



HAL
open science

Etude et validation d'une approche cinétique couplée pour la modélisation du transfert multimodal et multi-échelle de chaleur en milieu hétérogène

Théo Jeanneau

► **To cite this version:**

Théo Jeanneau. Etude et validation d'une approche cinétique couplée pour la modélisation du transfert multimodal et multi-échelle de chaleur en milieu hétérogène. Modélisation et simulation. Université de Bordeaux, 2022. Français. NNT : 2022BORD0391 . tel-03991906

HAL Id: tel-03991906

<https://theses.hal.science/tel-03991906>

Submitted on 16 Feb 2023

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 PRÉSENTÉE
POUR OBTENIR LE GRADE DE
DOCTEUR
DE L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX
ET DE BORDEAUX INP

ECOLE DOCTORALE MATHÉMATIQUES ET INFORMATIQUE

Par **Théo JEANNEAU**

Étude et validation d'une approche cinétique couplée pour la
modélisation du transfert multimodal et multi-échelle de chaleur en
milieu hétérogène

Sous la direction de : **Rodolphe TURPAULT**
Co-directeurs : **Bruno DUBROCA, Gérard VIGNOLES**

Soutenue le 15 décembre 2022

Membres du jury :

M. Guillaume PUIGT	Directeur de Recherche	ONERA	Rapporteur
M. Yann FAVENNEC	Maître de conférences HDR	Université de Nantes, LTeN	Rapporteur
M. Denis LEMONNIER	Directeur de Recherche	CNRS, Pprime	Examinateur
Mme Hélène HIVERT	Maîtresse de Conférence	École Centrale de Lyon, ICJ	Examinatrice
Mme Céline BARANGER	Ingénieur-Chercheuse	CEA-CESTA	Examinatrice
M. Rodolphe TURPAULT	Professeur des Universités	Bordeaux INP, IMB	Directeur
M. Gérard L. VIGNOLES	Professeur des Universités	Université de Bordeaux, LCTS	Co-directeur
M. Bruno DUBROCA	Directeur de Recherche	CEA-CESTA, LCTS	Co-directeur

Remerciements

Avant toutes choses, il me semble nécessaire de remercier un certain nombre de personnes sans qui ces travaux n'auraient sûrement pas vu le jour.

Mes premiers remerciements vont d'emblée vers mes trois directeurs de thèse Rodolphe Turpault, Bruno Dubroca et Gérard Vignoles, qui sont parvenus à me guider d'un bout à l'autre de la thèse. J'ai eu la chance d'être épaulé par 3 personnes extrêmement compétentes et toutes aussi bienveillantes qui m'ont permis de m'épanouir pleinement pendant ces 3 dernières années. Je me souviendrais notamment de la réactivité de Rodolphe pour répondre à chacune de mes questions et de la pertinence de tous ses conseils ; de la disponibilité de Bruno qui n'hésitait jamais à prendre autant de temps que nécessaire pour m'aider ainsi que son support moral (crucial, je t'en remercie encore) et sa bonne humeur toujours présente dans les moments difficiles ; de l'expertise de Gérard et de sa connaissance du milieu, ainsi que ses corrections pertinentes qui peuvent arriver à n'importe quelle heure de la journée ou de la nuit. J'ai pu grandir autant scientifiquement qu'humainement pendant ces 3 années grâce à eux, et je leur en serais toujours reconnaissant.

Ma gratitude va aussi à Guillaume Puigt et Yann Favennec qui ont accepté de prendre le temps de rapporter mon manuscrit de thèse, ainsi qu'aux membres de mon jury qui ont tous fait le déplacement pour ma soutenance.

Je souhaiterais aussi remercier tous les chercheurs du CEA que j'ai été amené à rencontrer, et avec qui il a toujours été un grand plaisir de travailler. Merci donc à Céline Baranger et Simon Peluchon, pour leur suivi et leurs précieux conseils pendant ces 3 ans, ainsi qu'à Jérôme Breil, Gaël Poette et Antonio Coscolluela pour toutes nos discussions intéressantes autour des problématiques conducto-radiatives.

J'ai aussi été aidé par des membres du personnel des deux laboratoires auxquels j'étais rattaché, et j'aimerais pour cela particulièrement remercier Guillaume Couegnat pour son aide apportée tout au long de ma thèse, mais aussi à Laurent Facq pour sa réactivité et son aide avec les moyens de calculs de l'IMB.

Bien sûr il me faut aussi remercier ma co-bureau de dernière année Thanh-Ha Nguyen-Bui pour sa bonne humeur permanente et les moments sympathiques que l'on a pu partager. J'en profite aussi pour remercier Alexandre Oysel Mestre pour ses travaux effectués en stage à nos côtés.

Je remercie aussi Bilel Bensaid avec qui j'ai partagé un bureau à l'IMB, même si je regrette de ne pas avoir pu le côtoyer plus longtemps.

Si malgré toutes les difficultés, je conserverais un souvenir impérissable de ces 3 dernières années, c'est aussi grâce à l'entraide et à la fraternité qui règne au sein de l'équipe des non-permanents du LCTS. Je ne citerais personne de peur d'en oublier, mais que ce soit toutes les générations de thésards que j'ai côtoyé, les apprentis, les CDD ou les stagiaires, c'est grâce à leur présence et nos rendez-vous au Pool que cette expérience à été réussie et que j'ai pu maintenir le cap dans les moments difficiles. Un grand merci à tous.

Bien sûr, je me dois aussi de remercier tout particulièrement les forces de l'ordre pour leur soutien inconditionnel. Merci donc aux membres de police nationale pour leur loyal service !

Je tiens de plus à remercier mes proches "extérieurs" aux laboratoires, avec qui j'ai gardé contact malgré la distance et les années, et qui ont même traversé la France pour venir assister à ma soutenance. Merci Jason, Thalia, Arthur et Baptiste pour ces visios et weekends passés ensemble pendant toutes ses années et celles à venir.

Enfin, mes derniers remerciements vont à ma famille qui m'a toujours soutenu et accompagné dans les moments difficiles. Merci donc à vous tous, et tout particulièrement à mes parents pour leur soutien pendant toutes ces années.

Table des matières

1	Introduction	9
1.1	Cadre de l'étude	9
1.1.1	Contexte	9
1.1.2	Motivations de la thèse	10
1.2	État de l'art	11
1.2.1	Modélisation du transfert de chaleur conducto-radiatif	11
1.2.2	Méthode des volumes finis	17
1.2.3	Préservation des comportements asymptotiques	19
1.3	Thermique	20
1.3.1	Matériaux considérés	20
1.3.2	Opacité	22
2	Modèles mathématiques	24
2.1	Introduction	24
2.2	Modèle cinétique	25
2.2.1	Équation du Transfert Radiatif	25
2.2.2	Équation du Transfert Thermique	26
2.2.3	Modèle cinétique couplé	27
2.3	Réduction aux moments	27
2.3.1	Principe de la méthode de réduction aux moments	27
2.3.2	Application au modèle cinétique	28
2.3.3	Modèle M_1	30
2.3.4	Limite asymptotique du modèle M_1	32
2.3.5	Modèle P_1	35
2.3.6	Limitations du modèle M_1	38
3	Résolution numérique	40
3.1	Introduction	40
3.2	Schéma numérique	41
3.2.1	Propriétés nécessaires pour le schéma numérique	41

3.2.2	Schéma de Rusanov avec correction asymptotique	45
3.2.3	Précédentes utilisations	46
3.2.4	Vérification de la limite asymptotique	47
3.2.5	Préservation de l'ensemble des états admissibles	48
3.2.6	Stabilité	50
3.2.7	Ordre supérieur	53
3.2.8	Gestion des discontinuités	54
3.2.9	Conditions aux limites	56
3.3	Solveur implicite	59
3.3.1	Généralités	59
3.3.2	Choix	59
3.4	Optimisation	61
3.4.1	Préconditionnement	61
3.4.2	Gestion du pas de temps	67
3.4.3	Parallélisme - Accélération	67
3.5	Maillages	69
3.5.1	Objectifs : des maillages basés images	69
3.5.2	Maillages utilisés	70
3.5.3	Limitations sur les maillages	74
4	Résultats numériques	75
4.1	Transfert de chaleur non-couplé - Validation numérique de la méthode	76
4.1.1	Solution exacte - Calcul d'ordre	76
4.1.2	Vitesse de convergence	79
4.1.3	Une illustration de la nécessité d'un schéma préservant le régime asymptotique	82
4.1.4	Calcul d'homogénéisation sur des plaques planes en conduction pure	84
4.1.5	Calcul basé image sur un matériau hétérogène complexe en conduction pure	87
4.2	Couplage conducto-radiatif - Validation et résultats	90
4.2.1	Un cas théorique	90
4.2.2	Conductivité effective sur un matériau semi-transparent homogène	94
4.2.3	Résolution instationnaire sur un matériau hétérogène	97
4.3	Limitations actuelles	100
5	Conclusion et perspectives	101
5.1	Conclusion	101
5.2	Perspectives	102

6	Annexe	104
6.1	Notations	104
6.2	La modélisation du transfert de chaleur conducto-radiatif en France	106
6.3	Les schémas AP pour systèmes hyperboliques	107
6.4	Conductivité effective radiative λ_R	107
6.5	Conductivité effective conducto-radiative λ_{Rm}	108

Chapitre 1

Introduction

1.1 Cadre de l'étude

1.1.1 Contexte

L'étude présentée dans ce manuscrit a pour objectif d'améliorer la conception et la caractérisation des matériaux céramiques poreux qui pourraient être de bons candidats comme boucliers thermiques en condition de rentrée atmosphérique.

Pendant cette phase de rentrée, le véhicule est confronté à d'importantes contraintes (forte chaleur, flux d'ions et de molécules réactifs, ...) qui vont dégrader sa surface. Pour protéger la charge utile, on place un bouclier thermique permettant d'absorber ces contraintes. Les matériaux le composant se doivent d'avoir des caractéristiques optimales [1] pour remplir leur rôle sans apporter une masse trop importante à l'objet en question. La plupart du temps sont utilisés des matériaux en céramique poreuse [2], ou des matériaux composites à base de carbone [3] pour remplir cette fonction. Ces matériaux ont l'avantage d'être légers et d'avoir d'excellentes propriétés thermiques.

La température sur le front du bouclier thermique s'élève jusqu'à plusieurs milliers de Kelvin pendant son utilisation. À cette température, le matériau en question émet de la chaleur par rayonnement en plus de la transmission par conduction [4]. De plus, pour des matériaux poreux ou composites, on observe des phénomènes de convection thermique à l'intérieur des porosités. Ainsi, pour simuler au mieux le transfert de chaleur pour ces applications, il est primordial de prendre en compte ces 3 modes de transfert : conduction, rayonnement et convection. Nous attacherons une importance particulière à la conduction et au rayonnement, qui sont les sources majeures de transfert de chaleur dans les applications considérées.

Les différents matériaux utilisables nous confrontent à des types de milieux et donc des modes de transfert de chaleur différents. On peut rencontrer dans ceux-ci une alternance de phases ab-

sorbantes (opaques ou semi-transparentes) ou purement transparentes, qui joueront un rôle dans le mode de transfert prépondérant et la distribution finale des flux de chaleur. Les matériaux typiquement utilisés pour nos applications sont détaillés dans la partie 1.3.1.

1.1.2 Motivations de la thèse

Les travaux ici présentés sont motivés par le besoin de caractériser les nouveaux matériaux de rentrée utilisés ou envisagés par le CEA. Ces derniers sont des matériaux poreux qui vont se dégrader par le phénomène de pyrolyse. Cette dégradation endothermique va consommer le flux de chaleur qui arrive à la paroi du véhicule, protégeant ainsi thermiquement la charge utile. C'est le principe des protections thermiques consommables. Si ce genre de matériaux possède des avantages certains pour la rentrée atmosphérique, sa composition complexe pendant la phase de pyrolyse rend l'étude de son évolution d'autant plus ardue. Son étude est pourtant nécessaire pour gérer au mieux le dimensionnement des pièces, comprendre les mécanismes de sa dégradation et s'assurer du fonctionnement de protection thermique du matériau.

