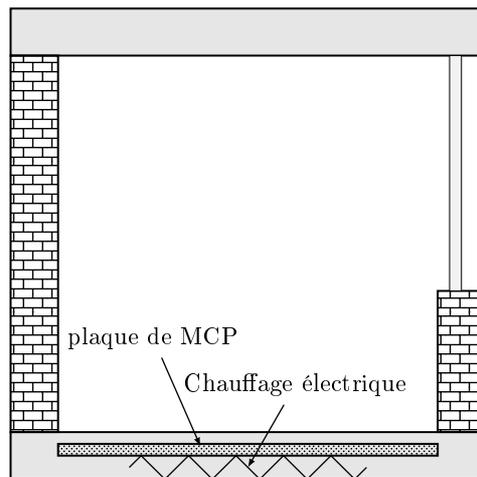


FIGURE 1.3: Schéma du plancher chauffant

Une application de ce système est le plancher chauffant (voir FIG. 1.3). Dans ce système, une couche de MCP est placée entre le sol et une plaque électrique. La plaque électrique est utilisée pour chauffer et fondre le MCP pendant la nuit (ou les heures durant lesquelles l'électricité est moins chère), puis, pendant la matinée, le MCP restitue la chaleur vers la pièce sans besoin d'énergie électrique. Des études expérimentales ont montré [5] une amélioration du confort thermique, du fait de la stabilité des températures et un avantage économique, car plus de la moitié de la puissance électrique totale est utilisée en heure creuse au lieu de l'être en heure pleine.

Ce type de solution est intéressant du point de vue économique et thermique, sans se passer toutefois, de l'énergie électrique. Par ailleurs, le même plancher chauffant peut profiter des apports solaires passant au travers d'une fenêtre, pour chauffer le sol et faire fondre le MCP, lequel dégagerait la chaleur absorbée pour chauffer la pièce pendant la nuit. Nous parlons alors d'un système passif.

1.1.3.2 Systèmes passifs de stockage

Les systèmes passifs utilisent des mécanismes naturels, sans intervention d'énergie électrique ou mécanique pour profiter des sources de chaleur externes, notamment l'énergie solaire, ou internes, comme les apports des occupants. Ce type d'approche est favorisée, car les sources d'énergie sont « gratuites ».

Un système de stockage passif intéressant, car il intègre plusieurs phénomènes et produits, est le mur Trombe (voir FIG. 1.4). Il est composé d'un vitrage orienté sud, pour profiter au maximum des apports solaires, et d'un mur contenant du MCP. Le fonctionnement est semblable à celui du mur capteur. Le rayonnement solaire chauffe la lame d'air entre le vitrage et le mur, ce dernier absorbe la chaleur en faisant fondre le MCP. La chaleur stockée par le MCP est dégagée vers la pièce, lorsque celle-ci est au-dessous de la température de la surface intérieure du mur. Le flux de chaleur vers la pièce peut être augmenté en faisant circuler l'air chaud, au travers des ouvertures en bas, et en haut du mur. L'air chauffé monte et passe par l'ouverture supérieure, entre dans la pièce et cède sa chaleur. Une fois refroidi, il descend et passe par l'ouverture inférieure et le cycle se répète.

Ce système a toutefois des limites puisque si l'environnement est très froid, le flux d'air peut s'inverser et produire un refroidissement de la pièce [7]. Une isolation

est aussi nécessaire pour réduire les pertes vers l'environnement.

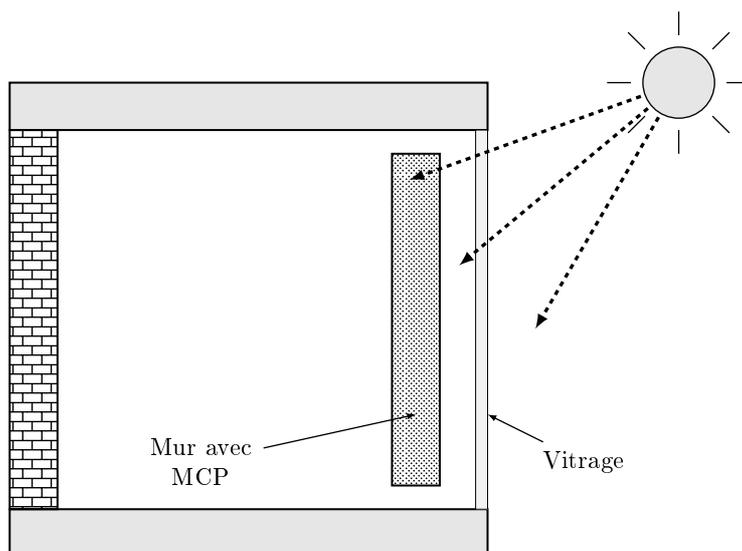


FIGURE 1.4: Schéma du mur Trombe

Comme nous l'avons vu, différents produits et phénomènes physiques peuvent être intégrés à l'enveloppe du bâtiment afin d'augmenter sa performance énergétique ; en lui donnant une fonction de stockage d'énergie par exemple. Les murs des systèmes passifs dont nous avons parlé étaient opaques, en empêchant la transmission de la lumière.

Par ailleurs, pour contribuer au confort visuel, toujours dans le but de minimiser la consommation d'énergie et d'utiliser les énergies renouvelables, l'enveloppe du bâtiment doit être conçue pour profiter au mieux de l'éclairage naturel. Une paroi translucide serait idéale à ce propos.

1.2 Façade alliant inertie et éclairage naturel

1.2.1 Matériaux isolants transparents

Dans les dispositifs de stockage présentés auparavant, les pertes par convection avec l'environnement peuvent être importantes. Il est souhaitable alors de réduire ces pertes, en ajoutant un isolant entre le système de stockage et le milieu extérieur. L'isolation est particulièrement importante pour la période d'hiver, afin de pallier les pertes de chaleur au travers des façades, et ainsi, réduire la demande de chauffage.

Les matériaux utilisés pour l'isolation sont normalement opaques, toutefois, nous trouvons des études s'intéressant aux matériaux isolants transparents (TIM) [10, 11], lesquels, outre l'isolation, permettent à la lumière de traverser. Cela est particulièrement important en hiver quand, en plus de l'isolation, il est souhaitable d'augmenter les apports solaires. De tels apports peuvent atteindre 50 W/m^2 pendant une semaine ensoleillée du mois de janvier [11]. En revanche, ces apports peuvent devenir un problème pendant l'été et il faut par conséquent pouvoir s'en protéger.

Suivant leur agencement illustré sur la figure 1.5, où le trait gras représente la surface absorbante (une paroi avec MCP par exemple), les TIM peuvent être classés en quatre catégories :

- Configuration parallèle à l'absorbeur
- Configuration perpendiculaire à l'absorbeur

- Configuration en cavité
- Configuration quasi-homogène

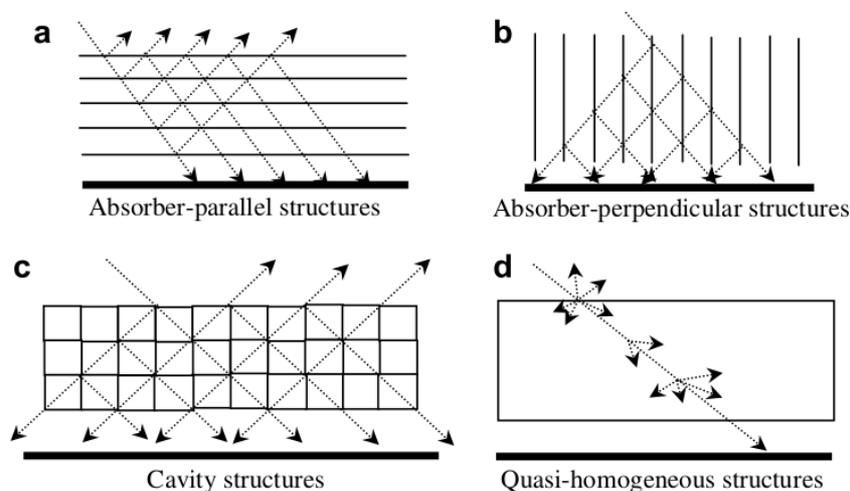


FIGURE 1.5: Classification des matériaux isolants transparents (reproduit de [11])

Les configurations parallèles se construisent à partir de plusieurs couches parallèles à la surface absorbante. Le degré d'isolation peut être augmenté, en rajoutant davantage de couches, pourtant, cela entraîne plus d'interfaces, qui vont refléter le rayonnement incident. Cette réflexion se traduit par des pertes, qui peuvent devenir tellement importantes que l'isolant perd son intérêt.

Dans les configurations perpendiculaires, la réflexion des rayons est toujours présente, cependant, elle est mise à profit en l'orientant vers la surface d'absorption. Les configurations de type cavité sont une combinaison des deux précédentes, ayant des pertes par réflexion comme la configuration parallèle, mais de moindre degré.

Enfin, les configurations quasi homogènes ressemblent aux matériaux poreux. Les rayons incidents traversent le TIM, toujours en subissant de multiples réflexions aux surfaces des pores et l'effet est alors la diffusion du rayonnement.

1.2.2 Façades translucides

Pour accomplir sa fonction de stockage d'énergie, et en même temps permettre la transmission de la lumière, certains chercheurs [12–14] se sont intéressés aux MCP transparents. Parmi ces matériaux citons par exemple l'acide stéarique, dont la transmittance en fonction de la température et de l'épaisseur a été mesurée par Buddhi et Sharma [13]. À 60 °C (température de fusion $T_F = 64.6^\circ\text{C}$) ils trouvent une transmittance moyenne de 99% pour une épaisseur de 1 cm, et de 81% pour une épaisseur de 5 cm. Avec cette grande transmittance ajoutée à la faible conductivité propre aux MCP, ils pourraient être utilisés comme une sorte de système d'isolation transparent [5, 13].

Avec ces matériaux, il a été possible de développer une autre type de façade conjuguant stockage de la chaleur latente et éclairage naturel. Ainsi, Manz *et al.* [12] ont proposé un mur alliant un MCP et un TIM (voir FIG. 1.6). Le MCP est contenu dans des briques en verre et transmet le spectre visible du rayonnement solaire, en produisant un éclairage naturel. L'autre partie du rayonnement -principalement l'infrarouge- est absorbée et stockée comme chaleur latente lors de la fusion du matériau. En outre, pour remédier aux déperditions constatées dans d'autres types de mur stockeurs, sans empêcher à la lumière de passer au travers, un matériau isolant transparent est mis en sur-épaisseur de la paroi.

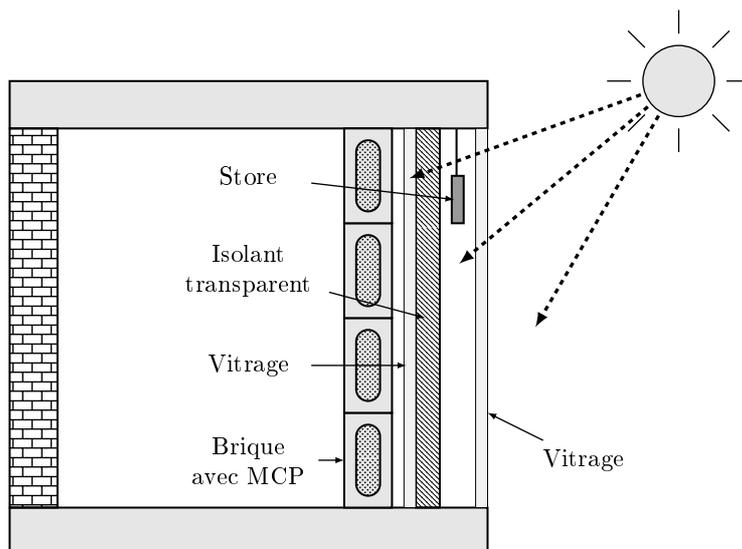


FIGURE 1.6: Mur avec MCP et isolant transparent

Le MCP utilisé par Manz *et al.* était un sel hydraté avec température de fusion de 26.5°C . Outre leur prototype (FIG. 1.6), ils ont fait un modèle numérique unidimensionnel couplant conduction et rayonnement. Ils ont comparé leurs résultats numériques aux expériences, en utilisant les données d'une seule brique au milieu de la paroi afin d'éviter les effets des bords. La FIG. 1.7 reproduit leurs résultats et mesures de température à $1/3$ de la surface du MCP durant le mois de janvier. Pour la simulation, ils ont utilisé un pas de temps horaire. Les courbes sont en général assez proches, avec des écarts plus importants autour de $T = 25^{\circ}\text{C}$. En effet, au-dessous de cette température le matériau doit être à l'état solide et par conséquent le modèle conductif donne une bonne prédiction des températures, tandis que près de $T = 26^{\circ}\text{C}$ le matériau commence à fondre et le modèle conductif est moins fiable. On peut déjà se questionner ici sur l'influence de la convection voire du rayonnement lors du changement d'état !

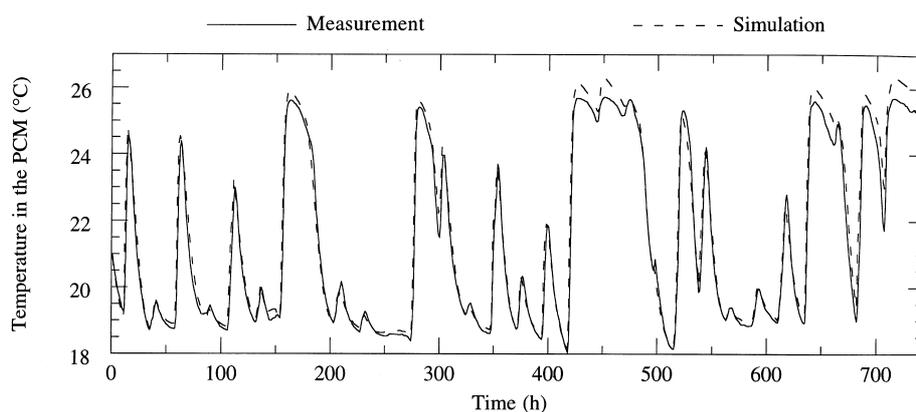


FIGURE 1.7: Température à $1/3$ de la surface extérieure du MCP durant le mois de janvier [12]

Manz *et al.* ont étudié aussi l'influence de différents paramètres. Sur la FIG. 1.8, nous reproduisons les résultats de leurs simulations en faisant varier la température de fusion. Les courbes correspondant aux apports de chaleur (*heat gains*) et à la transmission du rayonnement courte longueur d'onde -380 nm à 780 nm- sont adimensionnées par rapport aux calculs à $T = 26.5^{\circ}\text{C}$ (la température de

fusion du MCP dans le prototype), d'où certaines valeurs sont supérieures à l'unité. Ces courbes montrent que la transmission du rayonnement visible (courbe avec des croix) est plus grande pour les faibles températures de fusion. L'explication de cela est que pour les faibles températures de fusion, davantage de matériau est en phase liquide, favorisant la transmission, alors que la phase solide la dégrade à cause du phénomène de diffusion du rayonnement. En revanche, les apports de chaleur vers la pièce diminuent (courbe avec cercles), à cause du plus petit gradient de températures. Enfin, la troisième courbe (carrés) correspond au temps sans déperditions de chaleur rapporté au temps total considéré (entre le 1 novembre et le 31 janvier). Cette courbe montre que le minimum des pertes vers l'environnement (la valeur la plus proche de 1) s'obtient autour de 20°C et 21°C.

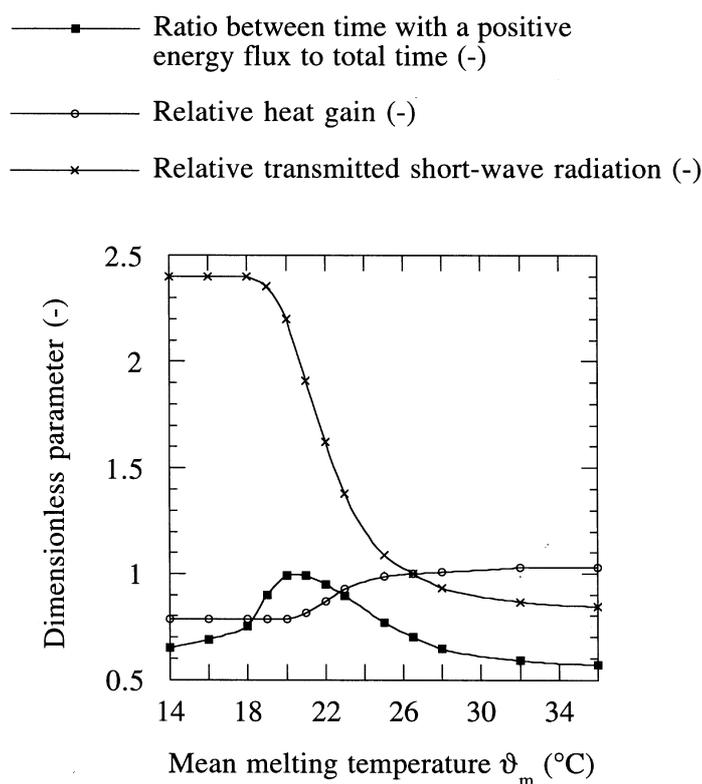


FIGURE 1.8: Température optimale de fusion pour un mur translucide [12]

Dans la même logique de profiter de l'éclairage naturel, Weinläder *et al.* [14] ont proposé une façade orientée sud avec double vitrage et un bloc de MCP (voir FIG. 1.9). Ils ont testé trois types de MCP, la paraffine commerciale RT25 de Rubitherm avec température de fusion $T_F = 25^\circ\text{C}$, le sel hydraté S27 de Cristopia avec $T_F = 27^\circ\text{C}$ et le sel hydraté L30 non commercial avec $T_F = 30^\circ\text{C}$. Ils ont mesuré la transmittance de ces matériaux à différents longueurs d'onde. Dans le spectre visible, les transmittances sont semblables et d'environ 0.9 pour le MCP liquide, et de 0.5 pour le MCP solide.

Weinläder *et al.* ont fait des simulations en utilisant un modèle 1D avec conduction et rayonnement, dont les résultats ont été comparés avec leurs mesures expérimentales de température et de flux. Les flux mesurés et simulés, entre le 11 et le 15 avril, sont montrés sur la FIG. 1.10. Leurs prédictions sont proches des valeurs expérimentales, mais elles s'écartent durant les périodes de changement de phase (12.4.01 et 13.4.01), où les flux prédits sont près de 50% plus grands que les flux mesurés. Cela a été attribué à la morphologie du front de fusion, car il ne se déplace pas parallèlement à la surface chauffée comme c'est supposé dans leur modèle 1D.

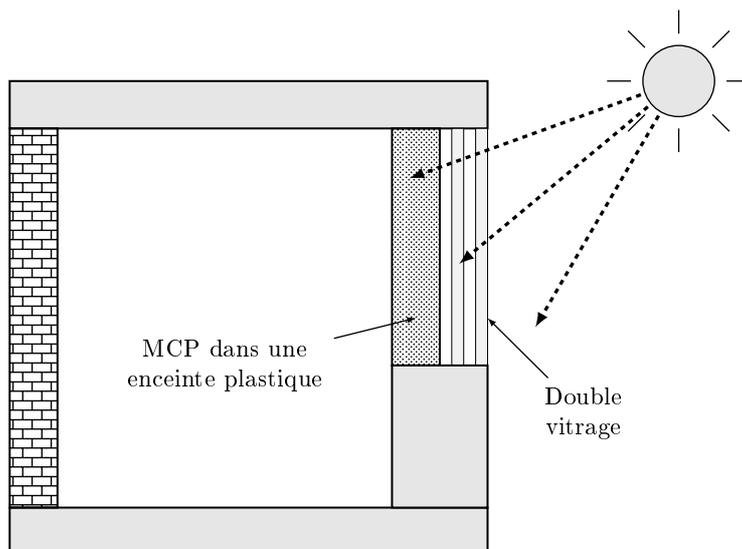


FIGURE 1.9: Façade avec double vitrage et MCP transparent

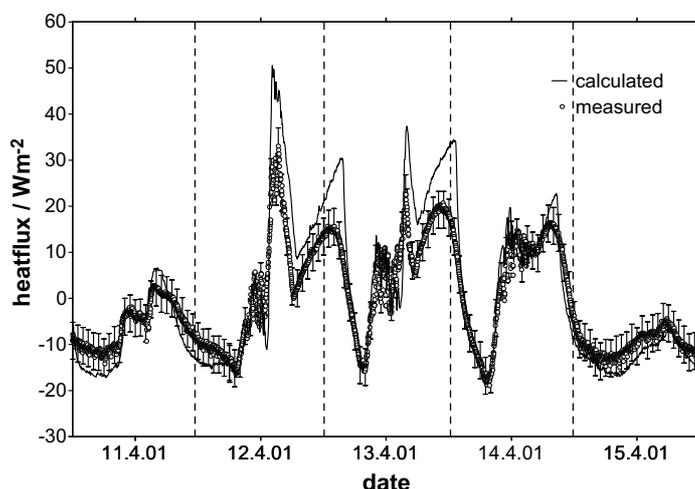


FIGURE 1.10: Flux mesurés sur une façade translucide avec 12 mm de paraffine RT25 [14]

Malgré ces écarts, ils utilisent le même modèle pour faire des simulations à partir de données météo de référence pour Würzburg en Allemagne. Pour une épaisseur de 12 mm de MCP, les résultats pour la période d'hiver ont montré une réduction des pertes vers l'environnement de près de 30%, mais une diminution des apports solaires de près de 50% par rapport à un double vitrage sans MCP (voir FIG. 1.11a). L'analyse des températures moyennes de surface pour cette période hivernale montre que le système MCP permet d'obtenir une température plus élevée que celle d'un double vitrage la nuit et le jour (FIG. 1.11b). Ces observations tendent à dire que le système MCP limite l'effet de paroi froide et contribue à l'amélioration du confort.

Pour la période estivale, leurs simulations montrent que les pertes diminuent également, que les apports de chaleur augmentent mais que les gains solaires sont plus faibles (FIG. 1.11c). La température moyenne de surface intérieure donne des indications intéressantes puisque l'on observe les mêmes tendances que pour la période hivernale, à savoir une température moyenne plus élevée pour le double vitrage MCP la nuit et le jour (FIG. 1.11d). Dans ce cas, la paroi MCP peut

éventuellement dégrader le confort puisque la température moyenne de surface est plus élevée. Il est intéressant de noter l'influence du choix de la température de fusion qui modifie de manière significative la température de surface. Enfin pour terminer sur l'analyse de ces résultats, les conclusions sur la notion de confort thermique sont à relativiser car elles ne considèrent pas les apports solaires direct transmis par la surface qui auront une influence sur le bilan thermique du local et par conséquent sur le confort.

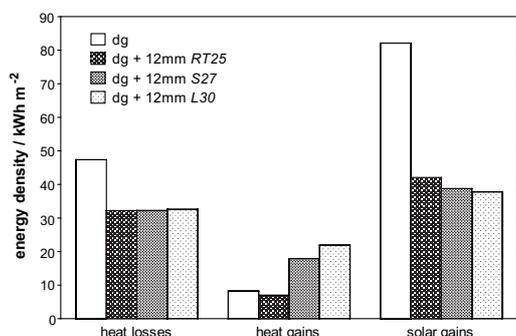


Fig. 8. Calculated heat losses, heat gains and solar gains of a south oriented double glazing (dg) without and with different kinds of PCM. Simulation period was from November to February.

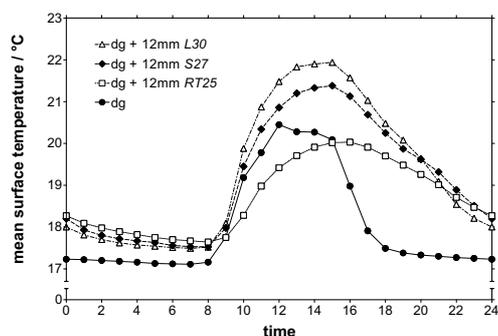


Fig. 10. Calculated hourly mean values of the surface temperatures on different south oriented facade panels. Simulation period was from November to February.

(a) Pertes, apports de chaleur et apports solaires en hiver (b) Température moyenne de surface en hiver

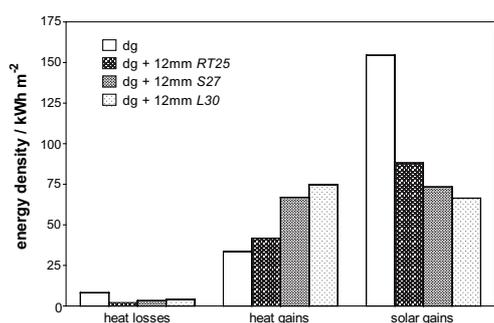


Fig. 11. Simulated heat losses, heat gains and solar gains of a south oriented double glazing (dg) without and with different kinds of PCM. The simulation period was from June to September.

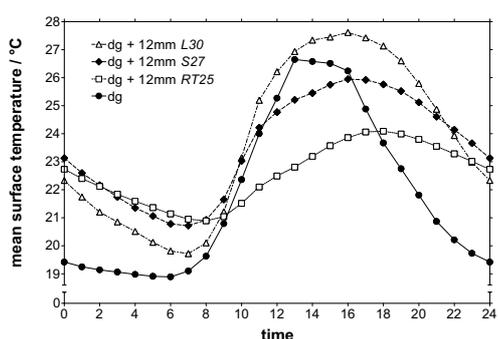


Fig. 12. Calculated hourly mean values of the surface temperatures on different south oriented facade panels. Simulation period was from June to September.

(c) Pertes, apports de chaleur et apports solaires en été (d) Température moyenne de surface en été

FIGURE 1.11: Résultats des simulations de Weinläder [14]

La société GLASSX¹ propose également un type de façade translucide avec stockage de chaleur et apports solaires variables. Il s'agit d'un vitrage contenant un MCP translucide, du type sel hydraté, avec une température de fusion comprise entre 26°C et 30°C, et dont l'épaisseur du récipient est d'environ 38 mm. Le principe de fonctionnement est identique aux systèmes décrits auparavant. D'une part, le solide absorbe la partie infrarouge du rayonnement, en augmentant sa température jusqu'à produire la fusion du matériau, d'autre part, le liquide transmet la lumière, en donnant un éclairage naturel au local. En plus, un verre placé à l'extérieur est de forme pyramidale, de sorte que le rayonnement solaire soit réfléchi en été, quand le soleil est au plus haut, et transmis directement en hiver (cf. FIG. 1.12). Malheureusement, peu d'informations quantitatives sont données.

1. <http://glassx.ch/index.php?id=314>

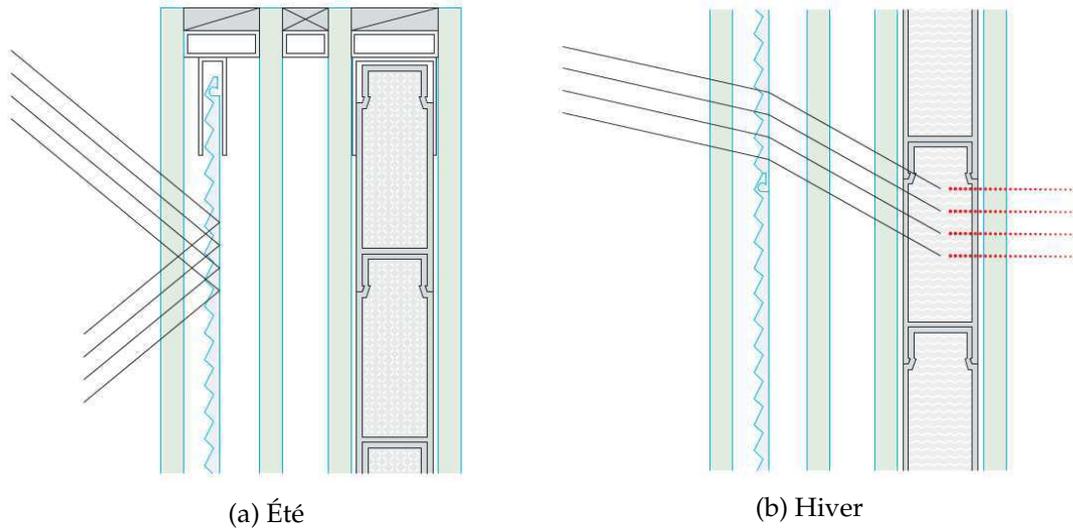


FIGURE 1.12: Schéma de la façade Glassx [15]

1.2.3 Paroi Inertrans

Avec ces précédents, le projet Inertrans a proposé de concevoir une paroi conjuguant les fonctions de confort thermique, visuel et acoustique. Il a été proposé de coupler un MCP transparent aux courtes longueurs d'onde à l'état liquide et un aérogel de silice comme isolant translucide. Ainsi, le mur, outre qu'il agit comme capteur et stockeur d'énergie, accomplit une fonction d'éclairage naturel, et pour réduire les pertes vers l'environnement, l'isolant est placé sur la surface extérieure de la paroi. Le meilleur conditionnement de ces éléments a été étudié, en retenant comme solution, l'assemblage d'un vitrage simple côté extérieur, suivi d'un espace rempli de l'isolant, et ensuite des briques en verre remplies de MCP côté intérieur (voir FIG. 1.13).

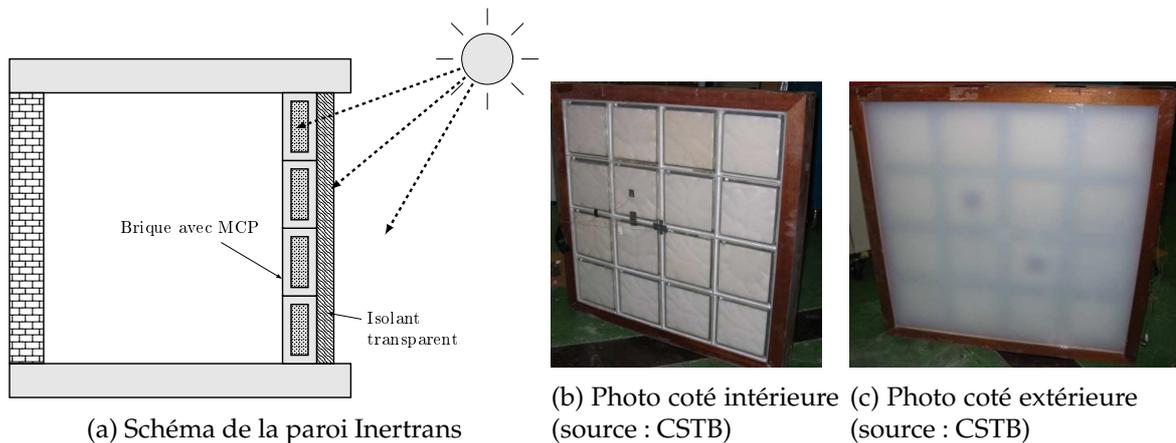


FIGURE 1.13: Paroi Inertrans

1.2.3.1 Phénomènes physiques en jeu

Le MCP utilisé pour la paroi Inertrans est caractérisé par un fort nombre de Prandtl ($Pr = 113$). Pour ce type de matériau ($Pr > 1$), la fusion avec convection naturelle dans une cavité carrée différentiellement chauffée a été étudiée par Jany et Bejan [16]. L'évolution du processus est comme suit. Au début, lorsqu'une petite couche de liquide se forme, les transferts sont dominés par la conduction, et le

front de fusion se déplace parallèlement à la paroi chauffée (voir FIG. 1.14a). Ensuite, du fait de la variation de masse volumique, le fluide chaud remonte et apporte la chaleur au solide via l'interface entre les deux. Cela entraîne une distribution non uniforme de la chaleur, et par conséquent une légère déformation du front de fusion. À ce moment, les transferts de chaleur sont mixtes alliant transfert par conduction et convection (voir FIG. 1.14b). Au fur et à mesure que les températures augmentent, le mouvement du fluide est plus important, le liquide donne davantage de chaleur à l'interface et se refroidit en descendant, par conséquent, les transferts de chaleur sont plus importants en haut qu'en bas de l'interface, en entraînant une forme irrégulière de celle-ci. La déformation du front de fusion est plus importante et les transferts convectifs dominant (voir FIG. 1.14c). Le processus continue jusqu'à l'arrivée du front de fusion à la paroi froide. Ces quatre régimes sont représentés sur la figure 1.14.

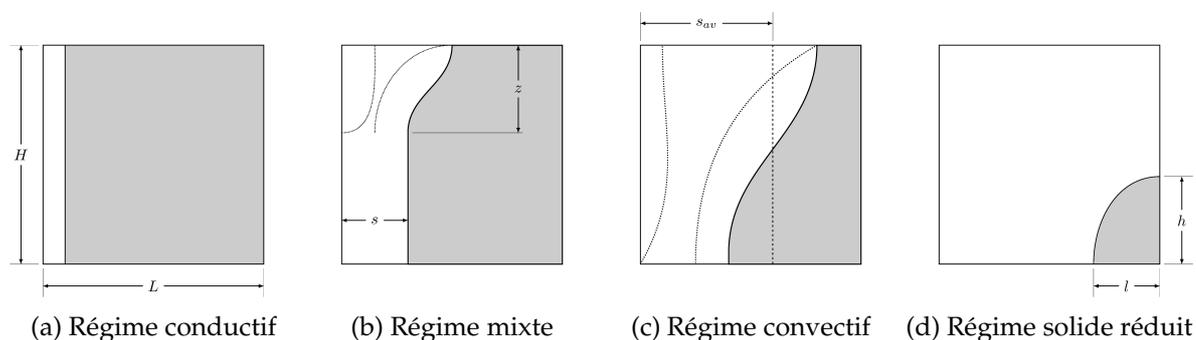


FIGURE 1.14: Différents régimes lors de la fusion avec convection naturelle

Dans le cas qui nous concerne, le récipient contenant le MCP est rectangulaire, et l'interaction du rayonnement, de la convection et de la conduction peut produire une évolution différente de celle indiquée par Jany et Bejan. Dans ce cas, le principe de fonctionnement est le suivant : le rayonnement solaire arrive sur la surface extérieure du MCP, et la partie visible du rayonnement passe au travers du matériau, lequel suivant ses propriétés diffusera ou non ce rayonnement. La partie infrarouge est absorbée par le solide, en augmentant sa température, jusqu'à atteindre la température de fusion et à ce moment là, une petite couche de liquide commence à se former. En plus, d'autres phénomènes tels que l'absorption du rayonnement dans le liquide, la réflexion et la diffraction aux interfaces peuvent s'ajouter, comme montré sur le schéma de la FIG. 1.15.

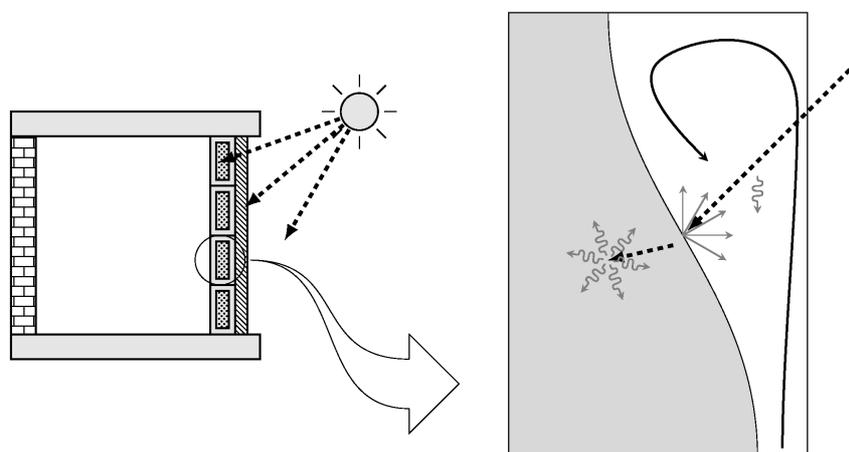


FIGURE 1.15: Détail de la brique du mur Inertrans

Dans le domaine du bâtiment, afin d'obtenir des temps de calcul raisonnables, des simplifications sont généralement nécessaires. Les hypothèses courantes sont des propriétés thermophysiques constantes et des transferts de chaleur uniquement par conduction. Toutefois, ces hypothèses sont parfois trop simplificatrices et ne permettent pas une représentation acceptable du phénomène physique. Par exemple, sur la FIG. 1.16, nous présentons les résultats des simulations faites par Faure [4]. Cette figure montre la différence entre la température prédite, avec et sans convection, lors de la fusion d'un eutectique d'acide gras fondant à 21°C. Il se trouve que les différences sont négligeables pour des épaisseurs inférieures à 1 cm, alors qu'au-delà, la prédiction des températures avec et sans convection peut atteindre jusqu'à 18°C d'écart.

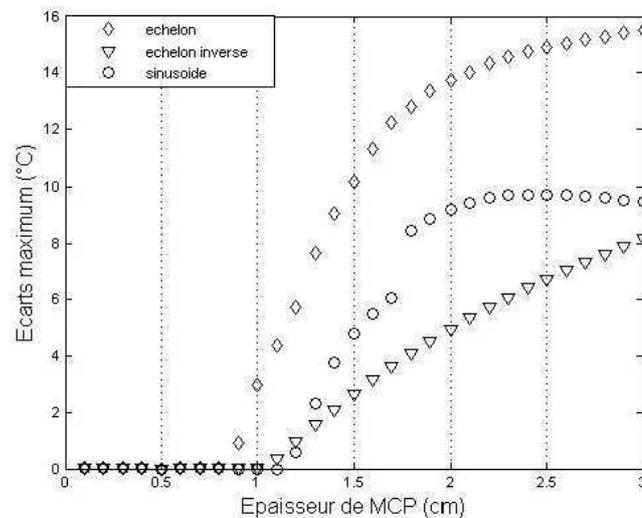


FIGURE 1.16: Influence de la convection naturelle suivant l'épaisseur de MCP [4]

Or, sans connaissances au préalable, sauf si nous faisons des expériences pour chaque matériaux, ce n'est qu'avec la simulation que nous pouvons déterminer l'importance de la convection et du rayonnement. Les études sur les façades translucides, dont nous avons parlé dans la section 1.2.2, ont supposé des transferts unidimensionnels par conduction et rayonnement en négligeant la convection. L'étude de Faure [4] a montré que les transferts convectifs sont importants si l'épaisseur de MCP est supérieure à 1 cm. Et encore une fois, l'interaction de la convection et du rayonnement n'a pas été étudiée.

À partir de ce constat, nous proposons de réaliser une modélisation fine des phénomènes mis en jeu au sein des MCP translucides afin de comprendre l'influence et l'interaction des différents modes de transfert de chaleur. Par conséquent, dans la section suivante, nous décrivons les équations gouvernant ces phénomènes ainsi que leurs hypothèses simplificatrices, et les méthodes numériques adaptées à leur solution.

1.3 Modélisation du changement de phase

Dans l'hypothèse d'un milieu continu, les équations gouvernantes sont la conservation de la masse, la quantité de mouvement et de l'énergie.

La *conservation de la masse* est donnée par :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (1.3)$$

En appliquant le principe fondamental de la mécanique, nous obtenons l'équation de *conservation de la quantité de mouvement*. Les forces extérieures peuvent agir sur un volume (forces volumiques) ou sur sa surface (forces de contact). Si la pesanteur est la seule force volumique considérée, nous avons :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{u}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = \rho \vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{P} \quad (1.4)$$

Le tenseur des contraintes (\mathbf{P}) a une composante normale (pression p), et une composante tangentielle (contrainte visqueuse τ) :

$$\mathbf{P} = -p\mathbf{I} + \tau \quad (1.5)$$

Enfin, la *conservation de l'énergie* est donnée par le premier principe de la thermodynamique. Si nous considérons, des sources internes de chaleur (q'''), des transferts par conduction et convection et les échanges avec le milieu extérieur, nous obtenons :

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} T \right) = q''' + \vec{\nabla} \cdot (\kappa \vec{\nabla} T) + \beta T \frac{Dp}{Dt} + \tau \cdot \vec{\nabla} \vec{u} \quad (1.6)$$

où $\beta = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}$ est le coefficient de dilatation thermique.

1.3.1 Hypothèses simplificatrices

1.3.1.1 Fluide Newtonien

Il existent différentes « lois de comportement », qui caractérisent la contrainte visqueuse. Pour un fluide Newtonien, la contrainte visqueuse est reliée par une constante au gradient des vitesses, ou plus précisément au tenseur de déformation. La contrainte visqueuse s'écrit alors :

$$\tau_{\alpha\beta} = \lambda \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha\beta} + \mu \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \quad (1.7)$$

où λ est appelé viscosité de volume et μ est la viscosité dynamique. Si le fluide est supposé incompressible, la masse volumique ne change ni dans le temps ni dans l'espace, et si en outre il est Newtonien, nous obtenons les équations de Navier-Stokes :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \quad (1.8a)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = -\frac{1}{\rho_\infty} \vec{\nabla} p + \frac{\mu}{\rho_\infty} \nabla^2 \vec{u} + \vec{g} \quad (1.8b)$$

où $\nu = \frac{\mu}{\rho_\infty}$ est la viscosité cinématique.

1.3.1.2 Hypothèse de Boussinesq

Les équations de l'énergie et de la quantité de mouvement sont couplées, du fait de la variation de la masse volumique avec la température. Une hypothèse simplificatrice très utilisée est l'approximation de Boussinesq. Cette approximation comprend trois hypothèses [17] :

- La masse volumique est supposée constante sauf dans le terme de poussée
- Toutes les autres propriétés du fluide sont supposées constantes
- La dissipation visqueuse est supposée négligeable

La première hypothèse implique d'ailleurs, que le fluide est incompressible. Les équations de conservation suivant l'approximation de Boussinesq peuvent être obtenues par différents moyens, toutefois, nous reprenons ici l'approche de Gray et Giorgini [17], car ils ont développé des critères pour la validité de cette approximation.

Tout d'abord, ils ont supposé les propriétés physiques, comme des fonctions linéaires de la température et de la pression, et ils expriment alors ces propriétés comme un développement en série de Taylor au premier ordre, autour d'une température (T_∞) et d'une pression de référence (p_∞). Or, afin de rendre l'écriture moins encombrante, sans pourtant changer le résultat final, nous ne présentons ici que des fonctions dépendantes de la température :

$$\rho = \rho_\infty [1 - \beta_\infty (T - T_\infty)] \quad (1.9a)$$

$$c_p = c_{p\infty} \left[1 + \frac{1}{c_{p\infty}} \frac{\partial c_p}{\partial T} (T - T_\infty) \right] \quad (1.9b)$$

$$\mu = \mu_\infty \left[1 + \frac{1}{\mu_\infty} \frac{\partial \mu}{\partial T} (T - T_\infty) \right] \quad (1.9c)$$

$$\beta = \beta_\infty \left[1 + \frac{1}{\beta_\infty} \frac{\partial \beta}{\partial T} (T - T_\infty) \right] \quad (1.9d)$$

$$\kappa = \kappa_\infty \left[1 + \frac{1}{\kappa_\infty} \frac{\partial \kappa}{\partial T} (T - T_\infty) \right] \quad (1.9e)$$

Ensuite, Gray et Giorgini ont appliqué ces expressions, aux équations gouvernantes du problème de convection naturelle dans une couche fluide d'épaisseur H , et pour un écart de températures $\Delta T = T_1 - T_0$. En prenant comme référence la température moyenne $T_\infty = (T_1 + T_0)/2$, et en supposant les propriétés comme constantes à 10% près, les équations pour un fluide Newtonien suivant l'approximation de Boussinesq s'écrivent :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \quad (1.10a)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = -\frac{1}{\rho_\infty} \vec{\nabla} (p - p_\infty) + \nu \nabla^2 \vec{u} - \vec{g} \beta (T - T_\infty) \quad (1.10b)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} T = \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa}{\rho_\infty c_p} \vec{\nabla} T \right) \quad (1.10c)$$

où $\alpha = \frac{\kappa}{\rho_\infty c_p}$ est la diffusivité thermique, et nous avons pris un état de référence statique, $\vec{\nabla} p_s = \rho_s \vec{g}$.

L'hypothèse des propriétés constantes à 10% près, impose les restrictions suivantes :

$$|\beta_\infty \Delta T| \leq 0.1 \quad (1.11a)$$

$$\left| \frac{1}{c_{p\infty}} \frac{\partial c_p}{\partial T} \Delta T \right| \leq 0.1 \quad (1.11b)$$

$$\left| \frac{1}{\mu_\infty} \frac{\partial \mu}{\partial T} \Delta T \right| \leq 0.1 \quad (1.11c)$$

$$\left| \frac{1}{\beta_\infty} \frac{\partial \beta}{\partial T} \Delta T \right| \leq 0.1 \quad (1.11d)$$

$$\left| \frac{1}{\kappa_\infty} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Delta T \right| \leq 0.1 \quad (1.11e)$$

Et l'hypothèse, de dissipation visqueuse et travail de compression négligeables, demandent :

$$\left| \frac{\beta_\infty g H T_\infty}{c_{p\infty} \Delta T} \right| \leq 0.1 \quad (1.12a)$$

$$\left| \frac{\beta_{\infty} g H}{c_{p\infty}} \right| \text{Pr} \leq 0.1 \quad (1.12b)$$

1.3.1.3 Surface libre

Comme nous l'avons vu dans l'explication du fonctionnement de la paroi Inertrans, la surface supérieure du MCP est libre, ou plus précisément, elle est en contact avec l'air au-dessus. Il s'agit alors, de deux fluides (le MCP liquide et l'air) séparés par une interface. La force normale qui sépare les deux fluides est appelée tension superficielle, et elle est proportionnelle à la courbure de l'interface.

Les équations de Navier-Stokes gouvernent l'écoulement de chaque fluide, cependant, nous avons un saut des propriétés, comme la masse volumique et la viscosité dynamique, à l'interface.

Nous devons modifier les conditions aux limites. Les forces de surface sont données par le tenseur des contraintes, alors le bilan des forces à l'interface s'écrit :

$$(\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2) \hat{n} = k \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right) \hat{n} \quad (1.13)$$

Où k est le coefficient de tension superficielle, qui est une propriété des matériaux, R_1 et R_2 sont les rayons de courbure de la surface, et \hat{n} est la normale à l'interface, orientée du gaz vers le liquide.

1.3.2 Nombres adimensionnels

Il est utile de définir certains nombres adimensionnels qui seront souvent utilisés pour caractériser les matériaux et les transferts thermiques.

Rappelons-nous des équations de Navier-Stokes pour un fluide sous l'hypothèse de Boussinesq (éqs. 1.10).

Maintenant, nous faisons l'adimensionnement des équations, pour lequel nous avons besoin de certaines grandeurs de référence. Pour les problèmes de convection naturelle, la hauteur H est en général prise comme longueur de référence. Pourtant, comme l'écoulement est induit par une différence de températures, ses caractéristiques ne sont pas connues au préalable. On utilise alors, une vitesse de référence définie par :

$$u_{\infty} = \sqrt{g\beta\Delta TH}$$

Où l'écart de température ΔT dépend du problème analysé. Avec cette vitesse de référence, et la hauteur, nous avons les quantités adimensionnelles suivantes :

$$x^* = \frac{x}{H} \quad u^* = \frac{u}{u_{\infty}} \quad t^* = \frac{tu_{\infty}}{H} \quad p^* = \frac{p - p_{\infty}}{\rho_{\infty} u_{\infty}^2} \quad T^* = \frac{T - T_0}{T_1 - T_0}$$

Ainsi, les équations de Navier-Stokes avec l'hypothèse de Boussinesq, sous forme adimensionnelle sont :

$$\vec{\nabla}^* \cdot \vec{u}^* = 0 \quad (1.14a)$$

$$\frac{\partial \vec{u}^*}{\partial t^*} + (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}^*) \vec{u}^* = -\vec{\nabla}^* p^* + \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \nabla^{*2} \vec{u}^* - T^* \quad (1.14b)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}^* T^* = \frac{1}{\sqrt{Ra Pr}} \nabla^{*2} T^* \quad (1.14c)$$

Nous voyons apparaître ici, les nombre de Rayleigh (Ra) et de Prandtl (Pr).

$$\text{Ra} = \frac{g\beta(T_1 - T_0)H^3}{\nu\alpha}; \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{\alpha}$$

Le nombre de Prandtl est une caractéristique du matériau et non de l'écoulement. Il est le rapport entre la viscosité cinématique et la diffusivité thermique. Les faibles nombres de Prandtl ($Pr \ll 1$) sont caractéristiques des métaux liquides, pour lesquels, les transferts par convection sont moins importants que ceux par conduction. Pour les nombres de Prandtl de l'ordre de l'unité ou plus grands, la convection a des effets importants.

Par ailleurs, le nombre de Rayleigh est le rapport entre les transferts par convection et les transferts par conduction.

Pour les problèmes de changement de phase, nous utilisons le nombre de Stefan qui est le rapport entre chaleur sensible et chaleur latente :

$$Ste = \frac{c_p(T_1 - T_F)}{L_h}$$

Un autre paramètre important est le nombre de Nusselt, qui est le rapport entre le flux total et le flux conductif. Le nombre de Nusselt moyen sert à représenter le flux de chaleur à la paroi chaude. Puisque la vitesse est nulle à la paroi, l'expression du nombre de Nusselt devient :

$$Nu = \frac{\int_0^H \kappa \frac{\partial T}{\partial x} dy}{\kappa(T_1 - T_0)} = \int_0^1 \frac{\partial T^*}{\partial x^*} dy^* \quad (1.15)$$

1.3.3 Méthodes numériques

1.3.3.1 Méthode à suivi de l'interface

Les équations décrites précédemment sont appliquées à la phase liquide et à la phase solide, et le couplage des équations se fait via le bilan d'énergie à l'interface ainsi :

$$\kappa_s \frac{\partial T_s}{\partial n} - \kappa_l \frac{\partial T_l}{\partial n} = \rho L_h u_n \quad (1.16)$$

Où u_n est la vitesse normale à l'interface.

Cette formulation utilise la température comme variable dépendante, et est connue comme formulation forte.

Puisque l'interface change de forme, la solution numérique requiert un maillage qui s'adapte à l'interface pour résoudre les équations correspondantes. Afin d'éviter ce maillage mobile, une transformation des coordonnées peut être utilisée afin de rendre orthogonal le domaine de calcul [18–21]. Pourtant, cette transformation implique une plus grande complexité des équations gouvernantes, ainsi certains auteurs négligent les termes croisés [20, 21].

Cette méthode s'adapte aux matériaux purs, dont le changement de phase se fait à une température fixe, et le saut des propriétés à l'interface est introduit facilement. En outre, elle permet d'utiliser un maillage plus fin près du front de fusion, si l'on veut une description fine de celui-ci. Cependant, pour des géométries complexes la transformation des coordonnées n'est pas recommandée et une grille déformable est alors nécessaire [21].

Par ailleurs, si la position de l'interface n'est pas très importante, nous pouvons recourir aux méthodes à maillage fixe.

1.3.3.2 Méthodes à maillage fixe

Parmi ces méthodes, nous avons la méthode enthalpique qui est largement utilisée [21–24] du fait de sa simplicité. Nous parlerons de la méthode nommée enthalpie-porosité développée par Voller *et al.* [25, 26].

Méthode d'enthalpie-porosité

La formulation faible ou enthalpique utilise l'enthalpie et la température dans l'équation de l'énergie :

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} H) = \vec{\nabla} \cdot (\kappa \vec{\nabla} T) \quad (1.17)$$

L'enthalpie représente la chaleur totale contenue dans le matériau, composée d'une partie sensible liée à l'augmentation de la température, et une partie latente correspondant au changement de phase. Pour un matériau pur, la relation entre l'enthalpie et la température est donné par l'ÉQ. 1.18 et illustrée sur la FIG. 1.17.

L'enthalpie représente la chaleur totale contenue dans le matériau, composée d'une partie sensible liée à l'augmentation de température, et une partie latente correspondant au changement de phase. Pour un matériau pur, la relation entre l'enthalpie et la température est donné par l'ÉQ. 1.18 et illustrée sur la FIG. 1.17.

$$H = c_p T + L_h \quad (1.18)$$

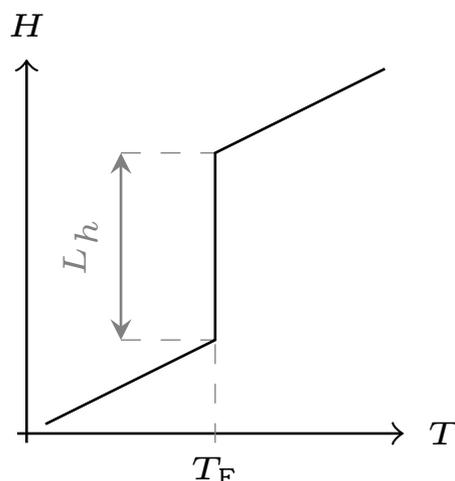


FIGURE 1.17: Relation entre enthalpie et température pour un matériau pur

En remplaçant l'ÉQ. 1.18 dans l'ÉQ. 1.17 nous obtenons :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{u} T) = \alpha \nabla^2 T - \frac{L_h}{c_p} \frac{\partial f_L}{\partial t} \quad (1.19)$$

Où la chaleur spécifique est supposée indépendante de la température, et le terme de divergence de la chaleur latente est zéro pour un matériau pur [25].