L'approche envisagée par le CEA pour améliorer la connaissance de ces matériaux et faire des choix entre plusieurs compositions de matériaux consiste à dégrader en laboratoire les pièces considérées dans des conditions proches de la rentrée atmosphérique (principalement par torche plasma [5, 6, 7], *c.f.* figure 1.1). Les matériaux envisagés peuvent ensuite être caractérisés et analysés à différents stades d'endommagement. La caractérisation de tels matériaux peut cependant être complexe ou coûteuse à mettre en place, c'est pourquoi l'utilisation de l'outil numérique est envisagée pour en retrouver les caractéristiques thermiques.

Ainsi, l'objectif de notre étude consiste à mettre au point un outil numérique permettant d'obtenir les caractéristiques effectives du matériau à plusieurs étapes de sa dégradation à l'aide

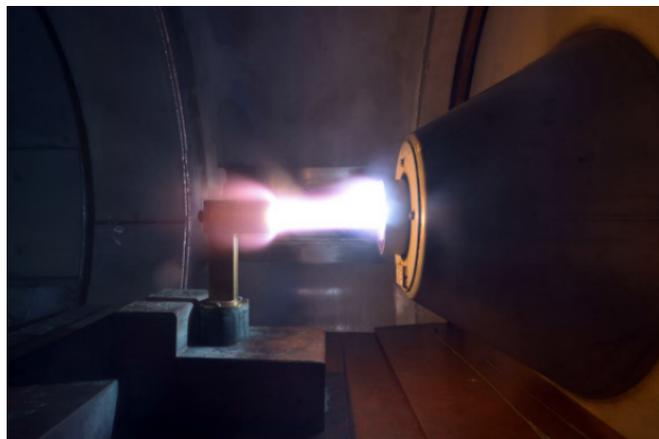


FIGURE 1.1 – Essai d'ablation par torche plasma [8]

d'informations obtenues par tomographie. Cet outil devra aussi permettre d'analyser l'évolution du transfert de chaleur à l'intérieur des pièces étudiées. Or la capacité à modéliser le transfert de chaleur dans un domaine permet d'obtenir directement des informations sur les propriétés thermiques de ce dernier, comme décrit dans la partie 3.2.9. Un outil de modélisation thermique sera donc nécessaire et suffisant pour obtenir les résultats souhaités dans cette étude. Ces observations nous permettent de dresser un cahier des charges de l'outil à mettre au point :

- Il doit permettre de modéliser le transfert de chaleur, en prenant en compte les modes de transfert conductif et radiatif. Une attention toute particulière devra donc être portée au couplage entre ces deux modes, pour assurer que le résultat reste conforme à la réalité physique.
- L'outil doit être en mesure de fournir les caractéristiques thermiques effectives du matériau considéré, et plus particulièrement sa conduction thermique homogénéisée équivalente λ .
- Il doit permettre de fournir des résultats sur des matériaux tels que des mousses céramiques ou des matériaux composites. Son utilisation sur des géométries complexes est donc obligatoire, l'objectif étant de fournir un calcul basé image, permettant d'appliquer des simulations de transferts sur des géométries réelles obtenues par tomographie.
- Les calculs doivent être capables de s'adapter à tous types de milieux, qu'ils soient opaques, transparents ou semi-transparentes.
- Comme tout code de calcul, on attend de celui-ci la précision la plus élevée possible pour un coût en calcul raisonnable. Le ratio entre précision et temps de calcul est déterminant en calcul numérique pour établir la qualité d'un code.

1.2 État de l'art

1.2.1 Modélisation du transfert de chaleur conducto-radiatif

La littérature est assez vaste concernant la modélisation du transfert de chaleur couplé : on peut citer un grand nombre d'approches permettant son étude. Le traitement du couplage entre les différents modes de transfert de chaleur a quant à lui évolué au cours des dernières années. Jusqu'à la dernière décennie, les transferts originaires de modes différents étaient traités séparément, en utilisant souvent deux méthodes de calcul distinctes. Cette séparation est naturelle, du fait que les équations régissant les deux transferts sont de nature différente. On parle alors de couplage faible entre les différents modes.

Les solveurs commerciaux suivent un schéma assez récurrent pour traiter le transfert conducto-radiatif. Les calculs sont menés séparément et alternativement pour les différents modes de transfert, à chaque fois de la façon la plus naturelle. Ainsi, on retrouve en général une résolution de la

loi de conservation de la chaleur utilisant une méthode par éléments ou volumes finis pour la partie conduction, tandis que la partie rayonnement est le plus souvent modélisée par une résolution de l'Équation du Transfert Radiatif (RTE) à l'aide d'une méthode de Monte-Carlo ou d'Ordonnées Discrètes. Un travail d'homogénéisation est ensuite nécessaire pour coupler les modes de transfert entre eux.

Si ce schéma peut rester le même dans différentes études, les utilisations divergent, que ce soit au niveau des méthodes numériques ou encore de l'homogénéisation entre les modes. La première différence apparaît dès la définition même du couplage entre les deux modes de transfert de chaleur. Dans certaines méthodes comme [9, 10, 11], on choisit de considérer, quoi qu'il arrive, l'existence des deux physiques dans chaque partie du domaine. Dans ce cas, la méthode peut employer soit des paramètres physiques homogénéisés, soit utiliser des paramètres avec une dépendance spatiale pour délimiter les différentes phases présentes dans le domaine. De cette façon, on considère chaque matériau comme semi-transparent, et ce sont les caractéristiques thermiques qui définissent la prépondérance d'un mode de transfert par rapport à l'autre. L'autre alternative, qu'on retrouve par exemple dans [12, 13, 14], consiste à différencier nettement les zones comportant des propriétés de transfert qui leur sont propres. Cette logique impose donc dès le départ une séparation entre des milieux opaques et/ou transparents (ou semi-transparentes), dans lesquels n'aura donc de rôle que le mode de transfert d'intérêt.

Les méthodes jusqu'ici développées dans les laboratoires français

Nous allons à présent dresser un aperçu rapide et non exhaustif des méthodes de modélisation du transfert conducto-radiatif récentes, en utilisation ou en cours de développement dans les laboratoires français. Le tableau 6.2, présenté dans l'annexe 6.2, récapitule certains points communs présents entre celles-ci. Cette restriction géographique est motivée non seulement par une volonté de collaboration avec les acteurs de la modélisation thermique en France, mais aussi par l'activité marquée de la communauté française thermicienne. En effet, c'est en France que l'on remarque les développements les plus importants en terme de modélisation du transfert de chaleur ces dernières années, même si l'on constate parfois une inspiration venant de l'école russe des années 1980 (*e.g.* Dombrowsky) ou américaine (*e.g.* Modest). Les applications considérées étant variées, ces méthodes sont toutes plus ou moins adaptées aux cas qui leur sont propres. Pour obtenir une vue d'ensemble des capacités actuelles communes, les acteurs de ce milieu se sont dernièrement rapprochés dans le cadre du GDR TAMARYS pour dresser un benchmark comparatif de leurs codes de calcul, en cours de production au moment de la rédaction de cette thèse.

- Dans des travaux réalisés au laboratoire LEMTA [9], le transfert conducto-radiatif a pu être modélisé par une Méthode Éléments Finis, pour une application sur des milieux semi-transparentes, monodimensionnels et anisotropes. L'objectif est de mettre au point une mo-

délisation thermique stationnaire et instationnaire pour étudier des milieux isolants fibreux à base de silice. Le principe est de résoudre dans un premier temps l'équation du transfert radiatif (ETR) appliquée à l'intensité radiative, et dans un second temps l'équation de conservation de l'énergie, en utilisant un flux de chaleur conducto-radiatif. Ce couplage faible nécessite une résolution alternée des deux équations à chaque pas de temps, ce qui n'est pas optimal.

- Dans la même structure, des travaux ont aussi été menés par N. Berour sur la modélisation du transfert par rayonnement, conduction et convection par une Méthode Volumes Finis (MVF), pour une application sur des fours verriers [15]. Le milieu étudié présente donc des phases opaques et semi-transparentes, dont la conductivité dépend en plus de la température. Une fois de plus, la méthode repose sur la résolution successive des équations de conservation de l'énergie et de l'ETR pour le transfert conducto-radiatif. Les deux modes de transfert sont comparés à l'intérieur de l'équation de conservation par le nombre sans dimension de Stark, rapport des flux conductif et radiatif, qui définit le mode de transfert dominant. On retrouve dans ces mêmes travaux la modélisation du couplage convecto-radiatif, réalisé à l'aide de l'ajout d'une équation de transport au système. Un autre point important relevé dans ces travaux est la recherche de la méthode et du schéma numérique adapté aux calculs. L'auteur expérimente sur la convergence et la précision de plusieurs méthodes en fonction du cas étudié. Il utilise successivement un Modèle de Rosseland modifié, la Méthode des Ordonnées Discrètes (MOD) et la Méthode des Volumes Finis (MVF), ainsi que des relations de fermeture et schémas d'ordres variés. On notera qu'il parvient à obtenir un ordre 4 en espace grâce à un schéma CDS, couplé à une technique de correction reportée pour en assurer la convergence et la stabilité. Ces résultats sont cependant obtenus pour des maillages cartésiens.
- Dans des travaux réalisés au CETHIL [16], une analogie entre photons et phonons a été utilisée pour obtenir une méthode de transfert conductif à partir du transfert radiatif, en suivant une approche ondulatoire du phénomène. Après l'essai de plusieurs méthodes, une méthode MOD a été utilisée pour résoudre l'ETR, tandis qu'une méthode Monte-Carlo a été utilisée pour décrire le comportement des phonons afin d'étudier le transfert conductif. Ces travaux ont été réalisés pour des milieux considérés comme absorbants et semi-transparentes. L'intérêt est d'étudier des matériaux micro- et nanoporeux caractérisés par une forte absorption aux longueurs d'ondes infrarouges, *e.g.* du quartz fondu contenant une faible fraction volumique de micro-bulles. Ce genre d'approche peut être particulièrement intéressant car il ouvre la possibilité vers des méthodes multimodales, utilisant la même méthode pour plusieurs modes de transfert de chaleur, ce qui pourrait être contre-intuitif au premier abord au vu des différentes natures des équations à résoudre.

- Précisément, à l'EM2C et en collaboration avec le CEA/Ripault, Y. Dauvois introduit dans ses travaux [10] une méthode de modélisation statistique du transfert conducto-radiatif, dans le but de quantifier le flux auquel un système est soumis pour permettre de dimensionner un matériau le plus isolant et le plus léger possible. L'objectif est de travailler sur des échantillons numériques fibreux pour des applications à très hautes températures comme les crayons de combustible dans un réacteur nucléaire ou les revêtements de corps de rentrée. Comme précédemment, une méthode Monte-Carlo est utilisée pour résoudre l'équation du transfert radiatif, ou encore l'équation généralisée du transfert radiatif (GRTE). Par contre, c'est aussi une méthode stochastique qui est utilisée pour décrire le transfert conductif, qui s'apparente alors à un mouvement Brownien mais aussi à une méthode de Gaz sur Réseau. Celle-ci permet de résoudre l'équation de conservation de l'énergie. Cependant, pour mettre le rayonnement et la conduction bout à bout, il faut à nouveau résoudre successivement les parties radiative et conductive. Il est donc nécessaire de calculer itérativement le champ de température, puis le champ d'énergie radiative, jusqu'à convergence.
- Plus récemment, et toujours dans l'optique de travailler sur des environnements soumis à de très hautes températures, M. Ghattassi [11] a développé à l'université de Lorraine (LEMTA) une stratégie dans laquelle l'équation du transfert radiatif est résolue par une méthode de Galerkin Discontinue d'ordre élevé, particulièrement efficace pour des systèmes hyperboliques, afin d'assurer une bonne précision pour un coût minimal. L'équation de la chaleur est quant à elle résolue à l'aide d'une Méthode Éléments Finis d'ordre élevé, et le couplage s'effectue sur les champs d'intensité radiative incidente et de température. Si les résultats obtenus ainsi sont prometteurs, son extension au cas tri-dimensionnel est complexe, et pour le moment non-réalisée.
- On peut encore citer des travaux réalisés au Laboratoire de Thermique et Énergie de Nantes (LTEN), où une Méthode Éléments Finis couplée à une Méthode des Ordonnées Discrètes a été développée et testée [14]. Le couplage entre les deux modes de transfert de chaleur se situe sur les conditions aux limites d'un motif élémentaire du matériau. L'algorithme utilisé est de la forme suivante :
 - Résolution du système de conduction d'énergie, en utilisant des conditions aux limites adaptées au transfert radiatif ;
 - À l'aide du nouveau champ de température, résolution de l'équation du transfert radiatif pour obtenir les flux radiatifs ;
 - Obtenir les nouvelles conditions aux limites radiatives

Le code développé a permis d'observer le transfert de chaleur conducto-radiatif sur des céramiques poreuses de constitutions diverses, générées sur un maillage 3D de façon artificielle

ou à partir d'une tomographie. Si l'apport de la partie convective et de la résolution sur matériau semi-transparent est envisagé, il n'a pas encore été développé. Cependant, les résultats obtenus jusqu'ici sont prometteurs et ont permis d'observer les différences quant à la distribution de la températures selon la topographie du matériau considéré.