Cette formulation a l'avantage d'utiliser une seule équation pour les deux phases, et ainsi facilite la résolution numérique, par exemple par une méthode aux différences finies.

Traitement de l'interface solide-liquide

Le changement de vitesse à la frontière mobile pose des problèmes, du point de vue numérique. Une première approche et la plus simple est de mettre à zéro la vitesse dans les nœuds considérés solides (ceux dont la température est au-dessous de la température de fusion). Du fait du changement brusque de vitesse, cette approche est susceptible de provoquer des instabilités [26]. Une autre

approche est d'augmenter la viscosité dans les nœuds devenant solides, ce qui amène effectivement à une diminution de la vitesse. Enfin, une dernière approche est de modéliser le problème comme un écoulement dans un milieu poreux. Cette dernière est considérée plus proche du phénomène physique réel.

Dans ce dernier cas, nous ajoutons un terme source aux équations de Navier-Stokes, ainsi :

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} = -\frac{1}{\rho_\infty} \vec{\nabla}(p - p_\infty) + \nu \nabla^2 \vec{u} - \vec{g}\beta(T - T_\infty) + A\vec{u} \quad (1.20)$$

Où A est un paramètre qui vaut zéro dans la phase liquide et a une valeur très grande ($10^6 \simeq C \simeq 10^{15}$) dans la phase solide, de sorte que le terme source domine sur les termes transitoire, convectif et diffusif. La zone de transition (zone pâteuse), est considérée comme un milieu poreux.

Le paramètre A peut avoir différentes expressions, suivant le type de matériau modélisé. Pour un matériau pur, dont le changement de phase est isotherme, l'interface est nette et il n'y a pas vraiment de zone pâteuse, A peut varier de façon linéaire avec la fraction liquide, ainsi :

$$A = -C(1 - f_L) \quad (1.21)$$

Pour un matériau dont le changement de phase se fait sur un intervalle de température, il existe en effet une zone pâteuse, où la vitesse est supposée suivre l'équation de Carman-Kozeny [26] :

$$\vec{\nabla}p = -C \frac{(1 - \epsilon)^2}{\epsilon^3} \vec{u} \quad (1.22)$$

où ϵ est la porosité du milieu. Alors A est défini par :

$$A = -C \frac{(1 - f_L)^2}{(f_L^3 + \delta)} \quad (1.23)$$

où δ est introduit afin d'éviter une division par zéro.

Le traitement comme une interface poreuse a l'avantage d'une transition graduelle des vitesses, et ainsi, moins d'instabilités. Pourtant, le choix de paramètres est assez arbitraire, et dépend, entre autres de la morphologie du milieu [25], laquelle en générale n'est pas connue *a priori*.

Dans les sections qui suivent, nous recensons des études expérimentales, et numériques faites sur les MCP. Enfin, nous faisons une analyse de ces études pour encadrer la recherche qui a été faite au cours de cette thèse.

1.4 Étude bibliographique sur le changement de phase

Nous recensons ici différents travaux expérimentaux et numériques, au sujet de la fusion et la solidification des MCP, qui serviront à valider nos résultats ultérieurement.

1.4.1 Études expérimentales

Nous trouvons dans la littérature, que les études expérimentales utilisées pour valider des résultats numériques, utilisent comme matériaux le gallium [9, 27] et l'octadécane [19, 20, 28]. Ces matériaux ont comme avantages, des propriétés thermophysiques assez connues, et des températures de fusion autour de l'ambiante, ce qui est favorable aux expériences car les pertes vers l'environnement se réduisent.

L'octadécane est une paraffine, dont la température de fusion est de $28.05 \pm 0.05^\circ\text{C}$ [20]. Il est transparent à l'état liquide [19], en rendant plus faciles les mesures optiques. Le gallium est un métal, dont la température de fusion est 29.78°C . Malgré sa basse température de fusion, il a l'inconvénient d'être anisotrope. Ainsi, sa conductivité thermique peut varier de $88.47\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ à $15.99\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ suivant les différents axes des cristaux [9].

Pour les deux types de matériaux, les expériences sont faites dans une enceinte rectangulaire, dont les températures dans les parois verticales sont imposées par des échangeurs, et les autres parois sont isolées et supposées adiabatiques.

Les résultats des études expérimentales sont souvent exprimés par des corrélations obtenues en ajustant les données par des moindres carrées. Sur le TAB. 1.2, nous présentons quelques corrélations pour la fraction fondue retrouvées dans la littérature, dont nous allons parler afin d'évaluer leur pertinence pour notre étude.

Dans ces corrélations, la dépendance du temps est introduite en général par le paramètre adimensionnel $SteFo$. Pour certaines expériences, le rapport de forme (A) a été modifié afin d'évaluer son effet. Ainsi l'a fait Okada [28], cependant, aucune conclusion n'est donnée sur l'influence du rapport de forme, et d'ailleurs, la corrélation donnée pour la position du front de fusion (liée à la fraction fondue) ne prend pas en compte ce paramètre. À leur tour, Bénard *et al.* [20] donnent une corrélation où la fraction fondue est fonction du rapport de forme. À partir de cette corrélation, en gardant tous les paramètres constants sauf la hauteur, le taux de fusion est plus grand pour les cavités plus basses.

Ho et Viskanta [30] ont fait des expériences de fusion dans une enceinte rectangulaire chauffée par le bas. Les parois verticales sont conductrices et la paroi supérieure est isolée. Quant au rapport de forme, ils observent que le taux de fusion diminue lorsque le rapport de forme augmente. Dans ce type de configuration lorsque la convection est bien établie, les transferts de chaleur sont plus importants en bas des parois verticales près de la surface chauffée, par conséquent, une enceinte plus haute a peu d'influence sur les transferts qui se font en bas. Or, dans une enceinte plus haute il y a plus de matériau, et par conséquent la fusion est plus lente. Malgré ces observations, les corrélations obtenues n'incluent pas le rapport de forme.

La corrélation pour la fraction fondue proposée par Gau et Viskanta [9] a été obtenue par des expériences sur la fusion du gallium. Ils affirment que l'effet du rapport de forme n'a pas été identifié clairement à partir de leur corrélation, mais ils suggèrent que le taux de fusion devrait augmenter avec le rapport de forme. Par ailleurs, la méthode utilisée par Gau et Viskanta, nommée *pour-out*, consistant à vider la cavité du liquide à certains instant de temps pour mesurer la position de l'interface a été contesté, par exemple en [27], car les mesures ne sont pas faites en temps réel et la vidange du liquide pourrait introduire de la convection forcée.

Par ailleurs, les corrélations obtenues par Jany et Bejan [16], à l'aide de l'analyse d'échelles, sont très utilisées pour valider les résultats numériques. Ils ont fait des simulations, avec l'approche semi stationnaire, d'une enceinte carrée contenant un MCP caractérisé par $0 \leq Ra \leq 10^8$, $Pr = 50$. En comparant les résultats des simulations et ceux de l'analyse d'échelle, ils ont obtenu les corrélations suivantes pour le nombre de Nusselt et la position du front de fusion en fonction du temps adimensionné $\theta = Fo Ste$:

$$Nu = (2\theta)^{-1/2} + \left[0.35 Ra^{1/4} - (2\theta)^{-1/2}\right] \left[1 + \left(0.0175 Ra^{3/4} \theta^{3/2}\right)^{-2}\right]^{-1/2} \quad (1.24a)$$

$$S_{av} = \left[(2\theta)^{5/2} + \left(0.35 Ra^{1/4} \theta\right)^5\right]^{1/5} \quad (1.24b)$$

TABLE 1.2: Corrélations pour la fraction fondue dans une enceinte rectangulaire avec température imposée sur les parois verticales

	Matériau	Domaine de validité	Corrélation
1984 Okada [28]	Octadécane	$Pr = [7, 56.2]$ $10^4 \leq Ra \leq 5 \times 10^6$	$S_{av} = \sqrt{2\tau_t} + \overline{Nu_{wt}}(\tau - \tau_t) [1 + C(\tau - \tau_t)/2]$
1984 Ho et Viskanta [19]	Octadécane	$10^4 \leq Ra \leq 5 \times 10^6$ $A = 2.6$	$\frac{V}{V_0} = 0.523(Ra^{1/4} Ste Fo)^{0.68}$
1985 Bénard et al. [20]	Octadécane	$Pr \gtrsim 10$ $Ra \cong 10^8 - 10^9$ $Ste < 0.2$ $1.2 \lesssim A \lesssim 5.5$	$\frac{V}{V_0} = A(\hat{t} + \hat{t}_0)$ $\hat{t} = 0.33 Ra^{1/4} \frac{\rho_s Ste}{\rho_s Pr} \frac{\nu}{H^2} t$ $\hat{t}_0 = \frac{1}{0.66 Ra^{1/4}}$
1986 Gau et Viskanta [9]	Gallium	$Ste[0.009, \dots, 0.083]$ $A = [0.286, 0.5, 0.714]$	$\frac{V}{V_0} = 2.708(SteFo)^{0.843} Ra^{0.0504} A^{-0.14}$
1999 Wang et al. [29]	Polyéthylène glycol	$2.02 \times 10^6 \leq Ra \leq 2.61 \times 10^7$ $804 \leq Pr \leq 1055$ $0.081 \leq Ste \leq 0.405$ $A = 0.67$	$\frac{V}{V_0} = 4.73Fo^{0.906} Ste^{1.538} Ra^{0.002}$

Pour des temps très grands le nombre de Nusselt a comme asymptote

$$Nu_{\infty} = 0.35 Ra^{1/4} \quad Pr > 1$$

Pour $Pr < 1$, l'épaisseur de la couche limite thermique est différente et par conséquent les échelles sont différentes. Ils trouvent que le nombre de Nusselt est de l'ordre de $Nu \sim (RaPr)^{1/4}$. Lin et Bejan [31] ont alors proposé une expression couvrant les petits ainsi que les grands nombres de Prandtl. Ils ajustent cette expression à des données expérimentales en obtenant :

$$Nu_{\infty} = \frac{0.35 Ra^{1/4}}{[1 + (0.143/Pr)^{9/16}]^{4/9}} \quad (1.25)$$

Il faut noter que ces équations sont valables lorsque le solide est isotherme à la température de fusion. Si le solide est au-dessous de sa température de fusion, la conduction dans le solide modifie les transferts thermiques à l'interface des deux phases et ces corrélations ne sont plus applicables [32].

Sur la FIG. 1.18 nous comparons les résultats des corrélations pour la fusion avec convection (ÉQS. 1.24a et 1.24b) et la solution théorique de fusion avec conduction (solution de Neumann [33]). Nous avons utilisé $Ra = 10^8$, $Pr = 50$ et $Ste = 0.1$, caractéristiques de l'octadécane. Au temps $\theta = 0.1$ par exemple, le Nusselt avec convection est environ 3 fois plus grand que le Nusselt avec conduction, et la position de l'interface avec convection est plus que le double de celle avec conduction seulement

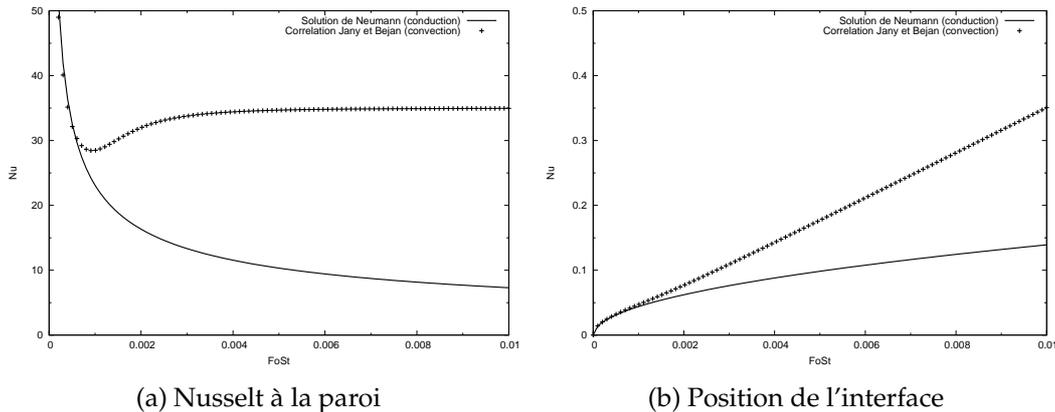


FIGURE 1.18: Résultat analytiques pour la fusion de l'octadécane

À nouveau, dans ces corrélations le rapport de forme est absent. Cela est justifié, du moins avant l'arrivée du front de fusion à la paroi froide, car la zone liquide n'a aucun rapport avec la longueur de la cavité. Cependant, ils suggèrent une modification pour prendre en compte plutôt le rapport de forme instantané, c'est-à-dire, le rapport entre la hauteur et l'épaisseur moyenne de la couche liquide s_{av} , en réajustant l'échelle du nombre de Nusselt par :

$$\frac{Nu}{Ra^{1/4}} = f \left(\frac{H}{s_{av}} \right)^{4/7} Ra^{1/7}$$

Cette relation ne semble pourtant pas très utile, car on doit connaître l'épaisseur s_{av} et la valeur du coefficient f . De plus, les auteurs donnent une valeur de l'ordre de 0.3, sans plus de détails.

Puisque l'effet du rapport de forme n'est pas bien établi, et les corrélations (1.24a) et (1.24b), qui ne prennent pas en compte ce paramètre, représentent correctement la physique du processus de fusion avec convection naturelle, nous allons utiliser ces corrélations pour la validation de nos résultats ultérieurement.

1.4.2 Études numériques

Le travail de Gobin, Le Quéré *et al.* [34] présente une comparaison des résultats de simulation de la fusion obtenus par différents chercheurs. Deux matériaux ont été proposés, l'étain et l'octadécane caractérisés par un faible et un fort nombre de Prandtl, respectivement. Ce travail a montré notamment la présence d'instabilités lors de la fusion de l'étain. L'origine de ces instabilités a été étudiée par Le Quéré et Gobin [35].

Hannoun *et al.* [22] remarquent que pour la fusion de l'étain dans le travail de Gobin *et al.* [34], certaines simulations montraient un écoulement unicellulaire alors que d'autres un écoulement multicellulaire, et parmi ces derniers, le nombre de cellules varient entre six et quatre en début de fusion. Ils trouvent la même dissemblance, dans les simulations de la fusion du gallium de [26] et [36], par exemple. Ils entament alors la simulation de la fusion du gallium avec les paramètres de [26], et de l'étain avec les paramètres de Gobin *et al.* [34]. Comme dans toutes les études précédentes, le fluide est supposé Newtonien, avec des propriétés constantes et approximation de Boussinesq. Ils trouvent un écoulement pluricellulaire, dont le nombre de cellules augmente avec le maillage et avec l'ordre du schéma de discrétisation (upwind le moins précis, centré le plus précis). En outre, les différences entre résultats diminuent au cours du temps. Ils affirment alors, que la solution du modèle doit être pluricellulaire et que les solutions avec une seule cellule proviennent des maillages très faibles ($< 100 \times 100$) et schémas de discrétisation d'ordre réduit.

Par rapport à la forme de l'interface Hannoun *et al.* trouvent qu'elle dépend également de l'ordre de discrétisation et la finesse du maillage. Pour le nombre de Nusselt à la paroi chaude, les schémas les plus précis et les maillages les plus fins montrent un saut lors de l'union des cellules, et des oscillations peu après $t = 1000s$, dont l'origine est supposée numérique mais les auteurs suggèrent d'approfondir sur ce point. Ils comparent également la fraction fondue, en concluant que les maillages les plus fins et les schémas le plus précis donnent une plus grande fraction fondue. Par ailleurs, du fait du très grands temps de calcul (2400h CPU pour simuler 2500 s), ils suggèrent la parallélisation comme possible amélioration.

Mencinger [23] a utilisé la méthode des volumes finis, avec un maillage adaptatif. En comparant ses résultats pour l'étain à $t = 1000s$ avec 80×80 volumes, la forme de l'interface est semblable aux solutions les plus précises de [22]. Grâce au maillage adaptatif, le caractère multicellulaire de l'écoulement est obtenu avec un maillage assez faible (80×80), en revanche le nombre et la forme des cellules est différent des résultats d'Hannoun. Le nombre de Nusselt présente des oscillations comme le montrent aussi les travaux précédents, sans donner d'explication, sauf que ces oscillations ont été montrées par d'autres chercheurs.

Mencinger a fait également des simulations de la fusion de l'octadécane. En comparant la position de l'interface avec celle des études précédentes, il trouve des différences plus importantes en haut de l'enceinte. Ces différences sont attribuées à la faible densité du maillage dans cette zone. Les courbes de Nusselt montrent des oscillations, dont l'origine est aussi expliquée par le faible maillage près de l'interface en haut de l'enceinte. Tout en acceptant que ces oscillations sont de nature numérique, il suggère qu'elles pourraient provenir également de la variation de géométrie produite par l'interface mobile.

1.4.2.1 Comparaison des différentes méthodes

Viswanath et Jaluria [21] ont fait une comparaison des méthodes à suivi de l'interface et à maillage fixe. Ils ont fait la simulation de la fusion du gallium, avec

les paramètres de l'expérience de Gau et Viskanta [37].

Pour la méthode à maillage fixe, ils utilisent la formulation d'enthalpie-porosité [26]. Les équations sont discrétisées par la méthode des volumes finis, dont les coefficients sont obtenus par le schéma loi de puissance. Après une étude sur l'influence du maillage, ils ont choisi une grille uniforme de 50×30 . Ils font des itérations à chaque pas de temps. Le temps de calcul a été de 7h pour la simulation de 19 minutes de fusion.

Pour la méthode à maillage à suivi de l'interface, ils utilisent une transformation de coordonnées. Les équations obtenues contiennent des dérivées croisées. Ils comparent les résultats obtenus en gardant tous les termes provenant de la transformation des coordonnées, avec ceux de l'approximation quasi-stable qui néglige les termes croisés [20]. Ils affirment que tous les termes devraient être utilisés au début du processus, lorsque les gradients de température sont plus importants.

Puis ils comparent les isothermes et lignes de courant obtenues par les deux méthodes. Les différences sont notables dans la description de l'écoulement. La méthode à suivi de l'interface a montré une recirculation du fluide dans certaines zones, recirculation qui n'a pas été montrée par la méthode enthalpique. Les auteurs suggèrent qu'un maillage plus fin serait nécessaire avec la méthode enthalpique pour prédire ce phénomène.

1.4.3 Fusion avec rayonnement

La fusion par rayonnement a été étudiée par peu de chercheurs. Nous avons déjà parlé de certains de ces travaux dans la Section 1.2.2, dans le cadre des façades translucides. Nous parlons ici d'autres études couplant fusion et rayonnement, hors de l'application aux façades.

Gobin *et al.* [38] ont étudié le changement d'état d'une paraffine, par conduction et rayonnement unidimensionnels. Cette paraffine est supposée fondre à 51°C , avec propriétés constantes et égales dans le solide et le liquide. Le changement de volume est négligé. Le flux est supposé constant et vertical. Le facteur de réflexion est constant ($\rho = 0.034$) à la frontière air-liquide, et nul à la frontière liquide-solide. Le coefficient d'absorption dans le liquide est de $\beta_e = 13.8\text{m}^{-1}$. Pour le solide, ils affirment que ce coefficient est beaucoup plus grand, alors ils négligent l'absorption dans le solide. Comme conditions limites aux surfaces intérieure et extérieure, ils utilisent un flux convectif ou condition de Fourier. À la frontière liquide-solide, la température est la température de fusion, et le flux radiatif est ajouté au bilan d'énergie. Ces auteurs ont étudié l'effet de différents paramètres, dont la conductivité thermique, les coefficients d'échange convectif extérieur et intérieur, et la fraction du flux radiatif absorbée. Le paramètre le plus important est la fraction du flux absorbé, car en augmentant cette fraction, ça augmente la vitesse de chauffage du matériau ainsi que les températures au sein du matériau.

Diaz et Viskanta [39] ont étudié la fusion avec rayonnement et conduction unidimensionnels. Ils ont résolu l'équation de l'énergie avec la formulation en température, et condition de Stefan à l'interface. Pour ce cas de conduction et rayonnement, cette formulation présente l'avantage de permettre l'introduction explicite du flux radiatif à l'interface. Pourtant en $2D$ l'utilisation d'un maillage qui se déforme rend plus complexe la mise en œuvre de cette formulation d'où l'avantage de la formulation enthalpique.

Webb [40] étudie la fusion induite par le rayonnement d'un milieu semi-transparent (MST). Il a utilisé un coefficient d'absorption dépendant de la longueur d'onde. Il a étudié d'abord, la convection naturelle induite par le rayonnement du point de vue expérimental et numérique, et ensuite, la fusion

induite par le rayonnement expérimental et numériquement. Il a étudié la structure cristalline du solide, pour déterminer l'influence de la diffusion du rayonnement, sur le taux de fusion.

1.5 Conclusion

La comparaison des méthodes de Viswanath et Jaluria [21] a montré que la méthode à suivi de l'interface donne une description plus fine des caractéristiques de l'écoulement. Néanmoins, il est difficile de généraliser ces conclusions car l'étude n'a été menée que pour de faibles nombre de Prandtl. Qu'en est-il par conséquent pour des matériaux à fort nombre de Prandtl? D'autre part, des méthodes enthalpiques ont également représenté des écoulements complexes, pour ce type de matériau, bien qu'elles aient mis en oeuvre des solutions à maillage adaptatif au niveau de l'interface [23].

Les temps de calculs peuvent être assez importants, en fonction de la méthode utilisée, du problème simulé et la discrétisation spatiale et temporelle. La simulation de 19 minutes de fusion du gallium dans [21] a pris $t = 7.1h$ avec la méthode enthalpique et 52×32 nœuds, alors que $3.5h$ avec la méthode à suivi de l'interface et 42×42 nœuds. Pour la fusion de l'étain par exemple, Hannoun *et al.* [22] signalent $2400h$ de CPU pour simuler $2500s$ réels avec un maillage de 200×200 , alors que Mencinger [23] signale 120 jours ($2880h$) de CPU pour simuler $5000s$ avec un maillage de 128×128 .

Par ailleurs, malgré l'application des MCP pour le stockage de l'énergie solaire, peu de travaux ont étudié le couplage rayonnement et changement de phase. Ce couplage a été considéré notamment pour les hautes températures, du fait des applications dans la production du verre ou la fonte des métaux, mais pour les applications de stockage passif de l'énergie solaire dans le bâtiment, le changement de phase se fait autour de la température ambiante. Pour des températures de fusion entre $25^\circ C$ et $30^\circ C$, les travaux de Manz *et al.* [12] et de Weinläder *et al.* ont étudié le changement de phase en présence de rayonnement dans des blocs de MCP de 3 cm et 1.2 cm d'épaisseur, respectivement. Ces études ont utilisé des modèles unidimensionnels, où la convection a été négligée. Toutefois, les transferts convectifs peuvent jouer un rôle important si l'épaisseur de MCP est supérieure à 1 cm [4].

À partir des constatations précédentes, la problématique abordée dans cette thèse est l'étude du changement de phase en présence de convection naturelle et de rayonnement.

Les problèmes rencontrés dans les études recensées qui utilisent les méthodes classiques ou macroscopiques, nous ont amené vers la méthode de Boltzmann sur réseau (LB), laquelle du fait de son caractère mésoscopique pourrait fournir une description fine de l'écoulement, et ainsi peut-être faire ressortir des phénomènes ignorés par les méthodes basées sur un milieu continu. Aussi, le chapitre suivant sera consacré à la présentation de la méthode de LB.

Chapitre 2

Méthode de Boltzmann sur réseau

2.1 Historique

Les origines de la méthode de Boltzmann sur réseau se situent dans la théorie cinétique des gaz [41], particulièrement, la méthode de Boltzmann sur réseau (LB) a été développée à partir des automates cellulaires de gaz sur réseau (LGCA).

Les automates cellulaires consistent en des particules qui bougent sur un réseau, suivant des règles établies, en reproduisant la dynamique moléculaire. L'évolution des LGCA se divise en deux étapes : collision et propagation. Pendant la phase de propagation, chaque particule se déplace vers le nœud voisin suivant sa direction de vitesse. Une seule particule est permise par nœud, par conséquent, lorsque plusieurs particules arrivent au même endroit, la phase de collision détermine leurs interactions et la façon dont elles changent de position.

Le premier modèle de LGCA, avec discrétisation spatiale et temporelle, a été proposé par Hardy, Pomeau et de Pazzis [42] en 1976 (désigné HPP), afin d'étudier les propriétés de transport des fluides. Ce modèle utilisait un réseau carré (voir figure 2.1a) dont les nœuds étaient occupés par des particules qui pouvaient se déplacer suivant quatre directions différentes.

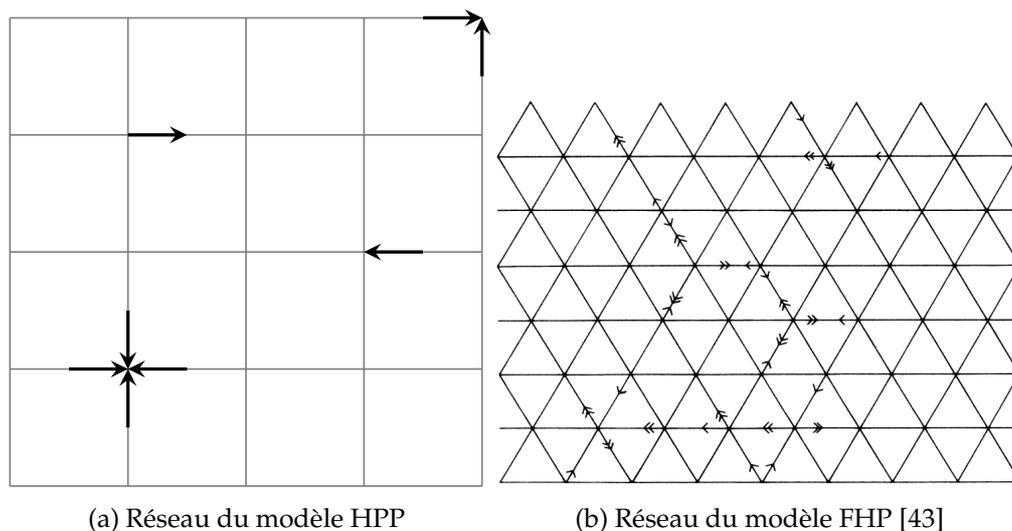


FIGURE 2.1: Réseaux dans LGCA

Le modèle HPP reproduisait la dynamique moléculaire mais il manquait d'isotropie [44]. Alors, Frisch, Hasslacher et Pomeau proposèrent en 1986 un autre modèle, connu comme FHP, dont le réseau était hexagonal (voir fig. 2.1b), réseau avec lequel ils résolvent le manque d'isotropie du HPP. Ce modèle cherchait à faire

respecter, à l'échelle microscopique, le comportement d'un fluide, par conséquent, le système devait respecter la conservation des particules et de la quantité de mouvement. Grâce à la symétrie du réseau, pour la première fois, les équations de Navier-Stokes ont été résolues à partir des LGCA [45].

Dans le modèle FHP, la variable booléenne $n_i(\vec{x}, t)$ appelée variable ou numéro d'occupation indique le nombre de particules (1 ou 0) qui occupent la position \vec{x} , en temps t , et dont la direction de vitesse est c_i , avec $i = 1, \dots, 6$.

L'évolution en temps et en espace de n_i est donnée par l'équation :

$$n_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = n_i(\vec{x}, t) + \Delta_i(n(\vec{x}))$$

Où Δ_i est l'opérateur de collision indiquant les règles à suivre lorsque plusieurs particules arrivent au même nœud. Ces règles doivent être construites en assurant la conservation de masse et de la quantité de mouvement.

Les automates cellulaires avaient pourtant des défauts, dont le principal était le bruit du fait du caractère booléen de n_i . En outre, le coefficient du terme d'advection de l'équation de Navier-Stokes était dépendant de ρ ; la pression était dépendante de la vitesse; et ils présentaient des invariants non physiques [46]. Les améliorations proposées ont donné naissance à la méthode de LB.

La méthode de Boltzmann sur réseau utilise une fonction de distribution monoparticulaire (PDF) exprimant la densité de particules à la position \vec{x} et au temps t , au lieu de la variable booléenne n_i , et la collision est vue comme une relaxation vers un état d'équilibre (au lieu des règles pour les différentes situations possibles lors d'un choc).

Même si la méthode de Boltzmann sur réseau est née des automates de gaz, il a été démontré [47,48] que l'équation de Boltzmann sur réseau est une forme discrète de l'équation continue de Boltzmann.

2.2 L'équation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann est utilisée dans la théorie cinétique des gaz, pour décrire l'évolution et l'interaction des molécules qui composent un gaz. Un petit volume de gaz est composé d'une grande quantité de molécules, à savoir, dans $V = 1\text{cm}^3$, nous avons de l'ordre de $N \sim 10^{20}$ [49]. En supposant que ces molécules suivent les lois de la mécanique classique, nous pourrions déterminer leurs positions et vitesses, en utilisant le principe fondamental de la dynamique, et cela en supposant que les forces agissant sont connues. Nous devrions alors résoudre un système de $6N$ équations (pour le cas $3D$) sachant que nous devrions connaître les $6N$ conditions initiales. La dynamique moléculaire utilise ce type d'approche. Évidemment, la plupart des problèmes en ingénierie sont hors de portée de cette approche. En outre, même si c'était faisable, les calculs seraient inutiles car les quantités d'intérêt sont la pression, la température et d'autres quantités mesurables, pour lesquelles les positions et vitesses ne fournissent pas d'information. Ces quantités mesurables sont liées plutôt aux moyennes des quantités microscopiques. Pour trouver ces moyennes nous utilisons le concepte de densité de probabilité. La densité de probabilité $P(\vec{z})$ est la probabilité de que \vec{z} soit dans l'intervalle $\vec{z} + d\vec{z}$.

Dans le contexte de l'équation de Boltzmann, on utilise plutôt f nommée fonction de distribution monoparticulaire. Elle est donnée par $f = NmP$, où N est le nombre de molécules, m est la masse d'une molécule. Cette fonction f est définie telle que $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)d\vec{x}d\vec{\xi}$ est la densité de probabilité de qu'une molécule prise au hasard, ait une vitesse entre $\vec{\xi}$ et $\vec{\xi} + d\vec{\xi}$, et une position entre \vec{x} et $\vec{x} + d\vec{x}$, dans l'espace de phase (l'espace donné par la position et la vitesse, voir figure 2.2).

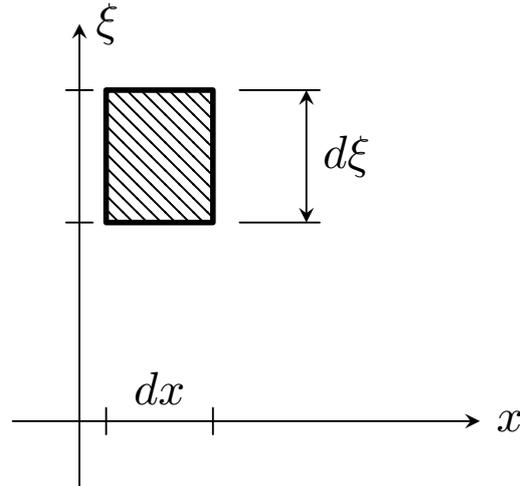


FIGURE 2.2: Espace de phase

L'équation de Boltzmann est une équation moyenne décrivant l'évolution de la fonction de distribution d'une particule [49]. Elle s'écrit :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}} = Q(f, f) \quad (2.1)$$

où $\vec{\xi}$ est la vitesse microscopique, \vec{F} est une force externe agissant sur la particule, et $Q(f, f)$ est l'opérateur de collision décrivant l'interaction des molécules lors des chocs.

En supposant que nous avons résolu cette équation, nous connaissons alors les valeurs de f et nous pouvons obtenir les quantités macroscopiques telles que la masse volumique, les vitesses et la température.

En intégrant la fonction de distribution sur toutes les vitesses, nous obtenons la masse volumique probable autour de la position \vec{x} et temps t :

$$\rho(\vec{x}, t) = \int f d\vec{\xi} \quad (2.2)$$

La vitesse macroscopique correspond à la valeur moyenne de la vitesse microscopique. La quantité de mouvement est donc donnée par :

$$\rho u_\alpha = \int \xi_\alpha f d\vec{\xi} \quad (2.3)$$

L'énergie totale (cinétique plus interne) correspond à la densité d'énergie microscopique, ainsi [49] :

$$\frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e = \frac{1}{2} \int \xi^2 f d\vec{\xi} \quad (2.4)$$

Où la densité d'énergie interne ρe est définie par :

$$\rho e = \frac{1}{2} \int |\vec{\xi} - \vec{u}|^2 f d\vec{\xi} \quad (2.5)$$

2.2.1 Opérateur de collision

Le terme ou opérateur de collision de l'équation de Boltzmann a été dérivé à partir des expressions pour la collision entre deux corps ou collisions binaires.

En outre, du fait de l'hypothèse du *chaos moléculaire*, on suppose que les positions et vitesses des particules ne sont pas corrélées, c'est-à-dire, que la probabilité de trouver une particule avec position entre \vec{x}_1 et $\vec{x}_1 + d\vec{x}_1$, et une vitesse entre $\vec{\xi}_1$ et $\vec{\xi}_1 + d\vec{\xi}_1$, n'a aucune influence sur la probabilité de trouver une autre particule entre \vec{x}_2 et $\vec{x}_2 + d\vec{x}_2$, et une vitesse entre $\vec{\xi}_2$ et $\vec{\xi}_2 + d\vec{\xi}_2$. Ainsi, la probabilité de deux particules s'exprime comme le produit des probabilités.

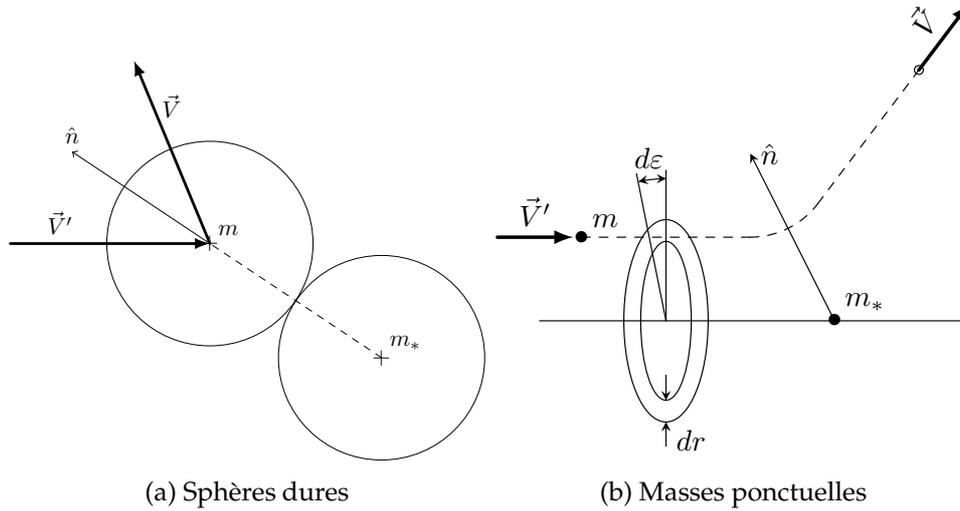


FIGURE 2.3: Schéma des collisions binaires

L'expression du terme de collision peut être déterminée suivant différents modèles. On peut supposer les molécules comme des sphères dures, et la collision comme le choc entre ces sphères (voir figure 2.3a), à l'instar des billes dans le jeu de billard, ce qui donne une idée physique des collisions. On peut également supposer les molécules comme des masses ponctuelles, dont la force d'interaction (répulsion) dépend de leur séparation (voir figure 2.3b). Dans le modèle des sphères dures, ainsi que dans celui des masses ponctuelles, il faut remarquer que les collisions sont supposées élastiques, donc elles conservent la quantité de mouvement et l'énergie cinétique :

$$\begin{aligned}\vec{\xi} + \vec{\xi}_* &= \vec{\xi}' + \vec{\xi}'_* \\ \xi^2 + \xi_*^2 &= \xi'^2 + \xi_*'^2\end{aligned}$$

Dans l'hypothèse d'un nombre infini de molécules ($N \rightarrow \infty$) supposées être des masses ponctuelles, et dont le volume est négligeable, le terme de collision est donné par [49] :

$$Q(f, f) = \int (f' f'_* - f f_*) V r dr d\varepsilon d\vec{\xi}_* \quad (2.6)$$

$f' = f(\vec{\xi}')$, $f'_* = f(\vec{\xi}'_*)$, $f = f(\vec{\xi})$ et $f_* = f(\vec{\xi}_*)$ sont les fonctions de distributions dépendantes des vitesses avant et après collision ; $V = \|\vec{\xi} - \vec{\xi}_*\|$ est la vitesse relative, et $r dr d\varepsilon$ est la section différentielle traversée par V (voir figure 2.3b). Dans cette équation nous n'avons laissé qu'un symbole intégrale, afin de simplifier l'écriture. Toutefois, il faut noter qu'il s'agit d'une intégrale multiple (r , ε , et les trois composantes de $\vec{\xi}$). L'équation de Boltzmann est alors une équation intégral-différentielle, non-linéaire (le terme quadratique en f à l'intérieur de l'intégrale), d'où la complexité de sa résolution.

2.2.1.1 Invariants de collision

Malgré l'expression complexe de l'opérateur de collision, il possède certaines caractéristiques qui permettent de l'étudier. Une propriété importante est qu'il existe des fonctions telles que :

$$\int Q(f, f)\psi(\vec{\xi})d\vec{\xi} = 0 \quad (2.7)$$

Ces fonctions $\psi(\vec{\xi})$ sont connues sous le nom d'invariants de collisions. Parmi ces fonctions, nous avons $\psi_0 = 1$, $\psi_{1,2,3} = \vec{\xi}_{1,2,3}$ (les composants du vecteur vitesse), et $\psi_4 = \xi^2$, appelés invariants de collision élémentaires, à partir desquelles nous pouvons construire d'autres invariants. Une expression générale des invariants est alors donnée par la combinaison linéaire des invariants élémentaires :

$$\psi(\vec{\xi}) = a + \vec{b} \cdot \vec{\xi} + c\xi^2 \quad (2.8)$$

Une propriété dont nous nous servons par la suite (démontrée dans [49]) est que les invariants satisfont l'équation suivante :

$$\psi(\vec{\xi}) + \psi(\vec{\xi}_*) = \psi(\vec{\xi}') + \psi(\vec{\xi}'_*) \quad (2.9)$$

2.2.1.2 Fonction d'équilibre

Une autre propriété de l'opérateur de collision est qu'il existe des fonctions de distribution pour lesquelles cet opérateur devient nul. En regardant (2.6), le terme de collision est égale à zéro si :

$$f' f'_* = f f_*$$

En appliquant le logarithme on obtient :

$$\ln f' + \ln f'_* = \ln f + \ln f_*$$

Si nous considérons $\psi = \ln f$, il est clair que ψ suit l'équation (2.9), et par conséquent, est un invariant. Cette fonction de distribution annulant le terme de collision est connu comme distribution d'équilibre f^{eq} . En utilisant $\psi = \ln f$ dans l'expression générale des invariants (ÉQ. 2.8), nous trouvons l'expression suivante pour la distribution d'équilibre :

$$f^{\text{eq}} = \exp(a + \vec{b} \cdot \vec{\xi} + c\xi^2)$$

Puis, en introduisant cette définition dans les équations de la masse volumique, la quantité de mouvement et l'énergie interne (ÉQS. 2.2, 2.3 et 2.5), nous constatons que la distribution d'équilibre correspond à la distribution de Maxwell [49] :

$$f^{\text{eq}} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{\xi} - \vec{u})^2}{2RT}\right) \quad (2.10)$$

2.2.2 Équations macroscopiques

En plus de la masse volumique, la quantité de mouvement et l'énergie définies précédemment, d'autres quantités sont importantes pour faire le lien entre l'équation de Boltzmann et les équations macroscopiques. Ces quantités sont le flux de quantité de mouvement, et le flux d'énergie.

Le flux de quantité de mouvement en direction α est la quantité de mouvement multiplié par la vitesse. Ce flux microscopique contribue au niveau macroscopique,

non seulement au flux de quantité de mouvement, mais également au tenseur de contrainte [49] :

$$\rho u_\alpha u_\beta + P_{\alpha\beta} = \int \xi_\alpha (\xi_\beta f) d\vec{\xi} \quad (2.11)$$

où $P_{\alpha\beta}$ est le tenseur de contraintes défini par :

$$P_{\alpha\beta} = \int (\xi_\alpha - u_\alpha)(\xi_\beta - u_\beta) f d\vec{\xi} \quad (2.12)$$

Le flux d'énergie est égal à la densité d'énergie multiplié par la vitesse. L'équivalent macroscopique se compose de différents termes, l'énergie advectée par la vitesse, le travail fait par les contraintes et le flux de chaleur :

$$u_\alpha \rho \left(\frac{1}{2} u^2 + e \right) + u_\beta P_{\alpha\beta} + q_\alpha = \frac{1}{2} \int \xi_\alpha \xi^2 f d\vec{\xi} \quad (2.13)$$

Où le vecteur de flux de chaleur q_α est défini par :

$$q_\alpha = \frac{1}{2} \int (\xi_\alpha - u_\alpha) |\vec{\xi} - \vec{u}|^2 f d\vec{\xi} \quad (2.14)$$

À présent, nous pouvons trouver les équations macroscopiques satisfaites par ces quantités. Pour cela, nous utilisons les propriétés des invariants de collision, ainsi, en multipliant l'équation de Boltzmann par chacun des invariants, et en intégrant sur toutes les vitesses, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \psi(\vec{\xi}) f d\vec{\xi} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int \xi_\alpha \psi(\vec{\xi}) f d\vec{\xi} + \frac{F_\alpha}{m} \int \psi(\vec{\xi}) \frac{\partial f}{\partial \xi_\alpha} d\vec{\xi} = \int \psi(\vec{\xi}) Q(f, f) d\vec{\xi}$$

où nous avons utilisé des indices au lieu de la notation des vecteurs. La partie droite est nulle, du fait des propriétés des invariants de collision (cf. ÉQ. 2.7). En utilisant les équations (2.2), (2.3), (2.11), (2.4) et (2.13), nous obtenons :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\rho u_\alpha) = 0 \quad (2.15a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_\beta) + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\rho u_\alpha u_\beta + P_{\alpha\beta}) = \rho \frac{F_\beta}{m} \quad (2.15b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left(\frac{1}{2} u^2 + e \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho u_\alpha \left(\frac{1}{2} u^2 + e \right) + P_{\alpha\beta} u_\beta + q_\alpha \right) = \rho \frac{F_\alpha}{m} u_\alpha \quad (2.15c)$$

Qui sont les équations de conservation de la masse, la quantité de mouvement, et de l'énergie pour un fluide compressible. Pour fermer le système d'équations, nous devons utiliser des lois de comportement reliant les contraintes et le flux de chaleur aux valeurs de ρ , \vec{u} et e . Nous avons, par exemple, la loi pour un fluide Newtonien, qui relie la contrainte visqueuse à la vitesse de déformation (cf. Section 1.3.1.1), et la loi de Fourier, qui relie le flux au gradient des températures. Pourtant, pour des fluides dont on ne connaît pas ces lois, il est souhaitable de résoudre l'équation de Boltzmann, car nous pouvons obtenir toute l'information, contraintes et flux inclus, à partir de la fonction de distribution, et puis obtenir le modèle macroscopique. Comme nous l'avons vu auparavant, la solution de l'équation de Boltzmann est difficile à déterminer du fait de l'opérateur de collision, donc nous devons recourir à des modèles de collision qui proposent des expressions simplifiées pour la collision. En outre, même avec des modèles simplifiés, nous devons recourir à la solution numérique. La méthode de Boltzmann sur réseau propose alors une discrétisation de l'espace, du temps et des vitesses pour résoudre l'équation de Boltzmann.

2.3 Boltzmann sur réseau

Comme nous sommes intéressés par la résolution numérique de l'équation de Boltzmann (2.1), nous utilisons tout d'abord un nombre fini de vitesses, lesquelles, pour suivre la notation habituelle de la littérature, seront appelées \vec{c}_i . Afin de faciliter la présentation, nous ne considérons pas le terme de force, alors, l'équation de Boltzmann à vitesses discrètes s'écrit :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{c}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{x}} = \Omega_i$$

La discrétisation en temps et espace de cette équation, avec $\Delta x_i = c_i \Delta t$, donne :

$$\frac{f_i(\vec{x}, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t)}{\Delta t} + \vec{c}_i \cdot \frac{f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t + \Delta t)}{\vec{c}_i \Delta t} = \Omega_i$$

Et si nous prenons $\Delta x = 1$, $\Delta t = 1$ nous obtenons l'équation de Boltzmann sur réseau :

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) - f_i(\vec{x}, t) = \Omega_i \quad (2.16)$$

Qui représente les étapes de propagation et collision, à gauche et à droite de l'équation respectivement. Un modèle est alors donné par un réseau discret et un ensemble de vitesses ; l'opérateur de collision et les distributions d'équilibre.

L'ensemble des vitesses doit être choisi soigneusement, car il doit avoir certaines propriétés. Il est une pratique générale de désigner les réseaux par $DdQq$, où d correspond à la dimension, et q au nombre de vitesses. En $2D$ il est commun d'utiliser un réseau avec 8 vitesses plus une particule au repos, alors appelé réseau D2Q9 (voir FIG. 2.4a). En $3D$ nous trouvons les réseaux D3Q15, le D3Q19 (voir FIG. 2.4b), et d'autres comme le D3Q27.

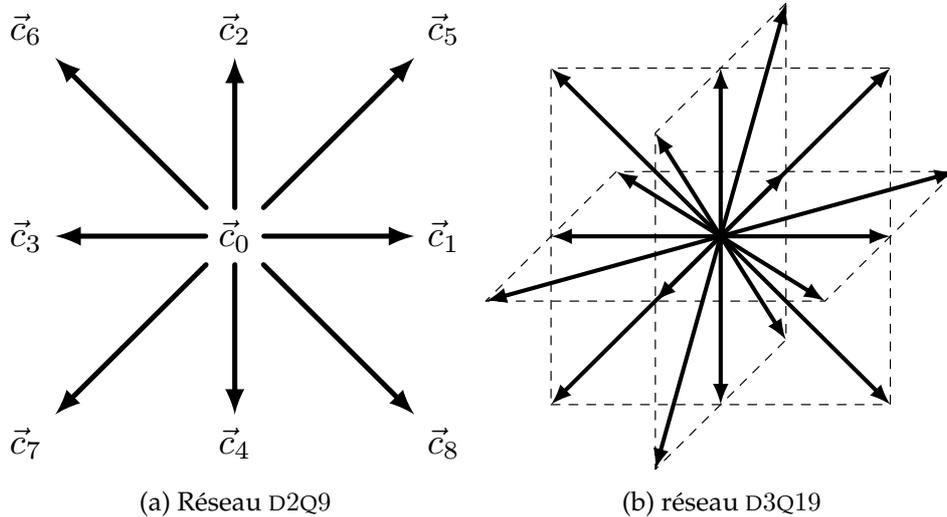


FIGURE 2.4: Ensemble de vitesses utilisés

Cependant, le terme de collision reste la difficulté principale pour la résolution de l'équation de Boltzmann.

En 1988, McNamara et Zanetti proposent le premier modèle LB. Ils utilisent une moyenne des particules au lieu de la variable booléenne n_i , et ainsi éliminent le bruit présent dans les LGCA. L'opérateur de collision est similaire à celui des LGCA précédentes, en utilisant un polynôme en n_i , avec autant de termes que de collisions possibles, ce que limite ce modèle à des cas très simples, sans être applicable en $3D$ [46].

En 1989, Higuera et Jimenez [50] introduisent une autre simplification en utilisant une linéarisation de l'opérateur de collision, représentant le changement de f_i par rapport à un état de référence. Puis, Higuera, Succi et Benzi [51], en continuant avec l'opérateur linéarisé, utilisent une matrice de collision Ω_{ij} dont les éléments dépendent de l'angle entre les directions de vitesse i et j . Par exemple, dans un réseau hexagonal, il y a 4 éléments différents correspondant aux angles, 0, 60, 120 et 180. Si en plus, des particules en repos sont utilisées, 2 éléments additionnels sont nécessaires, tenant compte de l'interaction entre la particule au repos et les autres particules, ainsi que de l'effet sur elle même. Ce modèle élimine le bruit et est applicable en trois dimensions. Pourtant, la distribution d'équilibre utilisée, conduit à une pression dépendante de la vitesse, et le modèle présente des instabilités numériques [46] ce qui limite son utilisation.

Postérieurement, en 1992 Qian *et al.* [46] proposent plusieurs solutions aux problèmes des LGCA et des modèles LB existants. Afin d'éliminer les invariants non physiques et la pression dépendante de la vitesse, ils supposent un gaz satisfaisant la statistique de Maxwell, au lieu de la statistique de Fermi-Dirac. Pour améliorer la stabilité, ils proposent d'appliquer une méthode de relaxation au terme de collision. La valeur vers laquelle se fait la relaxation est la distribution d'équilibre, laquelle est choisie pour satisfaire aux équations de Navier-Stokes. Ce modèle est considéré comme une approximation BGK, et est alors appelé LBGK (de lattice Boltzmann BGK). L'équation de Boltzmann sur réseau devient alors :

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) - f_i(\vec{x}, t) = -\omega[f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)] \quad (2.17)$$

où ω est le taux de relaxation.

Les différents phénomènes ayant lieu évoluent suivant différentes échelles de temps. Toutefois, dans le modèle LBGK, tous les phénomènes possèdent le même taux de relaxation. Par conséquent, il est naturel de chercher un modèle permettant de régler les taux de relaxation. C'est ainsi que d'Humières développe en même temps l'opérateur de collision à temps de relaxation multiple [52].

Nous avons alors deux types d'opérateurs de collision :

- Opérateur à temps de relaxation simple (LBGK)
- Opérateur à temps de relaxation multiple (MRT)

Nous développerons dans la suite ces deux opérateurs.

2.3.1 Opérateur LBGK

La complexité du terme de collision demande d'utiliser des versions simplifiées appelées modèles de collision. Un des modèles de collision le plus simple et très répandu est le modèle proposé par Bhatnagar, Gross et Krook [53], dit BGK. Ce modèle suppose que les détails des collisions binaires ne sont pas très importants lorsqu'on s'intéresse aux quantités moyennes, telles que la masse volumique et la vitesse macroscopique. Ainsi, un opérateur de collision simplifié permettrait de garder les caractéristiques principales, en omettant les détails. Les caractéristiques qui doivent être conservées par n'importe quel opérateur de collision sont :

1. Respecter les invariants de collision

$$\int \psi(\vec{\xi}) Q(f, f) d\vec{\xi} = 0$$

2. Respecter l'inégalité

$$\int \ln f Q(f, f) d\vec{\xi} \leq 0$$

Pour la première propriété, nous avons déjà parlé des invariants de collision dans la Section 2.2.1.1. Pour la deuxième propriété, elle est liée au fait que les collisions amènent la fonction de distribution vers un état d'équilibre (la distribution de Maxwell), dont nous avons parlé dans la Section 2.2.1.2.