Toutes ces méthodes font lieu d'un couplage faible entre les différents modes de transfert. Si l'on arrive à obtenir des résultats assez satisfaisants dans la plupart des situations, elles sont toutefois plutôt artificielles et entraînent des difficultés au moment de leur implémentation. Le couplage peut de plus être une source importante d'allongement du temps de calcul pour des cas de grande taille.

Vers un couplage fort entre les modes de transfert de chaleur

Ces dernières années, on a observé l'émergence d'un couplage plus étroit, pour lesquelles on utilise la même méthode pour les différents modes de transfert. Si ces méthodes multimodales sont avantageuses sur le plan de la facilité d'implémentation, leur principal intérêt réside dans le gain en temps et en précision apporté par l'unicité des calculs réalisés. On ne traite plus comme précédemment les modes indépendamment et de façon itérative, mais en même temps. On trouve dans la littérature des méthodes multimodales basées sur plusieurs approches :

- Une des plus anciennes méthodes multimodales repose sur le traitement du rayonnement à l'aide des facteurs de vue, et a notamment été mis en application au LTEN [17], pour modéliser le transfert bi-modal sur des géométries tridimensionnelles complexes. Ce principe repose sur un pré-calcul de ces dernières en début de simulation, permettant d'obtenir le rayonnement perçu par chaque face pour celui émis par toutes les autres, en fonction de leur orientation relative et de la géométrie des milieux. Une fois ces facteurs de vue obtenus, le problème peut être résolu comme un problème de conduction, avec une Méthode Volumes Finis, en considérant en plus le rayonnement comme une condition aux limites appliquée sur les faces attenantes au milieu transparent. Cette méthode permet donc un couplage radiato-conductif très simple, avec un unique système à résoudre, mais un inconvénient de cette méthode réside cependant dans le pré-calcul des fonctions de vue qui représente un coût de calcul très important. On remarquera de plus que cette méthode n'est pas adaptée aux fluides semi-transparentes.
- Les méthodes de type Monte-Carlo sont souvent employées pour modéliser le transfert radiatif, car elles simulent naturellement la propagation des rayons infra-rouges. Elle peuvent

cependant aussi être employées pour le transfert conductif et convectif, comme dans la méthode développée au laboratoire Laplace [12, 13, 18], en utilisant cette fois une méthode de Monte-Carlo Symbolique. L’objectif de cette approche n’est pas tant d’obtenir une modélisation directe du transport de chaleur, mais plutôt d’identifier les coefficients d’absorption et d’émission de matériaux poreux de géométrie complexe. Cette méthode permet de plus d’identifier une fonction de transfert permettant d’explicitier la température comme une fonction des sources de chaleur et des paramètres thermo-physiques du domaine. Cette investigation est menée pour des applications d’ingénierie dans des contextes à faible température mais où l’apport du rayonnement est significatif, comme par exemple pour le contrôle thermique des bâtiments, ou le refroidissement des moteurs électriques.

- La méthode des marcheurs aléatoires hybrides, développée par G. Vignoles [19, 20], consiste en la représentation assez naturelle des photons et phonons par des marcheurs transportant un quantum d’énergie. Ces marcheurs suivent un mouvement aléatoire de type Brownien dans le milieu opaque, et se déplacent en ligne droite à l’intérieur des milieux transparents. À l’instar de la méthode mise au point par Y. Dauvois [10], une méthode stochastique est utilisée pour les deux modes de transfert. Cependant, le couplage s’effectue cette fois-ci individuellement sur chaque marcheur. Ainsi, un marcheur purement radiatif se déplaçant par lancer de rayons dans le vide peut se faire absorber par un milieu opaque, et voir son libre parcours diminuer pour devenir un marcheur Brownien. Le couplage est alors modélisé par une probabilité de passage d’un mode à l’autre. Cette méthode permet d’étudier le transfert de chaleur conducto-radiatif dans des milieux opaques/transparents, mais aussi depuis peu opaques/semi-transparentes. Elle peut être utilisée sur des géométries complexes sans avoir à passer par la création d’un maillage non structuré. Elle peut aussi prendre en compte le mode convectif en principe, mais cela n’a pas été réalisé pour le moment. Si cette méthode s’est montrée efficace pour obtenir les propriétés thermiques homogènes des matériaux étudiés, elle ne permet cependant pas de résoudre de façon aisée des problèmes thermiques instationnaires.

Nous avons donc pu voir qu’il existe un éventail de méthodes développées à ce jour pour modéliser le transfert de chaleur multimodal. Les méthodes numériques pouvant être utilisées sont multiples, et les couplages entre les modes tout aussi variés. Néanmoins, parmi toutes les méthodes présentées ci-dessus, aucune ne remplit totalement le cahier des charges dressé dans la partie précédente. Il semble donc nécessaire de mettre au point une nouvelle approche revenant sur ces points. Une ébauche de réponse a déjà été formulée au LCTS, que nous allons chercher à développer. Celle-ci se présente sous la forme d’un code Volumes Finis sur un maillage cartésien en trois dimensions. Elle permet de modéliser le transfert conducto-radiatif sur tous types de milieu (opaque/semi-transparent/transparent), à l’aide d’une réduction aux moments des équations cinétiques sur les particules porteuses d’énergie, de la même façon que celle présentée dans le

chapitre 2. Outre le type de maillage, cette étude parallèle à la nôtre utilise un schéma numérique différent, présenté dans [21]. La suite de ce manuscrit démontre combien le choix du schéma est crucial et rend les résultats entre nos deux études indépendants.

1.2.2 Méthode des volumes finis

Les mathématiques appliquées fournissent plusieurs méthodes permettant de retranscrire les lois physiques pour prévoir et comprendre les phénomènes qui en découlent par le calcul. La méthode la plus adaptée pour travailler sur des équations de lois de conservations est la méthode des Volumes Finis [22] et c'est celle qui sera utilisée au long de cette étude. Nous introduisons ici les notations qui seront rencontrées dans la suite de ce manuscrit. Le principe de cette méthode réside dans l'intégration du système de lois physiques observées, menant à une discrétisation du domaine de calcul sur un maillage, pour travailler sur des petites quantités d'espace, notés "pas d'espace" Δx (constants sur un maillage homogène), et du temps de calcul (physique) sur des petites quantités de temps, appelés "pas de temps" Δt . On subdivise ainsi l'espace en un grand nombre de volumes finis (ici des simplexes). Sur un domaine unidimensionnel, on discrétise donc l'espace en découpant celui-ci sur un nombre N de segments (de longueur Δx constants sur un maillage homogène), appelés mailles. On considère ensuite les grandeurs physiques d'intérêt telles que la température T ou l'énergie E sous forme de leur moyenne par maille au centre de celles-ci (on note U_i le vecteur des variables conservatives moyennées sur la maille i), tel que sur la figure 1.2 :

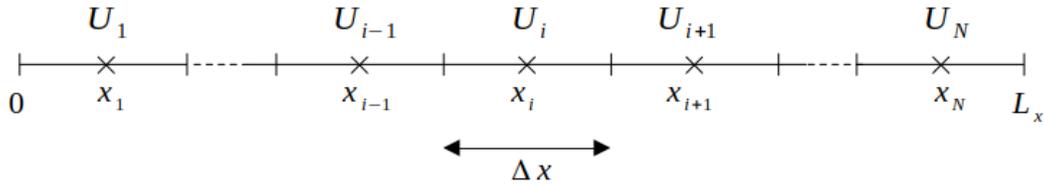


FIGURE 1.2 – Discrétisation 1D d'un domaine de taille L_x par un maillage homogène.

En deux dimensions, on peut considérer plusieurs façons de discrétiser un domaine de calcul, en choisissant différentes formes de mailles élémentaires, et une organisation plus ou moins régulière de celles-ci. Pour cette étude, on utilisera des maillages triangulaires non-structurés tels que présentés sur la figure 1.3. L'organisation et la forme des mailles n'a ainsi que peu de limitations, ce qui permet de travailler plus précisément sur des domaines de forme complexe.

Dans ce genre de disposition, on définit le pas d'espace global Δx par :

$$\Delta x = \max_{K \in [1, N]} \left(\frac{|K|}{p_K} \right) \quad (1.1)$$

avec p_K le périmètre de la maille K , et $|K|$ son aire. Les maillages utilisés dans notre étude sont précisés plus en détail dans la partie 3.5.2. En trois dimensions, on conserve le principe établi

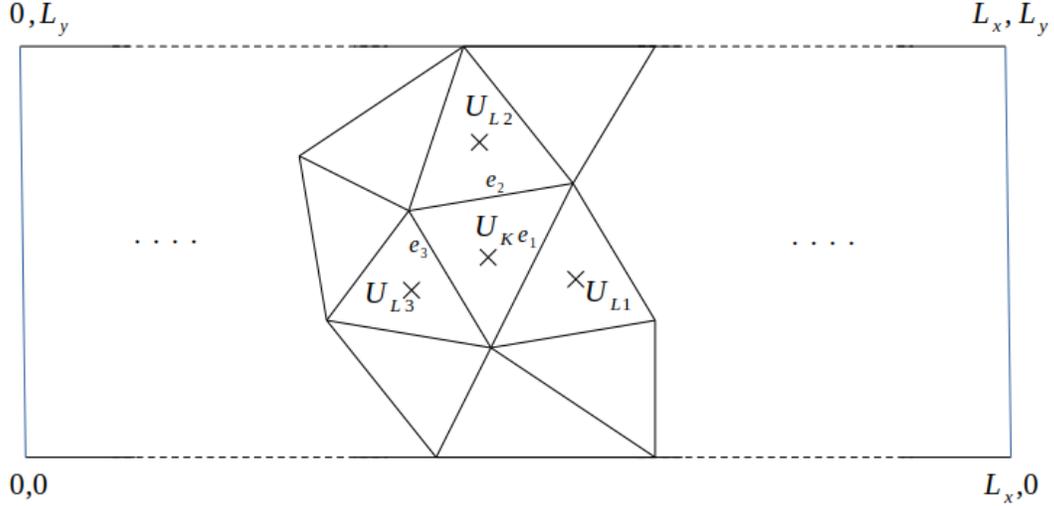


FIGURE 1.3 – Discrétisation 2D d’un domaine rectangulaire de taille $L_x \times L_y$ par un maillage triangulaire non-structuré.

précédemment, en utilisant des volumes pour discrétiser l’espace au lieu de mailles surfaciques. Dans ce qui suit, on utilisera seulement des tétraèdres pour discrétiser l’espace 3D, bien que d’autres formes soient bien entendu utilisables. On utilisera alors le pas d’espace global suivant :

$$\Delta x = \max_{K \in [1, N]} \left(\frac{|K|}{S_K} \right) \quad (1.2)$$

Avec S_K la surface du bord de la maille K , et $|K|$ son volume.

Une fois le domaine discrétisé et le vecteur des variables conservatives U^n établi sur l’ensemble des mailles à un temps t^n , on peut calculer ce même vecteur au pas de temps suivant $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ avec le schéma (1.3), pour un système de lois de conservation (et donc sans termes sources).

$$U_K^{n+1} = U_K^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_{e \in \partial K} |e| \mathcal{F}_e^n \cdot \mathbf{n}_{K,e} \quad (1.3)$$

$\mathbf{n}_{K,e}$ étant la normale sortant à K par l’interface e , $|e|$ la longueur de e , et \mathcal{F}_e^n le flux numérique à l’interface e défini au temps t^n . Le choix de ce dernier est libre et dépend des besoins de la modélisation. On étudiera par exemple un schéma complété par un flux de Rusanov [23], défini tel que :

$$\mathcal{F}_e^n \cdot \mathbf{n}_{K,e} = \frac{1}{2} \left([F(\mathcal{U}_K^n) + F(\mathcal{U}_L^n)] \cdot \mathbf{n}_{K,e} - b_e (\mathcal{U}_L^n - \mathcal{U}_K^n) \right) \quad (1.4)$$

Avec $F(U)$ le flux obtenu à partir du vecteur U , dont l’expression dépend du modèle utilisé, et b_e une vitesse supérieure à toutes les vitesses d’ondes à travers l’interface e .

1.2.3 Préservation des comportements asymptotiques

Cadre général

L'objectif premier d'un schéma numérique est de reconstruire fidèlement le système d'équations sur lequel il est basé, quel que soit le jeu de paramètres utilisé. Or, la forme du système peut changer lorsqu'un des paramètres devient si petit qu'il rend un ou plusieurs termes négligeables. Ce scénario arrive fréquemment dans de nombreux contextes d'applications : on parle alors de comportement asymptotique du système dont il est question. Le chapitre 2 détaille par exemple que le modèle M_1 , un système d'équations hyperbolique, admet une limite asymptotique de forme parabolique :

$$\partial_t \mathbf{U} + \operatorname{div} \mathbf{F}(\mathbf{U}) = -AS(\mathbf{U}) \xrightarrow{c\sigma t \rightarrow \infty} \partial_t u = \operatorname{div}(B\nabla u) \quad (1.5)$$

Or, rien ne certifie qu'un schéma numérique qui décrit correctement un système d'équations convienne aussi à sa forme asymptotique. Cette caractéristique n'a d'ailleurs aucune raison d'être vraie en général.

Une des difficultés pour ce type d'applications consiste donc à mettre au point un schéma numérique permettant de retranscrire correctement le régime asymptotique du modèle. De tels schémas sont qualifiés d'*asymptotic preserving* (AP) [24] et ont donc pour but de rester consistants avec le modèle ciblé quel que soit le régime. Comme on peut le voir sur la figure 1.4 pour le cas (1.5), le schéma limite obtenu à l'asymptote $c\sigma t \rightarrow \infty$ n'est donc consistant avec le forme asymptotique du modèle seulement si le schéma est AP.

$$\begin{array}{ccc}
 \partial_t \mathbf{U} + \operatorname{div} \mathbf{F}(\mathbf{U}) = -AS(\mathbf{U}) & \xrightarrow{c\sigma t \rightarrow \infty} & \partial_t u = \operatorname{div}(B\nabla u) \\
 \uparrow \Delta t, \Delta x \rightarrow 0 & & \uparrow \Delta t, \Delta x \rightarrow 0 \Leftrightarrow \text{Schéma AP} \\
 \text{Schéma numérique} & \xrightarrow{c\sigma t \rightarrow \infty} & \text{Schéma limite}
 \end{array}$$

FIGURE 1.4 – Schéma explicatif de l'intérêt d'un schéma AP (pour les équations (1.5))

Les schémas AP pour les modèles hyperboliques dans la littérature

De tels schémas ont été largement étudiés et répertoriés depuis les années 1990, quels que soient le modèle hyperbolique et les applications considérées. Le tableau 6.3, visible dans l'annexe 6.3, dresse une liste non exhaustive de travaux portant sur ces schémas. Historiquement, ces travaux ont à la base été développés sur des applications 1D, puis par extension sur des maillages cartésiens structurés. L'établissement de tels schémas est plus complexe sur des maillages non structurés,

mais des exemples d'applications ont été récemment présentés [25, 26, 21, 27, 28, 29].

Un schéma AP est avant tout construit pour préserver le régime asymptotique d'un modèle, ce qui se fait parfois au détriment des caractéristiques que l'on recherche habituellement dans un schéma numérique, telles que sa stabilité ou la simplicité de son expression. En outre, il n'est pas rare que la montée en ordre d'un tel schéma soit loin d'être triviale, voire impossible, et tout particulièrement pour une application sur un maillage non-structuré. Certains travaux ont déjà été menés pour tenter d'élaborer un schéma AP d'ordre élevé sur des maillages complexes. L'approche utilisée dans [21] en est un exemple et a permis d'obtenir de bons résultats en montant jusqu'à l'ordre 4 en espace, tout en faisant preuve d'une grande stabilité. Cependant, la formulation d'ordre élevé s'est avérée complexe, et il n'est pour le moment pas envisagé d'étendre cette méthode au cas tridimensionnel non-structuré.

Actuellement, les solutions proposées dans la littérature ne sont pas entièrement adaptées pour notre utilisation. Dans notre cas, un schéma AP agile (en terme de montée en ordre et taille des pas de temps) pour le modèle M_1 , permettant d'obtenir des résultats consistants à la limite asymptotique sur des maillages 3D non-structurés, est souhaité. La solution considérée est d'utiliser un schéma original, adapté à la montée en ordre et à l'utilisation de très grands pas de temps, introduit dans [30, 31]. Ce schéma sera détaillé dans le chapitre 3.

1.3 Thermique

1.3.1 Matériaux considérés

Les matériaux utilisés pour les protections thermiques de rentrée sont choisis avant tout pour leurs capacités réfractaires et leur légèreté. Par conséquent, on retrouve en général des matériaux fibreux ou des feutres, composés de matériaux isolants [1, 32]. Ce sont des matériaux présentant plusieurs phases, chacune pouvant favoriser un ou plusieurs modes de transports. Dans le cas des matériaux poreux (figure 1.5), très présents dans nos applications, on rencontre principalement une phase absorbante (opaque ou semi-transparente), correspondant au solide, et une phase transparente, liée au fluide (ou au vide) présent à l'intérieur des pores. À haute température, le transfert de chaleur à l'intérieur du solide sera principalement d'origine conductive, tandis que les pores seront le principal lieu des transferts par rayonnement [33]. À l'inverse, les matériaux composites fibreux (figure 1.6) ne présentent pas de pores pour héberger le transfert radiatif (si ce n'est les défauts qui peuvent apparaître entre les phases). Le transfert de chaleur par rayonnement peut toutefois jouer un rôle non-négligeable, en particulier en présence de matrices ou de fibres semi-transparentes. Certains matériaux de ce type peuvent par exemple chercher à maximiser la diffusion radiative pour améliorer les performances thermiques de la protection [34].

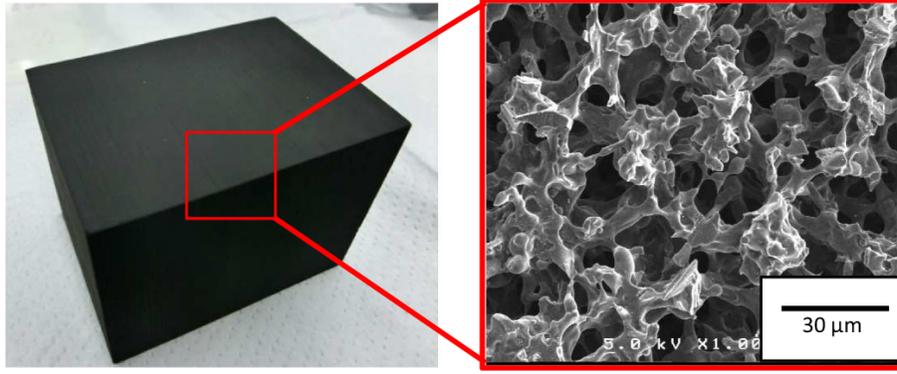


FIGURE 1.5 – Structure microscopique d’un matériau de rentrée en carbone poreux : Three-dimensionally Networked Porous Carbon (TNPC) [35]

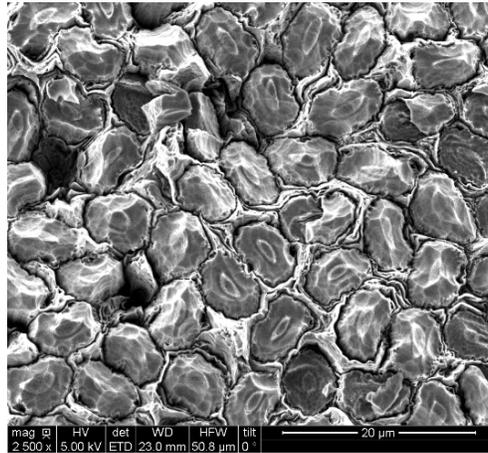


FIGURE 1.6 – Structure microscopique d’un matériau composite C_f/C après ablation par torche plasma [6]

Ainsi, on peut rencontrer un grand nombre de matériaux différents dans les protections de rentrée atmosphérique. Dans de tels assemblages hétérogènes, il n’est pas rare d’observer de grandes discontinuités sur les propriétés thermiques entre les différentes phases d’un même matériau. En particulier, l’opacité radiative σ est une grandeur d’intérêt pour cette étude (voir partie 1.3.2). On retrouve plusieurs ordres de grandeur d’écart entre ces paramètres sur des matériaux comme des mousses de zircon ($\sigma_{air} \simeq 10^{-5} - 10^{-3} \text{ m}^{-1}$ [36]; $\sigma_{ZrO_2} \simeq 10^4 - 10^5 \text{ m}^{-1}$ [37]) ou des matériaux à base de silice nanoporeuse ($\sigma_{SiO_2} \simeq 10^1 - 10^3 \text{ m}^{-1}$ [38]). Ces discontinuités importantes sont à prendre en considération lors de la création du modèle physique et du choix du schéma numérique.

Pour visualiser les discontinuités entre les différents milieux à l’échelle microscopique, il est d’usage d’utiliser l’imagerie 3D. Dans notre cas, les images obtenues par tomographie aux rayons X ou par FIB-SEM (suite de clichés au microscope électronique après décapages successifs au faisceau d’ions focalisé) peuvent être utilisées pour recréer numériquement des domaines de calculs

réalistes, que ce soit sur un matériau vierge ou en cours de dégradation. C'est le principe des calculs dits "orientés images" [39, 40, 41], qui permettent de pousser la compréhension des phénomènes en jeu, de prévoir les contraintes sur un matériau de manière non destructrice, ou encore de participer à la caractérisation d'assemblages hétérogènes complexes.

Dans les faits, l'intérêt est avant tout d'obtenir des informations sur le comportement de ces matériaux à l'échelle macroscopique. Si la structure microscopique a son importance dans les phénomènes mis en jeu, il est inconcevable avec les moyens de calculs actuels de créer des outils de simulation multi-échelles permettant d'obtenir des résultats macroscopiques à partir de la structure microscopique exacte des matériaux. Pour obtenir le modèle le plus précis, il est d'usage de chercher à obtenir les caractéristiques physiques homogènes équivalentes des matériaux étudiés [42, 43].

1.3.2 Opacité

Compte tenu de la nature hétérogène des milieux considérés, une des problématiques de notre approche réside dans la recherche de la valeur effective de certains paramètres physiques. Si cette étude est principalement motivée par l'obtention d'une conductivité thermique homogène équivalente λ pour un matériau complexe, ce paramètre n'apparaît pas tel quel dans les équations que nous manipulons. Les principales grandeurs thermiques d'intérêt seront les valeurs d'opacités $\sigma(\mathbf{x}, T_m(t, \mathbf{x}), \nu)$, qui correspondent à l'inverse du libre parcours moyen des particules porteuses d'énergies (et donc homogènes à l'inverse d'une distance, en m^{-1}) [44]. Ce rôle est rempli par les photons pour le transfert par rayonnement, et par les phonons pour le transfert par conduction. On notera donc l'opacité radiative σ (*resp.* matière σ_m) ce paramètre influençant le parcours des particules d'intérêt.