Bhatnagar, Gross, et Krook ont alors proposé de considérer la collision comme une relaxation vers un état d'équilibre :

$$\Omega_i = \omega \left[f_i^{eq}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) - f_i(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \right] \quad (2.18)$$

Une fois défini le réseau (dimension et directions des vitesses), le choix de la distribution d'équilibre est également important afin de retrouver les équations de Navier-Stokes. La version discrète de la distribution d'équilibre proposée par Qian *et al.* [46] est :

$$f_i^{eq} = W_i \rho \left[1 + \frac{c_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{u_\alpha u_\beta}{2c_s^2} \left(\frac{c_{i\alpha} c_{i\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right] \quad (2.19)$$

où W_i est un poids dépendant de la direction de vitesse. En considérant l'équation de LB, comme une discrétisation particulière de l'équation de Boltzmann, la distribution d'équilibre devrait correspondre à la distribution de Maxwell. Sachant que la méthode LB permet de simuler des fluides incompressibles pour lesquels les vitesses sont petites par rapport à la vitesse du son (petit nombre de Mach), la distribution d'équilibre est approximée par un développement en série de la distribution de Maxwell. Avec une température constante et jusqu'au deuxième ordre en u , on obtient :

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

En posant $c_s = \sqrt{RT}$, et en remplaçant f dans les équation (2.2) et (2.3), He et Luo [54] trouvent les poids nécessaires pour l'intégration numérique.

Avec cette distribution d'équilibre, l'équation de Navier-Stokes est obtenue jusqu'au deuxième ordre d'approximation.

Les quantités macroscopiques correspondent aux sommes de la fonction de distribution, ainsi :

$$\rho = \sum_i f_i \quad (2.20a)$$

$$\vec{j} = \rho \vec{u} = \sum_i f_i \vec{c}_i \quad (2.20b)$$

$$e = \frac{1}{2} \sum_i |c_i|^2 f_i \quad (2.20c)$$

2.3.2 Opérateur MRT

L'opérateur de collision doit assurer la conservation de la masse et la quantité de mouvement, c'est-à-dire, que ces quantités soient égales avant et après collision, soit $\tilde{\rho} = \rho$, et $\tilde{\vec{j}} = \vec{j}$. Comme la masse volumique ρ , et la quantité de mouvement \vec{j} correspondent aux moments de la fonction de distribution, on les appelle *moments conservés*. En gardant la même notation que celle retrouvée dans [55], ces moments correspondent à m_1 , m_4 et m_6 :

$$\begin{array}{rcccccccc} m_1 & = & f_0 & +f_1 & +f_2 & +f_3 & +f_4 & +f_5 & +f_6 & +f_7 & +f_8 \\ m_4 & = & & +f_1 & & -f_3 & & +f_5 & -f_6 & -f_7 & +f_8 \\ m_6 & = & & & +f_2 & & -f_4 & +f_5 & +f_6 & -f_7 & -f_8 \end{array}$$

Les autres moments, qui correspondent à des quantités non conservées, relaxent linéairement vers une valeur d'équilibre, laquelle ne dépend que des quantités conservées et que l'on appelle *moments non conservés*.

Nous pouvons alors ré-interpréter la collision comme la relaxation des moments, au lieu de la relaxation des fonctions de distribution :

$$\tilde{m} = m - s(m - m^{\text{eq}}) \quad (2.21)$$

Où s est le taux de relaxation. Les moments non conservés sont construits comme des combinaisons linéaires des moments de la fonction de distribution f_i . Ainsi, par exemple, pour le moment associé à l'énergie cinétique [55] :

$$m_2 = -4\rho + 6e = -4 \sum_i f_i + 6 \left(\frac{1}{2} \sum_i |c_i|^2 f_i \right)$$

Où les coefficients correspondants sont déterminés de sorte que les vecteurs soient orthogonaux entre eux (cf. annexe A pour plus de détails).

Par la même procédure, il est possible de construire d'autres moments jusqu'à avoir un nombre de moments égal au nombre de fonctions de distribution, constituant le dit *espace des moments*. Ainsi, pour le modèle D2Q9 nous avons :

$$|m\rangle = (\rho \quad e \quad \epsilon \quad j_x \quad q_x \quad j_y \quad q_y \quad p_{xx} \quad p_{xy})^T$$

où ρ , j_x et j_y sont la densité et la quantité de mouvement en x et y , respectivement, e et ϵ sont liés à l'énergie cinétique et au carré de l'énergie cinétique, q_x et q_y correspondent aux composants x et y du flux de chaleur et p_{xx} et p_{xy} sont liés au tenseur de contraintes.

La correspondance entre fonction de distribution et moments est une opération matricielle :

$$|m\rangle = \mathbf{M} |f\rangle$$

et inversement

$$|f\rangle = \mathbf{M}^{-1} |m\rangle$$

Les matrices de collision sont détaillées dans l'annexe A.

Dans ce modèle, l'étape de propagation est faite comme dans le modèle BGK, mais la collision est faite dans l'espace des moments.

2.3.3 Équations macroscopiques : développement de Chapman-Enskog

Les équations de conservation (ÉQS. 2.15) dérivées de l'équation de Boltzmann (ÉQ. 2.1) seraient correctes si nous pouvions résoudre l'équation de Boltzmann complète. Comme dans la méthode LB nous utilisons une version discrète de l'équation de Boltzmann et un modèle de collision simplifié, les équations macroscopiques obtenues peuvent ne pas être les mêmes.

Nous utilisons alors le développement de Chapman-Enskog pour retrouver les équations macroscopiques regissant le phénomène étudié, à partir de l'équation de Boltzmann sous un modèle de collision donné. En outre, ce développement permet d'exprimer les coefficients de transport (viscosité, conductivité, etc) en fonction des caractéristiques moléculaires.

Cette procédure consiste à exprimer l'équation de LB comme une somme de contributions de différentes échelles.

La fonction de distribution est exprimée par la somme de la distribution d'équilibre et hors équilibre :

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \mathcal{O}(\epsilon^3)$$

où $f^{(0)}$ est la distribution à l'équilibre.

Puisque le terme de collision n'a d'effet que sur les distributions hors équilibre, il agit sur l'ordre un et deux et par conséquent il s'exprime sous la forme :

$$\Omega_i = \epsilon \Omega_i^{(1)} + \epsilon^2 \Omega_i^{(2)} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

Les phénomènes physiques ont lieu sur différentes échelles temporelles, alors nous avons pour la dérivée temporelle :

$$\partial_t = \epsilon \partial_{t1} + \epsilon^2 \partial_{t2} + \mathcal{O}(\epsilon^3)$$

En revanche, ces phénomènes en général n'ont lieu que sur une seule échelle spatiale. La dérivée spatiale n'est donc développée qu'au premier ordre :

$$\vec{\nabla} = \epsilon \vec{\nabla}^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

Le développement de Chapman-Enskog amenant à l'équation de diffusion et aux équations de Navier-Stokes est présenté en détail dans l'annexe B.

2.3.4 Conditions aux limites

Puisque nous étudions une cavité fermée, nous nous bornerons au cas des parois solides sans glissement, c'est-à-dire, avec vitesse nulle. Comme la méthode de LB n'utilise pas les variables macroscopiques, les conditions aux limites sont imposées sur les fonctions de distribution de façon à obtenir une vitesse nulle. La condition généralement utilisée est connue comme *bounce back*, et consiste à refléter les fonctions de distribution arrivant aux parois. Pourtant, la précision des résultats dépend en général de la façon d'appliquer le *bounce back*.

La façon la plus simple, est nommée *full way bounce back*. Après collision, les distributions dans la première couche liquide, orientées vers la frontière solide, se déplacent et sont réfléchies au pas de temps suivant. Les avantages du *full way* sont sa simplicité de mise en œuvre, et sa généralité car il est applicable pour tout type de géométrie. Son inconvénient est d'avoir une précision d'ordre un [56] sur la convergence spatiale.

Par ailleurs, l'autre méthode est le *half way bounce back*, ainsi nommé du fait que la paroi est placée à mi-chemin entre les nœuds solides et la première couche des nœuds liquides (voir figure 2.5b).

Ziegler [56] a comparé les résultats pour l'écoulement de Poiseuille, suivant la façon d'introduire le *bounce back*, d'une part, avec la paroi placée sur les nœuds solides, d'autre part, avec la paroi placée à mi-chemin entre les nœuds solides et liquides. Pour le *full way bounce back*, le profil de vitesse obtenu, montre des écarts par rapport au profil ajusté aux vitesses moyennes. Il conclut que la vitesse nulle est effectivement obtenue à mi-chemin. Pourtant, il affirme qu'avec la paroi à mi-chemin le gradient de vitesse n'est en général pas correct. Il propose de placer la paroi sur les nœuds et de faire la collision sur ces nœuds également. Les distributions qui sortent de la paroi correspondent à la réflexion des distributions qui entrent, ainsi la vitesse normale est nulle, les autres distributions sont la moyenne des distributions entrantes, ainsi la vitesse tangentielle est nulle. Il calcule la contrainte de cisaillement à la paroi, premièrement, par la différence entre quantité de mouvement entrant et sortant, et deuxièmement, par le gradient de vitesse multiplié par la viscosité. En comparant les résultats, le *bounce back* avec collision sur les parois qu'il propose, donne un écart plus petit entre les deux types de calcul, donc il conclut que sa condition est plus précise près des parois.

Pour l'écoulement de Poiseuille, le *half way bounce back* a une précision de deuxième ordre en convergence spatiale. Pourtant, il a été montré que la position

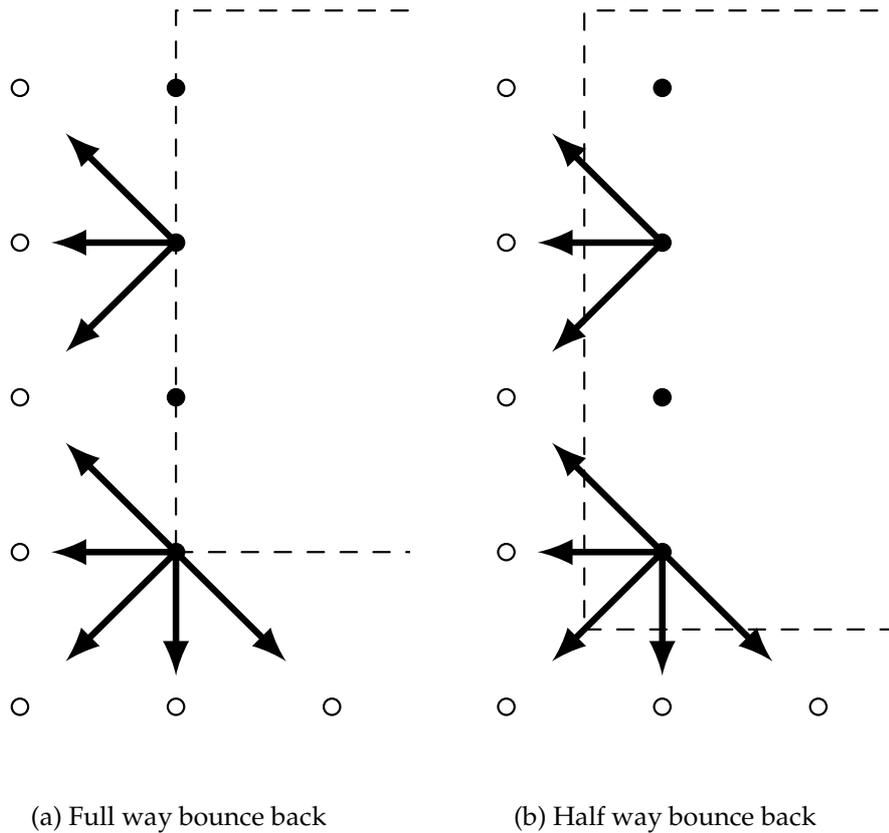


FIGURE 2.5: Différentes applications du bounce back

exacte de la paroi dépend de la discrétisation et la viscosité [57]. Pour des parois inclinées ou géométries plus complexes, la paroi ne peut pas être placée au milieu des nœuds, et des modifications sont nécessaires afin d'assurer une précision d'ordre deux.

Ginzburg et d'Humières [57] ont développé une méthode applicable aux parois lisses de forme arbitraire et flux stationnaire. Leur méthode présente l'avantage d'être local, au contraire d'autres méthodes qui recourent à l'informations des voisins. Pourtant son application aux parois mobiles devient encombrante, car requiert la résolution d'un système d'équations linéaires pour les distributions à la frontière, à chaque pas de temps.

D'autres approches ont été proposées pour remédier au problème de précision des conditions aux limites. Pourtant, en général elles ont été développées pour des parois planes et nécessitent des traitements spéciaux pour les coins, donc leur application aux géométries complexes s'avère moins aisée. Nous n'en parlerons pas ici car nous ne les utiliserons pas dans ce travail.

Même s'ils existent des conditions aux limites pour des parois courbes, avec un ordre de précision élevée, leur applicabilité reste limitée et sa programmation encombrante. Nous utiliserons le *bounce back* standard car il est facile à mettre en œuvre et applicable pour n'importe quelle orientation de paroi.

2.4 Modèles thermiques

Les premières applications de la méthode de LB ont été des problèmes hydrodynamiques dont la nécessité était seulement la conservation de la masse

et la quantité de mouvement. Lorsque la méthode est étendue aux problèmes thermiques, il est nécessaire d'assurer la conservation de l'énergie. Nous avons vu que l'équation de conservation de l'énergie est obtenue en multipliant l'équation continue de Boltzmann par l'invariant ξ^2 et en intégrant sur *toutes* les vitesses. Pourtant, lors de la résolution numérique nous n'utilisons qu'un nombre réduit de vitesses (9 pour le réseau D2Q9, par exemple), ce qui empêche d'obtenir l'équation de l'énergie exacte. Pour remédier à ce problème, plusieurs approches ont été proposées, lesquelles peuvent être regroupées en 3 catégories :

1. Vitesses multiples
2. Double distribution
3. Hybride

2.4.1 Vitesses multiples

Un des premiers modèles thermiques de LB est proposé par Alexander, Chen et Sterling [58]. Afin d'obtenir les équations macroscopiques en incluant l'équation de l'énergie, ils ont utilisé trois valeurs de vitesses ($c = 0$, $c = 1$ et $c = 2$) sur un réseau triangulaire 2D (le même du modèle FHP, cf. FIG. 2.1b), soit un total de 13 vitesses. Ils ont utilisé la collision du type BGK, pour laquelle ils proposent comme distribution d'équilibre un développement en série de la vitesse moyenne \bar{u} . En utilisant le développement de Chapman-Enskog, ils trouvent les expressions suivantes pour la viscosité dynamique μ et la conductivité thermique κ :

$$\mu = \rho e (\tau - 1/2) \quad \kappa = 2\rho e (\tau - 1/2)$$

Ce qui limite les simulations à un nombre de Prandtl fixe ($Pr = 1/2$) et cela à cause de l'utilisation de l'opérateur de collision BGK.

Mc Namara *et al.* [59, 60] ont étudié des améliorations possibles du modèle précédent. D'après ces auteurs, l'ensemble des vitesses avec module 2, $\sqrt{2}$, $\sqrt{3}$ dans un réseau cubique résulte en 26 directions de vitesse et celui-ci est l'ensemble minimal qui suit un comportement Navier-Stokes. Cependant, ce modèle a été trouvé numériquement instable.

Pour améliorer la stabilité du modèle, il est possible, soit d'augmenter le nombre de vitesses soit de le diminuer. En réduisant le nombre de vitesses, le modèle est plus simple mais s'éloigne du comportement Navier-Stokes au niveau macroscopique. Pourtant, cette déviation peut être rendue négligeable dans les écoulements à petit nombre de Mach. En augmentant le nombre de vitesses, le comportement Navier-Stokes est respecté mais les degrés de liberté augmentent également et par conséquent la consommation de mémoire et la complexité du modèle. Les deux possibilités ont été étudiées par McNamara *et al.* [59, 60].

Un modèle à 21 vitesses est étudié dans [59]. Il utilise notamment deux temps de relaxation pour pouvoir régler la viscosité et la conductivité thermique séparément. Cependant, ce modèle présente une erreur dans le terme visqueux de l'équation de l'énergie, qui est multiplié par la conductivité au lieu de la viscosité. Un modèle à 27 vitesses est étudié dans [60]. L'erreur dans le terme visqueux est éliminé en utilisant la vitesse relative $c_{i\alpha} - u_\alpha$ au lieu de la vitesse du réseau $c_{i\alpha}$ pour les calculs des moments d'ordre trois.

En comparant les modèles à 21 et à 27 vitesses, ils trouvent que le modèle à 27 vitesses est plus précis que celui à 21, mais avec une plage de stabilité plus réduite. Néanmoins, par rapport à un modèle aux différences finies, les auteurs concluent que le modèle LB à plusieurs vitesses n'est pas avantageux car, avec un temps de calcul semblable, consomme plus de mémoire et est moins stable [60].

2.4.2 Double distribution

Un des problèmes du modèles thermiques, et particulièrement de l'opérateur BGK, est que les équations macroscopiques obtenues ont un nombre de Prandtl fixe. De ce constat, il a été proposé d'utiliser deux fonctions de distribution indépendantes, une pour le champ de vitesse et une autre pour le champ de température, chacune ayant son propre temps de relaxation : le nombre de Prandtl peut alors être réglé facilement.

L'approche la plus simple est celle nommée de scalaire passif. Dans cette approche la température est considérée comme un scalaire, transporté par la vitesse sans modifier le champ de vitesses. Ce modèle part de l'hypothèse que la dissipation visqueuse et le travail de compression peuvent être négligés pour les fluides incompressibles, et alors l'évolution de la température est donnée par l'équation d'advection-diffusion.

He *et al.* [61] introduisent une fonction de distribution de densité de l'énergie interne pour calculer la température. D'après ces auteurs, l'évolution de cette distribution est régie par l'équation de Boltzmann et par conséquent elle est nommée équation de l'énergie de Boltzmann. Il est montré que cette équation correspond à l'équation de l'énergie au niveau macroscopique. Le modèle LB est obtenu à partir de la discrétisation des deux équations de Boltzmann, une pour la distribution de densité et l'autre pour la distribution de densité d'énergie. Deux fonctions de distribution sont utilisées, à l'instar du modèle scalaire passif, mais dans ce cas les effets de dissipation visqueuse et du travail de compression peuvent être pris en compte.

Par ailleurs, Peng *et al.* [62] remarquent que dans le modèle de He et al, le terme de dissipation de chaleur inclue un opérateur de gradient compliqué, et qu'il a été nécessaire d'effectuer un changement de variables dont les variables originelles sont utilisées dans les conditions aux limites tandis que l'évolution est faite avec les variables nouvelles. Par conséquent, dans l'hypothèse où la dissipation de chaleur ne peut être négligée dans les écoulements incompressibles, ces auteurs proposent un modèle thermique simplifié, qui ne se sert pas de nouvelles variables ni de terme de dissipation.

Cependant, cette approche est considéré peu efficace [55, 63, 64], car il n'est pas nécessaire d'ajouter une fonction de distribution pour simuler un scalaire passif.

2.4.3 Modèle hybride

D'après Lallemand et Luo [55], l'instabilité des modèles précédents est inhérente à la méthode LB, et est dûe à un couplage entre modes de l'opérateur de collision. Ces auteurs montrent que ce défaut ne peut pas être éliminé par une augmentation du nombre de vitesses. Par conséquent, ils affirment que la meilleure alternative pour construire un modèle thermique, est d'utiliser une méthode hybride, dont l'écoulement est résolu par la méthode LB et l'équation de l'énergie est résolue par une autre méthode.

Lallemand et Luo [55, 63] ont proposé, plus précisément, d'utiliser la méthode LB avec opérateur temps de relaxation multiple (MRT) [52], et d'employer la méthode des différences finies (FDM) pour l'équation de l'énergie. L'opérateur MRT offre deux avantages dans ce modèle. Premièrement, il contribue à réduire les instabilités. Deuxièmement, il permet de régler le rapport de chaleurs spécifiques, et par conséquent de coupler correctement les équations de quantité de mouvement et d'énergie. En outre, ils n'utilisent pas l'approximation de Boussinesq et donc le modèle peut prendre en compte des propriétés dépendantes de la température. Enfin, afin d'éviter les interpolations, le schéma des différences finies est construit

en accord avec la discrétisation de vitesses, ce qui améliore la stabilité globale du modèle numérique.

2.5 Étude bibliographique sur le changement de phase avec LBM

En tant qu'approche mésoscopique, la méthode LB est attirante car elle permet l'étude des phénomènes à différentes échelles de temps et d'espace, comme la croissance de cristaux [65] ainsi que la description macroscopique de l'écoulement ou le champ de température.

Puisque la méthode LB utilise un maillage fixe, il est possible de traiter le changement de phase avec la formulation enthalpique. La plupart des travaux recensés utilisent justement cette formulation [66–69]. Toutefois, nous trouvons quelques publications d'un groupe de recherche allemand [65, 70–73], qui utilise une autre méthode nommée champ de phase, notamment dans les applications de croissance des cristaux. Nous allons discuter ensuite ces deux approches. Une formulation ou l'autre ne changent que les équations macroscopiques, donc ce ne sont pas des nouveaux modèles thermiques. En effet, ces travaux utilisent le modèle double distribution et le modèle hybride.

Un des premiers modèles de changement de phase avec LB est celui de Fabritiis *et al.* [74], qui proposent de simuler le changement de phase comme une réaction chimique. Ce modèle utilise, premièrement, une fonction de distribution correspondant à chaque composant chimique, à savoir, phase solide et phase liquide, et deuxièmement, un *terme chimique* introduit dans l'équation de LB représentant la réaction par laquelle le solide devient liquide ou inversement. La phase solide est représentée par une viscosité très grande. Son modèle représente le comportement de la surfusion car il montre l'augmentation de température une fois que la chaleur latente est dégagée lors de la solidification. Le modèle est 1D et ils proposent de l'étendre au cas 2D. Miller [65] doute de l'application de ce modèle à d'autres études, alors il le modifie en couplant la méthode LB avec la méthode de champ de phase et étend l'étude à 2 dimensions. Nous décrirons ensuite la méthode de champ de phase ainsi que les travaux qui l'utilisent.

2.5.1 Méthode de champ de phase

Cette méthode utilise un champ additionnel, dit champ de phase ϕ , qui dépend de la position et du temps. Cette variable indique l'état du matériau, par exemple $\phi_s = 0$ pour le solide, et $\phi_l = 1$ pour le liquide, et son évolution est régie par une équation différentielle.

La méthode de champ de phase est appliquée principalement dans le domaine de la métallurgie. Tout comme la méthode enthalpique, la position de l'interface n'est pas suivie mais déterminée par les endroits où $\phi = \frac{\phi_l + \phi_s}{2} = 0.5$. Elle peut prendre en compte la variation de la température de fusion produite, par exemple, par la courbure de l'interface.

Un des premiers travaux utilisant cette méthode est celui de Miller [70]. Dans cette étude, le modèle LB utilise le réseau FCHC, avec 25 vitesses (24 vitesses et 1 particule au repos). Dans ce réseau, une quatrième composante de vitesse peut être assimilée à la température suivant l'équation d'un scalaire passif. Le changement de phase est traité comme une réaction chimique qui modifie l'état local suivant l'équation :

$$\phi(\vec{x}, t) = \phi(\vec{x}, t - 1) + R(\vec{x}, t)$$

où $R(\vec{x}, t)$ est le terme de réaction, donné par :

$$R(\vec{x}, t) = f_+ K^+(\vec{x}, t)[1 - \phi(\vec{x}, t - 1)] - f_- K^-(\vec{x}, t)[1 + \phi(\vec{x}, t - 1)] \quad (2.22)$$

où f_+ et f_- sont liés au taux de fusion et cristallisation ; K^+ et K^- sont les fonctions qui contrôlent le démarrage de la fusion et de la cristallisation.

Dans ce modèle, trois termes sont ajoutés à l'équation de LB. Un terme, pour la force due à la poussée thermique, un autre terme pour la force qui ramène à zéro la vitesse à l'interface solide-liquide, et un troisième terme qui modifie la température suivant l'absorption ou restitution de la chaleur latente.

Ils simulent la fusion du gallium en trouvant un écoulement multicellulaire, à l'instar de ce qui a été trouvé par certains chercheurs lors de la comparaison faite par Gobin *et al.* [34]. Ils comparent leur résultats avec ceux d'une autre étude numérique utilisant éléments finis et maillage adaptatif [75]. Ils trouvent un nombre plus grand de cellules en début de fusion (à $t = 40$ s, six cellules avec LB contre quatre avec éléments finis), attribué d'une part, au traitement de l'interface qui est pâteuse avec LB et nette avec les éléments finis, et d'autre part aux conditions initiales totalement solide avec LB et une couche liquide initiale avec éléments finis.

La même année [65], le même groupe de recherche dans un autre article affirme que du fait du caractère empirique du modèle proposé, les équations macroscopiques obtenues ne sont pas complètement comprises, et il suggère la possibilité d'utiliser une deuxième distribution pour le champ de phase et la température afin d'améliorer la stabilité numérique, sans le faire pourtant. Puis en 2002 [71], en faisant l'analyse multiéchelle du modèle proposé, ils trouvent certains termes dont l'origine physique n'est pas bien compris.

Le modèle est intéressant car le changement de phase, ainsi que l'écoulement sont traités au niveau mésoscopiques, pourtant, ce modèle demande des maillages très fins (400×560 pour la fusion du gallium). De plus, le lien entre le problème physique et les paramètres dans l'équation de réaction introduite par Miller *et al.* (2.22) n'est pas clair. Enfin, les bases physiques de l'équation du champ de phase sont considérées discutables [76].

2.5.2 Méthode enthalpique

La deuxième approche pour la modélisation du changement de phase avec la méthode LB se base sur la formulation enthalpique de l'équation de l'énergie. Plus précisément, l'équation macroscopique obtenue par le développement de Chapman-Enskog est l'équation de l'énergie sous forme enthalpique.

En général, deux fonctions de distributions sont utilisées. Il s'agit des modèles double distribution dont les inconvénients et avantages ont déjà été discutés.

Chatterjee et Chakraborty [66], en tenant compte des problèmes avec le champ de phase, notamment le besoin des maillages très fins, ont proposé un modèle de double distribution. Ils remarquent que l'approche de He *et al.* [61] avec une fonction de distribution $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ pour la masse volumique et la quantité de mouvement et une autre fonction $g(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ pour l'énergie interne, limite l'application des termes sources dans l'équation de l'énergie du fait que g est dépendante de f . Comme solution, ils introduisent une fonction de distribution de l'enthalpie. L'opérateur de collision est du type BGK. Les équations macroscopiques obtenues avec cette distribution peuvent prendre en compte la dissipation visqueuse et le travail de compression. En outre, comme ils appliquent ce modèle à la simulation de la croissance des cristaux, ils prennent en compte

le sous-refroidissement de la température à l'interface du fait de sa courbure (condition de Gibbs-Thomson).

Puis, Chatterjee [69] applique le modèle précédent à la simulation de la cristallisation de l'étain et la fusion du gallium dans une cavité rectangulaire. Il compare leurs résultats avec des expériences et des résultats numériques obtenus par un modèle macroscopique. Un point intéressant est le faible maillage nécessaire (42×30 pour la cristallisation et 56×40 pour la fusion), ainsi que les temps de calcul plus petits par rapport à un modèle macroscopique. Cependant, il apparaît que le faible maillage n'est pas capable de reproduire l'écoulement pluri-cellulaire obtenu avec le modèle de champ de phase. Dans ce modèle la collision est faite avec l'opérateur BGK.

2.6 En résumé...

La méthode LB permet de modéliser des écoulements avec transferts thermiques à partir d'une représentation mésoscopique des interactions entre paquets de particules. Dans le cas de la convection naturelle avec changement de phase, les modèles recensés dans la littérature n'utilisent principalement que l'opérateur de collision avec un seul temps de relaxation. Du fait des instabilités numériques de ce type d'approche [55], nous avons décidé de développer un modèle enthalpique MRT hybride.

Chapitre 3

Changement de phase avec convection naturelle

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté la méthode de Boltzmann sur réseau ainsi que les modèles thermiques associés à cette méthode. Cette revue a souligné la faiblesse du modèle à un seul temps de relaxation. Aussi avons-nous choisi d'utiliser un modèle hybride utilisant la méthode LB à temps de relaxation multiples MRT pour résoudre la partie fluide et un schéma aux différences finies pour résoudre l'équation de l'énergie. Ce modèle est développé afin de quantifier l'influence de la convection naturelle lors du changement d'état solide-liquide. Parmi les deux approches identifiées pour la simulation du changement de phase avec la méthode LB, à savoir, le modèle de champ de phase et le modèle enthalpique, nous avons choisi la formulation enthalpique. En effet, dans le précédent chapitre, nous avons mis en évidence les problèmes liés à l'utilisation du modèle de champ de phase, ce qui nous oriente naturellement à choisir la formulation enthalpique pour résoudre l'équation de l'énergie.

Dans ce chapitre, nous allons présenter plus en détail le modèle choisi, l'algorithme de résolution, le schéma aux différences finies utilisé pour le calcul des gradients, les hypothèses prises, et les conditions aux limites. Afin de faciliter la compréhension des phénomènes physiques et la vérification du modèle couplant le changement de phase à la convection naturelle, nous avons choisi de nous intéresser dans un premier temps au développement d'un modèle sans changement d'état. Le premier problème résolu dans ce chapitre sera par conséquent celui de la convection naturelle dans une enceinte rectangulaire. Ensuite, nous appliquerons le modèle à la simulation des cas test de fusion identifiés dans la littérature. Enfin, nous ferons la simulation de la fusion de l'acide gras contenu dans la brique Inertrans.

3.1 Modélisation de la convection seule

Pour expliquer plus précisément le modèle, désormais, nous écrirons explicitement les différents termes des équations, c'est-à-dire, sans utiliser la notation vectorielle. Nous utiliserons alors u_x et u_y , pour représenter les composantes x et y du vecteur de vitesse \vec{u} .

3.1.1 Présentation du problème

Nous ferons la simulation d'une cavité carrée remplie d'air ($Pr = 0.71$), dont les parois verticales ont une température imposée et les parois horizontales sont adiabatiques (voir FIG. 3.1). Ce cas est souvent repris dans la littérature pour

la validation des résultats numériques, en utilisant notamment les résultats du benchmark de De Vahl Davis [77].

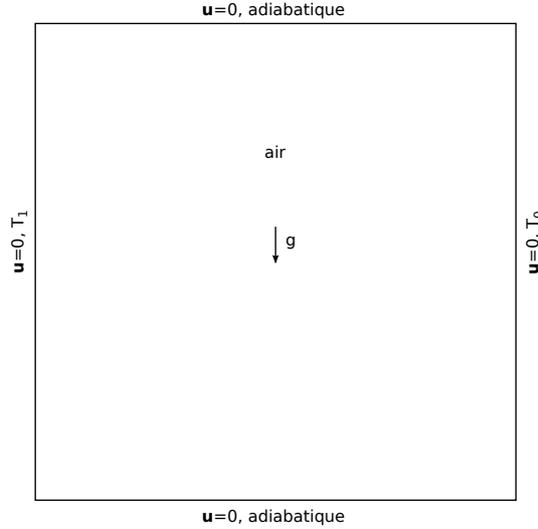


FIGURE 3.1: Schéma du problème de convection naturelle dans une enceinte

Les principes de conservation de la masse, la quantité de mouvement et l'énergie, pour un fluide Newtonien incompressible, sous l'hypothèse de Boussinesq (cf. Section 1.3.1.2), sont décrits par les équations (3.1).

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0 \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_\infty} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) \quad (3.1b)$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_\infty} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right) - g\beta (T - T_\infty) \quad (3.1c)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (3.1d)$$

Afin de résoudre numériquement les équations de conservation, nous divisons la géométrie du problème, en plusieurs cellules comme montré sur la FIG. 3.2, dont le centre sont les nœuds, et les mailles en sombre correspondent aux frontières solides.

Nous utiliserons un maillage régulier, où $\Delta y = \Delta x$, donc dorénavant nous écrirons Δx pour le pas d'espace indistinctement. En outre, nous avons vu au chapitre précédent, que pour la méthode LB, le pas de temps et d'espace sont égaux, et valent l'unité $\Delta x = \Delta t = 1$. Ainsi, dans ce qui suit, nous omettrons leur écriture.

3.1.2 Écoulement par la méthode de Boltzmann sur réseau

Nous allons résoudre les équations de conservation de la masse et la quantité de mouvement par la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM). Nous ne résolvons pas directement les équations (3.1b) et (3.1c), mais l'équation de Boltzmann sur réseau (voir Section 2.3). La solution de cette équation est séparée en deux étapes, la collision et la propagation, et comme nous utilisons l'opérateur MRT (voir Section 2.3.2) ces étapes s'expriment par :

$$\text{Collision : } f_i(\vec{x}, t + 1) = f_i(\vec{x}, t) - \mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} [m(\vec{x}, t) - m^{\text{eq}}(\vec{x}, t)] \quad (3.2a)$$

$$\text{Propagation : } f_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) = f_i(\vec{x}, t + 1) \quad (3.2b)$$

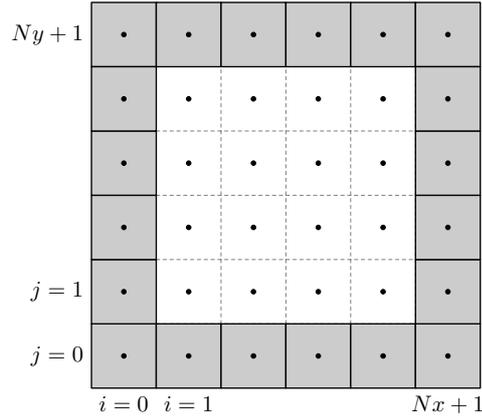


FIGURE 3.2: Schéma de la discrétisation spatiale

La matrice M et les taux de relaxation S sont présentées dans l'Annexe A.

Pour les simulations avec la LBM, nous utilisons les dites unités LB (*lattice units*, en anglais) notées par l'indice LB. Évidemment, il existe un lien entre les unités LB et les unités physiques, de sorte que l'on puisse obtenir les valeurs physiques réelles qui nous intéressent. Ce lien est donné par les lois de similitude.

Le problème physique et celui simulé doivent être similaires, c'est-à-dire qu'ils doivent respecter les mêmes nombres adimensionnels (Section 1.3.2). Ainsi, par exemple pour un écoulement isotherme, nous devons garder le même nombre de Reynolds. Par ailleurs, en convection naturelle, ce sont le nombre de Rayleigh et le nombre de Prandtl, qui doivent être respectés.

Dans les simulations avec la LBM, un des paramètres le plus important est la viscosité ν_{LB} , qui à son tour donne le temps de relaxation pour la collision. Le lien entre viscosité et temps de relaxation est donné par (cf. Annexe B) :

$$\nu_{LB} = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \quad (3.3)$$

Où c_s est la vitesse du son du réseau (en unités LB). Pour le réseau D2Q9 avec la fonction d'équilibre donné par l'équation (2.19), cette vitesse est $c_s^2 = 1/3$.

Une fois la viscosité définie, nous choisissons le nombre de nœuds pour la discrétisation géométrique. Nous noterons N_x et N_y , les nœuds en x et y respectivement.

Les forces externes comme la gravité modifient la quantité de mouvement. Dans le cadre de la méthode de LB, le développement de Chapman-Enskog montre que pour respecter la conservation de la masse, on ajoute un demi de la force lors du calcul de la quantité de mouvement après collision (voir Annexe B.2.1) [55, 78, 79]. La force correspondante au problème de convection naturelle est la poussée thermique $\vec{F} = \rho \vec{g} \beta (T - T_\infty)$. Alors, en utilisant la température moyenne comme référence ($T_\infty = T_m$) la quantité de mouvement en y s'écrit :

$$j_y(\vec{x}, t + 1) = j_y(\vec{x}, t) + \frac{1}{2} \rho g \beta_{LB} (T - T_m)_{LB} \Delta t \quad (3.4)$$

La valeur du paramètre $g\beta$ (en unités LB) dans la force de poussée se trouve au moyen de l'analyse dimensionnelle. À partir de la définition du nombre Rayleigh nous avons :

$$g\beta_{LB} = \frac{Ra \nu_{LB} \alpha_{LB}}{\Delta T_{LB} N_y^3} \quad (3.5)$$

où $\Delta T_{LB} = T_1 - T_0$ est l'écart de température entre les parois verticales, lequel est choisi de $\Delta T_{LB} = \Delta T^* = 1$ et ainsi $\Delta T_{LB} = \Delta T^*$.

3.1.3 Équation de l'énergie par la méthode des différences finies

L'équation (3.1d) est discrétisée par la méthode des différences finies. Le principe de cette méthode est le développement en séries de Taylor, dont la précision de l'approximation, dépend des termes utilisés dans ce développement. Par exemple, pour les différences centrées la précision est de deuxième ordre, ce qui veut dire, qu'en doublant le nombre de nœuds, ou autrement dit, en divisant par deux le pas d'espace, on s'attendrait à une diminution de l'erreur par un facteur de quatre, alors que si la discrétisation était d'ordre un, l'erreur diminuerait de moitié (cf. Annexe C).

Outre la précision, la discrétisation des dérivées joue un rôle sur la stabilité de la solution. Afin d'améliorer la stabilité du modèle hybride utilisé dans cette thèse, Lallemand et Luo [55] suggèrent d'utiliser une discrétisation en accord avec la discrétisation des vitesses. Tout en remarquant que le choix n'est pas unique, Lallemand et Luo proposent la discrétisation suivante pour les dérivées :

$$\frac{\partial T}{\partial x} = T_{i+1,j} - T_{i-1,j} - 1/4(T_{i+1,j+1} - T_{i-1,j+1} + T_{i+1,j-1} - T_{i-1,j-1}) \quad (3.6a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} = T_{i,j+1} - T_{i,j-1} - 1/4(T_{i+1,j+1} + T_{i-1,j+1} - T_{i+1,j-1} - T_{i-1,j-1}) \quad (3.6b)$$

et pour le laplacien :

$$\nabla^2 T = 2(T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1}) - 1/2(T_{i+1,j+1} + T_{i-1,j+1} + T_{i-1,j-1} + T_{i+1,j-1}) - 6T_{i,j} \quad (3.7)$$

Pour la dérivée temporelle, nous utilisons un schéma explicite (pour mémoire $\Delta t = 1$), alors :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n$$

En remplaçant (3.6) et (3.7) dans (3.1d), la forme discrète de l'équation de l'énergie est :

$$\begin{aligned} T_{i,j}^{n+1} = & T_{i,j}^n(1 - 6\alpha_{LB}) + T_{i+1,j}^n(-u_x + 2\alpha_{LB}) + T_{i-1,j}^n(u_x + 2\alpha_{LB}) \\ & + T_{i,j+1}^n(-u_y + 2\alpha_{LB}) + T_{i,j-1}^n(u_y + 2\alpha_{LB}) \\ & + T_{i+1,j+1}^n(1/4u_x + 1/4u_y - 1/2\alpha_{LB}) \\ & + T_{i-1,j+1}^n(-1/4u_x + 1/4u_y - 1/2\alpha_{LB}) \\ & + T_{i+1,j-1}^n(1/4u_x - 1/4u_y - 1/2\alpha_{LB}) \\ & + T_{i-1,j-1}^n(-1/4u_x - 1/4u_y - 1/2\alpha_{LB}) \end{aligned} \quad (3.8)$$

où nous avons omis les exposants n et les indices i, j des vitesses, pour alléger l'écriture.

Le coefficient qui accompagne $T_{i,j}$ dans l'équation précédente joue un rôle important pour les schémas explicites. Ces schémas sont conditionnellement stables, c'est-à-dire que le choix du pas d'espace et du pas de temps sont contraints par certaines conditions. Une des conditions de stabilité est que ce coefficient soit positif [80], ce qui implique que la diffusivité thermique α_{LB} soit limitée par :

$$\begin{aligned} (1 - 6\alpha_{LB})T_{i,j} & \geq 0 \\ \Rightarrow \alpha_{LB} & \leq \frac{1}{6} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Cette contrainte sera plus ou moins sévère en fonction du nombre de Prandtl du matériau simulé. En effet, à partir de l'ÉQ. 3.3, le temps de relaxation pour la simulation de l'écoulement sera borné par :

$$\begin{aligned} \frac{\nu_{\text{LB}}}{\text{Pr}} &= \frac{(\tau - \frac{1}{2}) c_s^2}{\text{Pr}} \leq \frac{1}{6} \\ \Rightarrow \tau &\leq \frac{1}{2}(1 + \text{Pr}) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Où, $c_s^2 = 1/3$ pour le réseau D2Q9. Nous voyons que pour de petits nombres de Prandtl ($\text{Pr} \ll 1$), le temps de relaxation est proche de $\tau \sim 1/2$. Cette valeur est la limite inférieure de τ imposée par la stabilité de la méthode, et parce que la viscosité doit être positive [46,81]. Près de cette limite, la simulation par la LBM est susceptible à d'instabilités numériques.

3.1.4 Conditions aux limites

Afin de ne pas dégrader la solution à l'intérieur du domaine de calcul, pour l'équation de l'énergie nous utilisons des conditions aux limites d'ordre $\mathcal{O}(\Delta x^3)$. En considérant la paroi au milieu des nœuds, nous devons faire des développements en série de Taylor, afin de retrouver les expressions pour la condition adiabatique, ainsi que pour la condition en température imposée.

Si nous faisons les développements suivants :

$$\begin{aligned} T_{(x_{\text{paroi}}-1/2),j} &= T_{\text{paroi}} - (\Delta x/2) \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{(\Delta x/2)^2}{2!} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{(\Delta x/2)^3}{3!} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \\ T_{(x_{\text{paroi}}+1/2),j} &= T_{\text{paroi}} + (\Delta x/2) \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{(\Delta x/2)^2}{2!} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x/2)^3}{3!} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \\ T_{(x_{\text{paroi}}+3/2),j} &= T_{\text{paroi}} + (3\Delta x/2) \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{(3\Delta x/2)^2}{2!} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{(3\Delta x/2)^3}{3!} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \\ T_{(x_{\text{paroi}}+5/2),j} &= T_{\text{paroi}} + (5\Delta x/2) \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{(5\Delta x/2)^2}{2!} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{(5\Delta x/2)^3}{3!} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \end{aligned}$$

Nous parvenons à l'expression suivante pour le gradient à la paroi :

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{\text{paroi}} = \frac{-23T_{0,j} + 21T_{1,j} + 3T_{2,j} - T_{3,j}}{24\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (3.11)$$

La même expression peut être appliquée au gradient dans les parois horizontales, en changeant les indices. Exprimons d'abord la condition adiabatique de façon adimensionnelle :

$$\begin{aligned} \kappa \frac{\partial T}{\partial y} &= \kappa \frac{\Delta T}{H} \frac{\partial T^*}{\partial y^*} = 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial T^*}{\partial y^*} &= 0 \end{aligned}$$

Nous imposons alors cette conditions ainsi :

$$T_{i,0} = \frac{21T_{i,1} + 3T_{i,2} - T_{i,3}}{23} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (3.12)$$

Et pour la condition de température imposée :

$$T_{0,j} = \frac{8T_{\text{paroi}} - 6T_{1,j} + T_{2,j}}{3} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (3.13)$$

Les équations étant posées ainsi que les conditions limites, il est maintenant possible de passer à la résolution du problème. L'algorithme de résolution est par conséquent présenté dans la section suivante.

3.1.5 Algorithme de résolution

Afin de parvenir aux résultats numériques et d'analyser l'influence des phénomènes modélisés, un code numérique écrit en langage C a été développé (cf. Annexe D) suivant l'algorithme précisé ci-dessous (voir aussi FIG. 3.3).

1. Calcul des paramètres de la simulation en fonction des nombres adimensionnels, du nombre de nœuds et du temps de relaxation : Éqs. (3.3) et (3.5)
2. Initialiser les fonctions de distribution à leur valeur d'équilibre (Éq. 2.19)
3. La température initiale est égale à la température moyenne de la cavité
4. Faire le calcul des vitesses (Éq. 2.20b)
5. Calcul des températures à l'instant $n + 1$ par l'Éq. 3.8
6. Collision (Éq. 3.2a) des fonctions de distribution f_i dans les nœuds liquides et *bounce back* (voir Section 2.3.4) aux frontières solides
7. Imposer les conditions aux limites (Éqs. 3.12 et 3.13)
8. Propagation (Éq. 3.2b)
9. Vérifier le critère de convergence
 - si convergence atteinte, alors finir les calculs
 - sinon, répéter depuis 4

Où la convergence est considérée atteinte si les deux critères suivants sont satisfaits :

$$\max \left| \sqrt{(u_x^2 + u_y^2)^{n+1}} - \sqrt{(u_x^2 + u_y^2)^n} \right| \leq 1 \times 10^{-6} \quad (3.14a)$$

$$\max |T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n| \leq 1 \times 10^{-6} \quad (3.14b)$$

3.1.6 Résultats

La présentation et l'analyse des résultats peut se faire avec différents types de graphiques. Nous sommes particulièrement intéressés par les champs de vitesses et de températures, qui sont des indices du transfert de chaleur. Le tracé des vecteurs vitesse fournit des informations sur la direction et le module des vitesses. Par ailleurs, les isothermes montrent les isovaleurs de température. Deux autres graphiques sont intéressants dans notre cas : les lignes de courant et les lignes de flux.

Les lignes de courant sont un tracé des isovaleurs de la fonction de courant ψ (*stream function* en anglais). Cette fonction est intéressante, car ses isovaleurs sont toujours tangentes au vecteur vitesse. La fonction de courant est définie par les Éqs. 3.15.

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = u_x \quad (3.15a)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -u_y \quad (3.15b)$$

À l'instar de la fonction de courant, la fonction de chaleur H (*heat function* [82]) est définie de sorte que ses isovaleurs, nommées lignes de flux, soient tangentes au vecteur de flux de chaleur. Dans le cas des transferts par conduction et convection, cette fonction est donnée par les Éqs. (3.16).

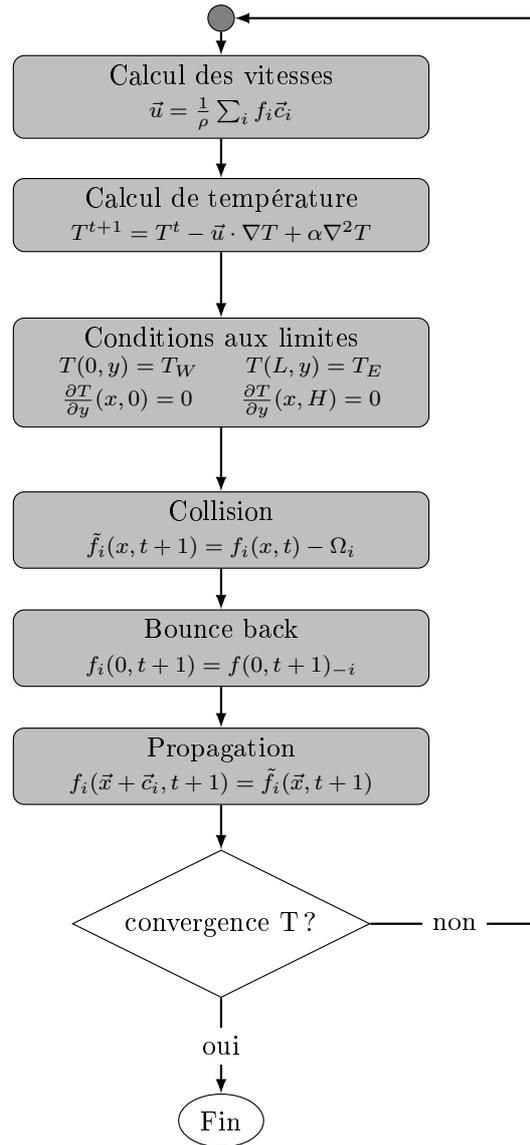


FIGURE 3.3: Diagramme de flux du problème de convection naturelle

$$\frac{\partial H}{\partial y} = \rho c_p u_x T - \kappa \frac{\partial T}{\partial x} \quad (3.16a)$$

$$-\frac{\partial H}{\partial x} = \rho c_p u_y T - \kappa \frac{\partial T}{\partial y} \quad (3.16b)$$

On constate qu'elle correspond aux transferts de chaleur en x et y .

Désormais, suivant les particularités du problème étudié, nous utiliserons des isothermes, des lignes de courant, et/ou des lignes de flux, pour la présentation de nos résultats.

Les résultats de De Vahl Davis [77] sont donnés en valeurs adimensionnelles, en utilisant les échelles suivantes, pour la position, le temps, la vitesse et la fonction de courant :

$$x^* = \frac{x}{L} \quad t^* = \frac{t\alpha}{L^2} \quad u^* = \frac{uL}{\alpha} \quad \psi^* = \frac{\psi}{\alpha}$$

Avec ces échelles, les équations gouvernantes deviennent :

$$\frac{\partial u_x^*}{\partial x^*} + \frac{\partial u_y^*}{\partial y^*} = 0 \quad (3.17a)$$

$$\frac{\partial u_x^*}{\partial t^*} + u_x^* \frac{\partial u_x^*}{\partial x^*} + u_y^* \frac{\partial u_x^*}{\partial y^*} = -\frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \text{Pr} \left(\frac{\partial^2 u_x^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u_x^*}{\partial y^{*2}} \right) \quad (3.17b)$$

$$\frac{\partial u_y^*}{\partial t^*} + u_x^* \frac{\partial u_y^*}{\partial x^*} + u_y^* \frac{\partial u_y^*}{\partial y^*} = -\frac{\partial p^*}{\partial y^*} + \text{Pr} \left(\frac{\partial^2 u_y^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u_y^*}{\partial y^{*2}} \right) - \text{Ra Pr } T^* \quad (3.17c)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + u_x^* \frac{\partial T^*}{\partial x^*} + u_y^* \frac{\partial T^*}{\partial y^*} = \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) \quad (3.17d)$$

Les simulations avec la LBM utilisent des unités LB. Pour comparer les deux résultats, on se sert des mêmes échelles, pour adimensionner les valeurs LB, ainsi :

$$u^* = \frac{u_{\text{LB}} N_x}{\alpha_{\text{LB}}} \quad \psi^* = \frac{\psi_{\text{LB}}}{\alpha_{\text{LB}}}$$

Pour le nombre de Nusselt (donné par l'équation 1.15), le gradient est calculé avec la même expression que pour les conditions aux limites (équation 3.11). Le lien entre nos résultats et les valeurs adimensionnelles est donné par :

$$\text{Nu}_{\text{paroi}} = \int_0^1 \frac{\partial T^*}{\partial x^*} dy^* = \frac{1}{\Delta T_{\text{LB}}} \sum_1^{N_y} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{\text{LB}} \quad (3.18)$$

Nous avons fait des simulations pour différents nombres de Rayleigh correspondant à différents gradients de température. Les résultats obtenus sont présentés sur la FIG. 3.4.

Les isothermes montrent que les températures sont stratifiées au milieu de la cavité, et elles varient rapidement près des parois. Ce comportement est plus prononcé pour $\text{Ra} = 10^6$.

Les lignes de courant révèlent les caractéristiques de l'écoulement. Pour $\text{Ra} = 10^4$ on voit que le fluide suit la forme d'une ellipse avec une partie qui stagne au milieu de l'enceinte. Pour $\text{Ra} = 10^5$ les lignes de courant se rapprochent près des parois en indiquant que les vitesses sont plus grandes qu'au centre de la cavité, et on voit deux endroits où le fluide stagne près du centre de la cavité. Enfin, pour $\text{Ra} = 10^6$ les lignes de courant sont encore plus proches entre elles. Du fait du grand nombre de Rayleigh, les vitesses sont plus importantes et elles varient rapidement près des parois.

Les lignes de flux montrent clairement que la chaleur va de la paroi chaude vers la paroi froide. Avec $\text{Ra} = 10^3$ le gradient de température, et par conséquent la poussée thermique, sont moins importants, c'est pourquoi le flux de chaleur en direction verticale est moins prononcé qu'avec $\text{Ra} = 10^5$ et $\text{Ra} = 10^6$. En revanche, pour $\text{Ra} = 10^6$ on voit que près des parois, le flux de chaleur en direction verticale est important, alors qu'au milieu de la cavité il ne l'est pas.

Outre ces figures, le nombre de Nusselt moyen à la paroi chauffée, les vitesses maximales, et leurs positions sont présentées sur le TAB. 3.1 et comparés avec le benchmark de De Vahl Davis.

Les erreurs relatives à la solution de De Vahl Davis sont inférieures à 5%, sauf pour la position x de la vitesse maximale $u_{y \text{ max}}$ à $\text{Ra} = 10^6$. D'ailleurs on voit que les erreurs sur toutes les quantités sont toujours plus grandes avec $\text{Ra} = 10^6$. Cela parce que nous présentons les résultats avec 101×101 nœuds, indistinctement du nombre de Rayleigh. En effet, du fait des vitesses et gradients de température plus importants avec $\text{Ra} = 10^6$, le maillage 101×101 n'est sûrement pas assez fin près des parois, d'où l'erreur plus grande sur la position x lorsqu'on s'approche des frontières.

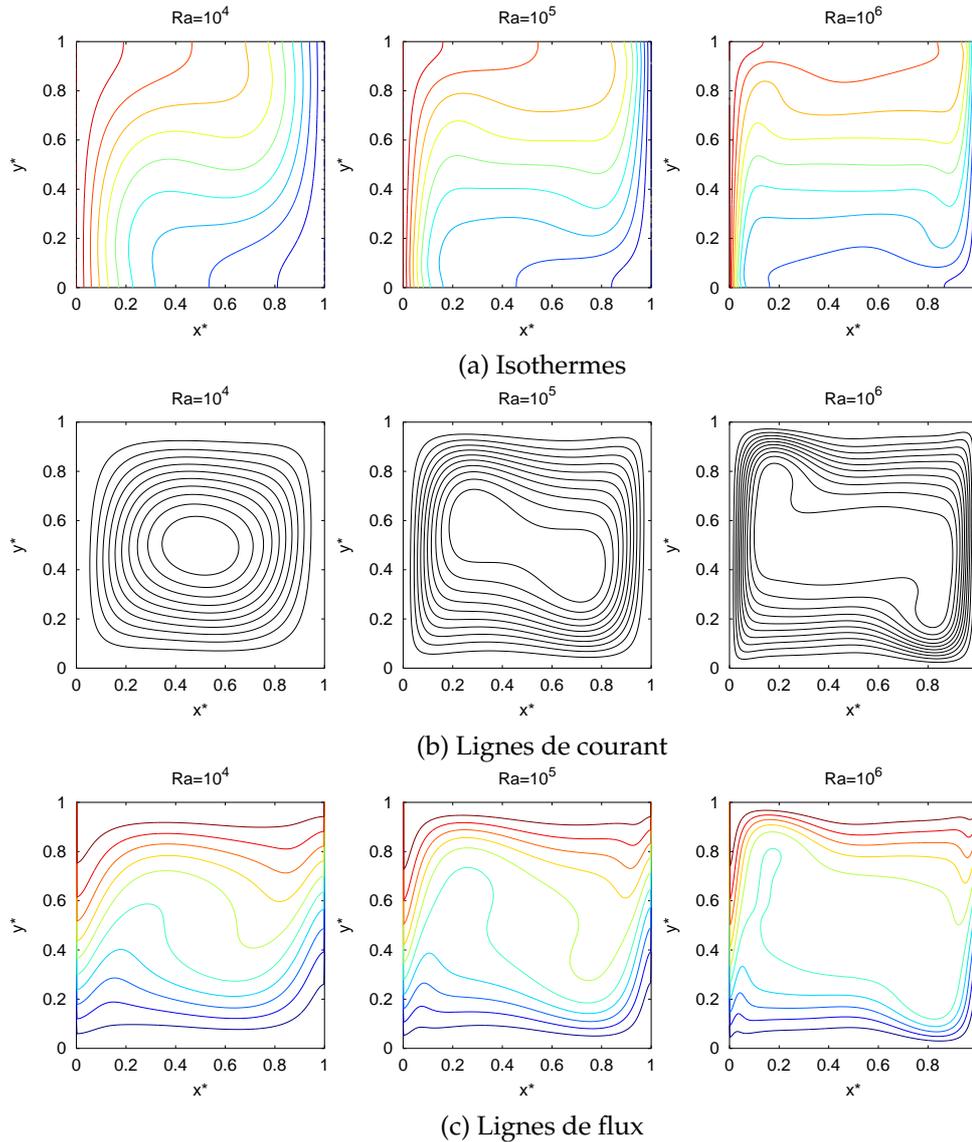


FIGURE 3.4: Convection de l'air - résultats à différents Rayleigh

3.2 Modélisation du changement de phase en présence de convection naturelle

Maintenant, nous allons appliquer le modèle hybride au cas de fusion avec convection naturelle. De nombreux travaux ont été menés dans ce domaine en particulier sur la cas test numérique proposé par Gobin, Le Quéré *et al.* [34]. Il s'agit de la fusion de deux types de matériaux : l'étain et l'octadécane caractérisés par un faible et un fort nombre de Prandtl, respectivement. Ces matériaux remplissent une cavité carrée dont les parois horizontales sont adiabatiques et les parois verticales ont une température imposée (voir FIG. 3.5). Les paramètres du problème, ainsi que les propriétés des matériaux considérés sont montrés au TAB. 3.2.

Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement sont identiques à celles du problème de convection seule (voir équations 3.1). En revanche, du fait de la formulation enthalpique pour la simulation du changement de phase, un terme source fonction de la chaleur latente s'ajoute à l'équation de l'énergie :

TABLE 3.1: Résultats du problème de convection

		Ra = 10 ⁴	Ra = 10 ⁵	Ra = 10 ⁶	Maillage
Nu_0	Ce travail	2.235	4.517	8.843	101 × 101
	Réf. [77]	2.238	4.509	8.817	
	Erreur (%)	0.134	0.177	0.295	
$u_{x \max}$	Ce travail	16.098	34.404	62.117	101 × 101
	Réf. [77]	16.178	34.730	64.630	
	Erreur (%)	0.494	0.939	3.888	
y_{\max}	Ce travail	0.827	0.856	0.837	101 × 101
	Réf. [77]	0.823	0.855	0.850	
	Erreur (%)	0.486	0.117	1.529	
$u_{y \max}$	Ce travail	19.505	68.540	224.710	101 × 101
	Réf. [77]	19.617	68.590	219.360	
	Erreur (%)	0.571	0.073	2.439	
x_{\max}	Ce travail	0.124	0.064	0.035	101 × 101
	Réf. [77]	0.119	0.066	0.038	
	Erreur (%)	4.202	3.030	7.895	

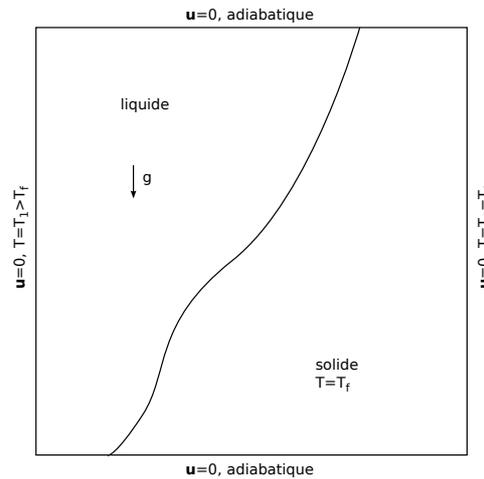


FIGURE 3.5: Schéma du problème de fusion avec convection naturelle dans une cavité

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - \frac{L_h}{c_p} \frac{\partial f_L}{\partial t} \quad (3.19)$$

3.2.1 Écoulement par la méthode de Boltzmann sur réseau

Si la simulation de l'écoulement dans le cas de fusion et dans le cas de la convection seule sont semblables, quelques particularités subsistent. Maintenant, les frontières solides changent au cours du temps, du fait de l'avancement du front de fusion. Puisque nous utilisons la formulation enthalpique pour le changement de phase, nous ne connaissons pas la position exacte de l'interface solide-liquide, mais nous connaissons la fraction fondue en chaque nœud. Ainsi, lorsque la fraction fondue d'un nœud dépasse un seuil, fixé à 0.5, la fonction de distribution est initialisée à la distribution d'équilibre, et pour les instants de temps postérieurs, les calculs se font comme pour le problème de convection naturelle.

Le couplage avec l'équation de l'énergie est identique à celui en convection

TABLE 3.2: Propriétés et paramètres du cas test de fusion [34]

Propriété	Unités	Matériau		
		Étain	Octadécane	
Conductivité	κ	W/m.K	60	0.2
Chaleur spécifique	c_p	J/kg.K	200	1250
Densité	ρ	kg · m ⁻³	7500	800
Diffusivité thermique	α	m ² /s	4 × 10 ⁻⁵	2 × 10 ⁻⁷
Viscosité cinématique	ν	m ² /s	8 × 10 ⁻⁷	1 × 10 ⁻⁵
Chaleur latente	L_h	J/kg	6 × 10 ⁴	1.25 × 10 ⁵
Température de fusion	T_F	°C	232	30
Dilatation thermique	β	°C ⁻¹	8/3 × 10 ⁻⁴	2 × 10 ⁻³
Paramètre				
Écart des températures	ΔT	°C	3	10
Hauteur	H	m	0.1	0.1
Pésanteur	g	m/s	10	10
Prandtl	Pr		0.02	50
Stefan	Ste		0.01	0.1
Rayleigh	Ra		2.5 × 10 ⁵	1 × 10 ⁸

seule. La poussée thermique, modifiant la quantité de mouvement en y , est ajoutée lors de l'étape de collision (Équation 3.4).

Nous utilisons à nouveau le nombre de Rayleigh pour déterminer la valeur de $g\beta$ (en unités LB) dans la force de poussée (Éq. 3.5). Le fluide sera maintenant entre les températures T_1 et T_F , donc l'écart des températures dans la définition du Rayleigh est $\Delta T = T_1 - T_F$.

Par ailleurs, pour la simulation de la fusion, un autre nombre adimensionnel doit être respecté, le nombre de Stefan. Celui-ci, nous permettra de définir les valeurs en unités LB de la chaleur latente L_h , et de la chaleur spécifique c_p :

$$\left(\frac{L_h}{c_p}\right)_{\text{LB}} = \frac{\Delta T_{\text{LB}}}{\text{Ste}} \quad (3.20)$$

Enfin, le nombre d'itérations nécessaires (N_t) pour la simulation d'un temps donné (t) se calcule via le nombre de Fo :

$$\begin{aligned} \text{Fo} &= \frac{\alpha t}{H^2} = \frac{\alpha_{\text{LB}} N_t}{N_y^2} \\ \Rightarrow N_t &= \frac{\alpha t N_y^2}{\alpha_{\text{LB}} H^2} \end{aligned} \quad (3.21)$$

3.2.2 Équation de l'énergie par la méthode des différences finies

Nous omettons ici les développements des gradients et du laplacien, afin d'alléger l'écriture. L'équation de l'énergie discrétisée est :

$$\begin{aligned} T_{i,j}^{n+1} &= T_{i,j}^n - \left[u_x^n \frac{\partial}{\partial x} T^n + u_y^n \frac{\partial}{\partial y} T^n \right]_{i,j} \\ &\quad + \alpha_{\text{LB}} \left[\frac{\partial^2 T^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T^n}{\partial y^2} \right]_{i,j} - \left(\frac{L_h}{c_p}\right)_{\text{LB}} [f_L^n - f_L^{n-1}]_{i,j} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Le gradient et le laplacien sont calculés avec les expressions présentées dans la Section 3.1.3, Équations (3.6) et (3.7), donc la diffusivité aura les mêmes contraintes.

Rappelons que l'enthalpie pour un matériau pur est donnée par (voir Section 1.3.3) :

$$H = c_p T + f_L L_h$$

À partir de cette relation, la fraction liquide se calcule par :

$$f_L = \begin{cases} 0 & \text{if } H < H_S \\ \frac{H-H_S}{H_L-H_S} & \text{if } H_S \leq H \leq H_L \\ 1 & \text{if } H > H_L \end{cases} \quad (3.23)$$

3.2.3 Conditions aux limites

Pour les conditions aux limites de l'écoulement, les distributions qui arrivent aux frontières, soit les parois solides, soit le front de fusion, sont reflétées suivant le principe du *bounce back* (voir Section 2.3.4) comme schématisé sur la FIG. 3.6.

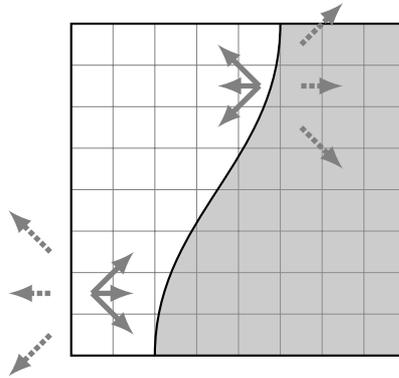


FIGURE 3.6: Schéma des conditions aux limites de l'écoulement

3.2.4 Algorithme de résolution

L'algorithme de résolution est le suivant (voir FIG. 3.7) :

1. Calcul des paramètres de la simulation en fonction des nombres adimensionnels, du nombre de nœuds et du temps de relaxation : Éqs. (3.3), (3.5), (3.20) et (3.21)
2. Les fonctions de distribution sont initialisées à leur valeur d'équilibre (Éq. 2.19)
3. La fraction liquide est initialisée à zéro
4. La température initiale est égale à la température de la paroi froide
5. Si la fraction liquide est supérieure à 0.5 le nœud est liquide, sinon solide
6. Si le nœud est liquide, faire le calcul de la vitesse (Éq. 2.20b), sinon $\vec{u} = 0$
7. Calcul des températures à l'instant $t + 1$ (Éq. 3.22)
8. Collision (Éq. 3.2a) des fonctions de distribution f_i dans les nœuds liquides et *bounce back* dans les nœuds solides
9. Imposer les conditions aux limites (Éqs. 3.12 et 3.13)
10. Propagation (Éq. 3.2b)

11. Calcul de la fraction liquide (Éq. 3.23)
12. Si le nombre maximal d'itérations a été atteint alors finir les calculs, sinon itérer depuis 5

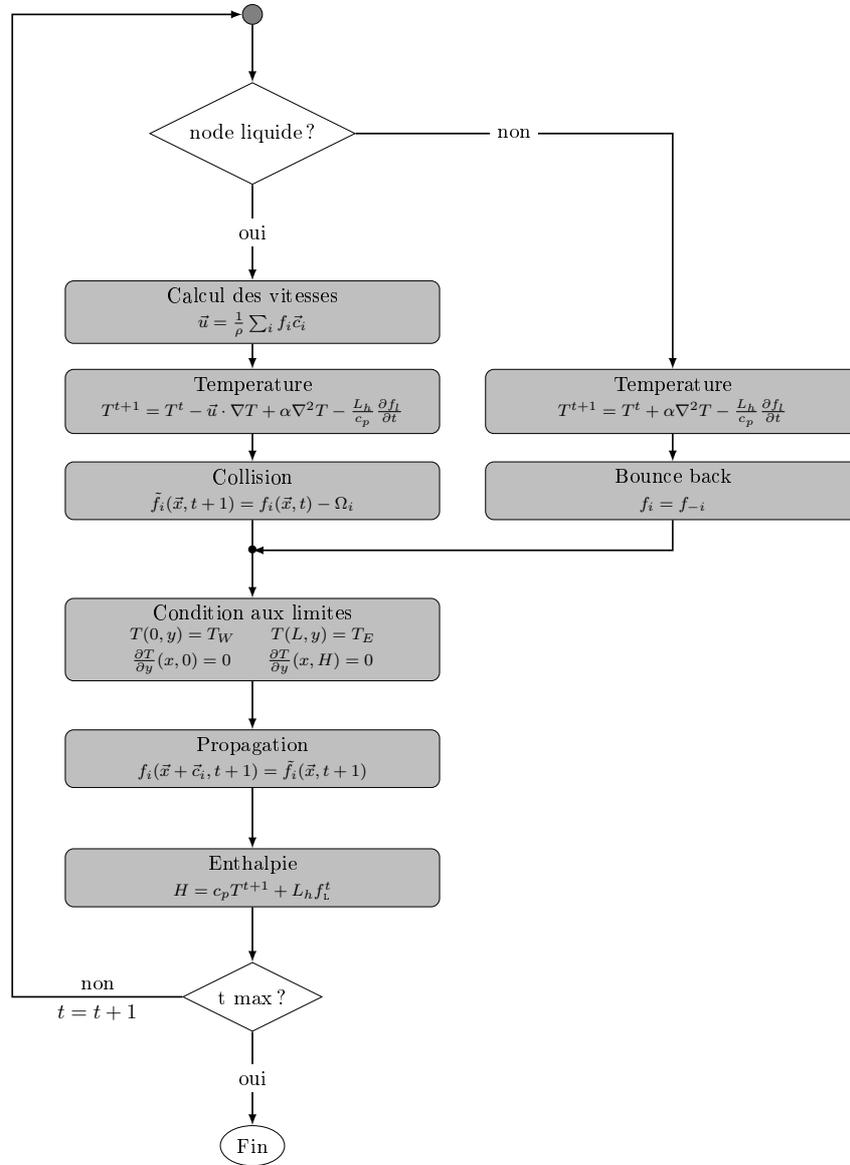


FIGURE 3.7: Diagramme de flux du problème de fusion

3.2.5 Résultats

La comparaison des résultats obtenus par la simulation LB, avec ceux de la littérature, se fait en suivant la même démarche que pour le problème de convection naturelle. L'adimensionnement des équations se fait avec les mêmes paramètres que dans le problème de convection naturelle, sauf la température, pour laquelle nous utilisons comme référence maintenant, la température de fusion :

$$T^* = \frac{T - T_F}{T_1 - T_F}$$

L'équation adimensionnelle de l'énergie, s'écrit alors :

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + u_x^* \frac{\partial T^*}{\partial x^*} + u_y^* \frac{\partial T^*}{\partial y^*} = \frac{1}{\sqrt{\text{Ra Pr}}} \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) - \frac{1}{\text{Ste}} \frac{\partial f_l}{\partial t^*} \quad (3.24)$$

Une partie des résultats qui vont être présentés ont été publiés et présentés lors du Xème colloque interuniversitaire Franco-Québécois [83].

3.2.5.1 Faible nombre de Prandtl

Du fait du faible nombre de Prandtl, la simulation de ce type de matériau pose des problèmes numériques. Examinons la condition de stabilité des températures, à savoir, la valeur du coefficient de la température $T_{i,j}$ dans l'équation de l'énergie. Comme nous l'avons vu dans la Section 3.1.3, la diffusivité de la simulation est contrainte par $\alpha_{LB} < 1/6$. Cela implique par conséquent la limite du temps de relaxation telle que :

$$\tau \leq \frac{1}{2}(1 + 0.02) = 0.51$$

En outre, certaines simulations de l'étain sous la même configuration montrent un écoulement à caractéristiques complexes, présentant notamment des cellules de recirculation, qui fusionnent les unes avec les autres au cours du temps [22–24, 35, 84]. Ce comportement n'a pourtant jamais été observé expérimentalement. Du point de vue numérique, par ailleurs, ce phénomène n'est pas anodin, car la forme du front de fusion est modifiée sensiblement, et l'évolution du nombre de Nusselt présente des oscillations durant le régime à deux cellules [35].

La première simulation a été réalisée pour un maillage 100×100 , en essayant différentes valeurs du temps de relaxation. Avec $\tau = 0.506$ ($\alpha_{LB} = 0.1$), la valeur du Nusselt oscille dès le début de la simulation, et son évolution ne correspond pas à celle donnée par la solution analytique en conduction seule (solution de Neumann [33]). La modification de la valeur de τ , à $\tau = 0.503$ soit $\alpha_{LB} = 0.05$, a permis de supprimer les oscillations et ainsi d'obtenir une évolution du nombre de Nusselt en accord avec la solution théorique par conduction. Les résultats présentés ci-après sont donc basés sur cette dernière valeur de τ ; valeur qui a permis d'établir sur une période de 250s les premières structures du développement de l'écoulement (figure 3.8).

L'analyse de cette figure montre que très tôt, à $t = 150s$, trois cellules de convection apparaissent et s'amplifient au fil du temps.

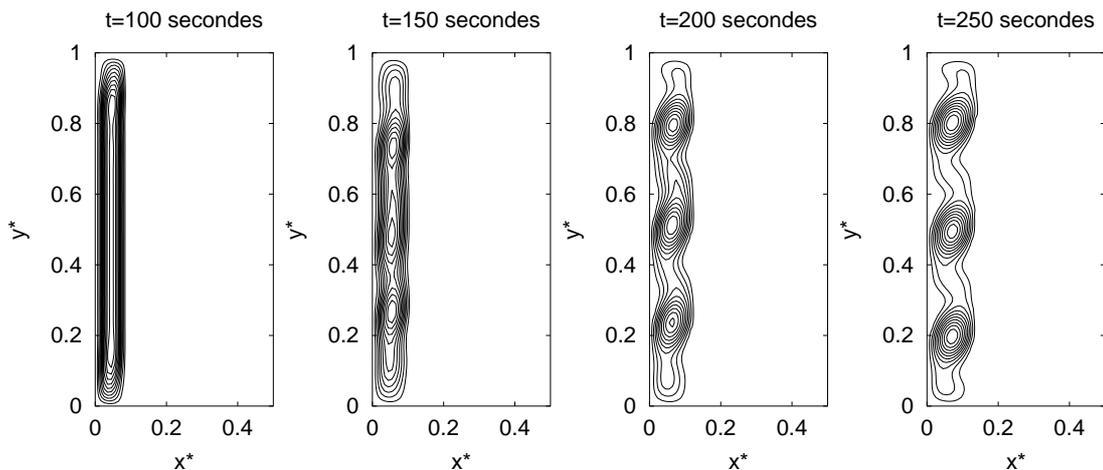


FIGURE 3.8: Fusion de l'étain - Lignes de courant avec 100×100 nœuds

Malheureusement peu après le temps $t = 250$ secondes, la solution de ce calcul diverge. Il faut comprendre ici par divergence une valeur extrêmement grande du nombre de Nusselt (*not a number* dans le langage C). En effet, peu après cet instant,

le nombre de Nusselt croit très rapidement pour atteindre cette valeur extrême. Différentes causes, de nature physique ou numérique, peuvent être avancées.

Premièrement, d'un point de vue numérique, les vitesses dans la LBM ne peuvent pas être trop élevées. En effet, la méthode de Boltzmann sur réseau simule des fluides incompressibles, pour lesquels, les vitesses doivent rester petites par rapport à la vitesse du son (petit nombre de Mach). En unités LB cela signifie que :

$$\frac{u_{LB}}{c_s} = \frac{u_{LB}}{1/\sqrt{3}} \ll 1$$

Dans la littérature, ce rapport se situe entre 0.1 – 0.3 [52, 85]. Examinons alors la valeur maximale du champ de vitesses, pour vérifier que cette condition est respectée.

Les vitesses maximales et le rapport (u_{max}/c_s) sont présentés dans le TAB. 3.3. Les vitesses restent petites par rapport à la vitesse du son, donc cela n'explique pas la divergence du calcul.

Deuxièmement, du fait de la particularité de cet écoulement cellulaire, la taille du maillage utilisé peut ne pas être suffisante pour suivre sa dynamique. Nous avons donc raffiné ce dernier. Pour garder un rapport constant d'augmentation tout en évitant un temps de calcul trop long, nous l'avons augmenté d'un facteur 1.5. Nous présentons sur la FIG. 3.9, les résultats pour ce nouveau maillage de 150×150 nœuds.

TABLE 3.3: Vitesses maximales avec 100×100 nœuds

Temps [s]	u_{max} [LB]	u_{max}/c_s
50	0.0031	0.0054
100	0.0089	0.0155
150	0.0144	0.0249
200	0.0166	0.0288
250	0.0159	0.0275

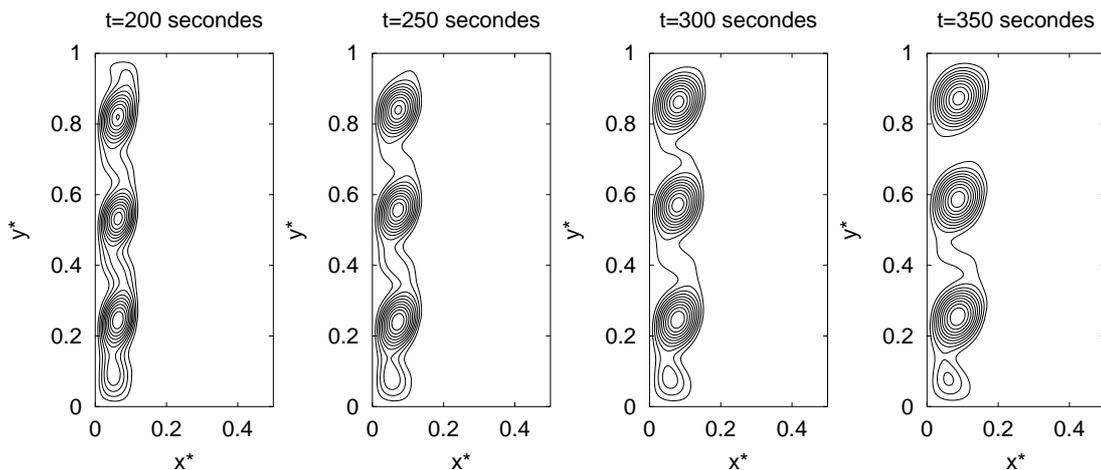


FIGURE 3.9: Fusion de l'étain - Lignes de courant avec 150×150 nœuds

Le raffinement du maillage avec 150×150 mailles permet d'outrepasser la limite des 250 secondes. Les trois grandes cellules montrées par la simulation précédente sont toujours présentes mais elles commencent à se séparer, et celle qui est la plus haute monte plus vite en s'éloignant des autres. Malheureusement, peu

après 350 secondes, le code diverge à nouveau. L'analyse des nouvelles vitesses maximales (voir TAB. 3.4) montre qu'elles respectent encore une fois le critère donné précédemment et ne justifie donc pas ces problèmes de divergence.

TABLE 3.4: Vitesses maximales avec 150×150 nœuds

Temps [s]	u_{\max} [LB]	u_{\max}/c_s
50	0.0022	0.0038
100	0.0054	0.0093
150	0.0089	0.0153
200	0.0108	0.0186
250	0.0115	0.0200
300	0.0122	0.0212
350	0.0131	0.0226

La justification de ce problème peut par conséquent être liée au détachement de la cellule située dans la partie supérieure - phénomène qui est apparu par rapport à la simulation précédente. Ce changement de forme de l'écoulement peut induire une variation très rapide des vitesses et des températures locales, entraînant la divergence du calcul et nécessite par conséquent que le maillage soit encore raffiné.

Avec le niveau suivant de raffinement du maillage (225×225), nous pouvons aller un peu plus loin en temps, jusqu'à 600 secondes. Sur la FIG. 3.10, il est possible de voir le passage de trois à deux cellules, lorsque les deux cellules en haut de l'enceinte fusionnent après 400 secondes.

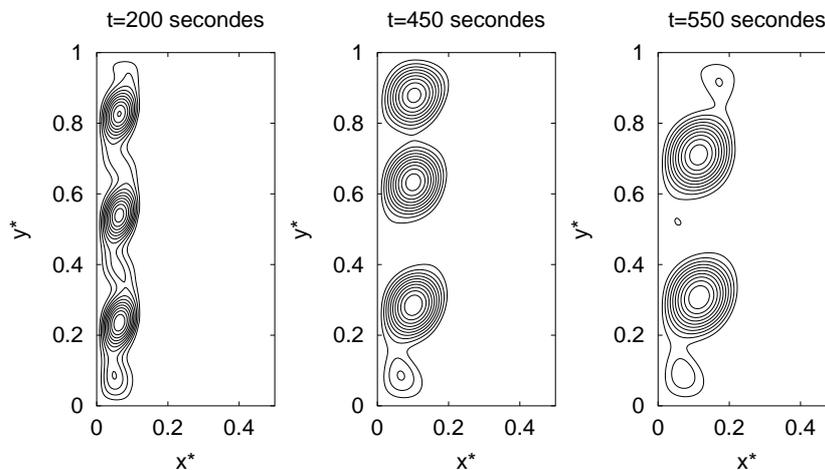


FIGURE 3.10: Fusion de l'étain - Lignes de courant avec 225×225 nœuds

L'évolution du Nusselt moyen à la paroi chauffée avec 225×225 nœuds est montrée sur la FIG. 3.11a. Sur cette figure, nous voyons qu'entre 450 et 500 secondes, le nombre de Nusselt montre un saut. Ce moment correspond à la fusion des deux cellules situées dans la partie supérieure de la cavité. Ici, après 600 secondes, le code diverge à nouveau. Les vitesses maximales pour ce cas sont dans le TAB. 3.5.

En fait, on remarque que si la vitesse est supérieure à 0.01 (unité LB) alors on note des problèmes de divergence. Aussi en regardant le TAB. 3.5 la vitesse à 600 s est de 0.0115 [LB]. Afin de vérifier cette hypothèse, une dernière simulation avec 400×400 a été menée et les vitesses maximales sont montrées au TAB. 3.6.

Les vitesses maximales obtenues avec le maillage le plus fin sont toujours

3.2. Modélisation du changement de phase en présence de convection naturelle

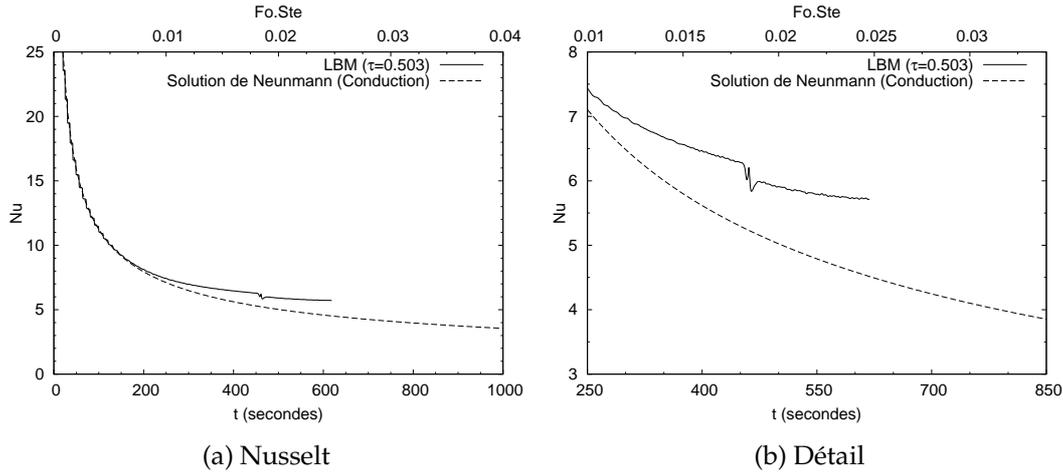


FIGURE 3.11: Fusion de l'étain - nombre de Nusselt avec 225×225 nœuds

TABLE 3.5: Vitesses maximales avec 225×225 nœuds

Temps [s]	u_{\max} [LB]	u_{\max}/c_s
100	0.0040	0.0069
200	0.0073	0.0126
300	0.0084	0.0145
400	0.0095	0.0164
500	0.0108	0.0187
600	0.0115	0.0199

TABLE 3.6: Vitesses maximales avec 400×400 nœuds

Temps [s]	u_{\max} [LB]	u_{\max}/c_s
100	0.00226	0.00391
200	0.00380	0.00658
300	0.00469	0.00813
400	0.00537	0.00931
500	0.00609	0.01055
600	0.00654	0.01132
700	0.00697	0.01208
800	0.00742	0.01286
900	0.00759	0.01314
1000	0.00806	0.01397

inférieures à 0.00806 ($u_{\max}/c_s < 0.01397$). Nous arrivons ainsi à simuler jusqu'à 1000 secondes.

Nos résultats sont en accord avec le travail de Hannoun *et al.* [22]. La FIG. 3.12 présente les résultats obtenus sous la forme de ligne de courant. À gauche sont présentés nos résultats pour le modèle avec 400×400 nœuds, au centre les résultats de Hannoun pour le schéma centré et à droite les résultats de Hannoun pour le schéma *upwind* [80]. Le nombre de cellules ainsi que leur forme sont semblables. L'étude d'Hannoun *et al.* a montré, premièrement, que l'écoulement multicellulaire est la solution correcte des équations, et deuxièmement, que les schémas d'ordre bas $\mathcal{O}(\Delta x)$ ou les discrétisations faibles ($< 100 \times 100$) montrent moins de cellules. Nous voyons alors que notre modèle simule correctement la fusion de ce matériau

et qu'il est aussi précis que le schéma centré avec 400×400 nœuds.

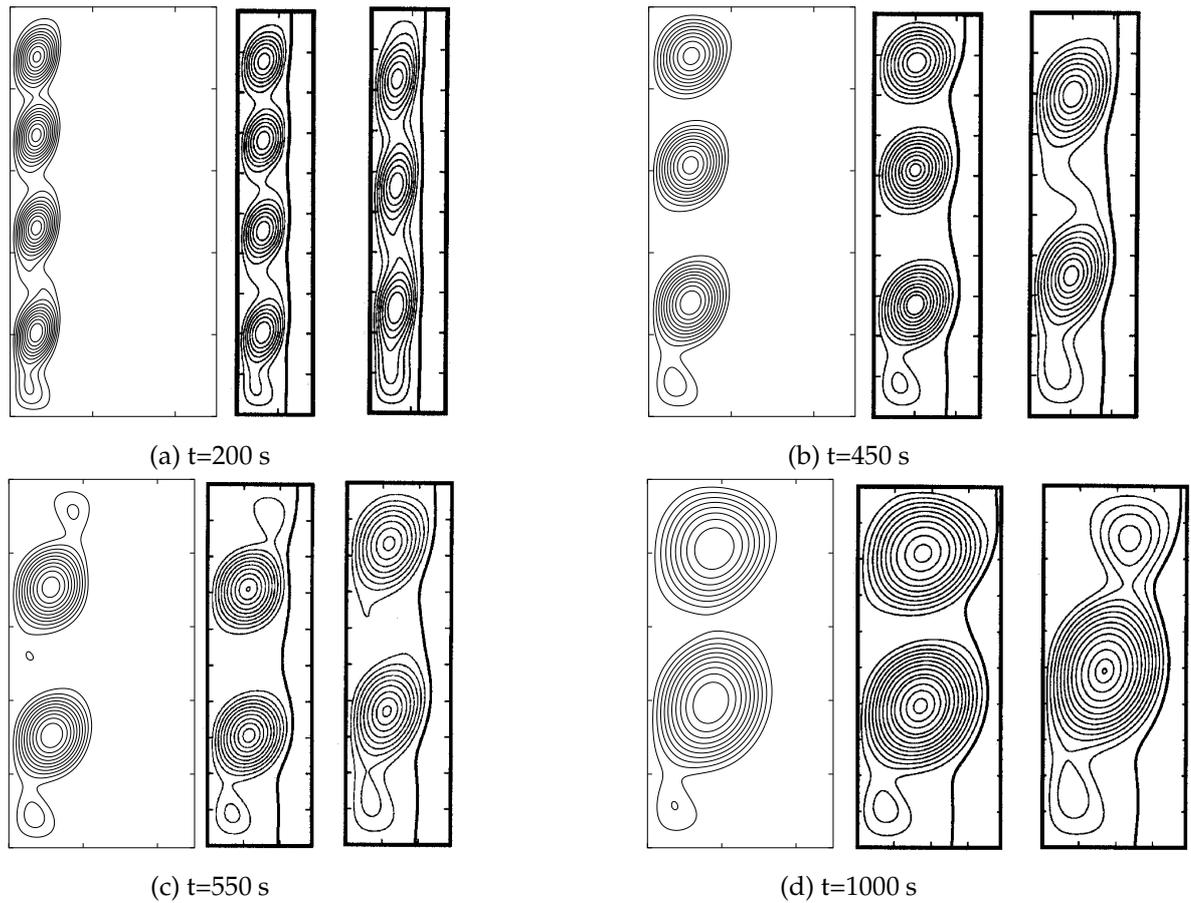


FIGURE 3.12: Fusion de l'étain - Lignes de courant avec 400×400 nœuds (à gauche nos résultats, au centre et à droite les résultats de Hannoun *et al.* [22] avec schéma centré et schéma *upwind*, respectivement)

Le nombre de Nusselt moyen à la paroi chaude obtenu avec 400×400 est montré sur la FIG. 3.13. On voit le saut correspondant au passage de trois vers deux cellules autour de 500 secondes. De plus, après 700 secondes ($Fo_{Ste} = 0.028$) la courbe montre des oscillations à haute fréquence. D'après Hannoun *et al.* [24], ces oscillations pourraient être de nature numérique car elles diminuent avec le raffinement du maillage. Pourtant, Le Quéré et Gobin [35] ont montré que ces oscillations sont physiques et inhérentes à la convection naturelle.

Enfin, il est intéressant de comparer les temps de calcul de notre modèle avec le modèle d'Hannoun, afin d'avoir un autre critère d'évaluation de la pertinence de la méthode hybride pour ce type de problème (voir TAB. 3.7).

TABLE 3.7: Temps de calcul du problème de fusion de l'étain

	Maillage	temps simulé	Temps CPU	$t_{CPU}/t_{simulé}$	Machine
Ce travail	400×400	0-1000 s	76h 31m 33 s	275.5	Intel Xeon X5472
Réf. [22]	200×200	0-2500 s	2400h	3456	Compaq Alpha ev67
Réf. [24]	200×200	0-700 s	260h	1337.1	CRAY SV1
Réf. [24]	400×400	0-700 s	450h	2314.3	Compaq Alpha ES40

En faisant le rapport entre temps CPU et temps simulé, le temps de calcul avec la méthode hybride LB est dans tous les cas plus petit qu'avec la méthode des

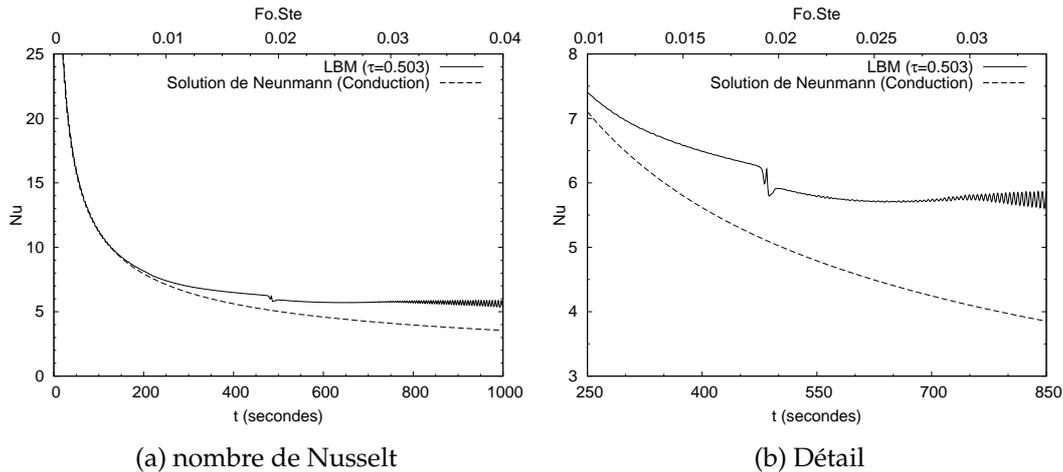


FIGURE 3.13: Fusion de l'étain - Nusselt à la paroi chauffée

volumes finis utilisée par Hannoun. Cela parce que la discrétisation temporelle de l'équation de l'énergie, ainsi que la méthode de LB, sont explicites et par conséquent nous ne faisons pas d'itérations sur chaque pas de temps. En revanche, même si notre méthode simule bien le caractère pluricellulaire de l'écoulement, un maillage fin (400×400) a été nécessaire afin de suivre l'évolution temporelle de ces cellules. On peut également relativiser ces résultats par rapport à la performance des calculateurs employés.

3.2.5.2 Fort nombre de Prandtl

Pour le fort nombre de Prandtl ($Pr > 1$), les corrélations de Jany et Bejan [16] dont nous avons parlé au premier chapitre (cf. Section 1.4), donnent l'évolution temporelle du nombre de Nusselt et de la position moyenne de l'interface. Nous utiliserons ces corrélations comme valeur de référence pour évaluer la justesse de nos résultats.

Le processus de fusion commence par un régime conductif suivi d'un régime mixte de conduction et convection. La fin du régime mixte se caractérise par un minimum du nombre de Nusselt atteint au temps [16] :

$$\theta_{\min} \approx 9 Ra^{-1/2} = 0.0009 \quad (t = 450s)$$

Une fois ce temps dépassé, les transferts par convection se font sur toute la hauteur de l'enceinte, en augmentant à nouveau le nombre de Nusselt jusqu'à atteindre une valeur asymptotique donnée par :

$$Nu_{\infty} = 0.35 Ra^{0.25} = 35$$

Du fait du fort nombre de Prandtl, ce matériau n'a pas les mêmes limitations que l'étain par rapport au temps de relaxation (voir ÉQ. 3.10). Par conséquent, la simulation peut être accélérée en utilisant un temps de relaxation plus grand. Toutefois cette modification se fait au dépend de la justesse des résultats. En effet nous avons observé qu'au-delà de $\tau = 0.55$, le nombre de Nusselt durant le régime convectif n'atteignait pas une valeur asymptotique mais chutait continûment (voir FIG. 3.14).

Une étude de convergence du maillage peut fournir d'autres pistes sur le choix des paramètres à utiliser. Les résultats avec deux temps de relaxation différents ($\tau = 0.53$ et $\tau = 0.55$) sont présentés au TAB. 3.8 et sur la FIG. 3.15.

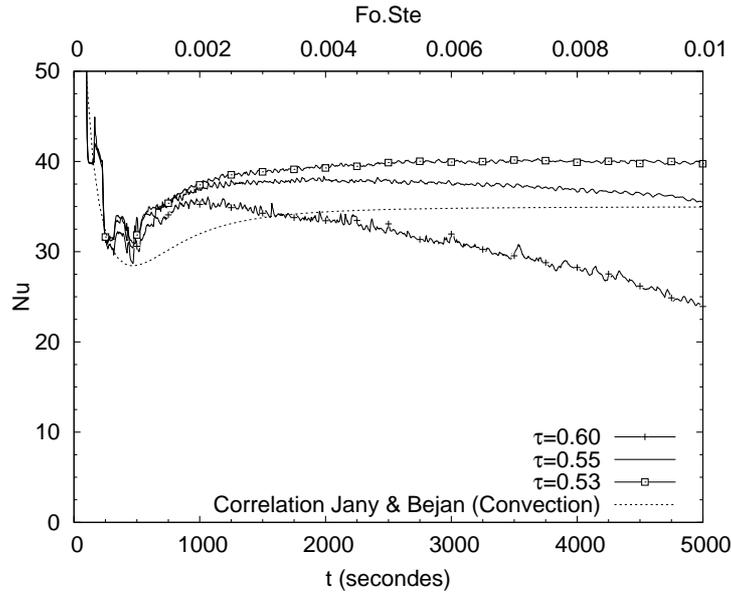


FIGURE 3.14: Fusion de l'octadécane - Nusselt suivant le temps de relaxation et 100×100 nœuds

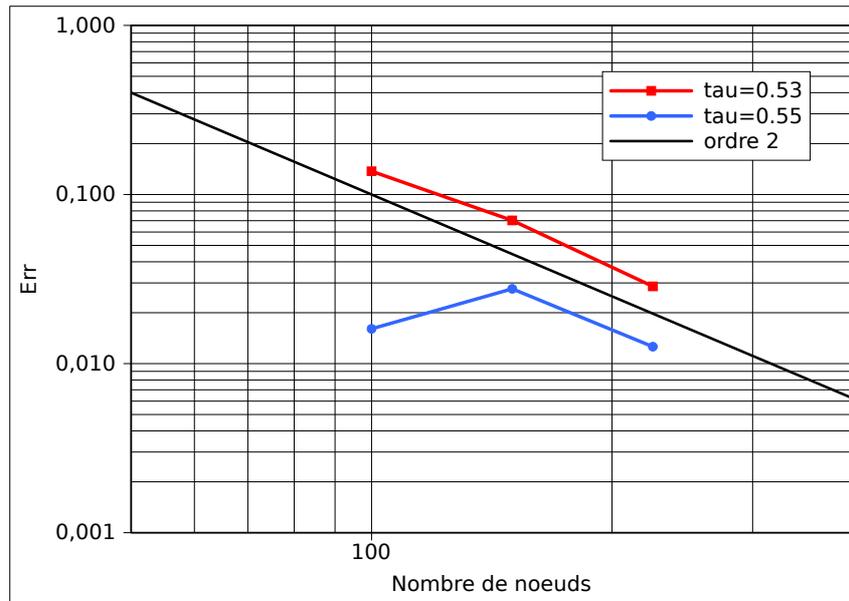


FIGURE 3.15: Ordre de convergence du nombre de Nusselt

Sur la FIG. 3.15, la courbe de $\tau = 0.53$ montre que l'ordre de convergence du Nusselt est proche de deux. Par ailleurs, la courbe de $\tau = 0.55$ montre une évolution non linéaire de l'erreur. Les résultats du TAB. 3.8 pourraient amener à choisir le temps de relaxation $\tau = 0.55$, du fait des erreurs plus petites, et du plus faible temps de calcul. Toutefois, l'erreur avec $\tau = 0.55$ ne diminue pas avec le raffinement du maillage, mais augmente et diminue ensuite. D'ailleurs, le calcul de l'ordre de convergence n'est pas possible du fait de cet évolution de l'erreur. En effet, une des hypothèses pour l'application de l'extrapolation de Richardson au calcul de l'ordre de convergence est que les solutions soient sur la zone de convergence asymptotique (cf. Annexe C). Le fait que l'erreur ne diminue pas de façon linéaire indique que les erreurs avec le maillage 100×100 sont assez importantes, et la petite valeur obtenue (1.605%) n'est qu'une pure coïncidence comme nous le voyons également sur la FIG. 3.14.

TABLE 3.8: Étude du maillage pour la fusion de l'octadécane

$\tau = 0.53$				
$N_x \times N_y$	Nu	Erreur (%)	Itérations	temps CPU
100^2	39.752	13.726	5×10^6	1h18m3.95s
150^2	37.410	7.026	11.25×10^6	6h25m9.82s
225^2	35.955	2.863	25.3125×10^6	34h11m6.16s
Ordre	1.173			
$\tau = 0.55$				
$N_x \times N_y$	Nu	Erreur (%)	Itérations	temps CPU
100^2	35.516	1.605	3×10^6	0h47m35.32s
150^2	35.922	2.768	6.75×10^6	4h01m35.93s
225^2	35.395	1.259	15.1875×10^6	19h55m21.89s
Ordre	-			

Nous utiliserons alors, pour la présentation des résultats qui suivent, le temps de relaxation $\tau = 0.530$ et un maillage 225×225 ; maillage qui correspond à l'erreur minimum. Les isothermes et les lignes de courant à différents instant de temps sont présentées sur la FIG. 3.16.

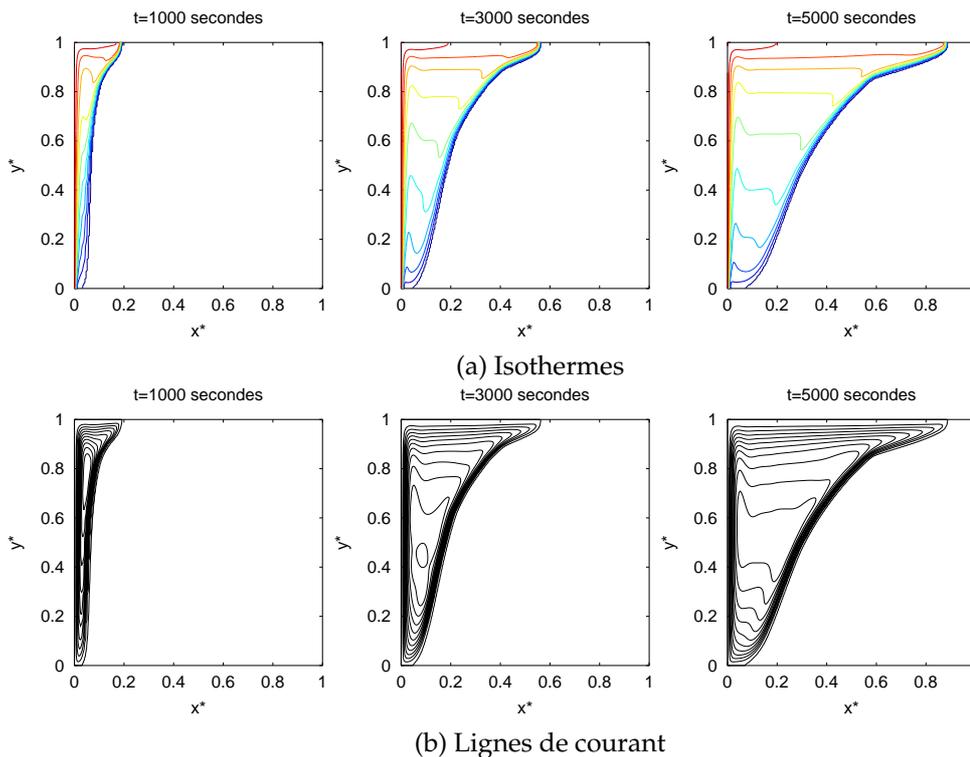


FIGURE 3.16: Fusion de l'octadécane - résultats avec 225×225 nœuds

Sur la FIG. 3.16a, les isothermes montrent une stratification des températures et un fort gradient près de la paroi verticale et du front de fusion, comme dans le cas de convection seule avec $Ra = 10^6$ (cf. FIG. 3.4a). Puisque le régime convectif est atteint rapidement (après 450 secondes), le front de fusion se déforme sur toute la hauteur de la cavité, même quand la quantité de liquide est relativement petite ($< 10\%$ de liquide à $t=1000$ secondes).

Par ailleurs les lignes de courant (FIG. 3.16b) montrent une recirculation à

l'intérieur du liquide, qui se concentre en haut de la cavité (autour de $y^* = 0.8$ à 1000 secondes) et qui se déplace ensuite vers le centre à 3000 et 5000 secondes. Près des parois, la proximité des lignes de courant indique que les vitesses sont plus importantes ici que dans le reste de la cavité.

Sur la FIG. 3.17, nous comparons nos isothermes avec celles de Mencinger [23] à $Fo Ste = 0.01$ ($t=5000$ s). La position de l'isotherme $T^* = 0.9$ est pratiquement égale. Les autres isothermes ont la même allure, pourtant près du front de fusion (isotherme à $T^* = 0$) on constate quelques différences. D'une part, dans nos simulations la partie supérieure de l'interface est proche de $x^* = 0.9$, tandis que pour Mencinger elle est plus proche de $x^* = 0.8$. D'autre part, l'interface change de courbure près de $x^* = 0.6$ dans nos résultats, et près de $x^* = 0.4$ pour Mencinger. D'ailleurs, les résultats du benchmark de Gobin, Le Quéré *et al.* montrent des différences importantes (une plage de $\pm 20\%$) dans cette zone [34].

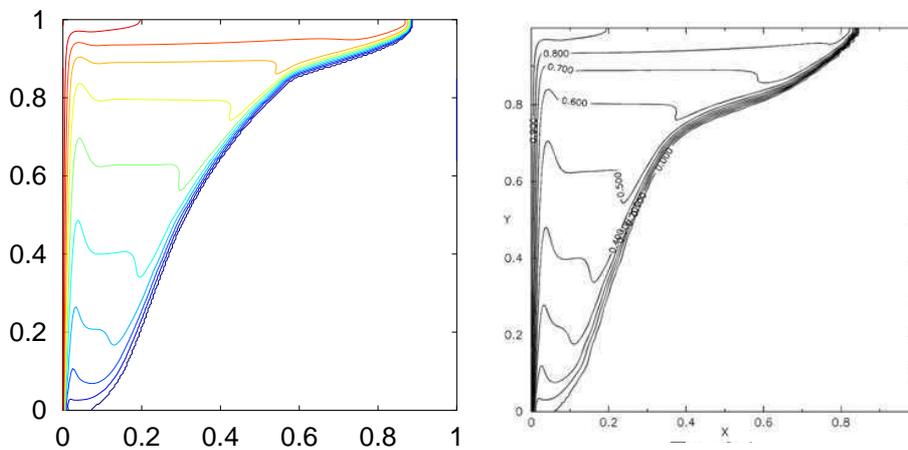


FIGURE 3.17: Isothermes à $Fo Ste = 0.01$ (à droite les résultats de [23])

Le nombre de Nusselt à la paroi chaude est montré sur la FIG. 3.18a. Nous voyons qu'au début du processus, la courbe montre des oscillations. Elles sont d'origine numérique [23,86,87]. Ces oscillations sont provoquées par les nœuds qui sont en train de changer d'état, lesquels se maintiennent à température constante (la température de fusion) pendant que leur fraction liquide est inférieure à 0.5. Par conséquent, le gradient entre un nœud à la paroi et un nœud voisin qui change d'état sera constant lorsque $f_L < 0.5$. Les oscillations du Nusselt se présentent depuis le début de la fusion jusqu'à la fin du régime mixte ($t \approx 450s$), parce que c'est en début de fusion et durant le régime mixte, que l'épaisseur du liquide en bas de la cavité est encore faible et les nœuds qui changent d'état sont proches de la paroi.