En outre, on observe qu'en régime de diffusion (ce qui sera presque toujours le cas pour la partie conduction), on peut obtenir l'expression de l'opacité matière en fonction de sa conductivité λ_m . On notera donc :

$$\sigma_m(\mathbf{x}, T_m(t, \mathbf{x})) = \frac{c_m \rho C_v}{3\lambda_m(\mathbf{x}, T_m(t, \mathbf{x}))} \quad (1.6)$$

Cette relation constitue notre principal lien entre les valeurs d'opacité et de conductivité thermique. Elle sera établie dans la partie 2.3.4, car cela nécessite que les notations et le modèle soient introduits.

En plus d'être liées aux propriétés thermiques des matériaux qui composent le milieu, pouvant fluctuer selon la plage de température (d'où la dépendance en \mathbf{x} et $T_m(t, \mathbf{x})$), ces grandeurs sont intimement liées à la fréquence des particules porteuses d'énergie. Or la méthode utilisée dans cette étude donne lieu à un modèle intégré sur tout le spectre de fréquences (et donc un modèle

"gris"). Cette approximation, qui pourrait être préjudiciable pour la qualité des résultats, peut être considérée comme raisonnable sur les cas qui nous intéressent, même si une extension comprenant une dépendance fréquentielle est envisageable. Il devient alors nécessaire d'utiliser une moyenne des opacités afin de supprimer leur dépendance en fréquence. Ces approximations sont présentés dans la partie 2.3.2.

Chapitre 2

Modèles mathématiques

2.1 Introduction

Dans ce chapitre seront présentés les différents modèles utilisés dans notre étude pour simuler le transfert de chaleur couplé conducto-radiatif.

Notre méthode est avant tout basée sur un modèle cinétique. Le principe en est de capturer le transport des particules porteuses d'énergie afin d'obtenir une information sur les échanges de chaleur. On partira ainsi de deux équations de Boltzmann, associées respectivement aux photons pour le transfert radiatif et aux phonons pour le transfert par conduction.

Afin de réduire le coût de calcul de la résolution de ce modèle, on applique une méthode de réduction aux moments, en suivant le principe employé dans [45] afin de nous concentrer uniquement sur les grandeurs qui nous intéressent. Dans la partie 2.3, nous établirons le système d'équations qui sera étudié tout au long de ce mémoire. Nous détaillerons aussi des versions découplées et simplifiées de ce modèle, les modèles découplés M_1 et P_1 , dont l'analyse numérique sera abordée dans les chapitres suivants.

La limite asymptotique du modèle M_1 est de plus décrite dans la partie 2.3.4. Son étude est d'une grande importance car elle représente à la fois le principal intérêt du modèle, mais aussi le principal écueil de sa retranscription numérique. Cette facette sera abordée dans le chapitre 3.5.3.

Comme précisé dans la partie précédente, le choix de ce modèle est avant tout guidé par la volonté de développer un code optimisé pour nos applications, représentant un couplage fort entre les différents modes de transferts. L'utilisation d'un modèle à deux équations cinétiques associé à une réduction aux moments est une approche tout à fait innovante dans le contexte de la modélisation du transfert de chaleur conducto-radiatif. Les bons résultats obtenus par ce même genre de méthode pour d'autres applications comme l'écoulement de plasmas [46] ou le transfert radiatif couplé à l'hydrodynamique [47] sont encourageants quant aux performances potentielles de cette approche.

2.2 Modèle cinétique

Les équations cinétiques de Boltzmann ont été établies pour décrire l'évolution macroscopique d'un gaz en état de déséquilibre, via l'étude de la densité de distribution des particules qui constituent ce gaz au niveau microscopique [48, 49]. Elles ont de plus été considérées pour l'étude de phénomènes différents, comme en radiologie pour modéliser le transfert radiatif par le biais de l'étude du transport de la densité de distribution des photons [50, 51], et ce procédé peut être utilisé de la même façon pour le transfert de chaleur par rayonnement [52, 53].

Pour tenter de rassembler les deux modes de transfert étudiés ici, on peut approcher le transfert conductif par une autre équation de Boltzmann, en considérant cette fois les phonons comme porteurs d'énergie [54]. Les échanges de chaleur entre les deux modes seront alors décrits comme des absorptions et émissions de particules d'une équation à l'autre.

2.2.1 Équation du Transfert Radiatif

Pour décrire la partie radiative de notre modèle, nous allons utiliser l'Équation du Transfert Radiatif (ETR), qui décrit l'évolution de l'intensité radiative I_R :

$$I_R = f_{pht}(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu) E_{pht} c \quad (2.1)$$

avec f_{pht} la fonction de distribution des photons, $E_{pht} = h\nu$ le quantum d'énergie transporté par les photons, c la vitesse de la lumière dans le milieu, h la constante de Planck, t le temps, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ le vecteur position, n étant la dimension du problème, et ν et $\boldsymbol{\Omega}$ la fréquence et la direction des quasi-particules.

$$\begin{aligned} \partial_t I_R(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu) + c \operatorname{div} \boldsymbol{\Omega} I_R(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu) &= c \underbrace{(\sigma(\mathbf{x}, T_m(t, \mathbf{x}), \nu) B_R(T_m(t, \mathbf{x}), \nu))}_{\text{Émission}} - \underbrace{\sigma(\mathbf{x}, T_m(t, \mathbf{x}), \nu) I_R(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu)}_{\text{Absorption}} \\ &+ c \underbrace{\int_{S_2} \sigma_{R_s}(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') I_R(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}', \nu) d\boldsymbol{\Omega}' - c \sigma_{R_{s,0}}(t, \mathbf{x}) I_R(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu)}_{\text{Scattering}} \end{aligned} \quad (2.2)$$

On suppose que le milieu est à l'équilibre thermodynamique local (ETL). Le terme d'émission est donc isotrope et régit par la fonction de distribution de Planck B_R :

$$B_R(T_m(t, \mathbf{x}), \nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT_m(t, \mathbf{x})}\right) - 1} \quad (2.3)$$

T_m étant la température de la matière et k la constante Boltzmann. On note de plus σ_e et σ_{R_s} les opacités d'émission et de diffusion, et $\sigma_{R_{s,0}} = 2\pi \int_{-1}^1 \sigma_{R_s} d\mu$, avec μ le cosinus de l'angle d'incidence.

En plus de l'ETL, cette expression est soumise à plusieurs hypothèses. On notera notamment que le scattering doit lui aussi être isotrope et indépendant de la fréquence ν pour que l'on puisse écrire le dernier terme sous sa forme actuelle. L'effet de la polarisation est de plus négligé et on supposera pour cela que l'indice optique des milieux est de 1.

2.2.2 Équation du Transfert Thermique

Pour décrire la partie conductive du modèle couplé, nous allons de la même façon utiliser une équation cinétique pour représenter le transfert des particules porteuses d'énergie. Pour la conduction, on considère les phonons, porteurs de l'énergie de vibration, comme remplissant cette fonction. L'analogie entre ces particules et les photons va nous permettre de compléter notre modèle, car ils obéissent de la même façon à la statistique de Bose-Einstein, et on peut alors utiliser une équation de la même forme que précédemment pour modéliser leur évolution. De cette façon, on utilise une équation similaire à l'ETR (2.5) pour décrire l'évolution de l'intensité "matière" I_m , dont le second membre a été pensé pour respecter une condition d'équilibre avec l'ETR (2.2) :

$$I_m = f_{phn}(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu) E_{phn} c_m \quad (2.4)$$

avec f_{phn} la fonction de distribution des phonons, E_{phn} le quantum d'énergie transporté par un phonon et c_m la vitesse du son dans le milieu, soit la vitesse des phonons.

$$\begin{aligned} \partial_t I_m(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu) + c_m \operatorname{div} \boldsymbol{\Omega} I_m(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu) &= c_m \sigma_m(t, \mathbf{x}, T_m(t, \mathbf{x}), \nu) (B_m(\varepsilon_m(t, \mathbf{x}), \nu) \\ &- I_m(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu)) + c_m \sigma_e(t, T_m(t, \mathbf{x}), \nu) (B_R(T_R(t, \mathbf{x}), \nu) - r_f(t, \mathbf{x}) I_m(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, \nu)) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Une fois de plus, en faisant l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local, on écrit le terme d'émission sous la forme d'une Planckienne :

$$B_m(\varepsilon_m(t, \mathbf{x}), \nu) = \frac{2h\nu^3}{c_m^2} \frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{k\theta_m(t, \mathbf{x})}) - 1} \quad (2.6)$$

$\varepsilon_m(t, \mathbf{x}) = \int_0^{T_m(t, \mathbf{x})} \rho_m C_{v_m}(\eta) d\eta$ étant l'énergie thermique fournie par les phonons, σ_m l'opacité aux phonons dans le milieu, $\theta_m(t, \mathbf{x}) = (\frac{\varepsilon(t, \mathbf{x})}{a_m})^{\frac{1}{4}}$ avec $a_m = \frac{8\pi^5 k^4}{15h^3 c_m^3}$, et $r_f(t, \mathbf{x}) = \frac{c}{c_m} \frac{E_R^{eq}(t, \mathbf{x})}{\varepsilon_m(t, \mathbf{x})}$.

On note E_R l'énergie radiative donnée par l'intégrale de l'intensité radiative [24, 55] et E_R^{eq} l'énergie radiative à l'équilibre (2.8), donnée par la loi de Stefan-Boltzmann. On définit de plus

par analogie la température radiative T_R :

$$E_R = \frac{1}{c} \int_0^\infty \int_{S^2} I_R d\Omega d\nu \quad (2.7)$$

$$E_R^{eq} = a_R T_m^4 \quad (2.8)$$

$$T_R(t, \mathbf{x}) = \left(\frac{E_R(t, \mathbf{x})}{a_R} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (2.9)$$

avec $a_R = \frac{8\pi^5 k^4}{15h^3 c^3} (\simeq 7.56 \cdot 10^{-16} \text{ J.m}^{-3}.\text{K}^{-4})$ avec c la vitesse de la lumière).

2.2.3 Modèle cinétique couplé

On obtient ainsi le modèle cinétique (2.10) couplé, modélisant les deux formes de transfert de chaleur, par conduction et par rayonnement.

$$\begin{cases} \partial_t I_R + c \operatorname{div} \boldsymbol{\Omega} I_R = c\sigma(B_R(T_m) - I_R) + c \int_{S_2} \sigma_{R_s} I_R d\boldsymbol{\Omega}' - c\sigma_{R_{s,0}} I_R \\ \partial_t I_m + c_m \operatorname{div} \boldsymbol{\Omega} I_m = c_m \sigma_m (B_m - I_m) + c_m \sigma_e (B_R(T_R) - r_f I_m) \end{cases} \quad (2.10)$$

On retrouve en rouge sur le système (2.10) les termes de couplage entre les deux modes. Ceux-ci sont établis de façon à ce que ce système soit conservatif en énergie une fois appliquée la réduction aux moments décrite dans la partie suivante. En effet, il peut être envisagé de chercher à résoudre ce système pour obtenir les informations souhaitées sur le transfert de chaleur, mais une telle résolution ne serait pas rentable (en terme de calcul numérique) au vu de la dimension du problème (I_m et I_R dépendent de $t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}$ et ν). Il nous faut simplifier ce système par le biais d'une réduction aux moments, afin d'obtenir une méthode compétitive.

2.3 Réduction aux moments

2.3.1 Principe de la méthode de réduction aux moments

Les méthodes de réduction aux moments, introduites par Grad [56] et développées par Levermore [57], permettent de décrire la déviation par rapport à un état d'équilibre (comme c'est le cas pour le transfert de chaleur), à partir de l'expression d'une équation cinétique. L'intérêt est de réduire le nombre de degrés de liberté par rapport à l'équation de base, permettant ainsi d'avoir une méthode plus compétitive, tout en concédant des approximations raisonnables.