La position moyenne de l'interface est montrée sur la FIG. 3.18b. Cette courbe ne montre pas d'oscillations comme celle du Nusselt, car la fraction liquide dans un nœud qui change d'état ne reste pas fixe comme la température, mais varie graduellement. Nos résultats sont au-dessus des valeurs de la corrélation de Jany et Bejan. Par exemple, à $t = 5000$ s ($Fo Ste = 0.01$), la corrélation (1.24b) donne 0.351 tandis que notre modèle donne 0.373 (l'écart est de 6.27%). Cela reste acceptable par rapport à la dispersion de $\pm 10\%$ entre les différents résultats du benchmark de Gobin, Le Quéré *et al.* [34].

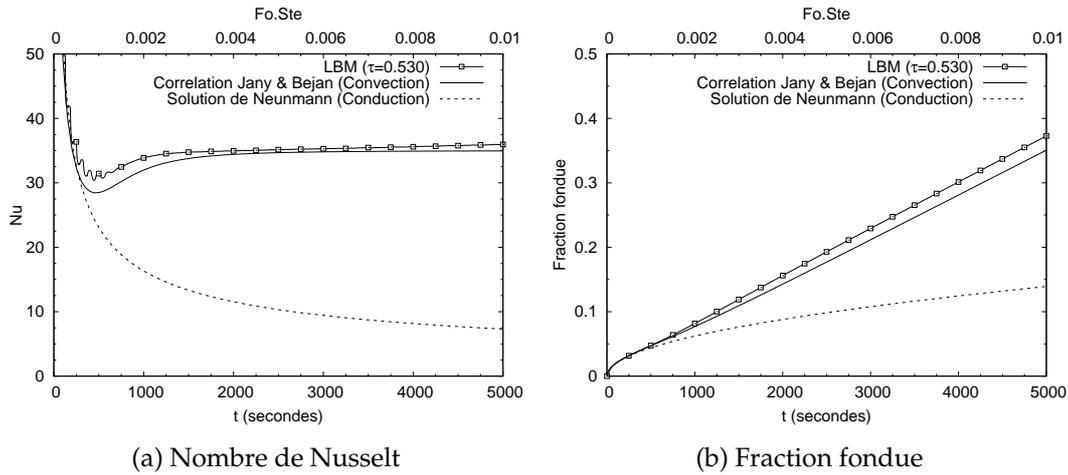


FIGURE 3.18: Fusion de l'octadécane - Nusselt et fraction fondue

3.3 Fusion de l'acide gras

Dans les sections précédentes, nous avons développé le modèle LB pour le changement de phase avec convection naturelle. Afin de vérifier le modèle et le code correspondant, nous avons simulé des cas de référence et nous avons étudié le maillage et le temps de relaxation donnant les résultats le plus satisfaisants en terme de temps de calcul et précision (par rapport aux corrélations 1.24). Néanmoins, notre problématique concerne un matériau en particulier qu'est l'acide gras.

Nous proposons donc dans cette section d'analyser l'influence de la convection naturelle sur le changement d'état solide-liquide de l'acide gras de la brique Inertrans. Ce MCP est un eutectique, dont les propriétés ainsi que les dimensions de la brique, sont présentées dans le TAB. 3.9. Un schéma avec les conditions limites est montré sur la FIG. 3.19. Avec ces propriétés et conditions limites, le matériau est caractérisé par les nombres adimensionnels suivants :

- Nombre de Rayleigh, $Ra = \frac{g\beta(T_1 - T_F)H^3}{\nu\alpha} = 3.66 \times 10^9$
- Nombre de Stefan, $Ste = \frac{c_p(T_1 - T_F)}{L_h} = 0.254$
- Nombre de Prandtl, $Pr = \frac{\nu}{\alpha} = 112.9$

TABLE 3.9: Propriétés de l'acide gras

Propriété	Unités		
Conductivité	κ	W/m·K	0.18
Chaleur spécifique	c_p	J/kg·K	2090
Densité liquide	ρ_l	kg · m ⁻³	884
Densité solide	ρ_s	kg · m ⁻³	960
Viscosité	ν	m ² /s	11.0×10^{-6}
Chaleur latente	L_h	J/kg	152×10^3
Température de fusion	T_F	°C	21.5
Dilatation thermique	β	°C ⁻¹	3.10×10^{-3}
Paramètre			
Hauteur de la brique	H	m	0.191
Largeur de la brique	L	m	0.032

Du fait des forts nombre de Rayleigh et nombre de Prandtl, les caractéristiques

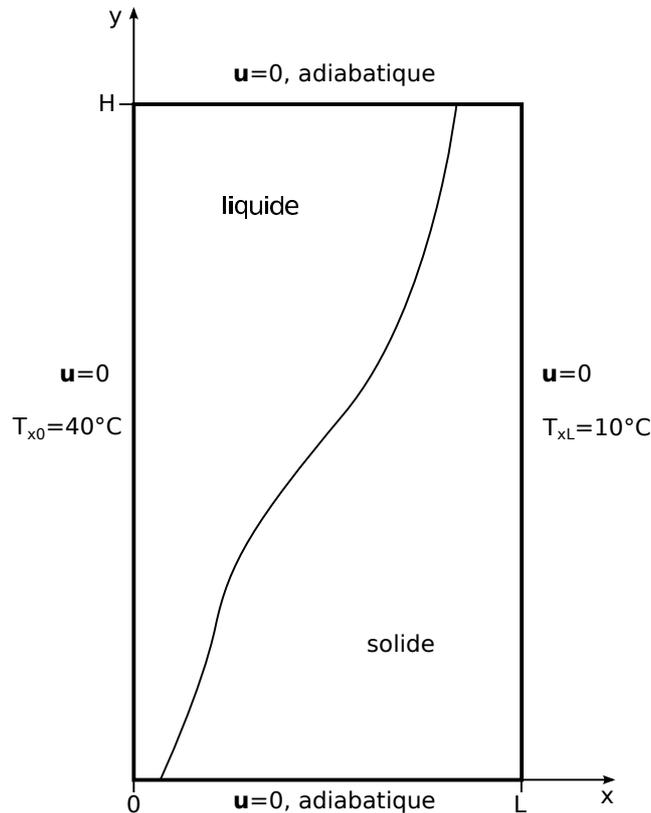


FIGURE 3.19: Acide gras - Schéma

de l'écoulement doivent ressembler à celles de l'octadécane. D'après l'analyse d'échelles de Jany et Bejan [16], les transferts convectifs et par conséquent la déformation du front de fusion, augmentent avec le nombre de Rayleigh. On s'attend alors à une influence de la convection encore plus importante que dans le cas de l'octadécane. Or, la cavité n'est pas carré et comme nous l'avons montré dans la Section 1.4, l'effet du rapport de forme sur la fusion n'est pas bien établi. Nous utiliserons toutefois les corrélations de Jany et Bejan, comme une base pour l'analyse de nos résultats.

3.3.1 Résultats

Afin de garder le même rapport de forme que la cavité contenant le MCP, nous pouvons commencer par utiliser 32×191 nœuds. De plus, étant donné la ressemblance de ce matériau et l'octadécane, et afin de réduire le temps de calcul, nous utilisons un temps de relaxation $\tau = 0.53$, qui dans le cas de l'octadécane a donné des résultats satisfaisants.

Pourtant, avec cette discrétisation la simulation diverge rapidement (lorsque le temps simulé est autour de 100 secondes). Même si le nombre de nœud en y paraît acceptable par rapport à la discrétisation utilisée pour le cas de l'octadécane (100, 150 et 225 nœuds), du fait du maillage régulier, la quantité de nœuds en x n'est pas suffisante pour résoudre les forts gradients de température près des parois. Nous avons essayé différentes valeurs du temps de relaxation, en gardant la même discrétisation spatiale, et finalement avec $\tau = 0.505$ la simulation arrive à son terme. Cependant, il n'est pas efficace d'utiliser un temps de relaxation trop petit parce que le pas de temps réel devient très petit (i.e. le temps de calcul devient très grand) et parce que la méthode LB devient instable [41]. Nous avons déjà utilisé un petit temps de relaxation pour la simulation de l'étain ($\tau = 0.503$), mais pour ce cas

nous étions contraints de le faire à cause du petit nombre de Prandtl (cf. ÉQ. 3.10). Puisque l'acide gras n'impose pas cette contrainte, nous préférons donc augmenter le maillage.

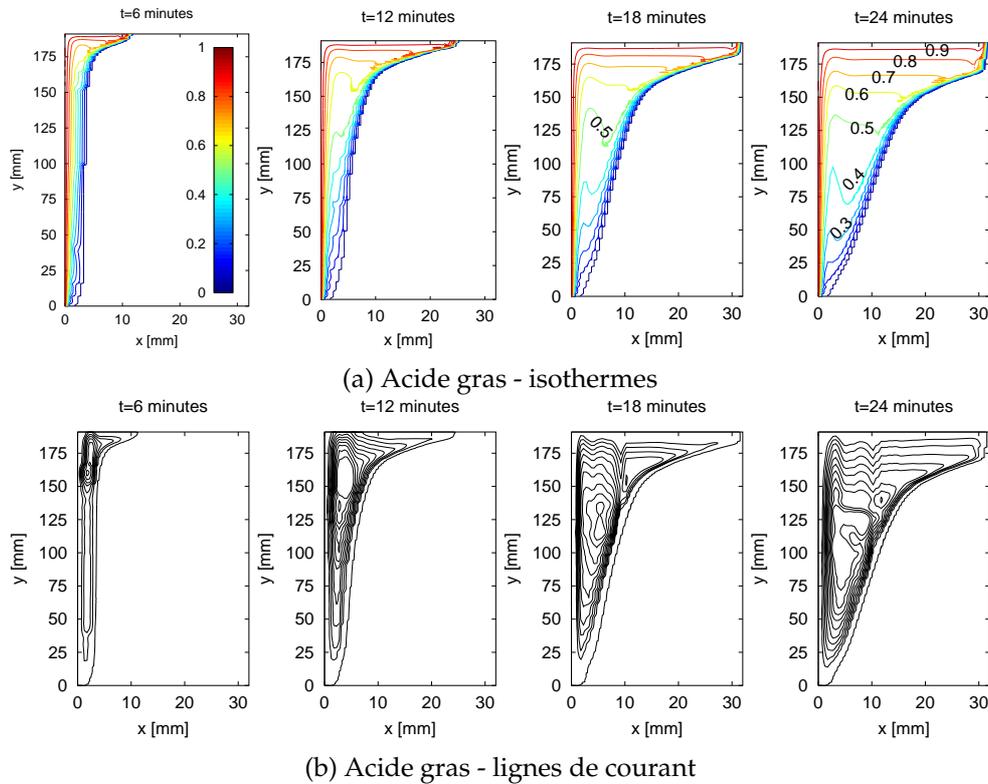


FIGURE 3.20: Acide gras - isothermes et lignes de courant

Les résultats qui suivent correspondent à 64×382 nœuds et $\tau = 0.53$. Sur les FIGS. 3.20a et 3.20b, nous présentons les isothermes et lignes de courant à 6, 12, 18 et 24 minutes. À 6 minutes, les isothermes sont déformées sur toute la hauteur de l'enceinte, ce qui indique que nous sommes déjà dans le régime dominé par la convection. Le minimum du nombre de Nusselt (la fin du régime mixte) est atteint au temps :

$$\theta_{\min} \approx 9 \text{Ra}^{-1/2} = 0.00015 \quad (t \simeq 219 \text{ s})$$

En effet, la convection est déjà dominante et les isothermes à 12, 18 et 24 minutes montrent l'avancement du front de fusion en haut de l'enceinte.

Sur la FIG. 3.20b, les lignes de courant à 6 minutes montrent une petite cellule en haut de la cavité, à 175 mm de hauteur environ. À 12 minutes cette cellule s'est développée et montre que le fluide circule autour de 150 mm environ. À 18 et 24 minutes le gradient de températures imposé par les isothermes à 0.5 et 0.4 produit l'écoulement complexe montré par les lignes de courant entre 75 et 125 mm de hauteur.

Comparons maintenant le flux et la fraction fondue, avec et sans convection. Sur la FIG. 3.21a nous présentons le flux sur la paroi chaude. Il est clair que la convection augmente les transferts thermiques. Ainsi, à 24 minutes le flux avec convection est environ trois fois le flux calculé par conduction seule. La courbe du flux montre également des oscillations comme pour la fusion de l'octadécane. Ces oscillations se présentent en début de fusion, durant le régime conductif et mixte. Elles sont produites par les nœuds qui sont en train de changer d'état et dont la température reste constante pendant que leur fraction liquide est inférieure à 0.5.

La FIG. 3.21b montre le flux sur la paroi froide. Il est à peu près stable avant 15

3. Changement de phase avec convection naturelle

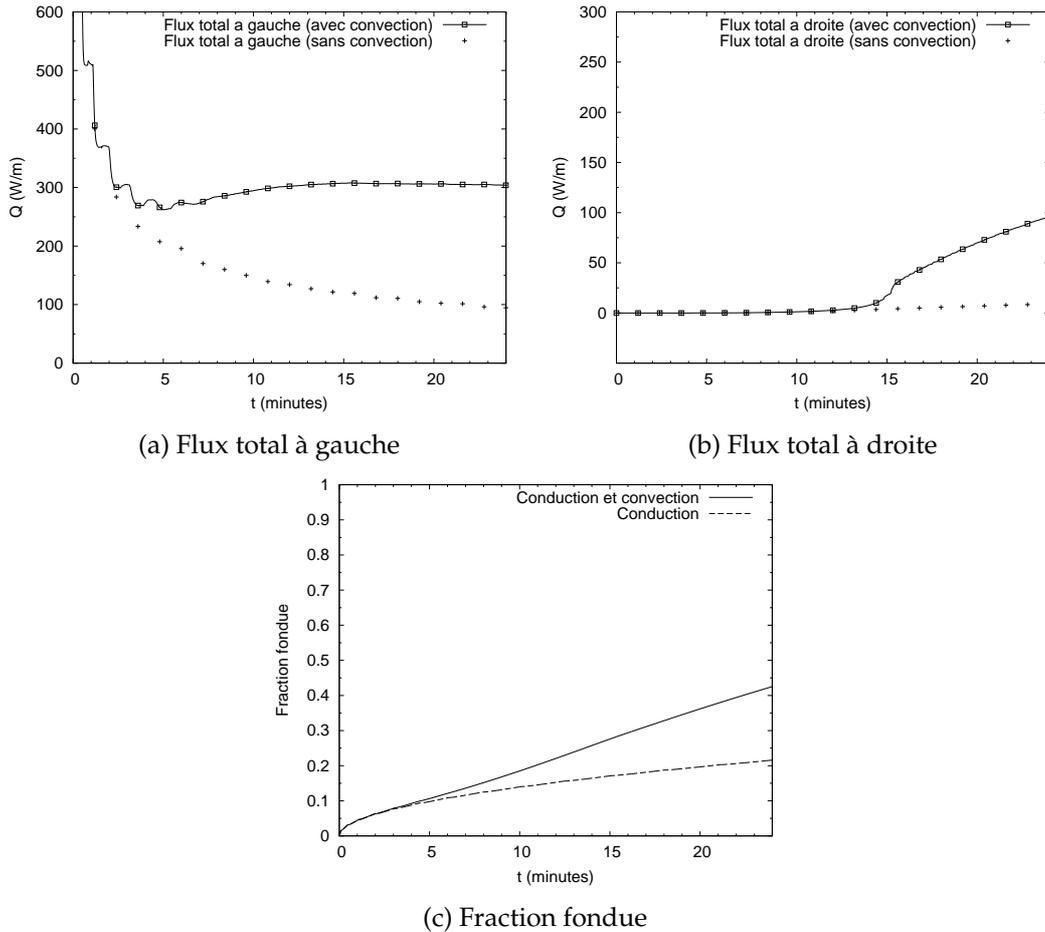


FIGURE 3.21: Acide gras - Flux et fraction fondue

minutes et augmente rapidement ensuite. Ce temps correspond à l'arrivée du front de fusion sur la paroi. Cette augmentation devrait être moins forte en réalité, car le fait d'avoir un nœud liquide très chaud à côté d'un nœud solide « froid » ferait augmenter artificiellement le gradient de température.

Enfin, la FIG. 3.21c montre à peu près le double de liquide dans le cas avec convection que le cas sans. À nouveau comme pour l'octadécane, cette courbe ne montre pas d'oscillations car la fraction liquide ne reste pas constante lors du changement d'état d'un nœud.

3.4 Conclusion

Ce chapitre a été dédié à la présentation et application du modèle pour la simulation du changement de phase avec convection naturelle. La résolution des équations gouvernantes se fait par une méthode hybride, couplant LB pour la solution du champ de vitesse et différences finies pour le champ de température. Différents problèmes de la littérature ont été traités pour la vérification du modèle (résolution correcte des équations). Premièrement, le problème de convection naturelle dans une cavité carré différentiellement chauffée, et deuxièmement, le problème de fusion avec convection naturelle aussi dans une cavité.

Pour la convection naturelle seule, les résultats avec trois nombres de Rayleigh différents ont été présentés, à savoir, $Ra = 10^4$, $Ra = 10^5$ et $Ra = 10^6$. Les isothermes montrent un gradient de températures importante près des parois et une stratification des températures au milieu de la cavité. Ces caractéristiques sont

d'autant plus marquées pour les grands Rayleigh $Ra = 10^6$. Par ailleurs, les lignes de courant montrent un écoulement symétrique, dont les vitesses sont importantes près des parois et le fluide circule autour d'un noyau au milieu de la cavité.

Pour le cas de fusion, différentes caractéristiques ont été identifiées suivant le type de matériau.

Pour l'étain (faible Prandtl) nous avons trouvé un écoulement pluricellulaire. D'après Hannoun [22, 24] l'écoulement pluricellulaire est la solution numérique correcte, au problème de fusion avec convection de l'étain. La méthode LB réussie à capturer ce phénomène. Cependant, le faible nombre de Prandtl, impose des contraintes importantes sur la discrétisation spatiale. Du fait du couplage de la discrétisation spatiale et temporelle de la LBM, les temps de relaxation doivent être petits, ce qui se traduit par un temps de calcul plus grand.

Pour la fusion de l'octadécane, nous avons trouvé quelques différences sur la position de l'interface, par rapport aux résultats de la littérature. D'ailleurs, aucune étude trouve des résultats identiques. Par ailleurs, le nombre de Nusselt montre des oscillations en début de fusion, lesquelles sont de nature numérique. Elles sont causées par l'évolution graduelle de la fraction liquide dans les nœuds devenant solides. Lorsque le nœud est « solide », c'est-à-dire que sa fraction liquide est inférieure à $f_L = 0.5$ alors sa température est constante, d'où un gradient constant durant certains intervalles de temps, en donnant une forme d'escalier à la courbe de Nusselt.

L'oscillation du Nusselt, provenant de la discrétisation, est moins importante pour la fusion de l'étain que pour la fusion de l'octadécane, en accord avec les résultats de Mencinger. Comme l'ont montré Le Quéré et Gobin [35], les fluides à faible Prandtl présentent des oscillations qui ne sont pas de nature numérique, mais proviennent de l'instabilité du régime conductif. Ces oscillations « physiques » ont une fréquence et une amplitude plus grandes, en se superposant aux oscillations numériques.

Concernant l'acide gras, les résultats sont de même nature que ceux obtenus pour l'octadécane, à savoir, une augmentation importante des transferts de chaleur et de la fraction fondue par rapport au cas sans convection.

En général, la fraction fondue est moins sensible à la discrétisation, que le nombre de Nusselt. Les maillages les plus grossiers prédisent une fraction liquide semblable, alors que, le nombre de Nusselt montre des écarts importants, avec les mêmes paramètres. Des résultats similaires ont été obtenus par Mencinger (voir Figures 14a et 14d).

Finalement ce chapitre a permis de caractériser l'influence de la convection naturelle lors du changement d'état solide/liquide du MCP de la brique Inertrans. Ces résultats montrent que la convection naturelle dans ce cas doit absolument être considérée. La paroi étant également soumise au rayonnement solaire diffus, il est par conséquent nécessaire d'évaluer l'impact du rayonnement. Aussi, les prochains chapitres se concentrent sur le développement du modèle de rayonnement, de sa validation par rapport à des résultats de la littérature et à l'analyse du rayonnement sur le MCP considéré dans cette étude.

Chapitre 4

Transferts radiatifs

Les résultats du chapitre précédent montrent que les transferts convectifs modifient sensiblement les transferts thermiques par rapport à une solution de conduction seule. Par conséquent, la convection ne devrait pas être négligée. D'ailleurs, en comparant avec les résultats existants, on s'aperçoit que la méthode de Boltzmann sur réseau permet des simulations de l'écoulement moins gourmandes en temps de calcul. Quelques travaux [88, 89] ont déjà étudié la possibilité d'appliquer la LBM aux transferts radiatifs également. Or, grâce à la flexibilité du modèle hybride utilisé, la partie radiative peut être résolue par un autre moyen.

Ce chapitre examine les méthodes de simulation du rayonnement. Pour cela, les phénomènes physiques mis en jeu dans les transferts radiatifs sont présentés dans la section 4.1. La section 4.2 aborde la modélisation du rayonnement, en introduisant notamment l'équation de transfert radiatif. Les études utilisant la méthode de LB pour les transferts couplés avec rayonnement sont présentées dans la section 4.3. Deux méthodes pour la résolution numérique de l'équation des transferts radiatifs, à savoir, la méthode des ordonnées discrètes et la méthode de Boltzmann sur réseau sont traitées dans les sections 4.4 et 4.5, respectivement. La comparaison des deux méthodes dans la section 4.6 permettra de choisir la plus pertinente pour l'application au cas des transferts couplés dans le chapitre 5.

4.1 Introduction

Le rayonnement émis par le soleil arrive sur la Planète suivant deux composantes. Une composante directe fortement orientée suivant une direction, et une composante diffuse sans direction privilégiée. Cette dernière est produite par la réflexion du sol et la déviation des rayons par les nuages ou d'autres obstacles.

Cette dépendance de la direction du rayonnement peut être caractérisée par la luminance I (*radiative intensity* en anglais), laquelle est définie comme le flux d'énergie radiative, par unité d'angle solide, et par unité de surface normale au rayonnement [90].

Outre son caractère directionnel, le rayonnement a un caractère spectral également, c'est-à-dire, il varie suivant la longueur d'onde. Dans le domaine du bâtiment, on distingue entre les courtes longueurs d'onde CLO et les grandes longueurs d'onde GLO. Les longueurs d'onde au-dessous de $2.5\mu m$ sont considérées courtes, et celles au-dessus sont les longues.

Au premier chapitre, nous avons parlé des matériaux isolants transparents dans le cadre de la paroi Inertrans. Plus précisément, le TIM de type homogène utilisé sur la face extérieure fait que le rayonnement solaire incident soit dispersé du fait

de la structure poreuse du matériau, qui produit des multiples réflexions. De ce constat, nous nous sommes orientés vers la modélisation du rayonnement diffus.

Le bilan d'énergie doit inclure maintenant le flux radiatif. À partir de la définition de la luminance, le flux net radiatif suivant la direction \hat{n} , normale à une surface, est donné par [90] :

$$q_r(\vec{x}, t) = \int_{4\pi} (\hat{n} \cdot \hat{s}) I(\vec{x}, \hat{s}, t) d\Omega$$

Où \vec{x} représente la position spatiale, \hat{s} est la direction angulaire, et Ω est l'angle solide. La variation de la luminance sur une direction angulaire quelconque est donnée par l'équation de transfert radiatif (ETR).

4.2 Équation des transferts radiatifs

Le flux radiatif est modifié par différents phénomènes, à savoir, l'absorption, la dispersion (ou diffusion) et l'émission du rayonnement. La diminution de ce flux suivant une direction \hat{s} est déterminée par le coefficient d'extinction β_e . Cela s'exprime par [91] :

$$dI = -\beta_e I ds \quad (4.1)$$

Cette diminution provient de l'absorption et la dispersion du rayonnement, alors, le coefficient d'extinction est définie comme la somme des coefficients d'absorption et diffusion :

$$\beta_e = \kappa_a + \sigma_s \quad (4.2)$$

En intégrant l'Éq. 4.1, entre 0 et s , nous obtenons :

$$\frac{I(s)}{I(0)} = \exp\left(-\int_0^s \beta_e(s^*) ds^*\right) \quad (4.3)$$

Qui exprime une décroissance exponentielle de la luminance, connue comme loi de Bouguer (ou loi de Bouguer-Lambert, ou loi de Beer également).

Si le rayonnement le long de la direction \hat{s} est en équilibre, l'énergie émise doit être égale à celle absorbée, alors, l'augmentation de la luminance par émission est proportionnelle au coefficient d'absorption κ_a [91] :

$$dI = \kappa_a I_b ds \quad (4.4)$$

Où I_b est la fonction de Planck, dépendante de la longueur d'onde et de la température locale :

$$I_b = \frac{\sigma_B T^4}{\pi} \quad (4.5)$$

La puissance du rayonnement est réduite par la dispersion sortante, pourtant, elle peut augmenter par la dispersion entrante, c'est-à-dire, la luminance dans une direction \hat{s}' déviée vers la direction \hat{s} en question. Pour prendre en compte l'augmentation de puissance grâce à cette dispersion entrante, la fonction de phase $\Phi(\hat{s}, \hat{s}')$, indique comment le milieu diffuse l'énergie (isotrope ou anisotrope). L'intégrale sur toutes les directions différentes de celle considérée, accompagnée du coefficient de dispersion σ_s , mesure la quantité d'énergie dispersée [91] :

$$\frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{4\pi, \hat{s} \neq \hat{s}'} I(\hat{s}') \Phi(\hat{s}, \hat{s}') d\Omega' \quad (4.6)$$

Enfin, le paramètre nommé albédo ω est le rapport entre extinction et dispersion.

$$\omega = \frac{\sigma_s}{\beta_e} \quad (4.7)$$

À présent il est possible d'identifier deux types de milieux suivant son comportement face au rayonnement. Un milieu non participatif est celui dans lequel, le rayonnement traversant n'est pas modifié, et au contraire, un milieu participatif est celui où le rayonnement est modifiée par l'extinction, l'émission ou la dispersion. Pour un milieu participatif, le bilan d'énergie radiative sur une direction quelconque \hat{s} est donné par l'équation de transfert radiatif (ÉQ. 4.8).

$$\hat{s} \cdot \vec{\nabla} I = -\beta_e I + \kappa_a I_b + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{4\pi, \hat{s} \neq \hat{s}'} I(\hat{s}') \Phi(\hat{s}, \hat{s}') d\Omega' \quad (4.8)$$

ou en utilisant la (4.2) et la (4.7) :

$$\hat{s} \cdot \vec{\nabla} I = \beta_e \left[-I + (1 - \omega) I_b + \frac{\omega}{4\pi} \int_{4\pi, \hat{s} \neq \hat{s}'} I(\hat{s}') \Phi(\hat{s}, \hat{s}') d\Omega' \right] \quad (4.9)$$

Il est clair maintenant, que l'ETR exprime le fait que l'énergie est diminuée par l'absorption et la dispersion sortante (*out-scattering*), et augmenté par l'émission et dispersion entrante (*in-scattering*). C'est une équation intégro-différentielle dépendante de la position \vec{x} , de la direction angulaire \hat{s} , et de la longueur d'onde λ . Il est évident que sa résolution est complexe et les méthodes numériques sont nécessaires.

Nous avons déjà parlé de la méthode des différences finies pour la résolution des équations aux dérivées partielles, notamment, pour la solution de l'équation de l'énergie. Les équations aux dérivées partielles ne sont donc pas le problème principal ici, mais les intégrales sur l'angle solide. Les méthodes numériques développées pour résoudre l'ETR se différencient suivant la façon de discrétiser l'angle solide.

On peut s'apercevoir des quelques ressemblances entre la problématique de résolution de l'équation de Boltzmann et la résolution l'équation de transfert radiatif. D'une part, l'équation de Boltzmann qui dépend de l'espace, des vitesses microscopiques et du temps, avec un terme de collision, qui indique l'interaction entre particules ; et d'autre part, l'ETR qui dépend de l'espace, de l'angle solide et du temps (pour des applications très précises, comme le nucléaire), avec un terme de dispersion représentant la déviation des photons de leur parcours. Nous pourrions assimiler les directions de vitesse microscopique et le terme de collision dans l'équation de Boltzmann, aux directions sur l'angle solide et au terme de dispersion de l'ETR.

Grâce aux ressemblances citées entre l'équation de Boltzmann et l'ETR, il existe des travaux proposant la résolution des transferts radiatifs en utilisant la méthode de LB. Nous allons en parler dans la section suivante.

4.3 Bibliographie concernant le couplage rayonnement et LBM

Nous avons déjà présenté des travaux utilisant la méthode LB pour les problèmes de transferts couplant conduction et convection, ainsi que convection et changement de phase. Les études qui utilisent la méthode LB pour les transferts avec rayonnement sont moins nombreux, et en général, elles appliquent

une approche hybride dont la partie radiative est résolue par les méthodes « conventionnelles » telles que la méthode des ordonnées discrètes (MOD) [92] ou les volumes finis [93]. La seule étude employant la méthode LB pour résoudre les transferts radiatifs est celle d'Asinari *et al.* [88]. Nous allons parler plus en détail de ces travaux, pour évaluer leur possible application à notre étude.

Parida *et al.* [92] appliquent la méthode LB à la solidification 1D d'une couche plane en considérant des effets radiatifs. Le matériau, initialement au-dessus de la température de fusion, est soumis de part et d'autre aux conditions de l'environnement, notamment une température au-dessous de la température de fusion qui entraîne son refroidissement. Ils ont alors étudié ce refroidissement par rayonnement. Le flux radiatif est calculé par la MOD, puis introduite dans l'équation de l'énergie, laquelle est résolue par la méthode LB. Les résultats obtenus ont été comparés avec ceux issus d'une solution par volumes finis. Cette comparaison montre des résultats identiques avec les deux méthodes et d'après les auteurs, les temps de CPU sont « comparables » mais aucune information précise n'est donnée.

Mishra *et al.* [94] étudient également les effets radiatifs lors de la solidification d'un matériau semi-transparent. Compte tenue de l'étude précédente en 1D, ils étudient le cas 2D en utilisant une méthode aux volumes finis pour la solution de l'ETR. Ces auteurs ont considéré un milieu rectangulaire avec des propriétés d'absorption, transmission et réflexion constantes et égales pour les phases liquide et solide. Les parois sont toutes à une température au-dessus de la température de fusion sauf la paroi nord, qui se trouve au-dessous de la température de fusion en entraînant la solidification du matériau. Le changement de phase a été traité par la formulation enthalpique. Ils ont étudié l'influence des propriétés radiatives sur l'évolution du processus de solidification. En comparant différentes valeurs du coefficient d'extinction ($\beta_e = 0.1, 1.0$ et 3.0), leurs résultats montrent que la vitesse de solidification (l'avancement de l'interface solide-liquide) diminue avec l'augmentation du coefficient d'absorption.

Asinari *et al.* [88] ont étudié le cas d'une enceinte rectangulaire remplie d'un milieu homogène, absorbant, émettant et dispersant. Les propriétés radiatives ont été supposées indépendantes de la longueur d'onde. Les transferts de chaleur ne se font que par rayonnement (dit équilibre radiatif). La discrétisation qu'ils proposent suppose que toutes les luminances reposent sur le plan xy (figure 4.1c), au lieu d'être en dehors du plan, mais symétriques comme dans la MOD (figure 4.1b). Cela entraîne évidemment des erreurs, comme le remarquent les propres auteurs. Ces erreurs diminuent en raffinant le maillage et en augmentant le nombre de directions, cependant, pour aller au-delà, il est nécessaire de introduire une discrétisation de l'angle polaire θ .

Dans la section qui suit, nous allons présenter la méthode des ordonnées discrètes (MOD), méthode assez connue et utilisée depuis longtemps pour la solution de l'ETR. Cette méthode servira de base à la présentation de la LBM appliquée à la solution de l'ETR, dans la section 4.5.

4.4 Méthode des ordonnées discrètes

Le principe de la méthode des ordonnées discrètes est de remplacer les intégrales sur l'angle solide par des sommes pondérées, en utilisant un nombre réduit de directions. Ainsi, le flux est remplacé par [90] :

$$q_r(\vec{x}, t) = \int_{4\pi} (\hat{n} \cdot \hat{s}) I(\vec{x}, \hat{s}, t) d\Omega \approx \sum_{m=1}^M (\hat{n} \cdot \hat{s}) I_m w_m \quad (4.10)$$

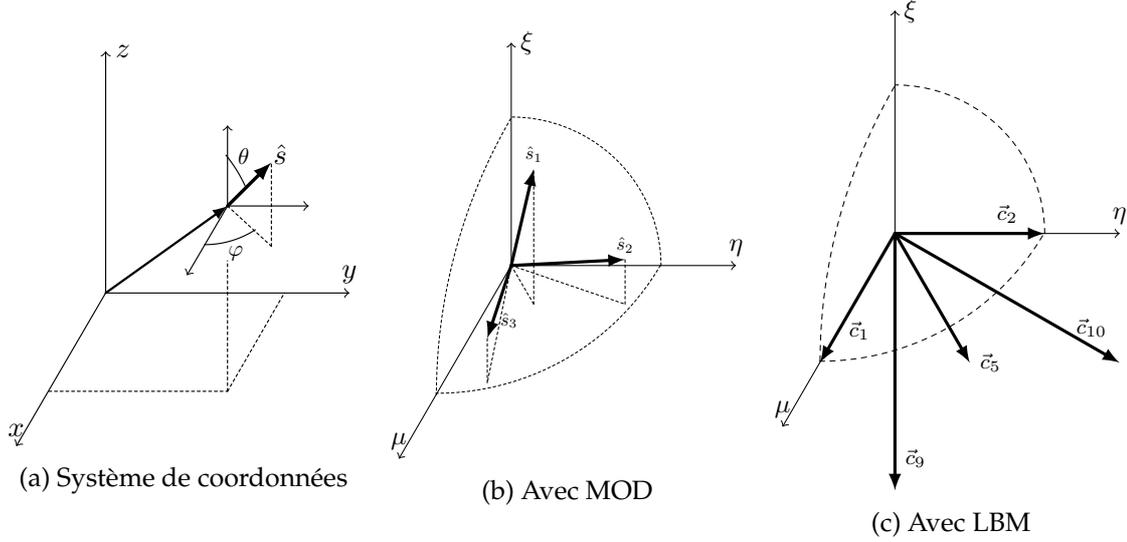


FIGURE 4.1: Discretisation angulaire suivant la méthode

Évidemment, nous devons connaître au préalable le champ de luminances, c'est-à-dire, résoudre l'ETR. La solution numérique de l'ETR se fait sur un ensemble de directions (ordonnées) choisies, lesquelles doivent satisfaire certaines conditions dont nous parlerons dans la Section 4.4.1. L'orientation des ordonnées est définie par les angles polaire θ et azimutal φ comme montré sur la FIG. 4.1a. En écrivant l'ETR en 2D avec m comme indice pour la direction, nous avons :

$$s_{mx} \frac{\partial I_m}{\partial x} + s_{my} \frac{\partial I_m}{\partial y} = \beta_e (-I_m + S) \quad (4.11)$$

Où s_{mx} et s_{my} correspondent aux cosinus directeurs de l'ordonnée s_m . Comme $m = 1 \dots M$, il s'agit d'un système d'équations différentielles. Le terme S est une source comprenant l'émission et la dispersion entrante :

$$S = (1 - \omega)I_b + \omega \int_0^{4\pi} I'_m \Phi_{mm'} d\Omega'_m$$

En 2D, le schéma de la FIG. 4.2 permet d'exprimer l'ÉQ. 4.11 de façon discrète :

$$s_{mx} \left(\frac{I_{i+1/2,j,m} - I_{i-1/2,j,m}}{\Delta x} \right) + s_{my} \left(\frac{I_{i,j+1/2,m} - I_{i,j-1/2,m}}{\Delta x} \right) = \beta_e (-I_{i,j,m} + S_{i,j}) \quad (4.12)$$

Les conditions aux limites déterminent la valeur des luminances aux parois. Par exemple, pour la maille en sombre de la FIG. 4.2, les valeurs de $I_{i-1/2,j}$ et de $I_{i,j-1/2}$ sont données comme conditions aux limites. Or, nous voulons connaître le champ des luminances au centre de la maille ($I_{i,j}$), mais nous ne connaissons ni les luminances de la face est ($I_{i+1/2,j}$) ni celles de la face nord ($I_{i,j+1/2}$) pour la maille en question. Nous avons donc deux inconnues et une équation. Pour résoudre le problème, nous utilisons une interpolation qui relie les valeurs connues et inconnues ainsi [95] :

$$I_{i,j} = \gamma I_{\text{inconnue}} + (1 - \gamma) I_{\text{connue}} \quad (4.13)$$

En remplaçant les luminances inconnues de l'ÉQ. 4.12 par l'ÉQ. 4.13, nous obtenons l'expression suivante pour $I_{i,j}$:

$$I_{i,j,m} = \frac{s_{mx} I_{i-1/2,j,m} + s_{my} I_{i,j-1/2,m} + \gamma \beta_e S_{i,j} \Delta x}{s_{mx} + s_{my} + \gamma \beta_e \Delta x} \quad (s_{mx} > 0, s_{my} > 0) \quad (4.14)$$

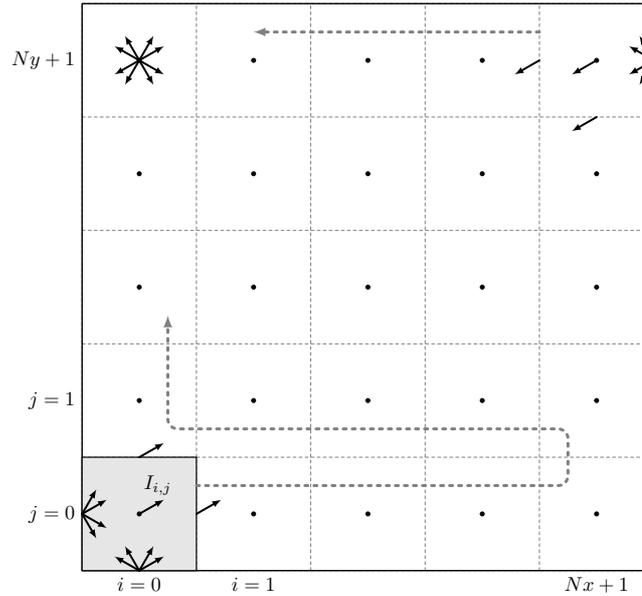


FIGURE 4.2: Schéma pour le calcul du champ des luminances en 2D

Le choix du coefficient d'interpolation donne lieu à différents schémas, avec leurs propres avantages et inconvénients qui seront discutés dans la section 4.4.2.

Une fois calculée $I_{i,j}$, nous calculons $I_{i+1/2,j}$ en utilisant l'ÉQ. 4.13 ; cette valeur sera l'entrée pour le calcul de la luminance du nœud voisin $I_{i+1,j}$. La procédure continue de gauche à droite pour toutes les directions dont le cosinus directeur est positif ($s_{mx} > 0$). Pour les directions négatives ($s_{mx} < 0$), nous prenons la valeur absolue et la procédure est identique, mais nous avançons de droite à gauche en commençant par la condition limite de la paroi est. Ce processus se répète pour toutes les directions m jusqu'à obtenir le champ de luminances sur chaque point.

4.4.1 Choix des ordonnées

Les directions des ordonnées et leur poids sont contraints par des propriétés dictées par la physique du rayonnement.

Premièrement, il est habituel que le groupe d'ordonnées soit symétrique. En effet, s'il n'y pas un sens privilégié de propagation du rayonnement, le choix des directions doit assurer l'isotropie, et par conséquent, les directions doivent être symétriques.

Deuxièmement, de par la géométrie de l'angle solide, le moment zéro (la somme des poids), le premier moment (la somme du produit des cosinus directeurs et le poids), et le deuxième moment imposent les conditions suivantes [90] :

$$\sum_m w_m = 4\pi \quad (4.15a)$$

$$\sum_m w_m s_{m\alpha} = 0 \quad (4.15b)$$

$$\sum_m w_m s_{m\alpha} s_{m\beta} = \frac{4\pi}{3} \delta_{\alpha\beta} \quad (4.15c)$$

Sachant que les poids w_m correspondent à une discrétisation de l'angle solide, la première condition est évidemment que leur somme soit égale à 4π .

Par ailleurs, le fait que le flux sortant d'une surface ne couvre que la moitié de l'angle solide impose la condition suivante [96] :

$$\sum_{s_{m\alpha} > 0} s_{m\alpha} w_m = \pi \quad (4.16)$$

Un ensemble de 24 directions, nommé S_4 , satisfaisant ces conditions a été proposé par Truelove [96]. Les directions et poids de cet ensemble sont présentés dans le TAB. 4.1. D'autres ensembles existent et sont désignés génériquement par S_N , où l'indice $N = 2n$ indique le nombre n de latitudes occupées sur chaque octant, et le nombre total des directions est $M = N(N + 2)$ [95].

TABLE 4.1: Directions et poids de la quadrature S_4 [90]

Cosinus directeurs			Poids
s_x	s_y	s_z	w_m
0.2958759	0.2958759	0.9082483	0.5235987
0.2958759	0.9082483	0.2958759	0.5235987
0.9082483	0.2958759	0.2958759	0.5235987

4.4.2 Relations de fermeture

Sachant que les luminances sont positives par définition, une valeur négative n'a pas de sens physique. Par ailleurs, une valeur nulle n'est physiquement réelle que pour le cas d'un milieu absorbant ou pour une paroi à zéro degrés, par exemple. Suivant le choix du coefficient d'interpolation dans l'équation (4.13), différents problèmes peuvent apparaître, à savoir, des luminances négatives (nommées *undershoots* en anglais), des luminances surestimées (c'est-à-dire au-dessus de la luminance incidente, nommées *overshoots* en anglais) ou des oscillations [97].

Nous parlerons ici de trois approches pour l'interpolation : le schéma diamant, le schéma step et le schéma positif. Le schéma diamant utilise un coefficient d'interpolation $\gamma = 0.5$, alors, la luminance au centre de la maille est prise comme la moyenne des luminances aux faces. Le schéma step prend $\gamma = 1.0$, alors, la luminance au centre est égale à celle des faces, ce qui suppose que la luminance ne varie pas le long de la maille. Enfin, le schéma positif renvoie à zéro les luminances négatives produites dans certains cas par le schéma diamant.

Rappelons-nous de l'expression pour la luminance au centre de la maille (éq. 4.14). Pour un cas 1D sans diffusion elle s'écrit :

$$I_{i,j,m} = \frac{s_{mx} I_{i-1/2,j,m}}{s_{mx} + \gamma \beta_e \Delta x}$$

Ainsi en résolvant la (4.13) pour $I_{i,E}$ nous obtenons :

$$I_{i+1/2,j,m} = \frac{1}{\gamma} \left(\frac{s_{mx} I_{i-1/2,j,m}}{s_{mx} + \gamma \beta_e \Delta x} \right) - I_{i-1/2,j,m} \left(\frac{1}{\gamma} - 1 \right) \quad (4.17)$$

Avec le schéma diamant $\gamma = 0.5$ la (4.17) donne :

$$I_{i+1/2,j,m} = I_{i-1/2,j,m} \left(\frac{2s_{mx}}{s_{mx} + 1/2 \beta_e \Delta x} - 1 \right)$$

qui sera négative si $\frac{\beta_e \Delta x}{s_{mx}} > 2$.

Avec le schéma step $\gamma = 1.0$ la (4.17) donne :

$$I_{i+1/2,j,m} = \frac{s_{mx} I_{i-1/2,j,m}}{s_{mx} + \beta_e \Delta x}$$

qui sera toujours positive.

Comme dit précédemment, le schéma positif remédie les luminances négatives du schéma diamant, pourtant, il a été montré qu'en 2D ce schéma peut surestimer la valeur des luminances (*overshoots*) [97].

D'après Chai, Patankar et Lee [97], le schéma step est recommandé pour les calculs en coordonnées cartésiennes si la simplicité du calcul est privilégiée. Même si d'autres schémas ont été proposés, ils demandent un effort additionnel en programmation sans assurer des résultats physiquement cohérents, donc nous ne parlerons pas de ces autres schémas.

4.5 Méthode de Boltzmann sur réseau pour l'ETR

Le schéma de Boltzmann sur réseau pour la simulation des transferts radiatifs correspond à une discrétisation particulière de l'équation des transferts radiatifs. La discrétisation angulaire donnée par les schémas du type S_N est bien établie et les résultats sont satisfaisants avec un nombre relativement petit d'ordonnées [96] (24 ordonnées pour le S_4 , par exemple). Les directions et poids sont tabulés et se trouvent facilement dans la littérature (voir par exemple [90]). Quand on souhaite étudier l'évolution de la luminance suivant une direction différente de celles tabulées, il est nécessaire de faire des interpolations, de construire un ensemble d'ordonnées que satisfassent les contraintes signalées dans la section 4.4.1, ou bien de recourir à une autre méthode, comme par exemple les volumes finis qui permettent une discrétisation arbitraire de l'angle solide [98].

Les ordonnées de la quadrature S_N ne sont pas en accord avec les directions utilisés dans la méthode LB. Pour résoudre l'ETR suivant la discrétisation des vitesses de la LBM, il est alors nécessaire de construire la quadrature. Mishra *et al.* [99] ont proposé une méthode des ordonnées discrètes admettant un choix libre des directions. À partir de cette méthode, Asinari *et al.* [88] ont développé le schéma LB de résolution de l'ETR, lequel nous décrirons dans la suite.

Le point de départ est l'équation des transferts radiatifs :

$$\vec{s} \cdot \vec{\nabla} I = \beta_e (-I + S)$$

où, \hat{s} est un vecteur unitaire indiquant une direction quelconque de propagation du rayonnement, et S est un terme source qui prend en compte l'émission et les luminances provenant d'autres directions vers la direction considérée. Si nous utilisons les directions du réseau LB pour créer des vecteurs unitaires et \hat{s} est remplacé par ces nouveaux vecteurs, l'ETR s'écrit :

$$\vec{c}_i \cdot \vec{\nabla} I_i = |\vec{c}_i| \beta_e (-I_i + S)$$

où le module de la vitesse $|\vec{c}_i|$ a été passé à droite de l'équation, pour que la discrétisation soit en accord avec celle de la méthode LB. La résolution de cette équation peut se faire par une procédure itérative. Or, il est possible de la résoudre également en ajoutant un faux terme transitoire pour résoudre le problème en régime permanent. Cette approche a été appliquée par exemple par De Vahl Davis [77], pour trouver la solution en régime permanent du problème de convection naturelle dans une enceinte. En suivant alors la même approche :

$$\frac{\partial I_i}{\partial t} + \vec{c}_i \cdot \vec{\nabla} I_i = |\vec{c}_i| \beta_e (-I_i + S)$$

La partie gauche de cette équation peut être discrétisée en faisant un développement en série de Taylor avec $\Delta \vec{x} = \vec{c}_i \Delta t$. Ainsi nous arrivons à :

$$\frac{I_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - I_i(\vec{x}, t)}{\Delta t} = |\vec{c}_i| \beta_e (-I_i(\vec{x}, t) + S(\vec{x}, t))$$

Dans cette équation, le terme source S et le produit $|\vec{c}_i| \beta_e$ peuvent être assimilés à la distribution d'équilibre et au temps de relaxation de la méthode LB, respectivement. L'équation de Boltzmann sur réseau pour les transferts radiatifs est alors donnée par :

$$I_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - I_i(\vec{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} (I_i(\vec{x}, t) - I_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)) \quad (4.18)$$

4.6 Comparaison des méthodes pour le rayonnement

Nous avons parlé de deux méthodes numériques pour la solution de l'ETR, à savoir, la MOD et la LBM. La LBM a été déjà appliquée à la résolution du champ de vitesses en convection naturelle. Utiliser la même discrétisation pour l'écoulement et les transferts radiatifs pourrait éventuellement réduire le temps de calcul.

Avant de se lancer sur le couplage rayonnement, convection et changement de phase, la performance des deux méthodes présentées va être étudiée dans le cas de transfert radiatif pur (appelé équilibre radiatif).

Du côté de la MOD, la quadrature S_4 à 24 directions est utilisée. En 2D, la symétrie des ordonnées permet de n'utiliser que la moitié des directions, tout en multipliant le poids par deux.

Quant à la LBM, Asinari *et al.* [88] ont proposé les réseaux D2Q8, D2Q16 et D2Q32, à 8, 16 et 32 directions, respectivement. Ici, il faut faire attention à l'ensemble utilisé, car le choix est un compromis entre précision spatiale et angulaire. En effet, l'erreur due à la discrétisation angulaire diminue en augmentant le nombre de vitesses. Pourtant, cela implique des luminances qui se propagent plus d'un pas d'espace et par conséquent, une moindre précision de l'étape de propagation. Or, avec un nombre plus petit de vitesses, la discrétisation angulaire est plus grossière et par conséquent, la collision l'est également. En outre, d'après les résultats numériques d'Asinari *et al.* l'amélioration entre 16 et 32 vitesses n'est pas importante. Nous nous bornerons alors à 8 et 16 vitesses.

4.6.1 Rayonnement dans une cavité

La FIG. 4.3 montre un schéma du cas simulé. Il s'agit d'une cavité carrée dont les quatre parois ont des températures imposées. La température initiale est égale à la température moyenne des quatre parois. Toutes les surfaces sont supposées noires, et le milieu se caractérise par un coefficient d'extinction $\beta_e = 5.0$.

La paroi sud est considérée chaude avec $T = 1$; les autres parois sont supposées froides avec $T = 0$.

4.6.2 Résultats

Afin de faire une étude du maillage, les simulations ont été faites avec trois maillages différents, $N_x = 100^2, 200^2$ et 400^2 . Nous avons comparé nos résultats avec ceux obtenus par une méthode des volumes finis FVM reportés dans [89]¹.

1. Merci à Pietro Asinari qui nous a fourni les données numériques

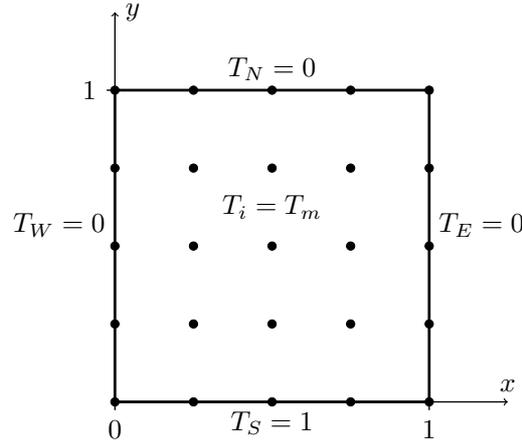


FIGURE 4.3: Schéma du cas test

Le flux total à la paroi sud, pour différents maillages, est calculé par :

$$\sum_i^N \Psi_i \Delta x \quad ; \quad \Psi_i = \frac{qR}{\sigma T_s^4}$$

où \$N\$ est le nombre de nœuds.

L'erreur est calculée par :

$$\text{err} = \left| \frac{\Psi_{\text{LBM}} - \Psi_{\text{FVM}}}{\Psi_{\text{FVM}}} \right|$$

où \$\Psi_{\text{FVM}}\$ est la solution par volumes finis, avec une discrétisation angulaire \$N_\delta = 32 \times N_\gamma = 16\$, et spatiale \$\Delta x = 0.0025\$. Pour rappel, avec le réseau D2Q8, \$N_\delta = 8 \times N_\gamma = 1\$.

Le flux le long de la paroi sud calculé avec différentes méthodes est montré sur la FIG. 4.4.

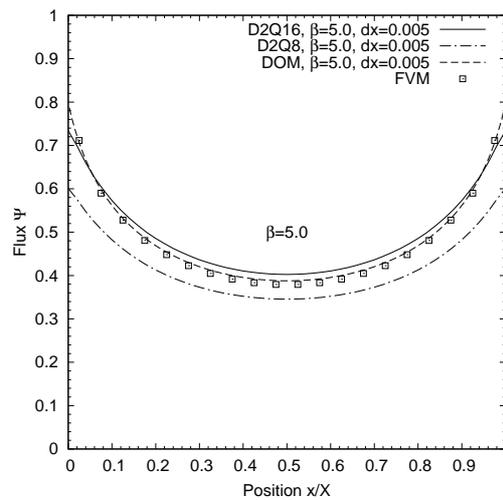


FIGURE 4.4: Flux adimensionnel sur la paroi sud

À partir de ces résultats, on constate que l'ordre de convergence est semblable pour toutes les méthodes et d'environ 1. Pourtant, l'erreur avec le réseau D2Q8 est assez importante > 10%. En revanche, l'erreur la plus petite est toujours obtenue

TABLE 4.2: Comparaison des méthodes

D2Q8				
Δx	Flux	Erreur (%)	Itérations	temps [s]
0.01	0.42202	11.93	939	3.68
0.005	0.41972	12.41	1777	28.20
0.0025	0.41856	12.65	3356	227.94
Ordre	0.988			
D2Q16				
Δx	Flux	Erreur (%)	Itérations	temps [s]
0.01	0.49804	3.93	755	5.21
0.005	0.49525	3.35	1425	43.30
0.0025	0.49386	3.06	2690	334.80
Ordre	1.005			
MOD				
Δx	Flux	Erreur (%)	Itérations	temps [s]
0.01	0.48606	1.43	119	1.96
0.005	0.48092	0.36	121	8.79
0.0025	0.47827	0.19	121	36.95
Ordre	0.956			

avec la MOD peu importe le maillage, toutefois, l'erreur avec le réseau D2Q16 reste acceptable $< 4\%$.

Par ailleurs, on constate que le nombre d'itérations avec le réseau D2Q16 est plus petit qu'avec le réseau D2Q8. Comme la discrétisation angulaire est plus fine, les erreurs sont plus petites à chaque itération et par conséquent, la solution converge plus vite.

Évidemment, le temps de calcul avec le réseau D2Q16 est plus grand qu'avec le D2Q8, car le nombre d'opérations arithmétiques est au moins doublé. Cette augmentation n'est pourtant pas très importante pour le maillage le plus grossier ($\Delta x = 0.01$).

4.7 Conclusion

Ce chapitre a présenté deux méthodes de résolution de l'équation de transfert radiatif (ETR) : la méthode des ordonnées discrètes (MOD) et la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM). Les limites et avantages de la MOD sont bien connus. En revanche, l'application de la LBM aux transferts radiatifs, en étant plus récente et moins connue, nécessite d'une évaluation judicieuse. Un cas test de transfert radiatif pur a été alors simulé afin de comparer la performance des deux méthodes. D'après les résultats obtenus, les calculs avec MOD se sont avérés plus précis et plus rapides.

Nous avons donc décidé de continuer avec la MOD pour la simulation des transferts radiatifs. Dans le chapitre qui suit nous ferons le couplage de cette méthode avec le modèle hybride, LBM pour le champ des vitesses et différences finies pour le champ des températures.

Chapitre 5

Changement de phase avec convection naturelle et rayonnement

Suite à la comparaison faite au chapitre précédent, la méthode des ordonnées discrètes (MOD) a montré une meilleure performance que la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM) pour la résolution de l'équation de transfert radiatif, en matière de temps de calcul ainsi que de précision sur le flux calculé, dans le cas des transferts radiatifs purs. Par conséquent, nous avons décidé d'utiliser la MOD pour les transferts couplés. Ce couplage des méthodes est d'ailleurs un des avantages du modèle hybride utilisé ici.

Ce chapitre présente la simulation du changement de phase en présence de convection naturelle et rayonnement, en couplant la méthode de LB pour la solution du champ de vitesses et la MOD pour la solution du champ de luminances. Comme cela a été fait au chapitre 3, nous commençons par un cas sans changement de phase dans la Section 5.1. Afin de vérifier notre modèle, nous utilisons des résultats de la littérature, notamment, le couplage convection-rayonnement grande longueur d'onde (GLO) dans une cavité remplie d'air. La Section 5.2 est dédiée au problème de fusion avec convection et rayonnement grande longueur d'onde (GLO), et la Section 5.3 étudie la fusion avec rayonnement courte longueur d'onde (CLO). Pour ce cas aucun résultat de la littérature n'est disponible pour vérifier notre modèle, donc nous évaluerons l'importance du rayonnement par rapport à la convection, et nous étudierons comment ce couplage modifie les transferts au sein du MCP. Enfin des conclusions clôturent le chapitre.

5.1 Modélisation de la convection et rayonnement grande longueur d'onde

Tout d'abord, nous allons vérifier le couplage convection et rayonnement sans changement de phase. Pour cela, nous ferons la simulation des transferts couplés convection naturelle et rayonnement GLO dans une cavité différentiellement chauffée, cas pour lequel on trouve des études de référence dans la littérature.

5.1.1 Présentation du problème

Il s'agit d'une cavité carrée dont les parois verticales sont soumises à des températures imposées et les parois horizontales sont adiabatiques. L'émission

des parois est prise en compte et toutes les surfaces sont supposées noires (voir FIG. 5.1).

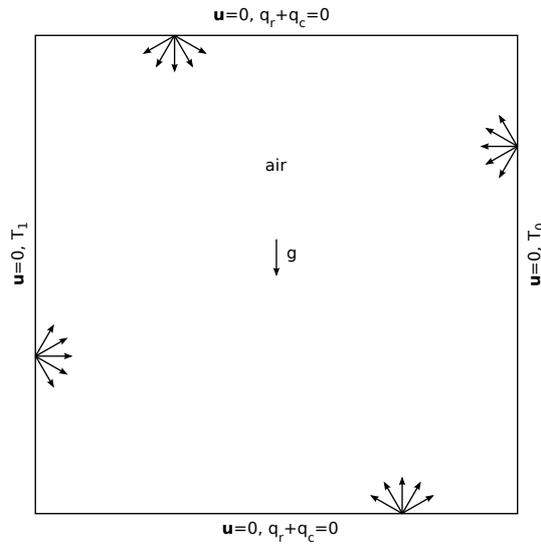


FIGURE 5.1: Schéma du problème de convection naturelle et rayonnement dans une cavité 2D différenciellement chauffée

La cavité est remplie d'air, lequel est considéré comme un milieu participatif sans dispersion du rayonnement, avec propriétés constantes et indépendantes de la longueur d'onde. Le rayonnement GLO émis par les parois est absorbé par l'air en augmentant sa température, et l'air émet à son tour. La divergence du flux radiatif, représentant le bilan entre absorption et émission de l'air, est un nouveau terme source dans l'équation de l'énergie. En supposant un fluide Newtonien sous l'hypothèse de Boussinesq, les équations de conservation sont :

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0 \quad (5.1a)$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_\infty} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) \quad (5.1b)$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_\infty} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right) - g\beta (T - T_\infty) \quad (5.1c)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - \frac{1}{\rho_\infty c_p} \left(\frac{\partial q_{rx}}{\partial x} + \frac{\partial q_{ry}}{\partial y} \right) \quad (5.1d)$$

De nouveau, la solution numérique de ces équations se fait en divisant l'espace en plusieurs mailles. Or, le flux radiatif dans l'équation de l'énergie dépend du champ de luminances, lequel est donné par l'équation de transfert radiatif (ETR). Au total, il est nécessaire de résoudre les 4 équations 5.1 plus l'ETR. Comme le milieu absorbe et émet mais ne diffuse pas, son coefficient de diffusion (ou dispersion) est $\sigma_s = 0$. Ainsi, en utilisant les ÉQS. 4.2 et 4.7, l'équation de transfert radiatif (Éq. 4.8) s'écrit :

$$s_x \frac{\partial I}{\partial x} + s_y \frac{\partial I}{\partial y} = -\kappa_a I + \kappa_a I_b \quad (5.2)$$

Il est possible que les nœuds utilisés pour la solution des équations de conservation (5.1), soient différents de ceux utilisés pour la solution de l'ETR (5.2). Cela demanderait des interpolations afin d'avoir toute l'information sur les mêmes nœuds.

Puisque nous utilisons le *half-way bounce back* (cf. Section 2.3.4) comme condition aux limites de la méthode LB, la paroi est placée à mi-chemin des nœuds extrêmes (voir Section 2.3.4). Ainsi, les volumes qui entourent chaque nœud correspondent aux mailles utilisées dans la MOD (voir la FIG. 5.2) et par conséquent toutes les valeurs sont obtenues au même nœud.

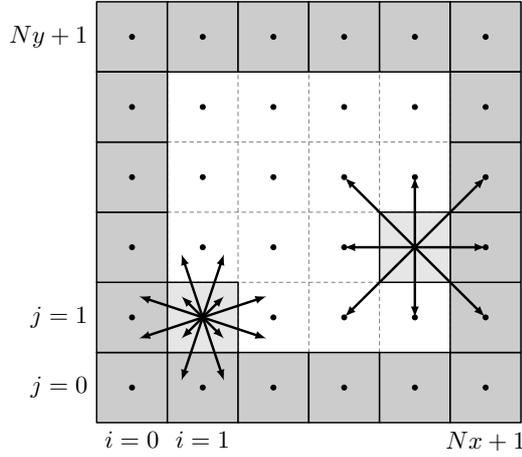


FIGURE 5.2: Schéma du maillage MOD et LBM

5.1.2 Équation des transferts radiatifs par la méthode des ordonnées discrètes

Le champ de luminances nécessaire pour déterminer le flux radiatif s'obtient par la résolution de l'équation de transfert radiatif. Pour cela, nous utiliserons la forme adimensionnelle de l'ÉQ. 5.2. Pour l'adimensionnement nous utilisons les quantités suivantes comme référence :

$$x^* = \frac{x}{H} \quad I^* = \frac{I}{\sigma_B T_m^4}$$

Une fois adimensionnée, la forme discrète de l'ÉQ. 5.2 suivant le schéma de la FIG. 5.2 est :

$$s_{mx} \left(\frac{I_{i+1/2,j,m}^* - I_{i-1/2,j,m}^*}{\Delta x^*} \right) + s_{my} \left(\frac{I_{i,j+1/2,m}^* - I_{i,j-1/2,m}^*}{\Delta x^*} \right) = -\kappa_a I_{i,j,m}^* + \kappa_b I_{b,i,j}^* \quad (5.3)$$

Dans cette équation, $I_{i-1/2,j}^*$ et $I_{i,j-1/2}^*$ sont données par les conditions aux limites et les valeurs de $I_{i+1/2,j,m}^*$ et $I_{i,j+1/2,m}^*$ sont définies par la relation (4.13). Ainsi, nous obtenons l'expression suivante pour le calcul de la luminance au nœud (i, j) suivant une direction m :

$$I_{i,j,m}^* = \frac{s_{mx} I_{i-1/2,j,m}^* + s_{my} I_{i,j-1/2,m}^* + \kappa_b I_{b,i,j}^* \Delta x^*}{s_{mx} + s_{my} + \kappa_a \Delta x^*} \quad (s_{mx} > 0, s_{my} > 0) \quad (5.4)$$

Une fois le champ de luminances déterminé, la divergence du flux radiatif en chaque nœud se détermine par :

$$\left(\frac{\partial q_{rx}^*}{\partial x^*} + \frac{\partial q_{ry}^*}{\partial y^*} \right)_{i,j} = \kappa_a H \left(4\pi I_b^* - \sum_{m=1}^{M=12} I_{i,j,m}^* 2w_m \right) \quad (5.5)$$

Du fait de la symétrie des ordonnées utilisées, la somme des luminances se fait sur la moitié des directions, tout en faisant attention à multiplier leur poids par deux.

5.1.3 Équation de l'énergie par la méthode des différences finies

Comme a été fait au chapitre 3, l'équation de l'énergie est discrétisée avec un schéma explicite en temps. Ainsi, la discrétisation de l'Éq. 5.1d s'écrit :

$$T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n - \left[u_x^n \frac{\partial}{\partial x} T^n + u_y^n \frac{\partial}{\partial y} T^n \right]_{i,j} + \alpha_{LB} \left[\frac{\partial^2 T^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T^n}{\partial y^2} \right]_{i,j} - \left(\frac{1}{\rho c_p} \right)_{LB} \left[\frac{\partial q_{rx}}{\partial x} + \frac{\partial q_{ry}}{\partial y} \right]_{i,j}$$

Afin de déterminer le paramètre $(1/\rho c_p)_{LB}$, il est utile d'écrire l'Éq. 5.1d de façon adimensionnelle. Pour cela, nous utilisons les grandeurs suivantes :

$$x^* = \frac{x}{H} \quad T^* = \frac{T - T_m}{\Delta T} \quad q_r^* = \frac{q_r}{\sigma_B T_m^4} \quad I^* = \frac{I}{\sigma_B T_m^4}$$

où $\Delta T = T_W - T_E$ et $u_\infty = \sqrt{g\beta\Delta T}$. Avec ces paramètres, l'équation de l'énergie s'écrit :

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + u_x \frac{\partial T^*}{\partial x^*} + u_y \frac{\partial T^*}{\partial y^*} = \frac{1}{\sqrt{Ra} Pr} \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) - \frac{1}{PL \sqrt{Ra} Pr} \left(\frac{\partial q_{rx}^*}{\partial x^*} + \frac{\partial q_{ry}^*}{\partial y^*} \right)$$

Pour ce problème, le nouveau terme source associé aux transferts radiatifs fait ressortir un autre nombre adimensionnel, le nombre de Planck. Celui-ci est le rapport entre les transferts par conduction et les transferts par rayonnement :

$$PL = \frac{\kappa \Delta T / H}{q_{r\infty}} \quad (5.6)$$

où $q_{r\infty}$ est un flux radiatif de référence. Ainsi, pour garder le numéro de Planck, sachant que $\alpha = \kappa / \rho c_p$, le paramètre $(1/\rho c_p)_{LB}$ est donné par :

$$\Rightarrow \frac{1}{(\rho_\infty c_p)_{LB}} = \frac{\alpha_{LB} \Delta T_{LB}}{N_y (q_{r\infty})_{LB}} \frac{1}{PL} \quad (5.7)$$

Par ailleurs, le flux radiatif calculé par la MOD est donné sous forme adimensionnelle, alors que les températures, les vitesses, les gradients et le flux, de l'équation de l'énergie sont en unités LB (voir Section 3.1.2). Encore une fois, l'analyse dimensionnelle permet de retrouver le lien entre les différents types d'unités :

$$\frac{\partial q_r^*}{\partial x^*} = \frac{\partial q_r}{\partial x} \frac{H}{q_{r\infty}} = \left(\frac{\partial q_r}{\partial x} \right)_{LB} \frac{N_y}{(q_{r\infty})_{LB}}$$

Le même raisonnement s'appliquant à $\frac{\partial q_r^*}{\partial y^*}$. Si nous remplaçons cet expression dans l'équation de l'énergie discrétisée et en posant $\Delta T_{LB} = \Delta T^* = 1$, nous obtenons :

$$T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n - \left[u_x^n \frac{\partial}{\partial x} T^n + u_y^n \frac{\partial}{\partial y} T^n \right]_{i,j} + \alpha_{LB} \left[\frac{\partial^2 T^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T^n}{\partial y^2} \right]_{i,j} - \frac{\alpha_{LB}}{N_y N_y PL} \left[\frac{\partial q_{rx}^*}{\partial x^*} + \frac{\partial q_{ry}^*}{\partial y^*} \right]_{i,j} \quad (5.8)$$

Celle-ci est l'équation que nous utilisons pour le calcul du champ de températures.

5.1.4 Conditions aux limites

Pour la condition de température imposée, nous utilisons une expression identique à celle donnée dans la Section 3.1.4 (Éq. 3.13).

Pour la condition adiabatique, cette fois-ci, nous devons prendre en compte le flux radiatif. Exprimons cette condition sous forme adimensionnelle :

$$\begin{aligned} -\kappa \frac{\partial T}{\partial y} + q_r &= 0 \\ -\kappa \frac{\Delta T}{H} \frac{\partial T^*}{\partial y^*} + q_r^* \sigma_B T_m^4 &= 0 \\ \Rightarrow \frac{\partial T^*}{\partial y^*} &= q_r^* \underbrace{\frac{H \sigma_B T_m^4}{\kappa \Delta T}}_{\frac{1}{\text{PL}}} \end{aligned}$$

Cela veut dire que pour notre simulation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial T^*}{\partial y^*} &= \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{\text{LB}} \frac{N_y}{\Delta T_{\text{LB}}} = \frac{q_r^*}{\text{PL}} \\ \Rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{\text{LB}} &= q_r^* \frac{\Delta T_{\text{LB}}}{N_y \text{PL}} \end{aligned}$$

Ainsi, en utilisant l'expression du gradient donnée dans la Section 3.1.4 (Équation 3.11) et pour mémoire $\Delta T_{\text{LB}} = 1$, nous arrivons enfin à :

$$T_{0,j} = \frac{21T_{1,j} + 3T_{2,j} - T_{3,j} - q_r^* \frac{1}{N_y \text{PL}}}{23} \quad (5.9)$$

Comme les surfaces sont supposées noires, les conditions aux limites de l'ETR correspondent à l'émission des parois. Cela s'écrit sous forme adimensionnelle :

$$I_b^* = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{T}{T_m} + 1 \right)^4 \quad (5.10)$$

Il faut noter toutefois que pour les parois horizontales la température n'est pas imposée comme pour les parois verticales. Nous avons besoin de cette température pour le calcul de l'émission (Éq. 5.10). Pour déterminer cette température, nous utilisons les expression de la Section 3.1.4 et nous obtenons :

$$T_{\text{paroi}} = \frac{3T_{i,0} + 6T_{i,1} - T_{i,2}}{8} \quad (5.11)$$

5.1.5 Algorithme de résolution

Maintenant que les équations gouvernantes sont discrétisées, nous présentons l'algorithme pour la résolution (voir FIG. 5.3).

1. Calcul des paramètres de la simulation en fonction des nombres adimensionnels, du nombre de nœuds et du temps de relaxation : Éqs. (3.3), (3.5) et (5.7)
2. Initialiser les fonctions de distribution à leur valeur d'équilibre (Éq. 2.19)
3. La température initiale est égale à la température moyenne de la cavité
4. Faire le calcul des vitesses (Éq. 2.20b)
5. Boucle pour les calcul radiatifs :

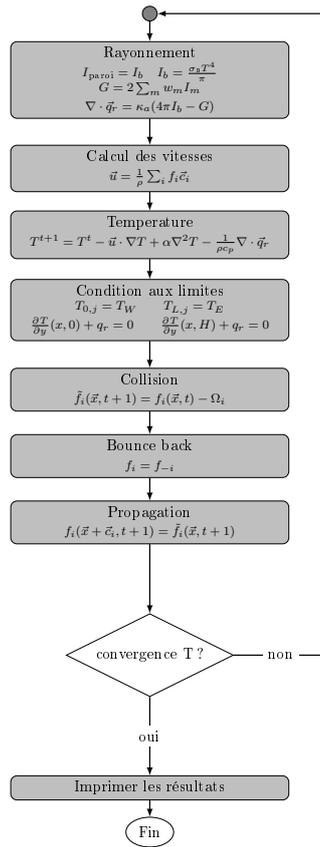


FIGURE 5.3: Diagramme de flux du problème de convection et rayonnement

- (a) La luminance aux frontières correspond à l'émission du corps noir (Éq. 5.10)
- (b) Calcul des luminances dans toute la cavité (Éq. 5.4)
- (c) Si les valeurs du champ des luminances entre deux itérations successives satisfont :

$$\max(|I^{n+1} - I^n|) \leq 1 \times 10^{-6}$$

alors aller au 6, sinon itérer depuis 5a

6. Calcul du flux radiatif (Éq. 5.5)
7. Calcul des températures à l'instant $n + 1$ par l'Éq. 5.8
8. Imposer les conditions aux limites (Éqs. 5.9 et 5.11)
9. Collision (Éq. 3.2a) des fonctions de distribution f_i dans les nœuds liquides et *bounce back* (Section 2.3.4) aux frontières solides
10. Propagation (Éq. 3.2b)
11. Vérifier le critère de convergence
 - si

$$\max\left(\left|\sqrt{(u_x^2 + u_y^2)^{n+1}} - \sqrt{(u_x^2 + u_y^2)^n}\right|, |T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n|\right) \leq 1 \times 10^{-6}$$

alors finir les calculs

- sinon, répéter depuis 4

5.1.6 Résultats

Nous comparons le Nusselt à la paroi chauffée. Pour ce cas, le nombre de Nusselt se compose d'un apport convectif et un apport radiatif ainsi :

$$\text{Nu} = \int_0^1 \left[\underbrace{-\frac{\partial T^*}{\partial x^*}}_{\text{Nu}_c} + \underbrace{\frac{q_r^*}{\text{PL}}}_{\text{Nu}_r} \right] dy^*$$

Puisqu'il n'existe pas de solution exacte pour ce problème, les isothermes obtenues sont comparées avec celles de Moufekkik *et al.* [100] sur la FIG. 5.4. Les isothermes sont semblables près des parois. Par contre, les différences les plus importantes se trouvent au cœur de la cavité.

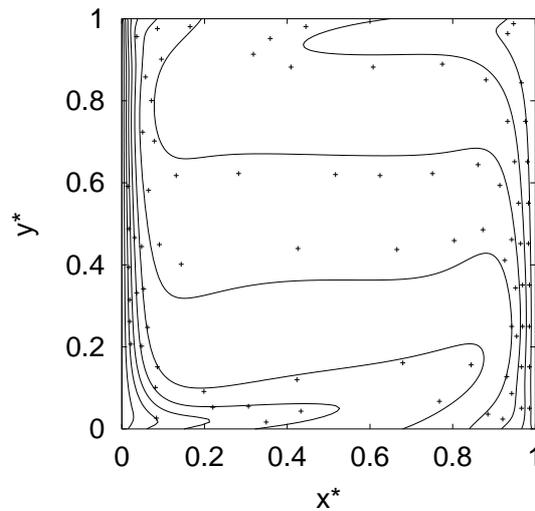


FIGURE 5.4: Convection et rayonnement GLO - comparaison des Isothermes avec $\kappa_a = 5.0$ et 150×150 nœuds

Afin d'avoir une mesure quantitative de l'erreur dans nos solutions, nous avons fait une étude de convergence du maillage (voir TAB. 5.1). Nous utilisons l'indice de convergence de maillage GCI (voir Annexe C) pour donner une plage d'erreur suivant le maillage utilisé. L'erreur (le GCI) montrée dans le TAB. 5.1 correspond à la plus grande entre les deux, soit l'erreur sur Nu_c , soit l'erreur sur Nu_r . Pour tous les trois maillages, les erreurs sont inférieures à 5%. Ainsi, même pour le maillage le plus faible, les résultats sont acceptables.

TABLE 5.1: Étude du maillage du problème de convection et rayonnement GLO de l'air dans une cavité 2D - coefficient d'absorption $\kappa_a = 5.0$

Maillage	$\kappa_a = 5.0$			Ordre
	100 × 100	150 × 150	225 × 225	
Nu_c	7.9443	8.0145	8.0455	2.016
Nu_r	23.8310	23.7601	23.7030	0.534
GCI (%)	4.71	3.70	2.99	

Par ailleurs, on voit que l'ordre dans le calcul du Nu_r est < 1 , alors que pour le Nu_c est ~ 2 . Cela provient du couplage des différentes méthodes, car les résultats en rayonnement seuls avaient donné un ordre ~ 1 (voir Section 4.6, TAB. 4.2). On constate que le fait d'utiliser des méthodes avec ordres différents dégrade la solution, d'où, le faible ordre de convergence pour Nu_r .

N'ayant pas d'autres moyens pour vérifier le modèle couplé, nous continuerons avec la simulation du cas qui nous intéresse qui est la fusion avec convection naturelle et rayonnement de l'acide gras. Nous allons étudier l'influence des transferts radiatifs GLO premièrement, et CLO deuxièmement, sur le processus de fusion dans la brique Inertrans.

5.2 Fusion avec rayonnement grande longueur d'onde

On reprend ici le cas de l'acide gras présenté dans la Section 3.3 et dont les dimensions de la cavité et les propriétés du matériau sont sur le TAB. 3.9.

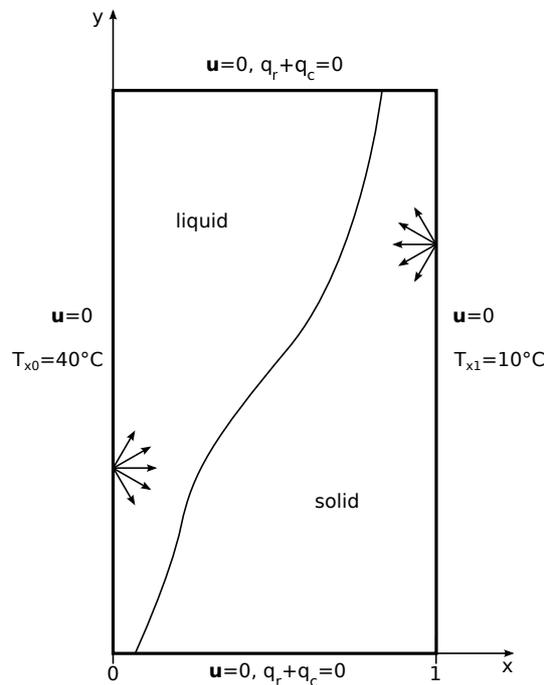


FIGURE 5.5: Schéma du problème de fusion de l'acide gras avec rayonnement GLO

Maintenant on s'intéresse aux effets du rayonnement GLO sur le processus de fusion. Un schéma avec les conditions aux limites est montré sur la FIG. 5.5. Le rapport de forme est $H/L \approx 6$. Avec les propriétés de l'acide gras et les conditions aux limites imposées, le problème se caractérise par les nombres adimensionnels suivants :

- Rayleigh $Ra = 3.66 \times 10^9$
- Stefan $Ste = 0.254$
- Prandtl $Pr = 112.9$

Faute des mesures des propriétés radiatives, nous utiliserons les propriétés de l'octadécane, lesquelles peuvent être trouvées dans la littérature [39]. Le coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde est montré sur la FIG. 5.6.

Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement sont identiques aux ÉQS. 5.1, sauf pour l'équation de l'énergie ÉQ. 5.1d. Le matériau est supposé absorbant et émettant. Les équations de l'énergie et de transferts radiatifs sont pour ce cas :

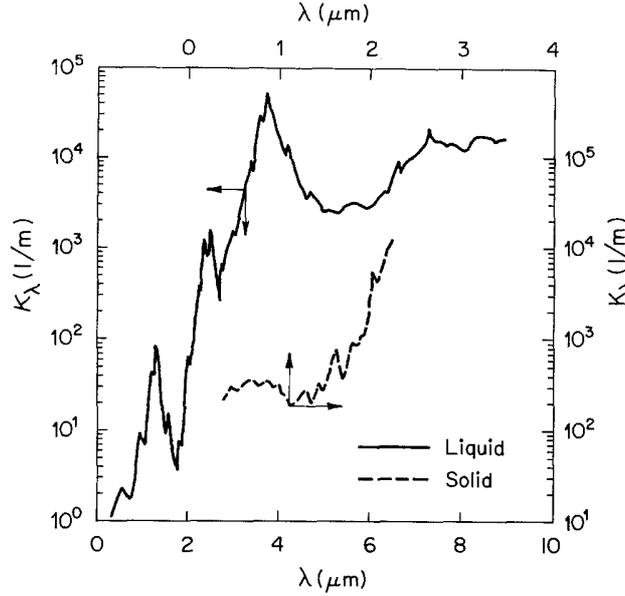


FIGURE 5.6: Coefficient d'absorption spectrale de l'octadécane [39]. L'échelle en haut à droite est pour le solide, alors que celle en bas à gauche est pour le liquide

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - \frac{L_h}{c_p} \frac{\partial f_L}{\partial t} - \frac{1}{\rho_\infty c_p} \left(\frac{\partial q_{rx}}{\partial x} + \frac{\partial q_{ry}}{\partial y} \right) \quad (5.12a)$$

$$s_x \frac{\partial I}{\partial x} + s_y \frac{\partial I}{\partial y} = -\kappa_a I + \kappa_a I_b \quad (5.12b)$$

La discrétisation de la (5.12a) se fait comme dans les cas précédents, en utilisant un schéma explicite pour le temps et les vitesses sont calculées par la LBM. La résolution de la (5.12b) se fait par la MOD en utilisant le schéma step pour la discrétisation spatiale (voir Section 4.4.2).

Les propriétés d'absorption du rayonnement sont différentes en fonction de l'état du matériau et de la longueur d'onde. Dans un premier temps, nous utilisons un coefficient d'absorption indépendant de la longueur d'onde, mais différent pour l'état liquide et l'état solide. Ici, pour les grandes longueurs d'onde ($\lambda > 2.5 \mu\text{m}$) nous prenons $\kappa_{aL} = 1000 \text{m}^{-1}$ pour le liquide et $\kappa_{aL} = 10000 \text{m}^{-1}$ pour le solide. Le changement de propriétés entre la phase liquide et la phase solide se fait par une évolution graduelle en fonction de la fraction liquide :

$$\kappa_a = f_L \kappa_{aL} + (1 - f_L) \kappa_{aS}$$

5.2.1 Résultats

Les résultats de cette section ont été acceptés pour publication dans la revue *Applied Energy* [101]. Comme nous avons fait pour la fusion avec convection naturelle (voir Section 3.3), nous utilisons un maillage de 64×382 nœuds.

La FIG. 5.7 montre la différence entre les flux à gauche et à droite de la cavité, avec et sans rayonnement. La différence maximale est de 8 W/m , soit une augmentation d'environ 3%.

La FIG. 5.8 montre la fraction fondue en fonction du temps et suivant les phénomènes considérés. Une courbe correspond à la fusion avec conduction seule, une autre à la fusion avec conduction et convection, et une troisième à la fusion

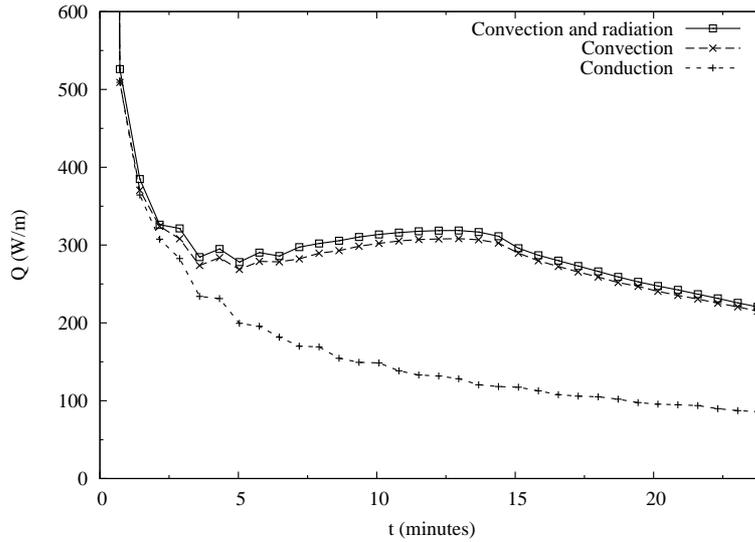


FIGURE 5.7: Fusion de l'acide gras avec rayonnement GLO - Flux

avec conduction, convection et rayonnement. Le rayonnement GLO augmente la fraction fondue, toutefois, cette augmentation est très légère et d'environ 3%, comme on s'attendrait d'après la faible augmentation du flux.

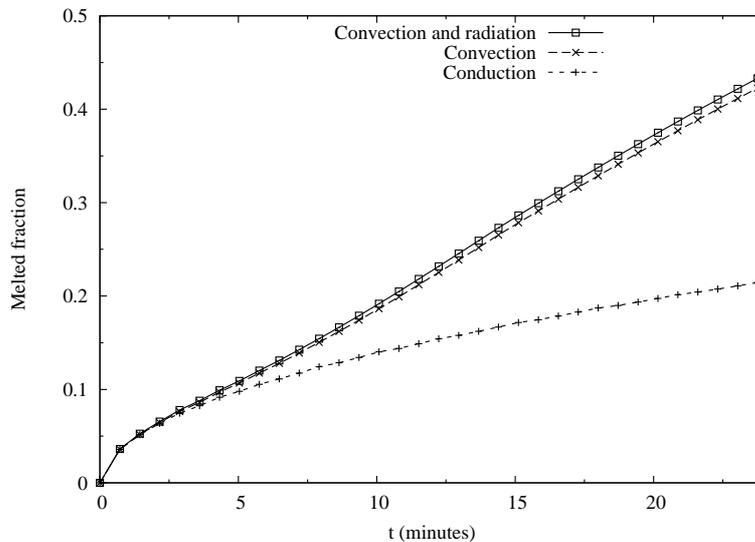


FIGURE 5.8: Fusion de l'acide gras avec rayonnement GLO - Fraction fondue

La position du front de fusion à différents instants de temps est présentée sur la FIG. 5.9. Cette figure montre que l'absorption et l'émission du rayonnement GLO ont une influence très faible sur la position du front de fusion, car la différence entre les résultats avec et sans rayonnement est inférieure à 1 mm. Nous voyons que sous les conditions étudiées ici, le rayonnement GLO peut être négligé pour la prédiction de la fraction fondue.

Les transferts thermiques pendant la journée impliquent les grandes ainsi que les courtes longueurs d'onde. Toutefois, comme nous venons de le voir, les GLO sont négligeables sous les conditions étudiées. Par conséquent, dans la section suivante, nous ne nous intéressons qu'aux CLO seules.

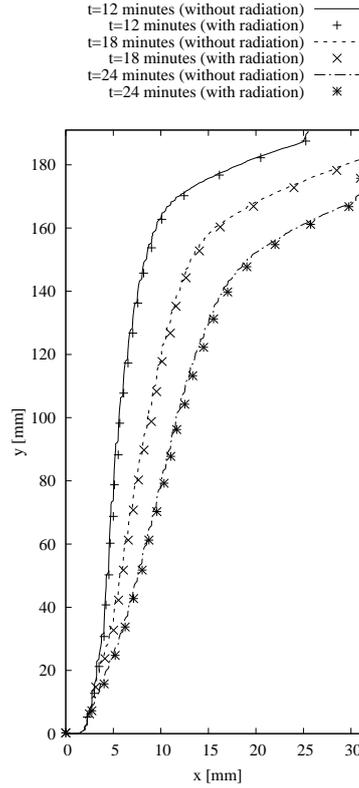


FIGURE 5.9: Fusion de l'acide gras avec rayonnement GLO - Évolution du front de fusion

5.3 Fusion avec rayonnement courte longueur d'onde

Dans cette section, le modèle développé est appliqué à la simulation de la fusion avec rayonnement CLO dans la brique Inertrans. Le matériau est l'acide gras, dont les propriétés ont déjà été présentées (voir TAB. 3.9).

Maintenant, nous supposons un flux radiatif incident de $q_{\text{CLO}} = 500 \text{ W/m}^2$. Un schéma du problème avec les conditions aux limites est montré sur la FIG. 5.10.

Le matériau est considéré comme absorbant et non diffusant. Pour les courtes longueurs d'onde, l'émission n'est pas prise en compte. L'équation de l'énergie et l'équation de transfert radiatif pour ce problème sont :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - \frac{L_h}{c_p} \frac{\partial f_L}{\partial t} - \frac{1}{\rho_\infty c_p} \left(\frac{\partial q_{rx}}{\partial x} + \frac{\partial q_{ry}}{\partial y} \right) \quad (5.13a)$$

$$s_x \frac{\partial I}{\partial x} + s_y \frac{\partial I}{\partial y} = -\kappa_a I \quad (5.13b)$$

5.3.1 Équation de l'énergie par la méthode des différences finies

Le terme source prenant compte de la chaleur latente s'ajoute maintenant à l'Éq. 5.1d. L'équation discrétisée est alors :

$$T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n - \left[u_x^n \frac{\partial}{\partial x} T^n + u_y^n \frac{\partial}{\partial y} T^n \right]_{i,j} + \alpha_{\text{LB}} \left[\frac{\partial^2 T^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T^n}{\partial y^2} \right]_{i,j} - \left(\frac{L_h}{c_p} \right)_{\text{LB}} [f_L^n - f_L^{n-1}]_{i,j} - \left(\frac{1}{\rho c_p} \right)_{\text{LB}} \left[\frac{\partial q_{rx}}{\partial x} + \frac{\partial q_{ry}}{\partial y} \right]_{i,j}$$

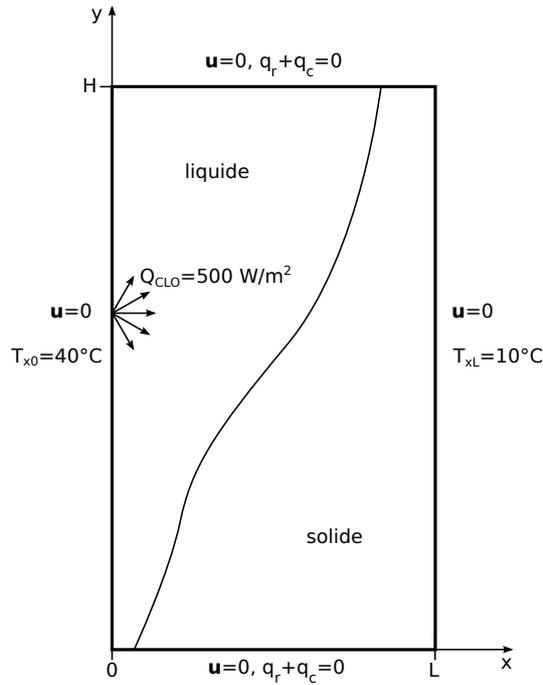


FIGURE 5.10: Schema de la fusion avec rayonnement CLO

La valeur des paramètres en unités LB se trouve comme d'habitude par les lois de similitude. Ce sont le nombre de Rayleigh, Prandtl, Stefan et de Planck, qui doivent être similaires lors de la simulation. Suivant l'analyse de la Section 3.2.1 et 5.1.3, les paramètres de la simulation sont :

$$\left(\frac{L_h}{c_p}\right)_{LB} = \frac{\Delta T_{LB}}{Ste} \quad \frac{1}{(\rho_\infty c_p)_{LB}} = \frac{\alpha_{LB} \Delta T_{LB}}{N_y (q_{r\infty})_{LB}} \frac{1}{PL}$$

De plus, comme a déjà été discuté dans la Section 5.1.3, les résultats des calculs radiatifs sont adimensionnels, donc la forme finale de l'équation discrète est :

$$T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n - \left[u_x^n \frac{\partial T^n}{\partial x} + u_y^n \frac{\partial T^n}{\partial y} \right]_{i,j} + \alpha_{LB} \left[\frac{\partial^2 T^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T^n}{\partial y^2} \right]_{i,j} - \frac{1}{Ste} [f_L^n - f_L^{n-1}]_{i,j} - \frac{\alpha_{LB}}{N_y N_y PL} \left[\frac{\partial q_{rx}^*}{\partial x^*} + \frac{\partial q_{ry}^*}{\partial y^*} \right]_{i,j} \quad (5.14)$$

5.3.2 Équation des transferts radiatifs par la méthode des ordonnées discrètes

En appliquant le principe des ordonnées discrètes, l'angle solide est remplacée par une quadrature. Comme pour les cas précédents, nous utilisons la quadrature S_4 (Section 4.4.1). En écrivant la (5.13b) sous forme adimensionnelle avec l'indice m pour la direction des ordonnées nous obtenons :

$$s_x \frac{\partial I_m^*}{\partial x^*} + s_y \frac{\partial I_m^*}{\partial y^*} = -(\kappa_a H) I_m^*$$

où les valeurs de référence ont été :

$$x^* = \frac{x}{H} \quad I^* = \frac{I}{q_{CLO}}$$

Dans un premier temps, le coefficient d'absorption κ_a est supposé indépendant de la longueur d'onde. Pourtant, sa valeur est différente pour la phase liquide ($\kappa_{aL} = 2\text{m}^{-1}$ à $0.5\mu\text{m}$) et pour la phase solide ($\kappa_{aS} = 200\text{m}^{-1}$ à $0.5\mu\text{m}$). Afin de prendre en compte cette caractéristique du matériau, le coefficient d'absorption a été exprimé comme une fonction de la fraction liquide ainsi [102] :

$$\kappa_a = f_L \kappa_{aL} + (1 - f_L) \kappa_{aS} \quad (5.15)$$

De cette façon, un seul coefficient est valable pour tout le domaine, à l'instar du principe de la formulation enthalpique et on se passe du calcul de la position de l'interface. En effet, un autre choix serait de déterminer la position de l'interface et changer le coefficient d'absorption suivant la phase, en imposant une condition aux limites entre les deux. Or, cela ferait perdre l'intérêt de la formulation enthalpique, qui évite justement de déterminer la position du front de fusion.

Enfin, la luminance en direction m au nœud (i, j) se calcule explicitement par :

$$I_{i,j,m}^* = \frac{s_{mx} I_{i-1/2,j,m}^* + s_{my} I_{i,j-1/2,m}^*}{s_{mx} + s_{my} + \kappa_a \Delta x^*} \quad (s_{mx} > 0, s_{my} > 0) \quad (5.16)$$

5.3.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites, de température imposée ou adiabatiques se font comme a été montré dans la Section 5.1.4.

Par ailleurs, pour ce problème nous avons un flux radiatif qui arrive sur la paroi gauche. Or, les calculs radiatifs se font en termes de luminance. Afin de déterminer la luminance correspondante au flux incident, il faut prendre en compte, premièrement, que cette luminance est égale dans toutes les directions (rayonnement diffus), et deuxièmement, qu'elle est définie sur la moitié de l'angle solide. Ainsi, en utilisant les propriétés des ordonnées présentées dans la Section 4.4.1, la luminance à imposer comme condition limite se calcule par :

$$\begin{aligned} \sum_{m, s_x > 0} s_{mx} I_m w_m &= q_{rx} \\ \Rightarrow I_m \underbrace{\sum_{m, s_x > 0} s_{mx} w_m}_{\pi} &= q_{rx} \\ \Rightarrow I_m &= \frac{q_{rx}}{\pi} \end{aligned}$$

laquelle sous forme adimensionnelle est :

$$I_m^* = \frac{1}{\pi} \quad (5.17)$$

5.3.4 Algorithme de résolution

L'algorithme de résolution est présenté ensuite (voir schéma de la FIG. 5.11).

1. Calcul des paramètres de la simulation en fonction des nombres adimensionnels, du nombre de nœuds et du temps de relaxation : Éqs. (3.3), (3.5), (5.7) et (3.20).
2. Initialiser les fonctions de distribution à leur valeur d'équilibre (Éq. 2.19)
3. La température initiale est égale à la température de la paroi froide
4. Boucle pour les calcul radiatifs :

- (a) Imposer conditions aux limites (Éq. 5.17)
- (b) Calcul des luminances dans toute la cavité (Éq. 5.16)
- (c) Si les luminances convergent aller au 5, sinon itérer depuis 4a
5. Calcul du flux radiatif (Éq. 5.5)
6. Faire le calcul des vitesses (Éq. 2.20b)
7. Calcul des températures à l'instant $n + 1$ par l'Éq. 5.8
8. Imposer les conditions aux limites (Éqs. 5.9 et 5.11)
9. Collision (Éq. 3.2a) des fonctions de distribution f_i dans les nœuds liquides et *bounce back* (Section 2.3.4) aux frontières solides
10. Propagation (Éq. 3.2b)
11. Si le nombre maximal d'itérations a été atteint alors finir les calculs, sinon itérer depuis 4

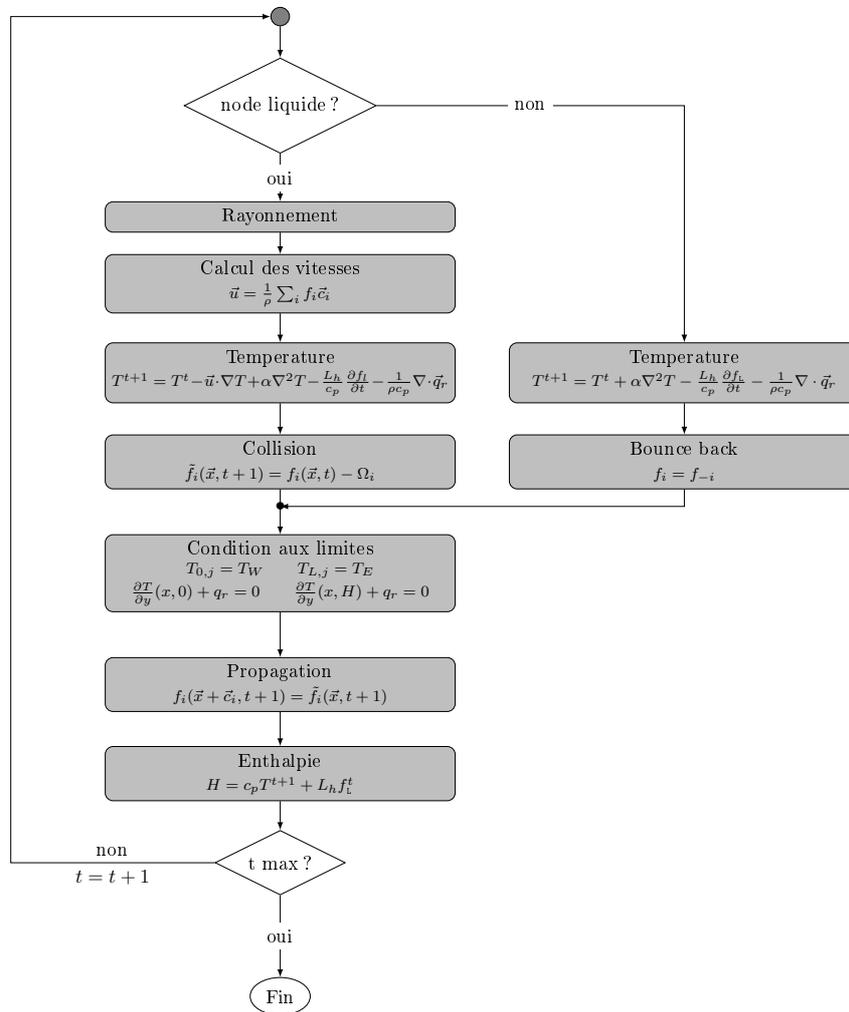


FIGURE 5.11: Diagramme de flux du problème de fusion avec convection et rayonnement

5.3.5 Résultats

À présent nous analysons les résultats obtenus avec notre modèle couplé. Nous avons utilisé un maillage de 64×382 nœuds et temps de relaxation $\tau = 0.52$ pour la méthode LB.

La FIG. 5.12 montre différents résultats du flux moyen et la fraction fondue. Le flux moyen est calculé comme l'intégrale du flux sur toute la hauteur de la cavité. Ce flux a une composante conductif (le gradient à la paroi) et une composante radiative, qui s'expriment par :

$$Q_c = \int_0^H -\kappa \frac{\partial T}{\partial x} dy; \quad Q_r = \int_0^H q_{rnet} dy$$

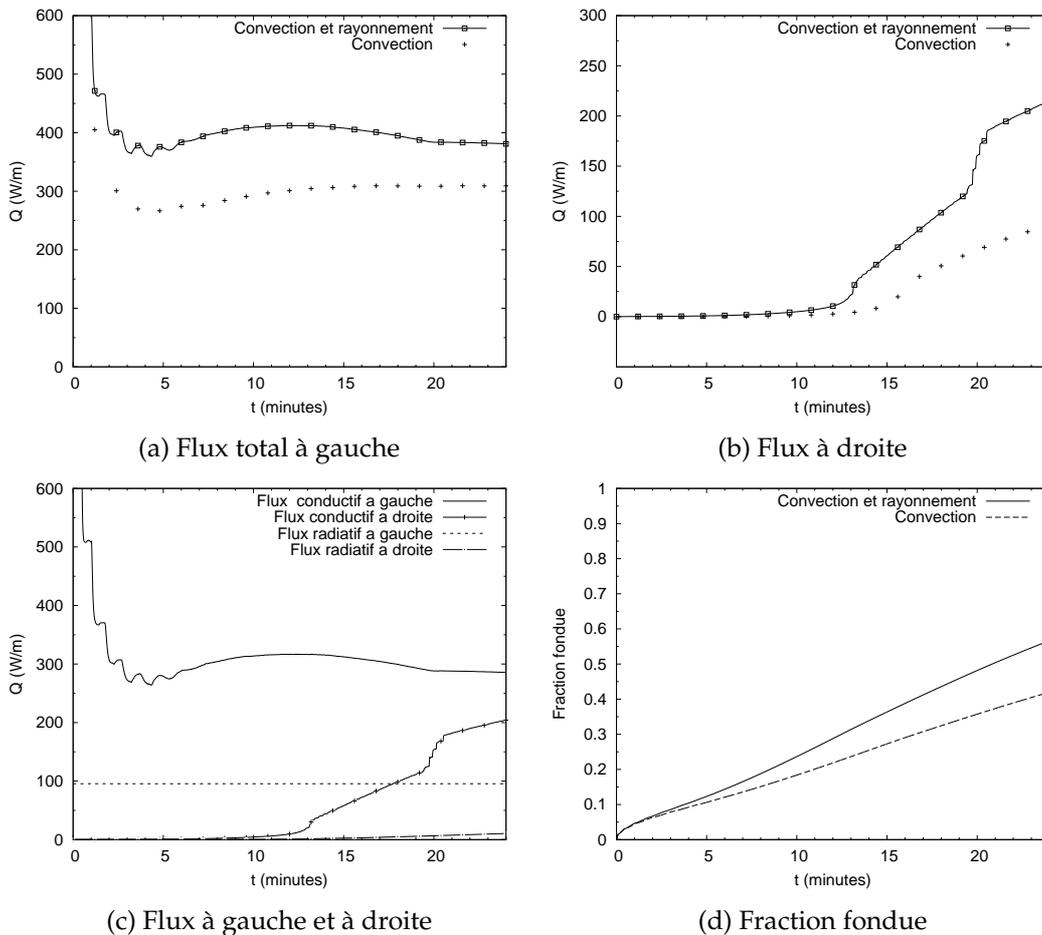


FIGURE 5.12: Acide gras - flux et fraction fondue

Sur la FIG. 5.12a on voit que les flux avec rayonnement augmente d'environ 30% par rapport au flux sans rayonnement. Les oscillations du flux au début de la fusion sont toujours présentes, car elles proviennent de la méthode enthalpique utilisée pour le changement de phase.

La FIG. 5.12b montre que le flux sur la paroi droite augmente aussi. L'augmentation ici est encore plus importante (près du double par rapport à la convection) que pour la paroi gauche. Comme dans le cas de fusion avec convection, on constate que le flux commence à augmenter lorsque le front de fusion touche la paroi droite peu après 12 minutes.

Sur la FIG. 5.12c, les différentes composantes du flux sont tracées séparément. Sur cette figure nous voyons que le flux radiatif à droite est très faible (10.53 W/m à 24 minutes). En effet à 24 minutes, la quantité de solide est encore important et du fait de sa grande absorption ($\kappa_a = 200 \text{ m}^{-1}$), presque tout le rayonnement est absorbé au front de fusion. En absence des réflexions, le flux radiatif à gauche est constant, et pour ce cas égal à $Q_r = 500 \times H = 95.5 \text{ W/m}$.

Sur la FIG. 5.12d nous comparons la fraction fondue obtenue avec et sans rayonnement. Nous voyons que la fraction fondue augmente près de 10% par rapport à la fusion sans rayonnement.

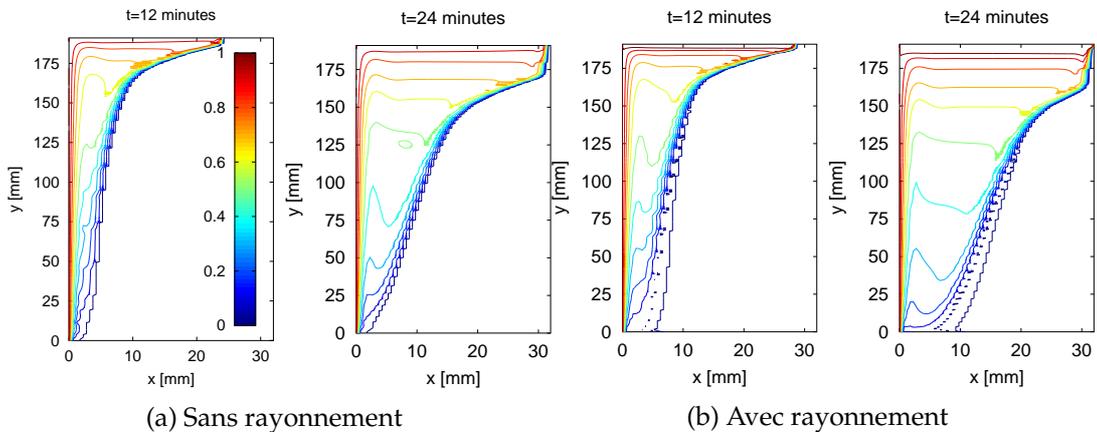


FIGURE 5.13: Fusion de l'acide gras avec rayonnement CLO - Isothermes

Sur la FIG. 5.13, les isothermes au cours du temps, sont comparées avec les résultats sans rayonnement. On constate que le front de fusion avance plus vite en haut de l'enceinte, dans le cas avec rayonnement. Ainsi, par exemple à 12 minutes avec rayonnement, le matériau touche déjà la paroi à droite, alors que sans rayonnement il est autour de 25 mm. En comparant les isothermes à 24 minutes, avec et sans rayonnement, on voit qu'avec rayonnement, le front de fusion pénètre plus en bas de la cavité. Or, vu que le flux avec convection peut être le triple du flux avec conduction seule, alors que le flux avec rayonnement est environ 1.3 le flux avec convection, le rayonnement semble ne pas changer fondamentalement les transferts.