Pour obtenir un modèle aux moments à partir des équations (2.2) et (2.5), on commence par choisir un sous-espace vectoriel \mathbb{M} de dimension finie M des fonctions de $\boldsymbol{\Omega} \in S_2$. On note $\mathbf{m}(\boldsymbol{\Omega})$ un vecteur de taille M contenant la base des éléments de \mathbb{M} . En notant $\langle \bullet \rangle$ la mesure 2.11, aussi

appelée opérateur moment, on peut obtenir à partir des équations cinétiques (2.2) ou (2.5) le système aux moments (2.12).

$$\langle \bullet \rangle = \frac{1}{c} \int_0^\infty \int_{S_2} \bullet \, d\Omega d\nu \quad (2.11)$$

$$\partial_t \langle \mathbf{m}I \rangle + c \operatorname{div} \langle \Omega \mathbf{m}I \rangle = \langle \mathbf{m}\mathcal{C}(I) \rangle \quad (2.12)$$

$\mathcal{C}(I)$ étant le second membre de l'équation, aussi appelé terme collisionnel. Le modèle ainsi créé nécessite une fermeture pour être complet. Le principe est d'exprimer la densité $\langle \mathbf{m}I \rangle$ et le flux $\langle \Omega \cdot \mathbf{m}I \rangle$ (qui sont les moments d'ordre 0 et 1) ainsi que le terme collisionnel $\langle \mathbf{m}\mathcal{C}(I) \rangle$ sous la forme de fonctions à M variables. Cette fonction de fermeture est au choix pour chaque modèle et permet d'introduire des caractéristiques nécessaires à chaque application.

De tels systèmes d'équations aux moments présentent un certain nombre d'écueils qui sont à prendre en compte pour modéliser des régimes de transition, notamment la multiplication du nombre d'équations dans le système, ou encore la possible perte d'admissibilité des moments obtenus. Cependant, le gain généré par la réduction du nombre de degrés de liberté rend cette méthode attractive dans bien des applications.

2.3.2 Application au modèle cinétique

Une hiérarchie de réductions aux moments, suivant le principe explicité dans la partie précédente, est introduite dans [55, 45] pour créer un modèle de transfert radiatif à partir de l'équation cinétique (2.2). Cette hiérarchie est basée sur le principe de minimisation de l'entropie totale [53, 58], et chaque modèle issu de celle-ci partage des caractéristiques de limitation des flux et de positivité d'énergie, qui s'avèrent particulièrement importantes pour mettre au point un modèle réaliste.

Pour cette étude, nous nous intéressons uniquement au premier modèle de cette hiérarchie, le modèle M_1 . Celui-ci est obtenu en considérant les moments d'ordre 0 et 1 : l'énergie $E \in \mathbb{R}^+$ et le flux $F \in \mathbb{R}^n$, la fermeture du modèle aux moments étant assurée par l'expression du moment d'ordre 2, à savoir la pression $P \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$.

$$E = \langle I \rangle \quad , \quad F = \langle cI\Omega \rangle \quad , \quad P = \langle I\Omega \otimes \Omega \rangle \quad (2.13)$$

Le système est ensuite obtenu par intégration des équations cinétiques par l'opérateur moment (2.11). Nous ne sommes en effet pas intéressés par le détail des distributions en fréquence et en direction. L'opacité σ étant aussi variable en fréquence, il nous faut introduire de nouveaux paramètres d'opacités moyennés : l'opacité d'émission σ_e , l'opacité d'absorption σ_a et l'opacité de

flux $\bar{\sigma}_f$. Ces derniers sont obtenus à partir des relations suivantes :

$$\frac{\langle \sigma I_R \rangle}{\langle I_R \rangle} = \sigma_a, \quad \frac{\langle \sigma \Omega I_R \rangle}{\langle \Omega I_R \rangle} = \begin{pmatrix} \sigma_{f,x} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{f,y} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{f,z} \end{pmatrix} = \bar{\sigma}_f \quad (2.14)$$

En pratique, on ne peut calculer exactement ces paramètres à cause de la méconnaissance de I_R , mais il est possible d'en obtenir une approximation [59, 60]. Dans la partie "émission" de l'ETR, l'opacité n'étant pas associée à l'intensité radiative I_R , on peut obtenir l'opacité d'émission σ_e en utilisant une moyenne au sens de Planck :

$$\sigma_e = \frac{\langle \sigma B_R \rangle}{a_R T_m^4} \quad (2.15)$$

Remarque : Si dans le système observé les opacités n'ont pas de dépendance fréquentielle, on peut prendre $\sigma_e = \sigma_a$, ce qu'on supposera dans ce qui suit [59].

Utilisons à présent l'opérateur moment sur l'ETR (2.2) :

$$\langle (2.2) \rangle \Leftrightarrow \partial_t E_R + \text{div } F_R = c \left(\underbrace{\langle \sigma B_R \rangle}_{\sigma_e E_R^{eq}} - \underbrace{\langle \sigma I_R \rangle}_{\sigma_e E_R} \right) + \underbrace{\left\langle c \int_{S_2} \sigma_{R_s} I_R d\Omega' \right\rangle}_{\sigma_{R_{s,0}} E} - \sigma_{R_{s,0}} E \quad (2.16)$$

$$\Leftrightarrow \partial_t E_R + \text{div } F_R = c \sigma_e (E_R^{eq} - E_R) \quad (2.17)$$

Une deuxième équation est obtenue en intégrant la direction de propagation Ω à la mesure de (2.2).

$$\langle \Omega(2.2) \rangle \Leftrightarrow \frac{1}{c} \partial_t F_R + c \text{div } P_R = c \left(\underbrace{\langle \sigma \Omega B_R \rangle}_0 - \underbrace{\langle \sigma \Omega I_R \rangle}_{\sigma_f F_R} \right) + \underbrace{\left\langle c \Omega \int_{S_2} \sigma_{R_s} I_R d\Omega' \right\rangle}_{\sigma_{R_{s,1}} F_R / c} - \frac{\sigma_{R_{s,0}}}{c} F_R$$

$$\Leftrightarrow \partial_t F_R(t, \mathbf{x}) + c^2 \text{div } P_R(t, \mathbf{x}) = -c(\bar{\sigma}_f + I_d \sigma_s) F_R$$

I_d étant la matrice identité et $\sigma_s = \sigma_{R_{s,0}} - \sigma_{R_{s,1}}$. Des calculs similaires peuvent être réalisés pour la partie conductive, aboutissant au système (2.18–2.21).

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t E_R(t, \mathbf{x}) + \text{div } F_R(t, \mathbf{x}) = c \sigma_e(t, \mathbf{x})(E_R^{eq}(t, \mathbf{x}) - E_R(t, \mathbf{x})) \quad (2.18) \\ \partial_t \varepsilon_m(t, \mathbf{x}) + \text{div } q_m(t, \mathbf{x}) = c \sigma_e(t, \mathbf{x})(E_R(t, \mathbf{x}) - E_R^{eq}(t, \mathbf{x})) \quad (2.19) \\ \partial_t F_R(t, \mathbf{x}) + c^2 \text{div } P_R(t, \mathbf{x}) = -c \bar{\sigma}_{f_R}(t, \mathbf{x}) F_R(t, \mathbf{x}) \quad (2.20) \\ \partial_t q_m(t, \mathbf{x}) + c_m^2 \text{div } P_m(t, \mathbf{x}) = -c_m \sigma_{f_m}(t, \mathbf{x}) q_m(t, \mathbf{x}) \quad (2.21) \end{array} \right.$$

Avec les opacités des flux $\bar{\sigma}_{f_R} = \bar{\sigma}_f + I_d \sigma_s$ et $\sigma_{f_m} = \sigma_m + r_f \sigma_e$. La fermeture du modèle est obtenue par la définition des termes de pression P , choisis comme fonctions des moments d'ordre inférieur pour minimiser l'entropie [45, 61], calculés analytiquement [55] comme étant :

$$P_R(t, \mathbf{x}) = \frac{E_R(t, \mathbf{x})}{2} [3\chi(f_R(t, \mathbf{x})) - 1] \frac{F_R(t, \mathbf{x})}{|F_R(t, \mathbf{x})|} \otimes \frac{F_R(t, \mathbf{x})}{|F_R(t, \mathbf{x})|} + \frac{E_R(t, \mathbf{x})}{2} [1 - \chi(f_R(t, \mathbf{x}))] I_d \quad (2.22)$$

$$P_m(t, \mathbf{x}) = \frac{\varepsilon_m(t, \mathbf{x})}{2} [3\chi(\alpha_m(t, \mathbf{x})) - 1] \frac{q_m(t, \mathbf{x})}{|q_m(t, \mathbf{x})|} \otimes \frac{q_m(t, \mathbf{x})}{|q_m(t, \mathbf{x})|} + \frac{\varepsilon_m(t, \mathbf{x})}{2} [1 - \chi(\alpha_m(t, \mathbf{x}))] I_d \quad (2.23)$$

avec les flux réduits $f_R(t, \mathbf{x}) = \frac{F_R}{cE_R}$, $\alpha_m(t, \mathbf{x}) = \frac{q_m}{c_m \varepsilon_m}$, I_d la matrice identité et χ le facteur d'Ed-dington :

$$\chi(z) = \frac{3 + 4z^2}{5 + 2\sqrt{4 - 3z^2}} \quad (2.24)$$

Le système se compose d'un couple d'équations (2.18–2.19) sur les énergies radiatives E_R et de conduction ε_m , et d'un autre sur les flux radiatif F_R et de conduction q_m (2.20–2.21). On peut noter que ces équations sont très semblables entre les deux modes de transfert, et que seuls les paramètres permettent de les différencier. Cette caractéristique est exactement celle recherchée, et nous permettra d'utiliser le même solveur pour chaque mode de transfert.

Pour les cas d'application considérés, on remarque dans les équations des flux un terme de transport conduit par une vitesse différente selon les modes :

- La vitesse de la lumière c dans le milieu pour la partie rayonnement,
- La vitesse du son c_m dans le milieu pour la partie conduction.

Prenons l'exemple du transfert couplé conducto-radiatif sur un matériau en carbone poreux [62]. La vitesse du son dans le carbone étant de $c_m = 18500 m.s^{-1}$, le rapport des conditions de Courant-Friedrichs-Levy (CFL) nécessaires à la résolution par un schéma explicite serait de l'ordre de $\frac{c}{c_m} \sim 10^4$. Des dispositions seront à prendre dans le choix du schéma numérique, présentées dans la partie 3.2 pour éviter que la résolution du phénomène le plus "rapide" ne soit limitée, ce qui nuirait à la compétitivité de cette approche.

2.3.3 Modèle M_1

Plutôt que d'étudier le problème conducto-radiatif couplé, on commence par regarder un unique modèle M_1 , sans émission ni absorption, qui sera aussi employé pour certaines applications présentées dans le chapitre 4. La généralisation au multi- M_1 couplé sur le terme source sera directe une fois la résolution de ce modèle maîtrisée. Pour écrire ce système non-couplé, on utilise une notation standardisée convenant aux usages conductif comme radiatif, les inconnus du système étant l'énergie $E(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+$ et le flux $F(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^n$. L'obtention de ce système est semblable à celle présentée dans le paragraphe précédent, mais les termes de couplage disparaissant, on obtient alors le système suivant :

$$\begin{cases} \partial_t E(t, \mathbf{x}) + \operatorname{div} F(t, \mathbf{x}) & = 0 \\ \partial_t F(t, \mathbf{x}) + c^2 \operatorname{div} P(t, \mathbf{x}) & = -c\sigma(t, \mathbf{x})F(t, \mathbf{x}) \end{cases} \quad (2.25)$$

avec $\sigma(t, \mathbf{x})$ l'opacité, c la vitesse de propagation, et $P(t, \mathbf{x})$ le tenseur de pression, obtenu tel que dans (2.22–2.23).

Definition : Soit \mathcal{A} l'ensemble des états admissibles pour le système aux moments ((2.25)). On a alors :

$$\mathcal{A} = \left\{ \mathcal{U} = \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} / E \geq 0, |F| \leq cE \right\} \quad (2.26)$$

Cet ensemble de définition assure l'intégrité physique des solutions, car il impose la positivité de l'énergie et une limitation du flux, qui garantie que le flux ne se propage pas plus vite que la vitesse de transport c [58]. La limitation du flux est garantie par le choix d'une fermeture qui assure une minimisation de l'entropie mathématique globale, et par le facteur d'Eddington [63]. Pour ce qui est de la positivité de l'énergie, elle est obtenue tant que l'intensité sous-jacente I_{M_1} est positive, ce qui est toujours le cas pour le modèle M_1 , vu que :

$$I_{M_1} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \left(\exp\left(\frac{h\nu}{kT}(1 - \beta\mu)\right) - 1 \right)^{-1} \quad (2.27)$$

avec $\beta = \frac{2 - \sqrt{4 - 3f^2}}{f}$, $f = \frac{\|F\|}{cE}$.

On peut se rassurer rapidement sur la qualité de l'approximation réalisée par la réduction au modèle M_1 sur les équations cinétiques de base en réalisant un cas test représentatif des applications désirées. On regarde un cas radiatif stationnaire 1D :

$$\mu \partial_x I = c\sigma_e(B - I) + \sigma_s(I_s - I) \quad (2.28)$$

— **CI :** $I = B$

— **CL :**

— $I(L, \mu) = B$ si $\mu \leq 0$

— $I(0, \mu) = \frac{B}{2}$ sinon

— **Paramètres :**

Paramètre	Valeur		Unité
c	1		m.s ⁻¹
L_x	1		m
N_x	500		mailles
B	40		W.m ⁻² .sr ⁻¹
	$x \leq 0.25$	$x > 0.25$	
$\sigma_e = \sigma_s$	0	10	m ⁻¹

avec $\sigma_s I_s = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \sigma_{R_s} I_R d\mu$ représentant la partie *scattering* de l'équation (2.2).

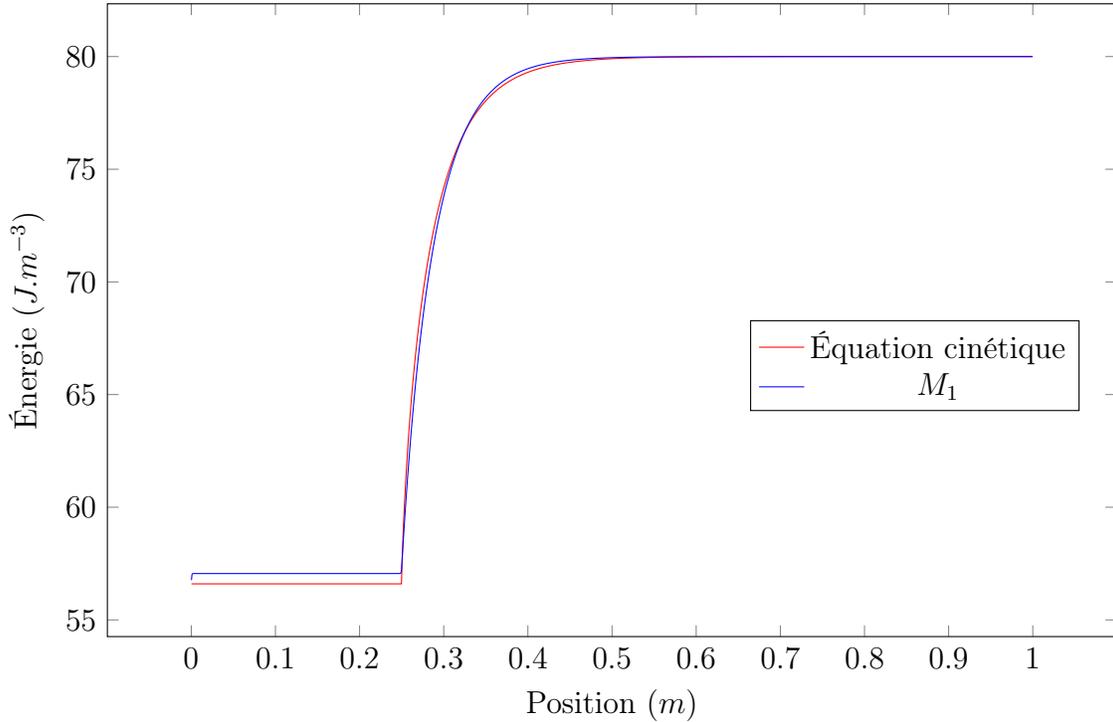


FIGURE 2.1 – Comparaison entre les solutions obtenues par le modèle cinétique et le modèle M_1 .

La comparaison entre la solution numérique de l'équation (2.28) et celle de la réduction M_1 de cette même équation est donnée sur la figure 2.1. La proximité entre les deux solutions sur ce cas suggère que le modèle M_1 est en effet une bonne approximation des modèles cinétiques. Des expérimentations numériques complémentaires sont menées dans le chapitre 4.

2.3.4 Limite asymptotique du modèle M_1

Dans le cas du transport dans un matériau transparent, le terme source dans l'équation (2.25) devient nul, et le modèle devient alors un système de lois de conservation hyperbolique qui décrit correctement un transfert d'énergie en régime de transport. A contrario, lorsque le produit des valeurs de la vitesse de particules c , de l'opacité σ et du temps t devient grand [64], le modèle précédent dégénère vers l'équation de diffusion à l'équilibre :

$$(2.25) \quad \xrightarrow[\sigma t \rightarrow \infty]{} \quad \partial_t E = \operatorname{div}(D \nabla E) \quad (2.29)$$

avec $D = \frac{c}{3\sigma}$ le coefficient de diffusion. Ce résultat peut être obtenu à l'aide d'une étude de la vitesse de convergence des termes du système, ou encore par un développement de Chapman-Enskog. Ces deux méthodes, qui sont aussi utiles pour étudier les schémas numériques qui cherchent à représenter cette même dégénérescence, sont développées dans les paragraphes suivants. La méthode utilisant les valeurs des vitesses de convergence sera souvent préférée dans le reste de cette étude, car elle permet d'obtenir des informations complémentaires, et notamment la vitesse de convergence

de chaque terme, ce qui peut s'avérer utile pour tirer des conclusions sur les différents schémas étudiés.

Méthode des vitesses de convergence

Le modèle M_1 appartient à la classe des modèles étudiés dans [65], qui détermine les vitesses de convergence des variables vers leur limite asymptotique. En supposant que les conditions initiales et aux limites sont correctement posées, les vitesses de convergence suivantes peuvent être obtenues :

$$\|\partial_x^\beta E\|_{L^p} = \mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{n}{2}(1-\frac{1}{p})-\frac{\beta}{2}}\right) \quad (2.30)$$

$$\|\partial_x^\beta \partial_t E\|_{L^p} = \mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{n}{2}(1-\frac{1}{p})-\frac{\beta}{2}-1}\right) \quad (2.31)$$

$$\|\partial_x^\beta F\|_{L^p} = \mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{n}{2}(1-\frac{1}{p})-\frac{\beta}{2}-\frac{1}{2}}\right) \quad (2.32)$$

$$\|\partial_x^\beta \partial_t F\|_{L^p} = \mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{n}{2}(1-\frac{1}{p})-\frac{\beta}{2}-\frac{3}{2}}\right) \quad (2.33)$$

n étant la dimension du problème, et β l'ordre de dérivation spatiale de l'inconnue étudiée. Ces expressions permettent de connaître le comportement asymptotique des différents termes du système (2.25). Pour les besoins de la démonstration, on les explicite un par un, en se plaçant sur un problème 2D et en utilisant une norme L^∞ , sans perte de généralité par rapport aux calculs ou à un cas tridimensionnel (les vitesses de convergence seront différentes mais les résultats équivalents avec une autre norme). Toujours selon [65], la pression P (2.22) tend vers la limite suivante :

$$\lim_{c\sigma t \rightarrow \infty} P = \begin{pmatrix} \frac{E}{3} & 0 \\ 0 & \frac{E}{3} \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

Ainsi, les termes de la seconde équation de (2.25) ont le comportement asymptotique suivant :

$$\partial_t F = \mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{5}{2}}\right) \quad (2.35)$$

$$\operatorname{div} P = \mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{3}{2}}\right) \quad (2.36)$$

$$-c\sigma F = \mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{3}{2}}\right) \quad (2.37)$$

Ces expressions révèlent que les termes dominants de la seconde équation sont (2.36)–(2.37), étant en $\mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{3}{2}}\right)$, ce qui conduit à l'expression de la seconde équation :

$$F = -\frac{c}{3\sigma} \nabla E \quad (2.38)$$

De la même façon, on peut voir pour la première équation que les deux termes sont en $\mathcal{O}((1 + c\sigma t)^{-2})$, et en remplaçant l'expression de F par celle obtenue en (2.38) on obtient :

$$\partial_t E = \operatorname{div} \left(\frac{c}{3\sigma} \nabla E \right) \quad (2.39)$$

ce qui correspond bien à l'équation de diffusion à l'équilibre (2.29).

Développement de Chapman-Enskog

Ce résultat peut aussi être simplement obtenu à l'aide d'un développement de Chapman-Enskog, se présentant comme suit :

- Premièrement, le temps t et l'opacité σ sont mis à l'échelle par le même facteur $\varepsilon > 0$, qui tend vers zéro pour simuler la limite asymptotique.

$$\sigma \rightarrow \frac{\sigma}{\varepsilon} \quad , \quad t \rightarrow \frac{t}{\varepsilon} \quad (2.40)$$

Le système (2.25) devient alors :

$$\begin{cases} \varepsilon \partial_t E + \operatorname{div} F = 0 \\ \varepsilon \partial_t F + c^2 \operatorname{div} P = -\frac{c\sigma}{\varepsilon} F \end{cases} \quad (2.41)$$

- Deuxièmement, on développe les variables en utilisant les notations suivantes :

$$w = w^{(0)} + \varepsilon w^{(1)} + \varepsilon^2 w^{(2)} + \dots \quad (2.42)$$

- On identifie ensuite les termes selon leur puissance de ε . Le terme dominant est facteur de ε^{-2} , soit :

$$F^{(0)} = 0 \quad (2.43)$$

Viennent ensuite les termes en ε^{-1} :

$$\begin{cases} \operatorname{div} F^{(0)} = 0 \\ c^2 \operatorname{div} P^{(0)} = -c\sigma F^{(1)} \\ P^{(0)} = \frac{E^{(0)}}{3} \end{cases} \Rightarrow F^{(1)} = -\frac{c}{3\sigma} \nabla E^{(0)} \quad (2.44)$$

et finalement les termes multiples de ε^0 qui donnent l'équation limite :

$$\partial_t E^{(0)} + \operatorname{div} F^{(1)} = 0 \Rightarrow \partial_t E^{(0)} = \operatorname{div} \left(\frac{c}{3\sigma} \nabla E^{(0)} \right) \quad (2.45)$$

Une fois de plus, on retrouve l'équation de diffusion à l'équilibre (2.29) comme équation limite. On notera tout de même que si la méthode du développement de Chapman-Enskog est simple

d'utilisation et permet d'obtenir l'expression de l'équation limite sans avoir à passer par les résultats (2.30)–(2.33), elle ne permet pas d'obtenir les vitesses de convergence de chaque terme. Cette particularité s'avèrera utile dans les parties 3.2.1 et 3.2.2. Par ailleurs, le développement de Chapman-Enskog donne faussement l'impression que t et σ doivent tous les deux être grands, alors que c'est la valeur de leur produit qui importe.

Relation avec la conductivité thermique à l'asymptote

Une fois la limite de diffusion atteinte, le système est équivalent à l'équation parabolique (2.29). Dans ces conditions la loi de Fourier s'applique, et en posant l'hypothèse $\rho C_v = \text{cte}$ pour pouvoir poser $E = \rho C_v T$, on obtient alors

$$(2.29) \Leftrightarrow \partial_t E = -\text{div}\left(\frac{c}{3\sigma} \frac{\rho C_v}{\lambda} F\right) \quad (2.46)$$

Ce qui est équivalent avec la première équation de (2.25), et donne donc

$$\frac{c}{3\sigma} \frac{\rho C_v}{\lambda} = 1 \quad (2.47)$$

On obtient donc une relation directe entre σ et λ en limite de diffusion, en se plaçant dans un domaine homogène.