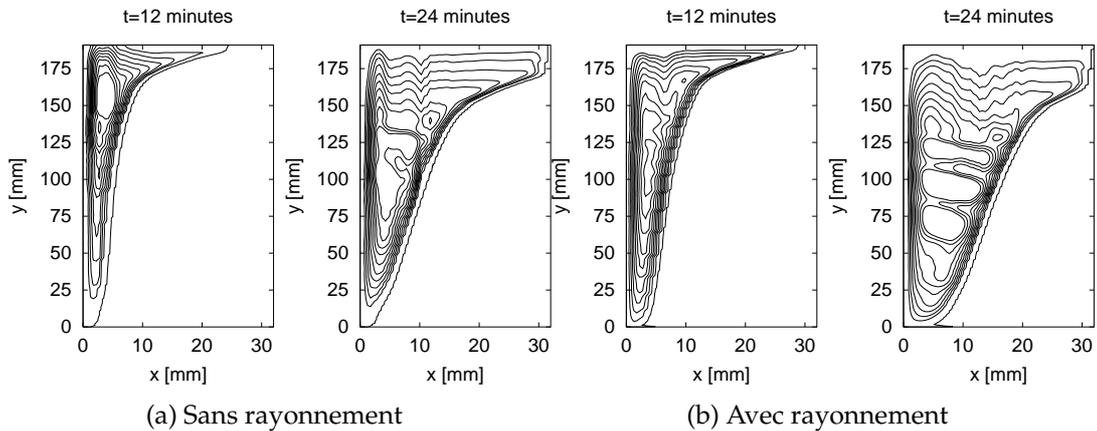


FIGURE 5.14: Fusion de l'acide gras avec rayonnement CLO - Lignes de courant

La FIG. 5.14 montre les lignes de courant à 12 et à 24 minutes sans (5.14a) et avec rayonnement (5.14b). À partir de ces graphiques, on voit que le rayonnement CLO modifie la dynamique de l'écoulement. En effet, à 12 minutes sans rayonnement le fluide circule autour d'une cellule qui se trouve approximativement à 150 mm de hauteur. D'autre part, à 12 minutes avec rayonnement cette cellule ne s'y trouve pas et d'ailleurs il n'y a pas une cellule bien définie, toutefois le fluide semble circuler autour d'un noyau à 100 mm de hauteur. Par ailleurs, à 24 minutes sans rayonnement la cellule en haut a disparu et une cellule se trouve entre 75 mm et 125 mm, alors qu'avec rayonnement on voit trois cellules bien développées environ

à 75 mm, 100 mm et 125 mm de hauteur. Alors, si l'on s'intéresse à la dynamique de l'écoulement, le rayonnement CLO doit être prise en compte.

Enfin, en ce qui concerne le temps de calcul, celui-ci augmente sensiblement lorsque l'on inclut le rayonnement. La simulation de la fusion en présence de convection et de rayonnement a pris 130h20m (plus de 5 jours), alors que sans rayonnement en utilisant les mêmes paramètres le temps de calcul a été de 6h21m, soit 20 fois moins.

5.4 Conclusion

Ce chapitre s'est occupé du couplage du modèle Boltzmann sur réseau pour la fusion avec convection naturelle, et la MOD pour la résolution de l'équation des transferts radiatifs. Cela a été possible grâce au modèle Boltzmann sur réseau hybride, qui permet de résoudre les problèmes thermiques en couplant des méthodes différentes à la LBM.

Nous avons appliqué ce modèle à la simulation de la fusion avec convection naturelle et rayonnement grande et courte longueur d'onde. Les résultats obtenus montrent que le rayonnement GLO n'a pas d'influence notable sur les transferts thermiques, car l'augmentation du flux et de la fraction fondue due au rayonnement est inférieure à 3%. De ce constat, nous avons étudié les CLO seuls. Le rayonnement CLO augmente les transferts thermiques, cependant, pour le matériau et les conditions étudiées cette augmentation n'est pas aussi importante que l'augmentation due à la convection. Le rayonnement CLO modifie également la dynamique de l'écoulement en produisant plusieurs cellules à l'intérieur du liquide. Par ailleurs, le temps de calcul en considérant le rayonnement CLO est près de 20 fois le temps de calcul sans rayonnement. De ce constat, si l'on s'intéresse à la dynamique de l'écoulement, le rayonnement CLO devrait être pris en compte, autrement un modèle radiatif plus simple devrait être utilisé.

Puisque aucune solution théorique ou de référence existe, ces conclusions demandent une validation avec des résultats expérimentaux. Une étude paramétrique avec des milieux plus absorbants permettrait de vérifier si l'on peut stocker plus de chaleur par la modification des propriétés. GLO

Conclusions et perspectives

Au cours de cette thèse, nous avons développé un modèle pour la simulation de la fusion dans une enceinte rectangulaire, avec convection naturelle dans un premier temps, et avec convection et rayonnement courte et grande longueur d'onde dans un deuxième temps.

Le modèle utilise la méthode de Boltzmann sur réseau à temps de relaxation multiple pour la résolution du champ de vitesse, et la méthode des différences finies pour la résolution du champ de températures. Afin de prendre en compte le changement de phase, l'équation de l'énergie est écrite avec la formulation enthalpique. La méthode de Boltzmann sur réseau a déjà été utilisée pour la simulation du changement de phase, mais cela a été fait en utilisant la collision du type BGK, qui utilise un seul temps de relaxation, et qui est à la source des instabilités. Notre apport est l'utilisation de la collision MRT et son application à la simulation des transferts couplés, changement de phase avec convection naturelle, premièrement, et changement de phase avec convection naturelle et rayonnement, deuxièmement.

Nous avons vérifié notre approche en faisant la simulation de deux cas de référence : la fusion de l'octadécane et de l'étain. Ces matériaux se distinguent par un fort (octadécane) et un faible (étain) nombre de Prandtl. À fort nombre de Prandtl les transferts par convection sont plus importants que pour le faible nombre de Prandtl. Les résultats obtenus par notre modèle, à savoir, le nombre de Nusselt, la fraction fondue, les isothermes, et les lignes de courant, correspondent bien aux phénomènes physiques mis en jeu, et sont d'ailleurs en accord avec les résultats trouvés par d'autres méthodes.

Les simulations de la fusion de l'étain faites par d'autres chercheurs ont montré deux types de solutions. Une solution avec un écoulement multicellulaire et une autre avec une seule cellule. Hannoun *et al.* [22, 24] ont montré que la solution multicellulaire est correcte, et que la solution unicellulaire est due à un faible maillage ou à des schémas de discrétisation d'ordre un. Nos résultats ont donné un écoulement multicellulaire, dont le nombre de cellules est en accord avec les résultats du schéma centré (le plus précis) d'Hannoun. En revanche, il a été nécessaire l'utilisation d'un maillage fin (400×400) pour suivre l'évolution temporelle de ces cellules. En outre, du fait du faible nombre de Prandtl et du schéma de différences finies utilisé, la valeur du temps de relaxation doit être petite, ce qui implique que le temps de calcul soit grand ($\sim 76h$ pour la simulation de 1000 s de fusion). Toutefois, les temps de calcul sont moins importants que ceux reportés dans la littérature (450 h avec le même niveau du maillage et simulation de 700 s [24]).

La simulation de l'octadécane n'était pas soumise aux mêmes contraintes. Par conséquent, le choix du temps de relaxation est conditionné par la justesse des résultats. En faisant une étude sur la convergence du maillage nous avons décidé d'utiliser $\tau = 0.53$ et 225×225 nœuds. Les isothermes obtenues montrent une stratification des températures au milieu de la cavité, et des forts gradients de

température près des parois. Les courbes de Nusselt montrent des oscillations au début de la fusion. Ces oscillations sont de nature numérique. Elles sont produites par les nœuds qui changent d'état, lesquels restent à température constante, et par conséquent le gradient est aussi constant durant ces instant de temps.

Nous avons alors utilisé le modèle hybride, pour simuler la fusion de l'acide gras contenu dans la brique INERTRANS. Les résultats ont montré que la convection est importante pour l'épaisseur étudiée (~ 3 cm), car le flux de chaleur augmentent sensiblement aux parois (jusqu'à trois fois sur la paroi par rapport à la fusion par conduction seule). En revanche, du fait du maillage regulier et du fort rapport de forme ($H/L \approx 6$), la discrétisation près des parois n'est pas assez bonne et on a besoin d'un maillage assez fin ($> 32 \times 191$).

Nous avons exploré aussi la méthode LB pour la solution de l'équation de transferts radiatifs. Cependant, comparée à une méthode bien établie comme la méthode des ordonnées discrètes, les résultats de la méthode LB à l'état actuel ne sont pas satisfaisants.

Enfin, aussi avons-nous couplé la méthode LB avec la MOD, afin de résoudre un problème de changement de phase en présence de convection naturelle et rayonnement. Nos résultats montrent une augmentation des transferts thermiques, cependant, la différence entre le cas avec convection et rayonnement, et le cas avec convection seule ne semble pas aussi importante que la différence entre le cas avec conduction et convection et le cas avec conduction seule. De plus, les temps de calcul augmentent notablement. Un modèle plus simple pour le rayonnement devrait être utilisé.

Perspectives

Le modèle peut être étendue aisement aux trois dimensions, pourtant, cela impose certaines contraintes. La condition de stabilité, est encore plus stricte en 3D, c'est-à-dire, le pas d'espace doit être plus petit que pour le cas bidimensionnel. Cela implique alors une discrétisation plus fine, laquelle, du fait de la troisième dimension entraîne des temps de calcul assez importants. À titre d'exemple, la simulation de la fusion de l'octadécane en 2D avec 100×100 nœuds a pris approximativement une heure (voir Section 3.2.5.2), alors qu'en 3D avec $101 \times 101 \times 11$ nœuds (FIG. 5.15) a pris approximativement 38h. À cet égard, du fait des calculs explicites et locales propres à la méthode LB, on peut profiter des architectures parallèles pour accélérer les calculs [103].

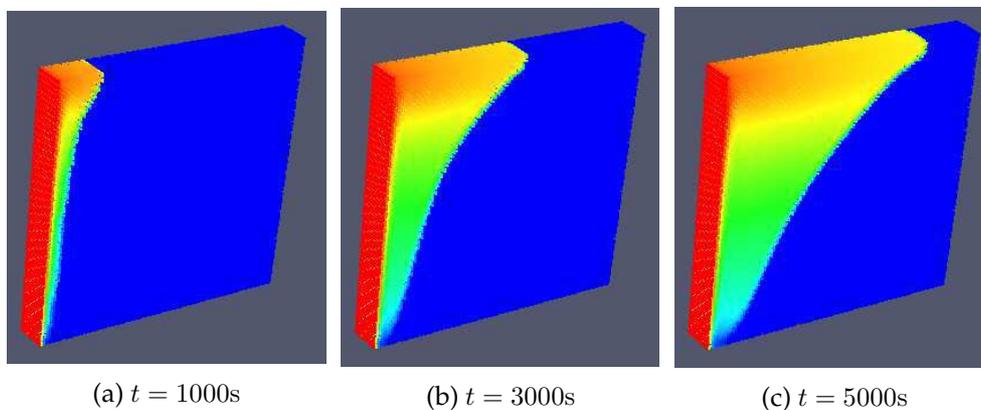


FIGURE 5.15: Fusion de l'octadécane - Isothermes en 3D avec $101 \times 101 \times 11$ nœuds

Nous avons utilisé des propriétés radiatives différentes pour la phase solide et

liquide, mais nous les avons supposées constantes dans la plage des CLO ($<2.5\mu\text{m}$) et de même pour les GLO. La dépendance spectrale des propriétés pourrait être prise en compte, par exemple, en utilisant des propriétés constantes par bandes spectrales plus étroites.

Nous avons étudié trois matériaux : l'étain, l'octadécane et l'acide gras. Il est nécessaire de faire une étude paramétrique avec différents matériaux et conditions aux limites, afin de vérifier et pouvoir généraliser les conclusions de cette étude.

Bibliographie

- [1] L. Serveau and L. Nicco, "Inventaire des émissions de polluants dans l'atmosphère en France," tech. rep., CITEPA, 2012.
- [2] SOeS, "Bilan énergétique de la France pour 2011," tech. rep., Commissariat général au développement durable, 2011.
- [3] L. Chesné, T. Duforestel, J.-J. Roux, and G. Rusaouën, "Energy saving and environmental resources potentials : Toward new methods of building design," *Building and Environment*, vol. 58, no. 0, pp. 199 – 207, 2012.
- [4] X. Faure, *Optimisation d'enveloppe hybride pour bâtiment à haute performance énergétique*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, 2007.
- [5] V. V. Tyagi and D. Buddhi, "PCM thermal storage in buildings : A state of the art," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 11, pp. 1146–1166, 2007.
- [6] A. Sharma, V. Tyagi, C. Chen, and D. Buddhi, "Review on thermal energy storage with phase change materials and applications," *Renewable and sustainable energy reviews*, vol. 13, pp. 318–345, 2009.
- [7] Z. Younsi, *Étude expérimentale et numérique du comportement thermique de matériaux à changement de phase. Intégration dans un composant solaire passif pour l'habitat*. PhD thesis, Université d'Artois, 2008.
- [8] S. M. Hasnain, "Review on sustainable thermal energy storage technologies, part I : Heat storage materials and techniques," *Energy Convers Mgmt*, vol. 39, pp. 1127–1138, 1998.
- [9] C. Gau and R. Viskanta, "Melting and solidification of a pure metal on a vertical wall," *Transactions of the ASME*, vol. 108, pp. 174–181, 1986.
- [10] N. Kaushika and K. Sumathy, "Solar transparent insulation materials : a review," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 7, pp. 317–351, 2003.
- [11] I. Wong, P. Eames, and R. Perera, "A review of transparent insulation systems and the evaluation of payback period for building applications," *Solar Energy*, vol. 81, pp. 1058–1071, 2007.
- [12] H. Manz, P. Egolf, P. Suter, and A. Goetzberger, "TIM-PCM external wall system for solar space heating and daylighting," *Solar Energy*, vol. 61, pp. 369–379, 1997.
- [13] D. Buddhi and S. Sharma, "Measurements of transmittance of solar radiation through stearic acid : a latent heat storage material," *Energy Conversion & Management*, vol. 40, pp. 1979–1984, 1999.
- [14] H. Weinslader, A. Beck, and J. Fricke, "PCM-facade-panel for daylighting and room heating," *Solar Energy*, vol. 78, pp. 177–186, 2005.
- [15] "GLASSXcrystal - technical data." Disponible sur : <http://glassx.ch/index.php?id=651>.
- [16] P. Jany and A. Bejan, "Scaling theory of melting with natural convection in an enclosure," *Int J Heat Mass Transfer*, vol. 31, pp. 1221–1235, 1988.

- [17] D. D. Gray and A. Giorgini, "The validity of the Boussinesq approximation for liquids and gases," *Int J Heat Mass Transfer*, vol. 19, pp. 545–551, 1976.
- [18] A. Gadgil and D. Gobin, "Analysis of two-dimensional melting in rectangular enclosures in presence of convection," *J Heat Transfer*, vol. 106, no. 1, pp. 20–26, 1984.
- [19] C.-J. Ho and R. Viskanta, "Heat transfer during melting from an isothermal vertical wall," *J Heat Transfer*, vol. 106, pp. 12–19, 1984.
- [20] C. Bénard, D. Gobin, and F. Martinez, "Melting in rectangular enclosures : Experiments and numerical simulations," *J Heat Transfer*, vol. 107, no. 4, pp. 794–803, 1985.
- [21] R. Viswanath and Y. Jaluria, "A comparison of different solution methodologies for melting and solidification problems in enclosures," *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 24, pp. 77–105, 1993.
- [22] N. Hannoun, V. Alexiades, and T. Z. Mai, "Resolving the controversy over tin and gallium melting in a rectangular cavity heated from the side," *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 44, pp. 253–276, 2003.
- [23] J. Mencinger, "Numerical simulation of melting in two-dimensional cavity using adaptive grid," *J Comput Phys*, vol. 198, pp. 243–264, 2004.
- [24] N. Hannoun, V. Alexiades, and T. Mai, "A reference solution for phase change with convection," *Int J Numer Methods Fluids*, vol. 48, pp. 1283–1308, 2005.
- [25] V. Voller and C. Prakash, "A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems," *Int J Heat Mass Transfer*, vol. 30, pp. 1709–1719, 1987.
- [26] A. D. Brent, V. R. Voller, and K. J. Reid, "Enthalpy-Porosity Technique for Modeling Convection-Diffusion Phase Change : Application to the Melting of a Pure Metal," *Numerical Heat Transfer Part B - Fundamentals*, vol. 13, pp. 297–318, 1988.
- [27] T. A. Campbell and J. N. Koster, "Visualization of liquid-solid interface morphologies in gallium subject to natural convection," *J Cryst Growth*, vol. 140, no. 3-4, pp. 414–425, 1994.
- [28] M. Okada, "Analysis of heat transfer during melting from a vertical wall," *Int J Heat Mass Transfer*, vol. 27, pp. 2057–2066, 1984.
- [29] Y. Wang, A. Amiri, and K. Vafai, "Experimental investigation of the melting process in a rectangular enclosure," *Int J Heat Mass Transfer*, vol. 42, pp. 3659–3672, 1999.
- [30] C.-J. Ho and R. Viskanta, "Inward solid-liquid phase-change heat transfer in a rectangular cavity with conducting vertical walls," *Int J Heat Mass Transfer*, vol. 27, pp. 1055–1065, 1984.
- [31] J. Lim and A. Bejan, "The Prandtl number effect on melting dominated by natural convection," *J Heat Transfer*, vol. 114, pp. 784–787, 1992.
- [32] Z. Zhang and A. Bejan, "The problem of time-dependent natural convection melting with conduction in the solid," *Int J Heat Mass Transfer*, vol. 32, pp. 2447–2457, 1989.
- [33] M. N. Özışık, *Heat Conduction*. John Wiley & Sons, 1993.
- [34] O. Bertrand, B. Binet, H. Combeau, S. Couturier, Y. Delannoy, D. Gobin, M. Lacroix, P. L. Quéré, M. Médale, J. Mencinger, H. Sadat, and G. Vieira, "Melting driven by natural convection. a comparison exercise : first results," *Int J Therm Sci*, vol. 38, pp. 5–26, 1999.

- [35] P. L. Quéré and D. Gobin, "A note on possible flow instabilities in melting from the side," *Int J Therm Sci*, vol. 38, pp. 595–600, 1999.
- [36] F. Stella and M. Giangi, "Melting of a pure metal on a vertical wall : Numerical simulation," *Numer Heat Transfer, Part A*, vol. 38, pp. 193–208, 2000.
- [37] C. Gau and R. Viskanta, "Melting and solidification of a metal system in a rectangular cavity," *Int J Heat Mass Transfer*, vol. 27, pp. 113–123, 1984.
- [38] D. Gobin, D. Levesque, and C. Benard, "Stockage de l'énergie solaire : simulation numérique du transfert d'énergie par conduction et rayonnement dans un milieu à deux phases," *Revue de Physique Appliquée*, vol. 14, pp. 125–137, 1979.
- [39] L. A. Diaz and R. Viskanta, "Experiments and analysis on the melting of a semitransparent material by radiation," *Heat Mass Transfer*, vol. 20, pp. 311–321, 1986. 10.1007/BF01002422.
- [40] B. W. Webb, *Radiation-induced melting of semitransparent materials*. PhD thesis, Purdue University, 1986.
- [41] R. Nourgaliev, T. Dinh, T. Theofanous, and D. Joseph, "The lattice Boltzmann equation method : theoretical interpretation, numerics and implications," *Int J Multiphase Flow*, vol. 29, pp. 117–169, 2003.
- [42] J. Hardy, O. de Pazzis, and Y. Pomeau, "Molecular dynamics of a classical lattice gas : Transport properties and time correlation functions," *Phys Rev A*, vol. 13, pp. 1949–1961, 1976.
- [43] U. Frisch, B. Hasslacher, and Y. Pomeau, "Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation," *Phys Rev Lett*, vol. 56, p. 1505, 1986.
- [44] B. Chopard, P. Luthi, and A. Masselot, *Cellular automata and lattice Boltzmann techniques : An approach to model and simulate complex systems*. University of Geneva.
- [45] S. Chen and G. D. Doolen, "Lattice Boltzmann method for fluid flows," *Annu Rev Fluid Mech*, vol. 30, pp. 329–64, 1998.
- [46] Y. H. Qian, D. D'Humières, and P. Lallemand, "Lattice BGK model for the Navier-Stokes equation," *Europhys Lett*, vol. 17, pp. 479–484, 1992.
- [47] T. Abe, "Derivation of the lattice Boltzmann method by means of the discrete ordinate method for the Boltzmann equation," *J Comput Phys*, vol. 131, pp. 241–246, 1997.
- [48] X. He and L.-S. Luo, "A priori derivation of the lattice Boltzmann equation," *Phys Rev E*, vol. 55, p. 6333(4), 1997.
- [49] C. Cercignani, *The Boltzmann equation and its applications*. Springer-Verlag, 1988.
- [50] F. J. Higuera and J. Jiménez, "Boltzmann approach to lattice gas simulations," *Europhys Lett*, vol. 9, pp. 663–668, 1989.
- [51] F. J. Higuera, S. Succi, and R. Benzi, "Lattice gas dynamics with enhanced collisions," *Europhys Lett*, vol. 9, pp. 345–349, 1989.
- [52] D. d'Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand, and L.-S. Luo, "Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model in three dimensions," *Philos Trans R Soc London, Ser A*, vol. 360, pp. 437–451, 2002.
- [53] P. Bhatnagar, E. Gross, and M. Krook, "A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems," *Physical Review*, vol. 94, pp. 511–525, 1954.

- [54] X. He and L.-S. Luo, "Theory of the lattice Boltzmann method : from the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation," *Phys Rev E*, vol. 56, p. 6811(7), 1997.
- [55] P. Lallemand and L.-S. Luo, "Theory of the lattice Boltzmann method : Acoustic and thermal properties in two and three dimensions," *Phys Rev E*, vol. 68, p. 036706(25), 2003.
- [56] D. P. Ziegler, "Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations," *J Stat Phys*, vol. 71, pp. 1171–1177, 1993.
- [57] I. Ginzburg and D. d'Humières, "Local second-order boundary methods for lattice Boltzmann models," *J Stat Phys*, vol. 84, p. 927(45), 1996.
- [58] F. Alexander, S. Chen, and J. Sterling, "Lattice Boltzmann thermohydrodynamics," *Physical Review E : Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 47, pp. 2249–2252, 1993.
- [59] G. R. McNamara, A. L. Garcia, and B. J. Alder, "Stabilization of thermal lattice Boltzmann models," *J Stat Phys*, vol. 81, pp. 395–408, 1995.
- [60] G. R. McNamara, A. L. García, and B. J. Alder, "A hydrodynamically correct thermal lattice Boltzmann model," *J Stat Phys*, vol. 87, p. 1111(11), 1997.
- [61] X. He, S. Chen, and G. D. Doolen, "A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit," *J Comput Phys*, vol. 146, pp. 282–300, 1998.
- [62] Y. Peng, C. Shu, and Y. Chew, "Simplified thermal lattice Boltzmann model for incompressible thermal flows," *Phys Rev E*, vol. 68, p. 026701(8), 2003.
- [63] P. Lallemand and L.-S. Luo, "Hybrid finite-difference thermal lattice Boltzmann equation," *Int J Mod Phys B*, vol. 17, pp. 41–47, 2003.
- [64] D. Yu, R. Mei, L.-S. Luo, and W. Shyy, "Viscous flow computations with the method of lattice boltzmann equation," *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 39, pp. 329–367, 2003.
- [65] W. Miller, S. Succi, and D. Mansutti, "Lattice Boltzmann model for anisotropic liquid-solid phase transition," *Phys Rev Lett*, vol. 86, p. 3578(4), 2001.
- [66] D. Chatterjee and S. Chakraborty, "A hybrid lattice Boltzmann model for solid-liquid phase transition in presence of fluid flow," *Phys Lett A*, vol. 351, pp. 359–367, 2006.
- [67] C. Huber, A. Parmigiani, B. Chopard, M. Manga, and O. Bachmann, "Lattice Boltzmann model for melting with natural convection," *Int J Heat Fluid Flow*, vol. 29, pp. 1469–1480, 2008.
- [68] E. Semma, M. E. Ganaoui, R. Bennacer, and A. Mohamad, "Investigation of flows in solidification by using the lattice Boltzmann method," *Int J Therm Sci*, vol. 47, pp. 201–208, 2008.
- [69] D. Chatterjee, "An enthalpy-based thermal lattice Boltzmann model for non-isothermal systems," *Europhys Lett*, vol. 86, p. 14004(5), 2009.
- [70] W. Miller, "The lattice Boltzmann method : a new tool for numerical simulation of the interaction of growth kinetics and melt flow," *J Cryst Growth*, vol. 230, pp. 263–269, 2001.
- [71] W. Miller and S. Succi, "A lattice Boltzmann model for anisotropic crystal growth from melt," *J Stat Phys*, vol. 107, pp. 173–186, 2002.
- [72] W. Miller, I. Rasin, and F. Pimentel, "Growth kinetics and melt convection," *J Cryst Growth*, vol. 266, pp. 283–288, 2004.

-
- [73] W. Miller, I. Rasin, and S. Succi, "Lattice Boltzmann phase-field modelling of binary-alloy solidification," *Physica A*, vol. 362, pp. 78–83, 2006.
- [74] G. de Fabritiis, A. Mancini, D. Mansutti, and S. Succi, "Mesoscopic models of liquid/solid phase transitions," *Int J Mod Phys C*, vol. 9, pp. 1–11, 1998.
- [75] I. Wintruff, C. Günther, and A. G. Class, "An interface-tracking control-volume finite-element method for melting and solidification problems- Part I : Formulation," *Numer Heat Transfer, Part B*, vol. 39, pp. 101–125, 2001.
- [76] W. Shyy, H. S. Udaykumar, M. M. Rao, and R. W. Smith, *Computational fluid dynamics with moving boundaries*. Dover Publications, 1996.
- [77] G. De Vahl Davis, "Natural convection of air in a square cavity : a bench mark numerical solution," *Int J Numer Methods Fluids*, vol. 3, pp. 249–264, 1983.
- [78] I. Ginzburg and P. Adler, "Boundary flow condition analysis for three-dimensional lattice Boltzmann model," *J Phys II*, vol. 4, pp. 191–214, 1994.
- [79] Z. Guo, C. Zheng, and B. Shi, "Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method," *Phys Rev E*, vol. 65, p. 046308(6), 2002.
- [80] S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor & Francis, 1980.
- [81] J. D. Sterling and S. Chen, "Stability analysis of lattice boltzmann methods," *J Comput Phys*, vol. 123, pp. 196 – 206, 1996.
- [82] A. Bejan, *Convection heat transfer*.
- [83] J. Miranda Fuentes, K. Johannes, F. Kuznik, J. Virgone, and M. Cosnier, "Étude numérique du changement de phase avec une méthode de type boltzman sur gaz réseau en présence de convection naturelle." Xè colloque interuniversitaire Franco-Québécois, juin 2011.
- [84] J. A. Dantzig, "Modelling liquid–solid phase changes with melt convection," *Int J Numer Methods Eng*, vol. 28, no. 8, pp. 1769–1785, 1989.
- [85] X. He and L.-S. Luo, "Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation," *J Stat Phys*, vol. 88, p. 927(18), 1997.
- [86] V. Voller and M. Cross, "Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method," *Int J Heat Mass Transfer*, vol. 24, pp. 545–556, 1981.
- [87] V. R. Voller, "An overview of numerical methods for solving phase change problems," *Advances in Numerical Heat Transfer*, vol. 1, 1996.
- [88] P. Asinari, S. C. Mishra, and R. Borchiellini, "A lattice Boltzmann formulation for the analysis of radiative heat transfer problems in a participating medium," *Numer Heat Transfer, Part B*, vol. 57, pp. 126–146, 2010.
- [89] A. F. D. Rienzo, P. Asinari, R. Borchiellini, and S. C. Mishra, "Improved angular discretization and error analysis of the lattice Boltzmann method for solving radiative heat transfer in a participating medium," *Int J Numer Methods Heat Fluid Flow*, vol. 21, pp. 640–662, 2011.
- [90] M. Modest, *Radiative Heat Transfer*. Academic Press, 2003.
- [91] R. Siegel and J. R. Howell, *Thermal Radiation Heat Transfer*. Hemisphere Publishing Corporation, 3 ed., 1992.
- [92] P. Parida, R. Raj, A. Prasad, and S. Mishra, "Solidification of a semitransparent planar layer subjected to radiative and convective cooling," *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*, vol. 107, pp. 226–235, 2007.
-

- [93] S. C. Mishra and H. K. Roy, "Solving transient conduction and radiation heat transfer problems using the lattice Boltzmann method and the finite volume method," *J Comput Phys*, vol. 223, pp. 89–107, 2007.
- [94] S. C. Mishra, N. C. Behera, A. K. Garg, and A. Mishra, "Solidification of a 2-D semitransparent medium using the lattice Boltzmann method and the finite volume method," *Int J Heat Mass Transfer*, vol. 51, pp. 4447–4460, 2008.
- [95] R. Vaillon, "Méthodes numériques en rayonnement thermique-la méthode des ordonnées discrètes." Support de cours, janvier 2005.
- [96] J. Truelove, "Discrete-ordinate solutions of the radiative transport equation," *J Heat Transfer*, vol. 109, pp. 1048–1051, 1987.
- [97] J. C. Chai, S. V. Patankar, and H. S. Lee, "Evaluation of spatial differencing practices for the discrete ordinates method," *J Thermophys Heat Transfer*, vol. 8, pp. 140–144, 1994.
- [98] J. C. Chai, H. S. Lee, and S. V. Patankar, "Finite volume method for radiation heat transfer," *J Thermophys Heat Transfer*, vol. 8, p. 3, 1994.
- [99] S. C. Mishra, H. K. Roy, and N. Misra, "Discrete ordinate method with a new and a simple quadrature scheme," *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*, vol. 101, pp. 249–262, 2006.
- [100] F. Moufekkik, M. Moussaoui, A. Mezrhab, D. Lemonnier, and H. Naji, "MRT-lattice Boltzmann computations of natural convection and volumetric radiation in a tilted square enclosure," *Int J Therm Sci*, vol. 54, pp. 125–141, 2012.
- [101] J. Miranda Fuentes, K. Johannes, F. Kuznik, M. Cosnier, and J. Virgone, "Melting with convection and radiation in a participating phase change material," *Applied Energy*, 2012. In Press, corrected proof.
- [102] P. Łapka and P. Furmański, "Numerical modelling of solidification processes of semitransparent materials using the enthalpy and the finite volume methods," *Heat Mass Transfer*, vol. 44, pp. 937–957, 2008.
- [103] F. Kuznik, C. Obrecht, G. Rusaouen, and J.-J. Roux, "LBM based flow simulation using GPU computing processor," *Computers and Mathematics with Applications*, vol. 59, pp. 2380–2392, 2010.
- [104] F. Dubois, "Une introduction au schéma de Boltzmann sur réseau," in *ESAIM*, vol. 18, pp. 181–215, July 2007.
- [105] P. Lallemand and L.-S. Luo, "Theory of the lattice Boltzmann method : dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability," *Phys Rev E*, vol. 61, p. 6546(17), 2000.
- [106] D. Wolf-Gladrow, "A lattice Boltzmann equation for diffusion," *J Stat Phys*, vol. 79, pp. 1023–1032, 1995.
- [107] A. Mohamad and A. Kuzmin, "A critical evaluation of force term in lattice Boltzmann method, natural convection problem," *Int J Heat Mass Transfer*, vol. 53, pp. 990–996, 2010.
- [108] P. Roache, "Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics," *Annu Rev Fluid Mech*, vol. 29, pp. 123–160, 1997.
- [109] C. J. Roy, "Grid convergence error analysis for mixed-order numerical schemes," *AIAA Journal*, vol. 41, pp. 595–604, 2003.
- [110] L. F. Richardson and J. A. Gaunt, "The deferred approach to the limit. part i. single lattice. part ii. interpenetrating lattices," *Philos Trans R Soc London, Ser A*, vol. 226, pp. 299–361, 1927.

- [111] P. J. Roache, "Perspective : A method for uniform reporting of grid refinement studies," *J Fluids Eng*, vol. 116, pp. 405–413, 1994.

Annexes

Annexe A

Matrices de l'opérateur MRT

Nous allons présenter ici la construction des matrices de l'opérateur MRT.

A.1 Réseau 2D à 9 vitesses

Les moments associés à la masse volumique et la quantité de mouvement, sont facilement construits par :

$$\begin{aligned} \rho &= m_1 = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 \\ j_x &= m_4 = +f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 \\ j_y &= m_6 = +f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8 \end{aligned}$$

Ensuite, le moment lié à l'énergie cinétique, est une combinaison linéaire de la masse volumique et la définition d'énergie cinétique [104] :

$$m_2 = -\alpha_2 \rho + \beta_2 e$$

où, les coefficients α_2 et β_2 , sont déterminés de sorte que ce vecteur soit orthogonal au m_1 . Soit :

$$m_2 \cdot m_1 = -\alpha_2 + 4 \left(\frac{\beta_2}{2} - \alpha_2 \right) + 4(\beta_2 - \alpha_2) = 0$$

ce qui donne $\alpha_2 = \frac{2}{3}\beta_2$. Les valeurs retenues sont $\beta_2 = 6$ et $\alpha_2 = 4$, afin que la matrice obtenue soit facile à manipuler.

Puis, un autre moment peut être construit à partir du carré de l'énergie cinétique, et les moments déjà construits :

$$m_3 = -\alpha_3 \rho - \beta_3 m_2 + \gamma_3 e^2$$

Ainsi, pour les simulations avec le modèle $D2Q9$, la matrice de collision utilisée est :

$$\mathbf{M} \equiv \begin{pmatrix} \langle \rho | \\ \langle e | \\ \langle \epsilon | \\ \langle j_x | \\ \langle q_x | \\ \langle j_y | \\ \langle q_y | \\ \langle p_{xx} | \\ \langle p_{xy} | \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Les moments d'équilibre pour ce modèle sont [55] :

$$e^{\text{eq}} = \alpha_2 \rho + \beta_2 (j_x^2 + j_y^2) \quad (\text{A.1})$$

$$\epsilon^{\text{eq}} = \alpha_2 \rho + \beta_2 e \quad (\text{A.2})$$

$$q_x^{\text{eq}} = c_1 j_x \quad (\text{A.3})$$

$$q_y^{\text{eq}} = c_1 j_y \quad (\text{A.4})$$

$$p_{xx}^{\text{eq}} = j_x^2 - j_y^2 \quad (\text{A.5})$$

$$p_{xy}^{\text{eq}} = j_x j_y \quad (\text{A.6})$$

$$(\text{A.7})$$

Et la vitesse du son est donnée par :

$$c_s^2 = \gamma c_{s0}^2$$

et la viscosité est liée au temps de relaxation de p_{xx}

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2} \right)$$

Les taux de relaxations correspondants sont [105] :

$$s_1 = 1.64$$

$$s_2 = 1.2$$

$$s_8 = s_7$$

$$s_6 = s_4$$

$$s_4 = 8 \left(\frac{2 - s_7}{8 - s_7} \right)$$

Annexe B

Développement de Chapman-Enskog

Tout d'abord, nous faisons un développement en série de Taylor de l'équation de Boltzmann sur réseau (2.16) :

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) - f_i(\vec{x}, t) \approx \frac{\partial f_i}{\partial t} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial x_{\alpha}} + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right)^2 f_i \quad (\text{B.1})$$

$$= \Omega_i$$

Puis, nous exprimons les dérivées, et la fonction de distribution, comme des séries d'un paramètre ϵ :

$$f_i = f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (\text{B.2a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (\text{B.2b})$$

$$\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} = \epsilon \frac{\partial}{\partial x_{\alpha 1}} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (\text{B.2c})$$

Nous développons la dérivée spatiale avec un seul terme parce que nous nous intéressons au comportement macroscopique, et alors il n'y a qu'une seule échelle spatiale. Alors, dans ce qui suit nous omettons l'indice 1 pour la dérivée spatiale. En revanche, les échelles temporelles peuvent être différentes, les termes de la dérivée temporelle vont donc dépendre du problème étudié, et par conséquent, nous écrivons les indices correspondantes.

En remplaçant ces échelles dans l'équation (B.1) et en utilisant l'opérateur de collision BGK nous obtenons :

$$\begin{aligned} & \left(\epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \right) (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)}) + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \epsilon \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)}) \\ & + \frac{1}{2} \left(\epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \epsilon \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right)^2 (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)}) \\ & = -\frac{1}{\tau} (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} - f_i^{\text{eq}}) \quad (\text{B.3}) \end{aligned}$$

En regroupant les termes d'ordre zéro en ϵ , nous trouvons que :

$$f_i^{(0)} = f_i^{\text{eq}} \quad (\text{B.4})$$

Ainsi, les équations obtenues au niveau macroscopiques vont dépendre du choix de la distribution d'équilibre.

Un élément essentiel pour que l'on puisse retrouver les équations dans la limite macroscopique sont les propriétés de symétrie du réseau. En effet, afin de récupérer les équations macroscopiques correctes, l'ensemble de vitesses et leurs poids correspondants sont contraints par [106] :

$$\sum_i W_i = 1 \quad (\text{B.5a})$$

$$\sum_i W_i c_{i\alpha} = 0 \quad (\text{B.5b})$$

$$\sum_i W_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = c_S^2 \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{B.5c})$$

$$\sum_i W_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} = 0 \quad (\text{B.5d})$$

$$\sum_i W_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} = c_S^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}) \quad (\text{B.5e})$$

$$\sum_i W_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} c_{i\epsilon} = 0 \quad (\text{B.5f})$$

B.1 Équation de diffusion

Comme nous ne considérons que le phénomène de diffusion, nous avons une seule échelle du temps. En ce cas, nous ne retenons que le terme de deuxième ordre de la dérivée temporelle car la diffusion est plus lente que la convection [106] :

$$\frac{\partial}{\partial t} = \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}$$

Ensuite, nous remplaçons les dérivées et la fonction de distribution dans l'Éq. B.1 par leurs développements correspondants. En utilisant l'opérateur de collision BGK, nous avons :

$$\begin{aligned} & \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)}) + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \epsilon \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)}) \\ & + \frac{1}{2} \left(\epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \epsilon \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right)^2 (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)}) = -\frac{1}{\tau} (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} - f_i^{\text{eq}}) \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

La fonction d'équilibre est en ce cas :

$$f_i^{\text{eq}} = W_i T = f_i^{(0)} \quad (\text{B.7})$$

Puis, pour les termes de premier ordre en ϵ nous avons :

$$\sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \quad (\text{B.8})$$

Maintenant, nous faisons la somme de l'équation (B.6) sur toutes les directions de vitesse (indice i) en négligeant les termes d'ordre $\mathcal{O}(\epsilon^3)$ et supérieurs :

$$\begin{aligned} & \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \sum_i f_i^{(0)} + \sum_{\alpha} \epsilon \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \sum_i c_{i\alpha} f_i^{(0)} + \sum_{\alpha} \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \sum_i c_{i\alpha} f_i^{(1)} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} = 0 \end{aligned}$$

En remplaçant $f^{(0)}$ et $f^{(1)}$ par (B.7) et (B.8) respectivement, et en utilisant les propriétés de symétrie du réseau :

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} T \underbrace{\sum_i W_i}_1 + \sum_\alpha \epsilon \frac{\partial}{\partial x_\alpha} T \underbrace{\sum_i c_{i\alpha} W_i}_0 \\ + (-\tau) \sum_{\alpha,\beta} \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} T \underbrace{\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} W_i}_{c_s^2 \delta_{\alpha\beta}} \\ + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} T \underbrace{\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} W_i}_{c_s^2 \delta_{\alpha\beta}} = 0 \end{aligned}$$

Enfin, nous obtenons l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} - \tau c_s \vec{\nabla}^2 T + \frac{1}{2} c_s \vec{\nabla}^2 T = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} = c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \vec{\nabla}^2 T \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Sur cette équation, le coefficient qui accompagne le laplacien correspond à la diffusivité thermique α en unités LB, ainsi :

$$\alpha_{\text{LB}} = c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (\text{B.10})$$

B.2 Équation de Navier-Stokes

Dans l'équation de Navier-Stokes, nous avons diffusion ainsi qu'advection. Les échelles temporelles de ces deux phénomènes sont différentes, par conséquent, la dérivée temporelle s'exprime par l'équation (B.2b).

Nous allons séparer les différentes échelles du développement (B.3). Ainsi, nous avons pour l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon)$:

$$\frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{(0)} + \sum_\alpha c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \quad (\text{B.11})$$

Et pour l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon^2)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{(1)} + \frac{\partial}{\partial t_2} f_i^{(0)} + \sum_\alpha c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} f_i^{(1)} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} + 2 \frac{\partial}{\partial t_1} \sum_\alpha c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} + \sum_\alpha c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \sum_\beta c_{i\beta} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \right) f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Afin de simplifier cette équation, nous la récrivons ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_2} f_i^{(0)} + \frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{(1)} + \sum_\alpha c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} f_i^{(1)} \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t_1} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{(0)} + \sum_\alpha c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} f_i^{(0)} \right) \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{(0)} + \sum_{\beta} c_{i\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} f_i^{(0)} \right) = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)}$$

Maintenant, nous utilisons la (B.11) pour remplacer les termes entre parenthèses :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_2} f_i^{(0)} + \frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{(1)} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} f_i^{(1)} \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t_1} \left(-\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(-\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \right) = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)} \end{aligned}$$

Enfin, si nous regroupons les coefficients de $f_i^{(1)}$, nous obtenons l'équation suivante pour l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon^2)$:

$$\frac{\partial}{\partial t_2} f_i^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right) f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)} \quad (\text{B.13})$$

Le moment d'ordre n (en vitesse) de f_i est la somme sur toutes les directions i du produit $c_{i\alpha}^n f_i$. Alors, les moments d'ordre zéro et d'ordre un en vitesse de f_i correspondent à la masse volumique et la quantité de mouvement (ÉQS. 2.20a et 2.20b).

Pour retrouver le lien avec les équations macroscopiques nous devons faire les moments du développement à l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon)$ (ÉQ. B.11) et à l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ (ÉQ. B.11). Comme nous utilisons une méthode hybride pour la simulation des transferts thermiques, nous ne sommes pas concernés par la conservation de l'énergie, par conséquent, nous ne nous intéressons qu'aux moments d'ordre zéro et d'ordre un en vitesse.

Nous commencerons par le développement à l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon)$. Les moments d'ordre zéro et d'ordre un en vitesse de la (B.11) sont :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_1} \sum_i f_i^{(0)} + \sum_{\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \sum_i c_{i\alpha} f_i^{(0)} &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t_1} \sum_i c_{i\beta} f_i^{(0)} + \sum_{\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} &= 0 \end{aligned}$$

La partie droite de ces équations est égale à zéro du fait des propriétés des invariants de collision (cf. Section 2.2.1.1).

En utilisant la fonction d'équilibre présentée dans la Section 2.3.1 (ÉQ. 2.19) :

$$f_i^{\text{eq}} = W_i \rho \left[1 + \frac{c_{i\alpha} u_{\alpha}}{c_s^2} + \frac{u_{\alpha} u_{\beta}}{2c_s^2} \left(\frac{c_{i\alpha} c_{i\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right]$$

et les propriétés de symétrie du réseau (ÉQS. B.5), nous obtenons les relations suivantes [85] :

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} = \rho \quad (\text{B.15a})$$

$$\sum_i c_{i\alpha} f_i^{\text{eq}} = \rho u_{\alpha} \quad (\text{B.15b})$$

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{\text{eq}} = c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho u_{\alpha} u_{\beta} \quad (\text{B.15c})$$

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} f_i^{\text{eq}} = c_s^2 \rho (\delta_{\alpha\beta} u_{\gamma} + \delta_{\gamma\alpha} u_{\beta} + \delta_{\beta\gamma} u_{\alpha}) \quad (\text{B.15d})$$

où $\Pi_{\alpha\beta}$ est le tenseur de flux de quantité de mouvement.

Ainsi, les équations macroscopiques obtenues avec le développement de Chapman-Enskog jusqu'à l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon)$ sont :

$$\frac{\partial}{\partial t_1} \rho + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\rho u_\alpha) = 0 \quad (\text{B.16a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t_1} (\rho u_\beta) + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\rho u_\alpha u_\beta) = -\frac{\partial}{\partial x_\beta} p \quad (\text{B.16b})$$

où nous avons remplacé $p = c_s^2 \rho$. Ces équations correspondent aux équations de conservation pour un fluide non visqueux ou équations d'Euler.

Pour les équations de conservation d'un fluide visqueux, c'est-à-dire, les équations de Navier-Stokes, nous avons besoin des moments du développement à l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon^2)$:

$$\frac{\partial}{\partial t_2} \sum_i f_i^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\underbrace{\frac{\partial}{\partial t_1} \sum_i f_i^{(1)}}_0 + \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \underbrace{\sum_i c_{i\alpha} f_i^{(1)}}_0 \right) = -\frac{1}{\tau} \underbrace{\sum_i f_i^{(2)}}_0$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t_2} \sum_i c_{i\beta} f_i^{(0)} \\ & + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\underbrace{\frac{\partial}{\partial t_1} \sum_i c_{i\beta} f_i^{(1)}}_0 + \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)} \right) = -\frac{1}{\tau} \underbrace{\sum_i c_{i\beta} f_i^{(2)}}_0 \end{aligned}$$

Pour l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon^2)$, nous avons alors les équations suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial t_2} \rho = 0 \quad (\text{B.17a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t_2} (\rho u_\beta) + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = 0 \quad (\text{B.17b})$$

Nous pouvons trouver une expression pour le tenseur $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ en multipliant la (B.11) par $c_{i\alpha} c_{i\beta}$:

$$\frac{\partial}{\partial t_1} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} + c_{i\alpha} c_{i\beta} \sum_\gamma \frac{\partial}{\partial x_\gamma} c_{i\gamma} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)}$$

Puis, en faisant la somme sur les directions i et en réorganisant l'équation :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t_1} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} + \sum_\gamma \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)} \\ & -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t_1} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} + \sum_\gamma \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} f_i^{(0)} \right) = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)} = \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \end{aligned}$$

Ensuite nous utilisons les équations (B.15c) et (B.15d) :

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} &= -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t_1} (c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} c_s^2 \rho (\delta_{\alpha\beta} u_\gamma + \delta_{\gamma\alpha} u_\beta + \delta_{\beta\gamma} u_\alpha) \right) \\ &= -\tau \left(\underbrace{c_s^2 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} \rho + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \rho u_\gamma \right)}_0 \delta_{\alpha\beta} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial t_1} \rho u_\alpha u_\beta}_{\sim 0} + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} c_s^2 \rho (\delta_{\gamma\alpha} u_\beta + \delta_{\beta\gamma} u_\alpha) \right) \end{aligned}$$

Le premier terme du parenthèse est nulle de par l'équation (B.16a). En développant le deuxième terme, il se trouve qu'il est d'ordre $\mathcal{O}(u^3)$ et il doit alors être négligé [85]. Nous avons enfin :

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\tau c_s^2 \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \rho u_\beta + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \rho u_\alpha \right) \quad (\text{B.18})$$

En remplaçant la (B.18) dans (B.17b), nous obtenons :

$$\frac{\partial}{\partial t_2} (\rho u_\beta) - \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \rho u_\beta + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \rho u_\alpha \right) = 0$$

Finalement, en faisant la somme des différents ordres en ϵ (ÉQS. B.16 et B.17) nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\rho u_\alpha) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_\beta) + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\rho u_\alpha u_\beta) &= - \frac{\partial}{\partial x_\beta} p + \underbrace{\left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \rho u_\beta + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \rho u_\alpha \right)}_{\nu} \end{aligned}$$

Si nous supposons un fluide incompressible, ces équations deviennent :

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha} u_\alpha = 0 \quad (\text{B.19a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u_\beta + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (u_\alpha u_\beta) = - \frac{\partial}{\partial x_\beta} \frac{p}{\rho_\infty} + \nu \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} u_\beta + \nu \frac{\partial}{\partial x_\beta} \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_\alpha} u_\alpha}_0 \quad (\text{B.19b})$$

Lesquelles correspondent aux équations de Navier-Stokes, dont la viscosité cinématique est égale à :

$$\nu = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2$$

B.2.1 Avec force externe

Les résultats de la section précédente ont été obtenus à partir de l'équation de LB sans prendre en compte des forces externes. Lorsque l'on veut introduire une force externe, comme la gravité par exemple, nous ajoutons un terme à l'équation de Boltzmann sur réseau [79, 107] :

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) - f_i(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\vec{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)] + F_i \quad (\text{B.20})$$

Ce nouveau terme est une fonction de la force externe \vec{F} , pourtant, il n'y a pas de consensus sur la forme de cette fonction. Guo, Zheng et Shi [79] ont étudié différentes expressions de F_i et les équations macroscopiques qui en résultent. Ils montrent qu'afin d'assurer la conservation de la masse la définition de la quantité de mouvement doit considérer l'effet de la force. La quantité de mouvement est alors modifiée par la force ainsi :

$$\rho \vec{u} = \sum_i \vec{c}_i f_i + m \vec{F} \quad (\text{B.21})$$

où m est une constante à déterminer de sorte que les équations macroscopiques correspondent aux équations de Navier-Stokes.

En faisant un développement en série de Taylor de l'équation de LB avec force externe (ÉQ. B.20), puis en faisant le développement de Chapman-Enskog (en utilisant les séries de ϵ des ÉQS. B.2) on obtient :

$$\begin{aligned} & \left(\epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \right) (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)}) + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \epsilon \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)}) \\ & + \frac{1}{2} \left(\epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \epsilon \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right)^2 (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)}) \\ & = -\frac{1}{\tau} (f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} - f_i^{\text{eq}}) + \epsilon F_i^{(1)} \quad (\text{B.22}) \end{aligned}$$

Ensuite nous séparons les différentes échelles de l'ÉQ. B.22. Nous avons pour l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon)$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right) f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} + F_i^{(1)} \quad (\text{B.23})$$

Et pour l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon^2)$:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{(1)} + \frac{\partial}{\partial t_2} f_i^{(0)} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} f_i^{(1)} \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} + 2 \frac{\partial}{\partial t_1} \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \sum_{\beta} c_{i\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \right) f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)} \end{aligned}$$

En réorganisant cette dernière, et en utilisant l'ÉQ. B.23 :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t_2} f_i^{(0)} + \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right) f_i^{(1)} \\ & + \frac{1}{2} \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t_1} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right) f_i^{(0)} \right)}_{\text{ÉQ. B.23}} \\ & + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \sum_{\beta} c_{i\beta} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \right) f_i^{(0)}}_{\text{ÉQ. B.23}} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t_2} f_i^{(0)} + \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right) f_i^{(1)} \\ & + \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} + F_i^{(1)} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right) = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)} \end{aligned}$$

En regroupant les termes, nous avons pour l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon^2)$:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t_2} f_i^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right) f_i^{(1)} \\ & = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \right) F_i^{(1)} \quad (\text{B.24}) \end{aligned}$$

En faisant les moments d'ordre zéro en vitesse des ÉQS. B.23 et B.24 on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t_1} \rho + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\rho u_\alpha^{(0)}) = A$$

$$\frac{\partial}{\partial t_2} \rho + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (-m F_\alpha) = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} A + \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} B_\alpha \right)$$

Où nous avons utilisé les relations suivantes [79] :

$$\sum_i F_i = A \quad (\text{B.26a})$$

$$\sum_i c_{i\alpha} F_i = B_\alpha \quad (\text{B.26b})$$

Puis en posant :

$$A = 0 \quad B_\alpha = n F_\alpha \quad n + \frac{m}{\tau} = 1 \quad (\text{B.27})$$

Le moment d'ordre zéro en vitesse de l'ÉQ. B.20 s'obtient en fusionnant les échelles de ϵ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\rho u_\alpha^{(0)}) = \left(m - \frac{1}{2}\right) \frac{\partial}{\partial x_\alpha} F_\alpha \quad (\text{B.28})$$

Nous voyons que l'ÉQ. B.28 est équivalent à l'équation de conservation de la masse si $m = 1/2$.

Annexe C

Vérification et validation des solutions numériques

Il est entendu par vérification la résolution correcte des équations et par validation la résolution des équations correctes [108].

C.1 Estimation de l'erreur

La résolution numérique des équations différentielles, telles que l'équation de Boltzmann ou l'équation des transferts radiatifs entraîne évidemment des erreurs. Ces erreurs peuvent avoir différentes origines. Hormis l'erreur humaine, ces erreurs sont dues à la précision du calculateur et au fait d'utiliser une approximation discrète des équations continues. Nous nous bornerons ici à ces dernières. À son tour, la solution des équations discrètes dépend des conditions initiales et aux limites. Nous appelons erreur de troncature, à la différence entre la solution exacte et la solution discrète sans prendre en compte les conditions aux limites, et erreur de discrétisation, l'erreur lorsque les conditions aux limites sont prises en compte. Étant donné les problèmes traités dans ce manuscrit, nous ne parlerons que de cette dernière. Nous écrivons cette erreur comme la différence entre la solution exacte f_{exacte} et celle obtenue avec un certain maillage f_k [109] :

$$DE_k = f_{\text{exacte}} - f_k \quad (\text{C.1})$$

Cette erreur peut être évaluée, pour des valeurs locales, par exemple la température sur chaque nœud, ou pour des valeurs globales, par exemple le flux sur une paroi. Or, de par sa définition, nous avons besoin d'une solution exacte, pourtant, sauf pour des cas très simples, nous ne connaissons pas cette solution. Quelle solution de référence utilisons-nous alors ?

L'extrapolation de Richardson [110] permet de faire une estimation de l'ordre de l'erreur ou d'obtenir une solution d'ordre supérieur, qui peut être utilisée comme référence.

C.1.1 Extrapolation de Richardson

L'erreur de discrétisation dépend du maillage utilisé, et devrait diminuer en diminuant la taille du maillage, c'est-à-dire, que la solution numérique s'approche de la solution exacte au fur et à mesure que la taille de la maille tend vers zéro.

En supposant que la solution discrète f peut être défini comme un développement en série de puissances du pas d'espace (dans la littérature $h = \Delta x$), la solution f s'écrit :

$$f = f_{\text{exact}} + g_1 h^1 + g_2 h^2 + \dots + g_n h^n + \mathcal{O}(h^{n+1}) \quad (\text{C.2})$$

L'extrapolation de Richardson fournit une solution plus proche de f_{exacte} . Cette nouvelle solution est d'ordre quatre, à condition que l'on n'utilise que des différences finies centrées, sinon, elle sera d'ordre trois [108].

La même procédure peut être appliquée pour avoir une estimation de l'ordre de convergence.

L'extrapolation de Richardson n'est pas limitée aux raffinements entiers, et la solution d'ordre supérieure peut être obtenue pour le maillage grossier ou le maillage fin. Or, nous devons prendre en compte les hypothèses sous-jacentes. Premièrement, les solutions doivent être continues (*smooth*). Deuxièmement, l'erreur doit converger de façon monotone. Troisièmement, les solutions doivent être dans la zone de convergence asymptotique. Enfin, l'erreur locale doit être du même ordre que l'erreur globale.

Par ailleurs, certains défauts de l'extrapolation de Richardson sont connus, à savoir, l'augmentation de l'erreur d'arrondi, et le fait que la solution extrapolée pourrait ne pas être conservative, c'est-à-dire, qu'elle pourrait ne pas satisfaire l'équation différentielle, comme le remarque par exemple De Vahl Davis, dans son benchmark de convection naturelle [77]. De ce constat, il est recommandé d'utiliser l'extrapolation de Richardson pour estimer l'erreur de discrétisation, et non pas pour obtenir une solution de référence (i.e. d'ordre supérieure).

Cette erreur peut pourtant avoir différentes interprétations. Afin de pouvoir comparer les résultats d'une étude de maillage, Roache [111] a proposé l'indice de convergence de maillage GCI (*Grid Convergence Index*).

C.1.2 Indice de convergence de maillage

Cet indice représente une plage d'erreur ou l'incertitude sur la solution obtenue. Il a l'avantage de ne requérir que deux maillages, et en plus, leur rapport ne doit pas être forcément entier (en général on double la taille du maillage, lors d'une étude de convergence). L'indice de convergence est défini par l'ÉQ. C.3.

$$\text{GCI}_1 = 3 \frac{|\epsilon|}{r^p - 1} \quad (\text{C.3})$$

où ϵ est l'erreur relative au maillage le plus fin. En général on note f_1 la solution avec le maillage le plus fin et f_2 la solution avec un maillage plus grossier. L'erreur relative est donc définie par :

$$\epsilon = \frac{f_2 - f_1}{f_1}$$

Le facteur 3 dans la (C.3) implique que dans une étude de convergence d'un problème, dont la méthode numérique utilisée est censée d'ordre deux $p = 2$ et le rapport de raffinement du maillage a été deux ($r = 2$), le GCI soit égale à l'erreur relative ϵ .

C.1.3 Ordre de convergence

Pour le calcul de l'erreur de discrétisation (ou le GCI), à partir de l'extrapolation de Richardson, nous avons supposé connu l'ordre de convergence p . Cet ordre est théoriquement donné par le schéma de discrétisation choisi. Par exemple, en utilisant des différences finies centrées $p = 2$. Pourtant, l'ordre observé lors d'une simulation peut différer de l'ordre théorique, par exemple, lors du couplage des

méthodes d'ordre différent. Pour certains problèmes, il est également possible d'obtenir un ordre supérieur à la théorie, du fait de compensations d'erreurs [108]. Il est alors souhaitable de déterminer cet ordre pour chaque problème, afin de borner correctement les erreurs correspondantes.

En exprimant la solution avec un maillage uniforme k par son développement en série (Éq. C.2), en utilisant trois maillages différents tout en gardant un rapport constant de raffinement r , l'ordre de convergence p peut être calculé avec [108] :

$$p = \frac{\ln \left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1} \right)}{\ln r} \quad (\text{C.4})$$

Annexe D

Fragment du code développé

Nous présentons dans cette annexe la fonction principale `main` du code `Chaphalab` (changement de phase avec lattice Boltzmann). Certains morceaux de la fonction ne sont pas montrés (entre `main` et `entrees`, et le morceau pour imprimer les résultats), afin de diminuer la quantité de texte et parce qu'ils n'apportent rien à la compréhension de la structure du code.

```
/*=====
Chaphalab.c
- Simule le changement de phase avec
convection et rayonnement CLO
- Ecoulement par la methode LB D2Q9
- Temperature par differences finies
avec 9 points
- Rayonnement par la methode des ordonnees
discrettes avec quadrature S4
=====*/
#include "global.h"

int main(int argc, char *argv[])
{
    /* ----- entrees ----- */
    printf("tmax tvideo?\n");
    if(scanf("%d %d",&tmax,&tvideo));
    printf("Flux radiatif ?\n");
    if(scanf("%lf", &QRAD));
    /* ----- critere de convergence ----- */
    converge=1e-6;
    /* ----- allouer memoire ----- */
    allocate();
    /* ----- parametres ----- */
    parametres();
    parametres_ray();
    /* ----- rappel ----- */
    printf("Parametres : \n");
    printf("dx=%g\ndt=%g\n", dx, dt);
    printf("alpha = %f\n", alpha);
    printf("tau = %f\n", tau);
    printf("Ra = %f\n", Ra);
    printf("Pr = %f\n", Pr);
    printf("Pl = %.3f\n", Pl);
```

D. Fragment du code développé

```
printf("Ntmax = %d\n",Ntmax);
Nplot=(int) (Ntmax/2000);
printf("Nplot = %d\n",Nplot);
/* ----- conditions initiales et limites ----- */
initialize(T,Te,0,Nx-1,0,Ny-1);
for (m=0; m<Q; m++)
{
    initialize(f[m],rho_0*w[m],0,Nx-1,0,Ny-1);
}
cl_T(T);

/* ----- debut du cycle ----- */
err_L=0.1;
err_T=0.1;
err_G=0.1;

tini=clock();
for (Nt=0; Nt<=Ntmax; Nt++)
{
    /*calcul radiatifs*/
    rayonnement();
    /*calcul des temperatures*/
    temperature();
    /*condition aux limites*/
    cl_T(Tnew);
    /*ecoulement par lattice Boltzmann*/
    collision();
    propagation();
    /*calcul de la fraction liquide*/
    update(fl,fl_old,Nx,Ny);
    enthalpie();
    /*calcul des erreurs*/
    err_T=erreur(Tnew,T,Nx,Ny);
    /*mise a jour*/
    update(Tnew,T,Nx,Ny);

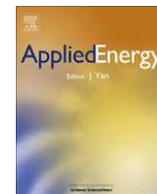
    /* ---- impression des resultats ----- */
}
tfin=clock();
tcalcul=(double) (tfin-tini)/CLOCKS_PER_SEC;
printf("temps CPU=%f",tcalcul)
return 0;
}
```

Annexe E

Article soumis à la revue *Applied Energy*

Contents lists available at [SciVerse ScienceDirect](http://www.sciencedirect.com)

Applied Energy

journal homepage: www.elsevier.com/locate/apenergy

Melting with convection and radiation in a participating phase change material

Johann Miranda Fuentes^{a,c,d}, Kévyen Johannes^{b,c}, Frédéric Kuznik^{a,c,*}, Matthieu Cosnier^d,
Joseph Virgone^{b,c}

^a INSA-Lyon, CETHIL, F-69621 Villeurbanne, France

^b Université Lyon 1, CETHIL, F-69622 Villeurbanne, France

^c Université de Lyon, CNRS, UMR5008, F-69622 Villeurbanne, France

^d Université Paris-Est, CSTB, Département Enveloppes et Revêtements, Division Caractérisation Physique des Matériaux, 24 Rue Joseph Fourier, 38400 Saint Martin D'Hères, France

HIGHLIGHTS

- ▶ Modelling of the phase change with natural convection and radiation.
- ▶ Novel LBM MRT with phase change and energy equation.
- ▶ Diffuse radiation increases the heat transfer but not global behavior of phase change.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 2 August 2012

Received in revised form 13 November 2012

Accepted 15 November 2012

Available online xxxx

Keywords:

Phase change

Natural convection

Lattice Boltzmann model

Discrete ordinates method

ABSTRACT

This article presents a novel model to simulate melting of a phase change material, with natural convection and radiation. For the phase change problem, the enthalpy formulation is used. Energy equation is solved by finite differences, whereas fluid flow equations are solved by the lattice Boltzmann method. For radiation intensity, the radiative transfer equation is solved by the discrete ordinates method, and then radiation flux is added into the energy equation. The model is first validated with literature results. Then, a glass brick wall filled with a fatty acid is simulated to evaluate the heat transfer processes. The results show that (1) natural convection plays an important role in the transitional behaviour of the global heat transfer process and (2) the long wave radiation has few impacts on the melting process.

© 2012 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The practical design of low energy consumption buildings is often accomplished by the use of passive solar heat gains. Phase Change Materials (PCMs) wallboards are passive systems extensively studied to improve both thermal comfort and energy consumption [1–11]. However, the efficiency of such systems has to be improved due to weak heat transfers between the air and the wall and inside PCM (i.e. low thermal conductivity [2,8]). PCM facade panel is another passive system in which the PCM receives solar radiation [12]. PCM is stored in a container with different aspect ratio than those encountered in the PCM wallboards – often shape-stabilized PCM. Therefore, a specific study concerning the system efficiency has to be carried out to evaluate the influence of convection, conduction and radiation heat transfers on the phase change process. The container is a glass block wall filled with a fatty acid which composed a PCM facade

panel. To achieve these objectives the melting process has been studied by means of computational fluid dynamics.

Natural convection melting has been numerically studied [13–15] in particular using Navier–Stokes equation but also by means of Lattice Boltzmann Method (LBM) [15–18]. The LBM provides a powerful alternative approach for simulation of fluid flow involving phase change. Besides its numerical stability and accuracy, two of the major advantages of LBM are the possibility to implement no-slip boundary conditions in complex geometries [19] and the high parallel implementation of the algorithm [20,21].

In this paper we intend to develop a lattice Boltzmann method coupling a finite difference scheme and a Discrete Ordinate Method (DOM) to model a fatty acid conduction, convection and radiation melting. Then, part 2 deals with the formulation of the problem. The numerical modelling is developed in parts 3–7:

- Fluid flow with LBM part 3.
- Phase change phenomena part 4.
- Energy equation part 5.
- Radiative heat transfer with DOM part 6.
- Boundary conditions part 7.

* Corresponding author at: INSA-Lyon, CETHIL, F-69621 Villeurbanne, France.
Tel.: +33 4 72 43 84 59; fax: +33 4 72 43 85 22.

E-mail address: frederic.kuznik@insa-lyon.fr (F. Kuznik).

Nomenclature

c_p	specific heat (J/kg K)	β	thermal expansion coefficient (K^{-1}), extinction coefficient ($\beta = \kappa + \sigma_s$) (m^{-1})
f_i	liquid fraction	ε	the emissivity
H, h	enthalpy (J/kg)	ϵ	the energy square (J^2)
I	radiation intensity (W/m^2)	η	direction cosine in y
I_b	black body emission (W/m^2)	γ	interpolation coefficient
k	conductivity ($W/m K$)	κ	absorption coefficient (m^{-1})
L_h	latent heat (J/kg)	μ	direction cosine in x
q_c	conduction heat flux (W/m^2)	ν	viscosity (m^2/s)
q_r	radiation heat flux (W/m^2)	ω	scattering albedo $\omega = \sigma_s/\beta$
T	temperature (K)	σ	Stefan–Boltzmann constant ($W/m^2 K^4$)
Greek symbols		σ_s	scattering coefficient (m^{-1})
α	thermal diffusivity (m^2/s)	ρ	density (kg/m^3)

Part 8 deals with (1) the validation of the model (comparison with literature and experimental results) and (2) the analysis of the numerical results concerning a tall brick of phase change taking into account long wave radiations. Finally, the model developed in this study is able to handle complex problems with coupled heat transfers.

2. Problem formulation

Phase change phenomena are considered moving boundary problems, as the interface between the solid and liquid phases is moving over time. There are two approaches to deal with this problem. The first one, is to formulate an energy equation for each phase, and coupling them by an energy balance at the interface (*Stefan's condition*). This approach requires a moving grid, which follows the melting front position. The second one entails expressing the energy equation with the enthalpy. Then, the energy equation is valid for the whole domain, the interface condition is implicit and therefore a fixed grid can be used.

In this study, the enthalpy method is used because (1) it requires a fixed grid and (2) it allows the modelling of non-pure and non-eutectic mixture. The energy equation, including convection and radiation, is expressed as:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) - L_h \frac{\partial f_l}{\partial t} - \nabla \cdot \vec{q}_r \quad (1)$$

Using the following dimensionless quantities:

$$x^* = \frac{x}{H} \quad u^* = \frac{u}{u_\infty} \quad t^* = \frac{tu_\infty}{H} \\ T^* = \frac{T - T_m}{\Delta T} \quad \phi = \frac{\Delta T}{T_{av}} \quad q_r^* = \frac{q_r}{\sigma T_{av}^4}$$

And the dimensionless parameters:

$$I^* = \frac{I}{\sigma T_{av}^4} \quad I_b^* = \frac{1}{\pi} \left(\phi T^* + \frac{T_m}{T_{av}} \right)^4 \quad Pl = \frac{k}{H \sigma T_{av}^3} \\ Ra = \frac{g \beta \Delta T H^3}{\nu \alpha} \\ Ste = \frac{c_p \Delta T}{L_h} \\ Pr = \frac{\nu}{\alpha}$$

where the reference velocity is $u_\infty = \sqrt{g \beta \Delta T H}$, $\Delta T = T_h - T_m$ and $T_{av} = (T_h + T_m)/2$.

The governing dimensionless energy equation (Eq. (1)) becomes:

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \vec{u}^* \cdot \nabla^* T^* = \frac{\nabla^{*2} T^*}{\sqrt{Ra} \times Pr} - \frac{1}{Ste} \frac{\partial f_l}{\partial t^*} - \frac{\nabla^* \cdot \vec{q}_r^*}{\phi \times Pl \times \sqrt{Ra} \times Pr} \quad (2)$$

Using the same set of dimensional scales, the system of equations for convection melting, in the case of Newtonian incompressible fluids under the Boussinesq approximation (and neglecting viscous heating), can be written:

$$\nabla \cdot \vec{u}^* = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \vec{u}^*}{\partial t^*} + \vec{u}^* \cdot (\nabla^* \vec{u}^*) = -\nabla^* p^* + \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \times \nabla^{*2} \vec{u}^* - T^* \quad (4)$$

These equations cannot be solved analytically and a numerical integration is required. Eq. (2) is solved using a finite difference method (Section 5). Eqs. (3) and (4) are solved using the Lattice Boltzmann Method (Section 3). Radiative heat flux is solved by the DOM described in Section 6.

3. Fluid flow with the lattice Boltzmann method

The LBM is a mesoscopic approach in fluid mechanics. Within this approach, fluid is described with a particle distribution function, which evolves in discrete space and time (a $DdQq$ lattice, d dimensions and q velocities) following two steps, propagation and collision. These steps are expressed in the lattice Boltzmann equation:

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) - f_i(\vec{x}, t) = \Omega_i \quad (5)$$

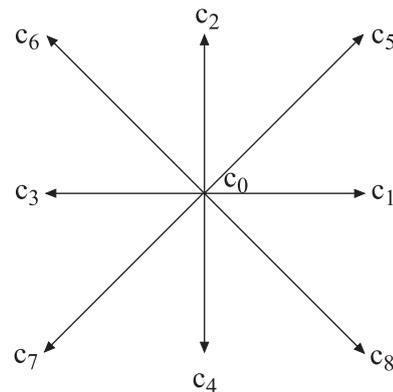


Fig. 1. D2Q9 quadrature.

where f_i is the particle distribution function, which is the probability of finding a particle in position \vec{x} , time t and velocity \vec{c}_i ($i = 0, \dots, q-1$, see Fig. 1), and Ω_i is the collision operator, giving the relaxation towards an equilibrium state.

There are two collision approaches: the single relaxation time (called lattice Bhatnagar–Gross–Krook, LBGK), where all moments have the same relaxation rate, or the multiple relaxation times (MRT), where each relaxation rate can be tuned according to the physical phenomena involved.

Macroscopic quantities are obtained from particle distribution function moments:

$$\rho = \sum_{i=0}^{q-1} f_i \quad \rho \vec{u} = \sum_{i=1}^{q-1} f_i \vec{c}_i \quad (6)$$

There are three approaches for thermal simulations with the LBM. The multi speed approach [22], which uses a bigger set of velocities to guarantee the energy conservation. The multi distribution approach [23–25], which uses the density distribution function for the velocity field, and a second energy density distribution function for temperature field. And the hybrid approach [26], which uses the LBM for the velocity field, and any other method for the temperature field.

In spite of (LBGK) possible numerical instabilities [27], it has been used in phase change simulations [16,28,17] because of its simplicity.

It has been shown in [26], that the numerical instability problem comes from a coupling between the shear and energy modes, and that this coupling is inherent to the lattice Boltzmann model. Indeed, the MRT [27] collision operator, has been proved to enhance numerical stability compared to the simpler LBGK collision. Therefore, the hybrid approach with a MRT LBM model is used in this study.

As macroscopic quantities are obtained from distribution function moments, a square matrix can be used to represent the transformation. f_i could be expressed in terms of moments m_i , by $|m\rangle = \mathbf{M}|f\rangle$. \mathbf{M} is a matrix constructed from velocities [26] (see Appendix A for details concerning the collision matrix). Hence, collision is expressed as moment relaxation:

$$\tilde{m}_i = m_i - s_i(m_i - m_i^{\text{eq}}) \quad (7)$$

where \tilde{m}_i , is the post-collision moment, s_i is the relaxation rate (given in [26]), and m_i^{eq} is the equilibrium moment.

The physical signification of the moments are given by:

$$|m\rangle = (\rho \quad j_x \quad j_y \quad e \quad \epsilon \quad q_x \quad q_y \quad p_{xx} \quad p_{xy})^T$$

where ρ is the density, j_x and j_y the x and y components of momentum (mass flux), e the energy mode, ϵ is related to the 4th order moment of energy, more specifically it is defined as the part of the kinetic energy square independent of the density and kinetic energy ($m_2 = \epsilon = e^2$) [29]. q_x and q_y correspond to the x and y components of energy flux, p_{xx} and p_{xy} correspond to the diagonal and off-diagonal component of the stress tensor.

After collision moments are transformed into \tilde{f}_i by inverting Eq. (7), and then distribution functions are propagated to neighbouring nodes.

During collisions, conserved quantities such as mass and/or momentum do not change, then, $m_i = m_i^{\text{eq}}$ for conserved moments, and $m_i \neq m_i^{\text{eq}}$ for non-conserved moments. Hence, depending on modelled phenomena, some moments have no physical meaning, and their relaxation rate could be tuned to enhance stability.

More information concerning the numerical model can be found in [27] and [26].

The Chapman–Enskog expansion applied to the previously described model allows to recover the Eqs. (3) and (4) (see [30] for more information about the procedure).

4. Phase change

The phase change is treated by the enthalpy method. The enthalpy is related to temperature by:

$$h = c_p T + f_l L_h \quad (8)$$

where f_l is the liquid fraction, calculated as function of enthalpy via:

$$f_l = \begin{cases} 0 & \text{if } h \leq h_s \\ \frac{h-h_s}{h_l-h_s} & \text{if } h_s < h < h_l \\ 1 & \text{if } h \geq h_l \end{cases} \quad (9)$$

Note that C_p is considered constant for solid and liquid.

5. Finite differences for temperature field

The advection/diffusion components of the energy equation (Eq. (2)) are discretized by second order finite difference method, and according to the velocity model we use a nine point stencil, as in [26], with the following expressions for gradient and Laplacian:

$$\nabla_x T(i,j) = T(i+1,j) - T(i-1,j) - \frac{1}{4}[T(i+1,j+1) - T(i-1,j+1) + T(i+1,j-1) - T(i-1,j-1)] \quad (10)$$

$$\nabla^2 T(i,j) = 2[T(i+1,j) + T(i-1,j) + T(i,j+1) + T(i,j-1)] - \frac{1}{2}[T(i+1,j+1) + T(i-1,j+1) + T(i+1,j-1) + T(i-1,j-1)] - 6T(i,j) \quad (11)$$

For time marching an explicit scheme is used, which is conditionally stable, so care must be taken when choosing space and time step.

6. Radiative heat transfer with discrete ordinates method

To solve the energy Eq. (2), the radiation heat flux \vec{q}_r is calculated integrating the radiation intensity $I(\vec{r}, \hat{s})$ travelling in direction \hat{s} , passing through an area normal to \hat{s} [31] in a solid angle Ω . The Discrete Ordinate Method (DOM) is then used to solve numerically the angular integrals leading to a weighted sum (Eq. (12)).

$$\vec{q}_r = \int_{4\pi} I(\vec{r}, \hat{s}) \hat{s} d\Omega \simeq \sum_{m=1}^M I_{mp} \hat{s} w_m \quad (12)$$

where the directions m and weights must follow certain conditions (for further details see [31]).

I_{mp} is calculated according to the discrete form of the Radiative Transfer Equation (RTE) (Eq. (13)) where the spectral dependence of radiative quantities is omitted for simplicity. The right side of the equation corresponds to the energy gained by emission and in-scattering.

Table 1
S₄ quadrature.

Directions			Weights
μ	η	ζ	w
0.2958759	0.2958759	0.9082483	0.5235987
0.2958759	0.9082483	0.2958759	0.5235987
0.9082483	0.2958759	0.2958759	0.5235987

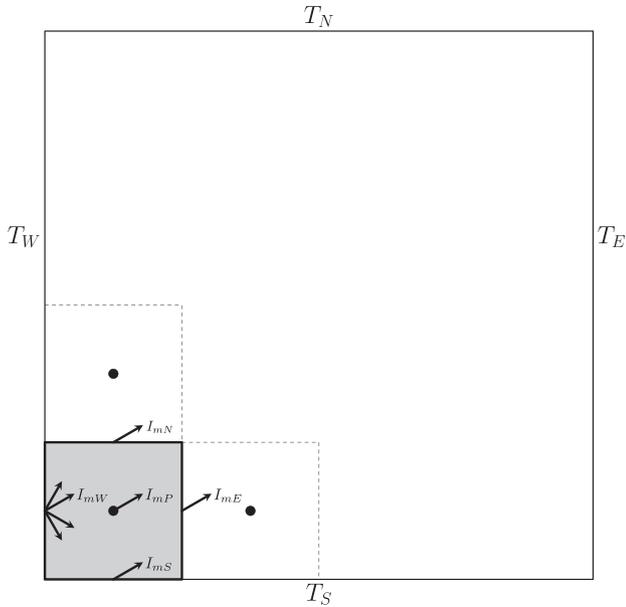


Fig. 2. Radiative boundary conditions.

$$I(\vec{r}, \hat{s}) = \epsilon I_b(\vec{r}) + \frac{1 - \epsilon}{\pi} \int_{\hat{n} \cdot \hat{s}' < 0} |\hat{n} \cdot \hat{s}'| I(\vec{r}, \hat{s}') d\Omega' \quad (17)$$

Horizontal walls are adiabatic, so when including radiation, conduction plus radiation heat fluxes equals zero ($q_c + q_r = 0$). In dimensionless form, this condition is given by:

$$\frac{\partial T^*}{\partial y^*} = \frac{q_r^*}{\phi Pl} \quad (18)$$

where a second order finite difference was used for the derivative.

For black body radiation intensity at the horizontal walls, an interpolation between solid and fluid node temperatures was used as surface temperature.

8. Results and discussion

The first part of this section deals with the validation of the numerical model. Then results are presented for a fatty acid in a glass brick.

8.1. Natural convection

First, natural convection of air ($Pr = 0.71$) in a square cavity was considered. Horizontal walls are adiabatic, and vertical walls have imposed temperatures T_h and T_c . All are considered no-slip boundaries. Simulations were carried out for different Rayleigh numbers. Average Nusselt number at the hot wall obtained are presented in Table 2 and compared against the benchmark of de Vahl Davis [33]. In all cases the differences are under 0.5%.

8.2. Convection and radiation

For coupled convection and radiation, a test case was simulated too. The physical model is a square enclosure, filled with a grey, absorbing, emitting and nonscattering fluid ($\omega = 0$). The vertical walls have imposed temperatures (T_h and T_c), and horizontal walls are adiabatic. All walls are considered black and no slip boundaries. Fluid properties are given by the following dimensionless numbers $Pr = 0.71$, $Ra = 5.0 \times 10^6$, $Pl = 0.02$ and a temperature ratio of $\phi = 1.5$.

Heat transfer at the hot wall is given by an average Nusselt number. Total and radiation Nusselt numbers obtained are shown in Table 3. We can observe that the differences are small compared to [34]. Isotherms for an optical thickness $\tau = \beta L = 0.2$ are presented in Fig. 3, where the solid lines are our results and the crosses are values taken graphically from [34]. Once again our results are in very good agreement.

8.3. Melting with natural convection

A test case for melting of two PCM was studied, namely, tin (low Prandtl) and octadecane (high Prandtl). It consists of a cavity filled with a pure material. The upper and lower walls are supposed adiabatic, whereas the left and right walls are fixed at a constant set point temperature (see Fig. 4). The left wall is heated over the melting temperature, causing the melting process to begin. The fluid is supposed to be incompressible, with constant properties and the Boussinesq approximation for density variation. N-Octadecane

Table 2
Nusselt number at the hot wall.

	Nu_0 [33]	Nu_0 (this work)	Grid
$Ra = 10^4$	2.238	2.239	139×139
$Ra = 10^5$	4.509	4.510	139×139
$Ra = 10^6$	8.817	8.828	139×139

$$\hat{s} \cdot \nabla I(\vec{r}, \hat{s}) + \beta I(\vec{r}, \hat{s}) = \beta(1 - \omega) I_b(\vec{r}) + \frac{\beta \omega}{4\pi} \times \int_{4\pi} I(\vec{r}, \hat{s}') \Phi(\hat{s}', \hat{s}) d\Omega' \quad (13)$$

Using the discrete form of Eq. (13), the S_N -approximation, namely, the S_4 set which gives the direction cosines (see Table 1) and a 2D finite volumes approach, I_{mp} is given by Eq. (14):

$$\mu_m \frac{(I_{mE} - I_{mW})}{\delta x} + \eta_m \frac{(I_{mN} - I_{mS})}{\delta y} + \beta I_{mp} = \beta S_{mp} \quad (14)$$

Unknowns I_{mE} and I_{mN} are obtained by the boundary conditions I_{mW} and I_{mS} (see Fig. 2) where the link between surface and node intensities is usually done by the linear relationship $I_{mp} = \gamma I_{mE} + (1 - \gamma) I_{mW}$. Thus I_{mp} is expressed as the following equation.

$$I_{mp} = \frac{\mu_m \delta y I_{mW} + \eta_m \delta x I_{mS} + \beta \delta x \delta y \gamma S_{mp}}{\mu_m \delta y + \eta_m \delta x + \beta \delta x \delta y \gamma} \quad (15)$$

The step scheme ($\gamma = 1.0$) has been chosen, because of its simplicity, and because it ensures positive intensity values [32].

The DOM is well adapted for the diffusive component of radiation, however it is not for the collimated component, unless discrete directions coincide with the collimated beam. The DOM is used only when directional integration is needed, namely, diffuse boundary conditions and radiation heat fluxes.

7. Boundary conditions

All configurations deal with heat transfer in an enclosure with different aspect ratios. Dirichlet boundary conditions (fixed temperature) are imposed at the vertical walls. The no-slip boundary condition for fluid flow in the LBM has been shown, to be achieved half way the boundary nodes. To be coherent with the fluid and thermal boundary conditions, the temperature is fixed half way the boundary nodes too, using the following interpolation:

$$T_{solid} = 2T_{wall} - T_{fluid} \quad (16)$$

For the radiative heat transfer, a grey medium is considered, with diffusively reflecting and emitting walls, therefore radiation intensity at boundaries is given by:

Table 3
Nusselt number at the hot wall.

	Ref. [34]		This work		Grid
	Nu_R	Nu_T	Nu_R	Nu_T	
$\tau = 0.2$	36.718	45.509	37.465	46.108	139×139
$\tau = 1.0$	31.108	38.725	31.550	39.074	139×139
$\tau = 5.0$	23.801	31.778	23.798	31.703	139×139

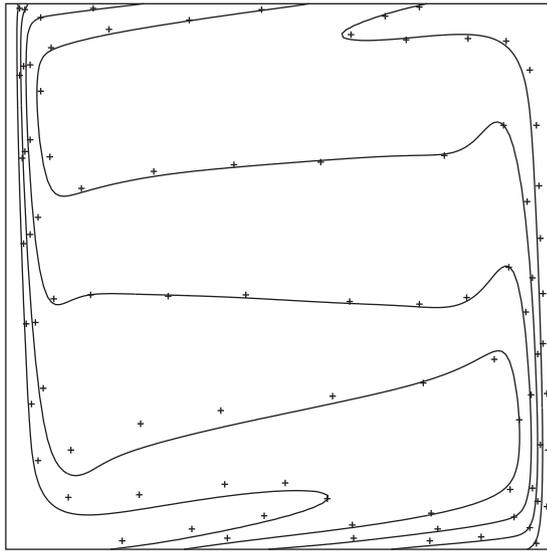


Fig. 3. Isotherms in convection and radiation $Ra = 5 \times 10^6$, $\beta = 0.2$.

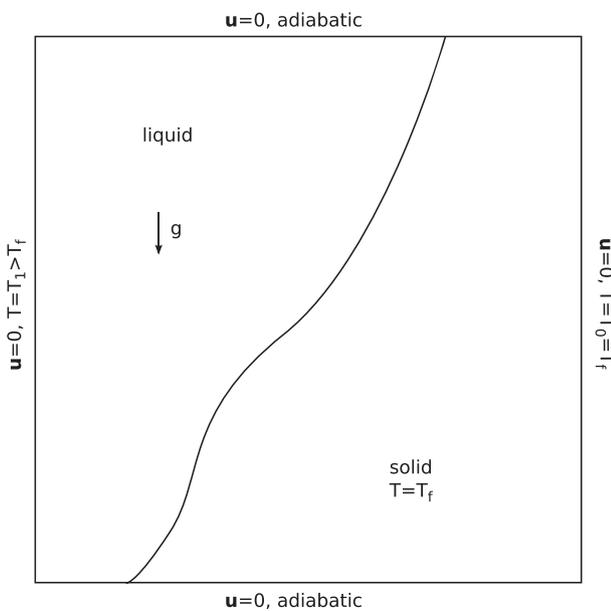
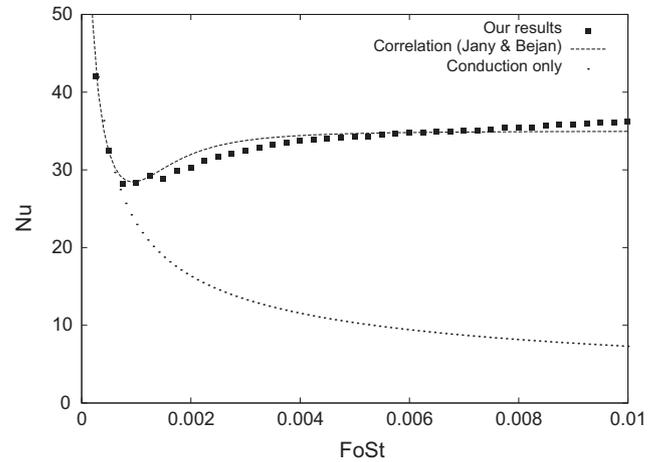


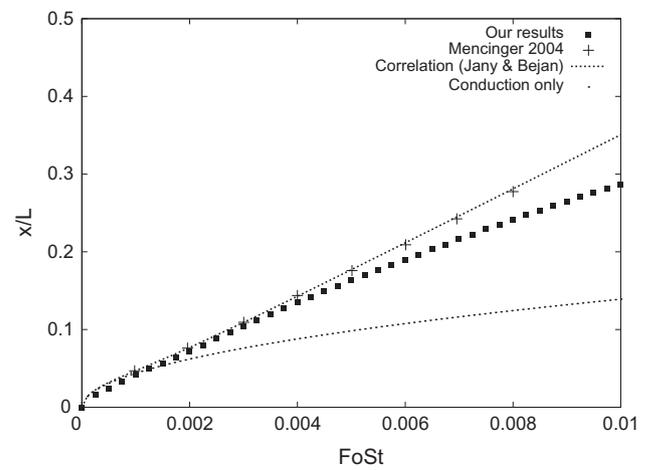
Fig. 4. Thermal boundary conditions on the cavity.

results (case 4 of [13]) are presented hereafter to validate the numerical modelling.

A 128×128 uniform grid was used. Average Nusselt number at the hot wall and average melting front position are shown in Fig. 5a and b and compared to the respective correlations given in [35] and to the pure conduction solution. From these figures, natural convection has a significant effect on the melting process: the heat transfer and the melted fraction increase in comparison



(a) Nusselt number at hot wall



(b) Melted fraction

Fig. 5. Melting of octadecane $Ra = 10^8$, $Pr = 50$, $St = 0.1$.

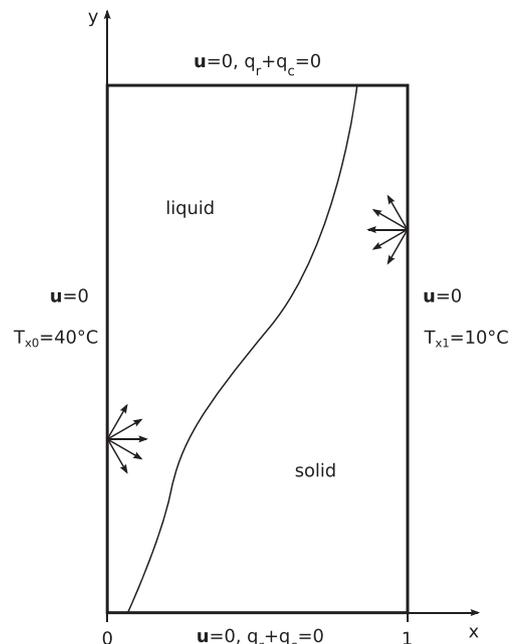


Fig. 6. Boundary conditions.

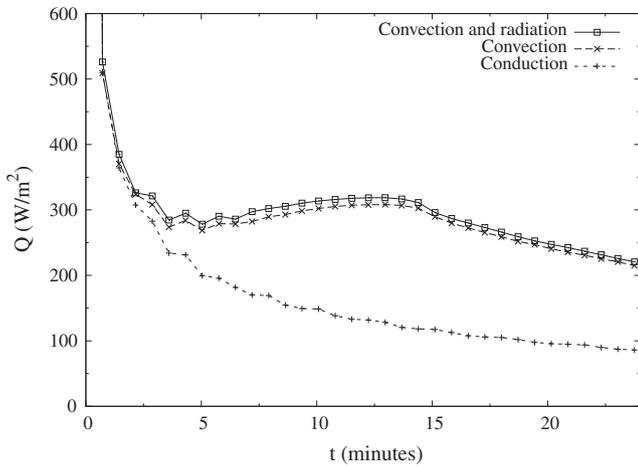


Fig. 7. Absorbed heat flux within the PCM.

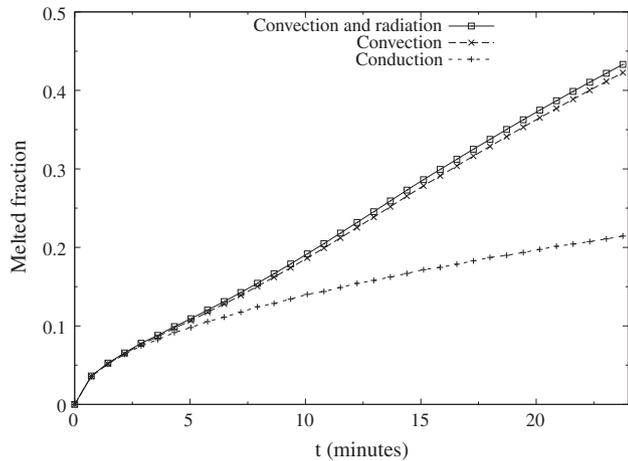


Fig. 8. Melted fraction.

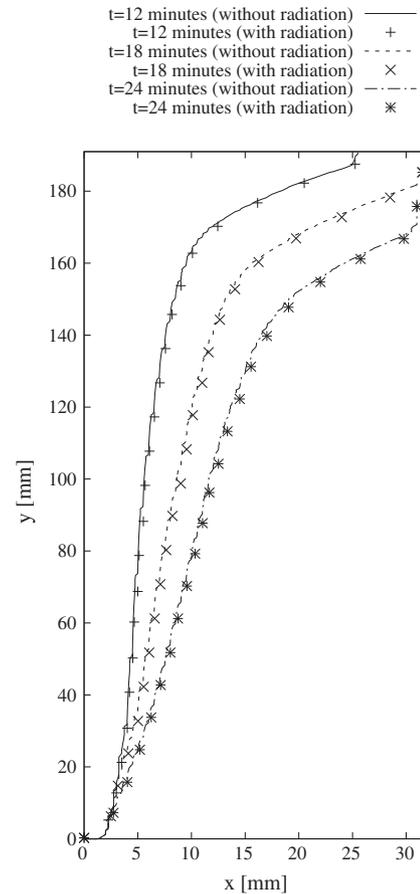


Fig. 9. Evolution of the melting front position.

with the pure conduction case. With regard to the correlation for melting with convection, the results obtained show at the beginning that heat transfer is under predicted and then, around $Fo \times St = 0.005$ it is over predicted, which may explain the slower melted fraction in the Fig. 8.3(b), as deviations start almost at the same time. However our results are in very good agreement with Mencinger [14]. Finally, our model agrees with the correlations and physically expected results.

8.4. Melting with convection and radiation in a fatty acid

In this section, the influence of long wave diffuse radiation is analyzed. The results are compared to those obtained in the melting with convection configuration and are summarized in Figs. 7–11.

The model was applied to a fatty acid used as PCM in a $0.032 \text{ m} \times 0.191 \text{ m}$ cavity. The properties of the PCM are summarized in Table 4; the long wave properties are coming from [36]. A $N_x = 66 \times N_y = 384$ grid was used for this run. The geometry and boundary conditions are illustrated in Fig. 6. The PCM is supposed to be initially at a constant temperature of 10°C . A long wave diffuse radiation heat flux was set on the vertical walls of the cavity. In the liquid, emission and absorption are taken into account and it was considered that all the radiation heat flux was absorbed at the solid interface. The simulations were carried out with

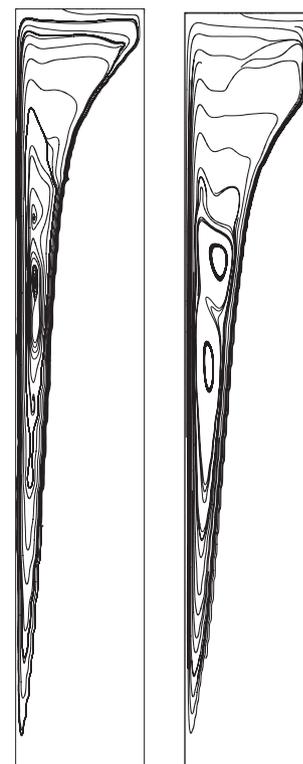


Fig. 10. Streamlines without radiation at $t = 18 \text{ min}$ (left) and $t = 24 \text{ min}$ (right).

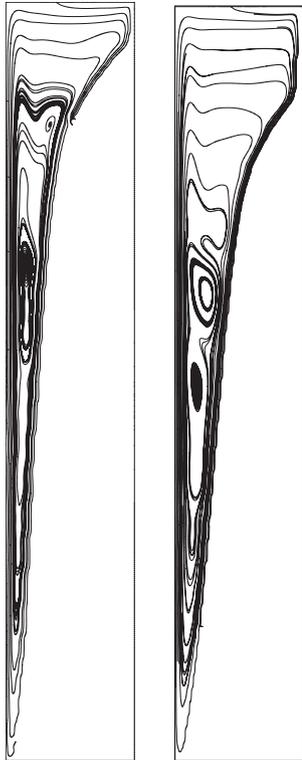


Fig. 11. Streamlines with radiation at $t = 18$ min (left) and $t = 24$ min (right).

Table 4
Fatty acid properties.

Property	Units	
Latent heat L_h	J/kg	152×10^3
Conductivity λ	W/(m K)	0.18
Specific heat c_p	J/(kg K)	2090
Liquid density ρ_l	kg/m ³	884
Solid density ρ_s	kg/m ³	960
Thermal expansion coefficient β	1/K	3.10×10^{-3}
Viscosity ν	m ² /s	11.0×10^{-6}
Melting temperature T_f	°C	21.5

the following dimensionless numbers: Stefan number of $St = 0.252$, Rayleigh number of $Ra = 3.6 \times 10^9$ and Prandtl number of $Pr = 113$.

Fig. 7 shows the absorbed heat flux within the PCM. As expected, the absorbed heat flux within the PCM is larger than convection only, with a maximum difference of about 8 W/m^2 (about 3% maximum of increase). Fig. 8 shows the melted fraction as a function of time according to the thermal process. The results are broadly consistent with Fig. 7 since radiation increases the melted fraction by about 3%. Fig. 9 shows the evolution of the front position for the cases with and without radiation. The melting front position is few influenced by the long wave diffuse radiation in the PCM. The difference is lower than 1 mm between the two phenomena over time. Fig. 10 shows the flow patterns in the liquid. Both pictures highlight the convection heat transfer in the liquid phase. At time $t = 18$ min two recirculation cells appear on the left side of the cavity and grow up with time (see $t = 24$ min). Fig. 11 presents the same streamlines as Fig. 10 taking into account the diffuse long wave radiation effects. On the whole, the flow patterns are similar. However, differences appear in the middle of the liquid phase where the velocity is low and then it does not affect the overall thermal and dynamical behaviour of the phase change process.

9. Conclusions

A novel hybrid approach is proposed to simulate melting of a PCM, coupling (1) LBM for the velocity field and (2) finite difference discretization of energy equation with the enthalpy method for the temperature field.

Validation of this approach is carried out using test cases from the literature: (1) the differentially heated cavity with convection only, (2) coupled convection and radiation and (3) for the melting of octadecane.

The effect of long wave diffuse radiation on the melting process of a tall brick of fatty acid is studied in detail. The radiation heat flux is calculated by the means of the discrete ordinate method. Absorption/emission within the liquid and absorption on the melting front interface are both considered. The results show that the absorbed heat flux within the PCM is higher by a maximum of 3% if long wave radiation is modelled. However, the increased absorbed heat flux in PCM has only a few effect on the melted fraction and the evolution of the melting front position. The main conclusion of the numerical study is that convection has a significant effect whereas long wave radiation can be neglected for the prediction of the phase change with natural convection. In that case, the maximum error is about 3% for the melted fraction evolution.

As a future work, the effect of diffuse short wave radiations (solar heat flux) will be studied.

Appendix A. LBM-MRT model

\mathbf{M} is a matrix constructed from velocities. For instance, with a D2Q9 lattice, this matrix is given by:

$$\mathbf{M} \equiv \begin{pmatrix} \rho \\ e \\ \epsilon \\ j_x \\ q_x \\ j_y \\ q_y \\ p_{xx} \\ p_{xy} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

References

- [1] Zhou D, Zhao C, Tian Y. Review on thermal energy storage with phase change materials (PCMs) in building applications. *Appl Energy* 2012;92(0):593–605.
- [2] Kuznik F, David D, Johannes K, Roux J-J. A review on phase change materials integrated in building walls. *Renew Sustain Energy Rev* 2011;15(1):379–91.
- [3] Kuznik F, Virgone J, Johannes K. In situ study of thermal comfort enhancement in a renovated building equipped with phase change material wallboard. *Renew Energy* 2011;36(5):1458–62.
- [4] Tao Y, He Y. Numerical study on thermal energy storage performance of phase change material under non-steady-state inlet boundary. *Appl Energy* 2011;88(11):4172–9.
- [5] Zhou G, Yang Y, Xu H. Performance of shape-stabilized phase change material wallboard with periodical outside heat flux waves. *Appl Energy* 2011;88(6):2113–2121.
- [6] Baetens R, Jelle BP, Gustavsen A. Phase change materials for building applications: a state-of-the-art review. *Energy Build* 2010;42(9):1361–8.
- [7] Kuznik F, Virgone J. Experimental investigation of wallboard containing phase change material: data for validation of numerical modeling. *Energy Build* 2009;41:561–70.
- [8] Zhang Y, Zhou G, Lin K, Zhang Q, Di H. Application of latent heat thermal energy storage in buildings: state-of-the-art and outlook. *Build Environ* 2007;42(6):2197–209.
- [9] Darkwa K, O'Callaghan P, Tetlow D. Phase-change drywalls in a passive-solar building. *Appl Energy* 2006;83(5):425–35.
- [10] Zalba B, Marin JM, Cabeza LF, Mehling H. Free-cooling of buildings with phase change materials. *Int J Refrig* 2004;27(8):839–49.

- [11] Gonçalves L, Probert S. Thermal-energy storage: dynamic performance characteristics of cans each containing a phase-change material, assembled as a packed-bed. *Appl Energy* 1993;45(2):117–55.
- [12] Weinlader H, Beck A, Fricke J. Pcm-facade-panel for daylighting and room heating. *Solar Energy* 2005;78(2):177–86.
- [13] Bertrand O, Binet B, Combeau H, Couturier S, Delannoy Y, Gobin D, et al. Melting driven by natural convection. a comparison exercise: first results. *Int J Thermal Sci* 1999;38:5–26.
- [14] Mencinger J. Numerical simulation of melting in two-dimensional cavity using adaptive grid. *J Comput Phys* 2004;198:243–64.
- [15] Chatterjee D, Chakraborty S. An enthalpy-based lattice Boltzmann model for diffusion dominated solid–liquid phase transformation. *Phys Lett A* 2005;341:320–30.
- [16] Huber C, Parmigiani A, Chopard B, Manga M, Bachmann O. Lattice Boltzmann model for melting with natural convection. *Int J Heat Fluid Flow* 2008;29:1469–1480.
- [17] Semma EA, Ganaoui ME, Bennacer R. Lattice Boltzmann method for melting/solidification problems. *CR Mec* 2007;335:295–303.
- [18] Miller W, Succi S, Mansutti D. Lattice Boltzmann model for anisotropic liquid–solid phase transition. *Phys Rev Lett* 2001;86:3578–81.
- [19] Droz M, Chopard B. Cellular automata and modeling of physical systems. *Monographs and Texts in Statistical Physics*, Cambridge University Press; 1998. p. 353.
- [20] Kuznik F, Obrecht C, Rusaouen G, Roux J-J. LBM based flow simulation using GPU computing processor. *Comput Math Appl* 2010;59(7):2380–92.
- [21] Obrecht C, Kuznik F, Tourancheau B, Roux JJ. A new approach to the lattice Boltzmann method for graphics processing units. *Comput Math Appl* 2011;61(12):3628–38.
- [22] McNamara GR, García AL, Alder BJ. A hydrodynamically correct thermal lattice Boltzmann model. *J Stat Phys* 1997;87:1111–21.
- [23] He X, Chen S, Doolen GD. A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit. *J Comput Phys* 1998;146:282–300.
- [24] Kuznik F, Vareilles J, Rusaouen G, Krauss G. A double-population lattice boltzmann method with non-uniform mesh for the simulation of natural convection in a square cavity. *Int J Heat Fluid Flow* 2007;28(5):862–70.
- [25] Kuznik F, Rusaouen G. Numerical prediction of natural convection occurring in building components: a double-population lattice Boltzmann method. *Numer Heat Transfer Part A: Appl* 2007;52(4):315–35.
- [26] Lallemand P, Luo L-S. Theory of the lattice Boltzmann method: acoustic and thermal properties in two and three dimensions. *Phys Rev E* 2003;68:036706(25).
- [27] d’Humières D, Ginzburg I, Krafczyk M, Lallemand P, Luo L-S. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model in three dimensions. *Philos Trans R Soc A* 2002;360:437–51.
- [28] Semma E, Ganaoui ME, Bennacer R, Mohamad A. Investigation of flows in solidification by using the lattice Boltzmann method. *Int J Therm Sci* 2008;47:201–8.
- [29] d’Humières D, Ginzburg I, Krafczyk M, Lallemand P, Luo L. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions. *Philos Trans: Math, Phys Eng Sci* 2002:437–51.
- [30] Cercignani C. *The Boltzmann equation ANS its applications*. Springer Verlag; 1987. 455p.
- [31] Modest M. *Radiative heat transfer*. Academic Press; 2003.
- [32] Chai JC, Patankar SV, Lee HS. Evaluation of spatial differencing practices for the discrete ordinates method. *J Thermophys Heat Transfer* 1994;8:140–4.
- [33] De Vahl Davis G. Natural convection of air in a square cavity: a bench mark numerical solution. *Int J Numer Methods Fluids* 1983;3:249–64.
- [34] Moufekkik F, Moussaoui M, Mezrhab A, Lemonnier D, Naji H. MRT-lattice Boltzmann computations of natural convection and volumetric radiation in a tilted square enclosure. *Int J Therm Sci* 2012;54:125–41.
- [35] Jany P, Bejan A. Scaling theory of melting with natural convection in an enclosure. *Int J Heat Mass Transfer* 1988;31:1221–35.
- [36] Diaz L, Viskanta R. Experiments and analysis on the melting of a semitransparent material by radiation. *Warme – Stoffübertragung* 1986;20:311–321.