Il est important de rappeler que les valeurs de σ obtenues à la suite de cette approche représentent une moyenne fréquentielle. Dans les faits, l'opacité retrouvée à la limite diffusive de l'ETR correspond à une moyenne au sens de Rosseland (2.48) [60, 66] :

$$\frac{1}{\langle \sigma \rangle_{\text{Ross}}} = \int_0^\infty \frac{1}{\sigma(\nu)} \frac{\partial B}{\partial T}(\nu) d\nu \Big/ \int_0^\infty \frac{\partial B}{\partial T}(\nu) d\nu \quad (2.48)$$

2.3.5 Modèle P_1

Si le modèle M_1 est le principal sujet d'étude de cette thèse, plusieurs références sont faites au modèle P_1 dans cette étude. Appartenant à la hiérarchie P_n , elle aussi décrite dans [24, 55]. Le modèle P_1 se présente dans les faits comme une linéarisation du modèle M_1 :

$$\partial_t U + \nabla \cdot F(U) = \mathcal{S}(U) \quad (2.49)$$

$$U = \begin{pmatrix} E \\ F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix}, \quad F(U) = \begin{pmatrix} F_x & F_y & F_z \\ \frac{c^2}{3} E & 0 & 0 \\ 0 & \frac{c^2}{3} E & 0 \\ 0 & 0 & \frac{c^2}{3} E \end{pmatrix}, \quad \mathcal{S}(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ -c\sigma F_x \\ -c\sigma F_y \\ -c\sigma F_z \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

Du fait de sa linéarité, l'obtention d'une solution analytique continue est bien plus aisée avec le modèle P_1 que le M_1 . Étant donné qu'il est de plus équivalent à ce dernier avec $\chi = \frac{1}{3}$, on préférera l'utiliser pour certains cas tests de validations, présentés dans la section 4. Le détail de l'obtention d'une solution analytique continue du modèle P_1 est présenté dans le paragraphe suivant.

Obtention d'une solution analytique continue - P_1

Nous tirons la solution analytique continue du modèle P_1 présentée ici des travaux présentés dans [67]. Posons-nous dans un premier temps dans un cas 1D. Le système à résoudre est

$$\begin{cases} \partial_t E + \partial_x F_x = 0 \\ \partial_t F_x + \frac{c^2}{3} \partial_x E = -c\sigma F_x \end{cases} \quad (2.51)$$

Ce système est linéaire, on peut donc le transformer en un système du télégraphe avec un changement de variable. Il est de cette façon équivalent à

$$\begin{cases} \partial_t u + a \partial_x u = \sigma'(v - u) \\ \partial_t v - a \partial_x v = \sigma'(u - v) \end{cases} \quad (2.52)$$

avec $\begin{cases} u = E - \frac{\sqrt{3}}{c} F \\ v = E + \frac{\sqrt{3}}{c} F \end{cases}$ et $\begin{cases} a = -\frac{c}{\sqrt{3}} \\ \sigma' = \frac{c\sigma}{2} \end{cases}$.

On peut alors construire des solutions continues de u et v .

$$\begin{cases} u(t, x) = f(t, x) + \frac{1}{2\sigma'} \partial_t f(t, x) - \frac{a}{2\sigma'} \partial_x f(t, x) \\ v(t, x) = f(t, x) + \frac{1}{2\sigma'} \partial_t f(t, x) + \frac{a}{2\sigma'} \partial_x f(t, x) \end{cases} \quad (2.53)$$

où $f(t, x)$ est solution de

$$2\sigma' \partial_t f(t, x) + \partial_t^2 f(t, x) - a^2 \partial_x^2 f(t, x) = 0 \quad (2.54)$$

Cette méthode étant détaillée dans [67], seul les résultats sont ici présentés. Par une méthode de séparation de variables, on peut prendre f de la forme $f(t, x) = \alpha(t) \cos(\frac{2\pi x}{L_x})$, avec L_x la longueur du domaine dans la direction x . α est alors solution de

$$\frac{4\pi^2}{L_x^2} a^2 \alpha(t) + 2\sigma' \alpha'(t) + \alpha''(t) = 0 \quad (2.55)$$

On a alors trois solutions de α différentes en fonction de la valeur de σ .

— Si $0 < \sigma' < \frac{2\pi}{L_x}|a|$, i.e. $0 < \sigma < \frac{4\pi}{L_x\sqrt{3}}$:

$$\alpha(t) = e^{-\frac{c\sigma t}{2}} (\cos(zt) + \sin(zt)) \quad , \text{ avec } \quad z = \frac{c}{6} \sqrt{\frac{48\pi^2}{L_x^2} - 9\sigma^2} \quad (2.56)$$

— Si $\sigma = \frac{4\pi}{L_x\sqrt{3}}$:

$$\alpha(t) = \exp\left(-\frac{2\pi c}{L_x\sqrt{3}}t\right) (1+t) \quad (2.57)$$

— Si $\sigma > \frac{4\pi}{L_x\sqrt{3}}$:

$$\alpha(t) = \exp\left(-\left(\frac{c\sigma}{2} - z\right)t\right) + \exp\left(-\left(\frac{c\sigma}{2} + z\right)t\right) \quad , \text{ avec } \quad z = \frac{c}{6} \sqrt{9\sigma^2 - \frac{48\pi^2}{L_x^2}} \quad (2.58)$$

Au final, ces résultats nous permettent de retrouver les solutions exactes de E et F_x pour toute valeur de σ , pour un problème dans la direction x . Nous avons eu besoin d'un cas avec $\sigma = 1$ au cours de notre étude, ce qui nous donne alors :

$$\begin{cases} E = e^{-\frac{c\sigma t}{2}} \cos\left(\frac{2\pi x}{L_x}\right) (\cos(w_x t) (\frac{1}{2} + \frac{w_x}{c\sigma}) + \sin(w_x t) (\frac{1}{2} - \frac{w_x}{c\sigma})) \\ F_x = \frac{2\pi c}{3\sigma L_x} e^{-\frac{c\sigma t}{2}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L_x}\right) (\cos(w_x t) + \sin(w_x t)) \end{cases} \quad (2.59)$$

avec $w_x = \frac{c}{6} \sqrt{\frac{48\pi^2}{L_x^2} - 9\sigma^2}$

Passage au cas multidimensionnel

Afin d'obtenir une solution analytique dans le cas multidimensionnel, nous cherchons tout d'abord la solution dans le cas 2D. Pour cela, notons $E^{(1)}$ et $F_x^{(1)}$ les solutions exactes (2.59) obtenues dans la direction x . On peut étoffer ces solutions en ajoutant $F_y^{(1)} = 0$ le flux en y pour le problème défini dans la même direction x . Ce système est bien solution de (2.49).

De la même façon, on peut obtenir les solutions du système dans la direction y . À titre d'exemple, dans le cas $\sigma = 1$, on obtient alors :

$$\begin{cases} E^{(2)} = e^{-\frac{c\sigma t}{2}} \cos\left(\frac{2\pi y}{L_y}\right) (\cos(w_y t) (\frac{1}{2} + \frac{w_y}{c\sigma}) + \sin(w_y t) (\frac{1}{2} - \frac{w_y}{c\sigma})) \\ F_x^{(2)} = 0 \\ F_y^{(2)} = \frac{2\pi c}{3\sigma L_y} e^{-\frac{c\sigma t}{2}} \sin\left(\frac{2\pi y}{L_y}\right) (\cos(w_y t) + \sin(w_y t)) \end{cases} \quad (2.60)$$

avec $w_y = \frac{c}{6} \sqrt{\frac{48\pi^2}{L_y^2} - 9\sigma^2}$

Lemme 1. Pour toute paire de solutions $\left\{ \begin{pmatrix} E^{(1)} \\ F_x^{(1)} \\ F_y^{(1)} \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} E^{(2)} \\ F_x^{(2)} \\ F_y^{(2)} \end{pmatrix} \right\}$ des systèmes (2.51) et son complémentaire dans la direction y , $\begin{pmatrix} E^{(1)} + E^{(2)} \\ F_x^{(1)} + F_x^{(2)} \\ F_y^{(1)} + F_y^{(2)} \end{pmatrix}$ est solution de (2.49)

Démonstration. On peut définir les solutions 1D de la façon suivante :

$$\begin{pmatrix} E^{(1)}(t, x) \\ F_x^{(1)}(t, x) \\ F_y^{(1)} = 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} E^{(2)}(t, y) \\ F_x^{(2)} = 0 \\ F_y^{(2)}(t, y) \end{pmatrix} \quad (2.61)$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \partial_t(E^{(1)} + E^{(2)}) + \partial_x(F_x^{(1)} + F_x^{(2)}) + \partial_y(F_y^{(1)} + F_y^{(2)}) &= \partial_t E^{(1)} + \partial_x F_x^{(1)} + \partial_t E^{(2)} + \partial_y F_y^{(2)} \\ &= 0 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \partial_t(F_x^{(1)} + F_x^{(2)}) + \frac{c^2}{3}\partial_x(E^{(1)} + E^{(2)}) &= -c\sigma(F_x^{(1)} + F_x^{(2)}) \\ \Leftrightarrow \partial_t F_x^{(1)} + \frac{c^2}{3}\partial_x E^{(1)} &= -c\sigma F_x^{(1)} \end{aligned}$$

et de même pour la dernière équation en y . $\begin{pmatrix} E^{(1)} + E^{(2)} \\ F_x^{(1)} + F_x^{(2)} \\ F_y^{(1)} + F_y^{(2)} \end{pmatrix}$ vérifie donc bien les 3 équations de (2.49). □

De la même façon, soit $\begin{pmatrix} E^{(3)} \\ F_z^{(3)} \end{pmatrix}$ la solution du problème 1D dans la direction z , on peut obtenir

la solution analytique en trois dimensions $\begin{pmatrix} E^{(1)} + E^{(2)} + E^{(3)} \\ F_x^{(1)} \\ F_y^{(2)} \\ F_z^{(3)} \end{pmatrix}$

2.3.6 Limitations du modèle M_1

Malgré les capacités du modèle M_1 à représenter le transfert de chaleur conducto-radiatif, il présente comme tout modèle ses limitations. Ainsi, on notera que la méthode présentée ici ne convient

pas à l'étude des matériaux anisotropes ayant une opacité dépendant de la direction de propagation des quasi-particules. Toute information de cet ordre est perdue lors de l'intégration sur la direction de ces particules nécessaire à l'obtention du M_1 . Nous sommes ainsi limités à la modélisation des problèmes dans une seule direction de propagation des particules porteuses d'énergie. On notera en particulier que l'étude des matériaux réfléchissants est exclue des applications possibles de ce modèle.

Une difficulté supplémentaire associée aux applications considérées est la dépendance fréquentielle du transfert de chaleur. Certains termes du modèle, et notamment les opacités, peuvent présenter un spectre très complexe, avec de nombreuses raies d'émissions pour certains matériaux. Dans ces conditions, la réduction opérée par le modèle M_1 n'est plus une approximation suffisante du modèle cinétique. Cependant, on peut considérer les opacités et autres termes constants sur chacune de ces raies, menant à des fonctions constantes par morceaux. Ce modèle M_1 -multigroupe est présenté plus en profondeur dans [68].

Chapitre 3

Résolution numérique

3.1 Introduction

Nous avons établi dans la partie précédente les modèles que nous allons employer pour décrire la physique sous-jacente au transfert de chaleur conducto-radiatif. Nous avons choisi le modèle M_1 (et même un couplage entre plusieurs M_1) pour approximer les équations cinétiques des particules porteuses d'énergie, que nous allons résoudre à l'aide d'une méthode déterministe. Nous envisageons pour cela une Méthode Volumes Finis, comme décrite dans la partie 1.2.2. Cette partie présente à présent les choix et solutions numériques qui ont été employées pour mettre au point un code de calcul permettant d'obtenir les résultats souhaités.

Dans un premier temps, nous nous intéressons au schéma numérique qui sera employé dans notre méthode volume finis. Le choix du schéma est souvent crucial pour obtenir le code de calcul le plus performant, en cherchant à trouver, selon le modèle et les applications recherchées, le bon équilibre entre stabilité, performance et précision. Dans notre cas, une attention particulière est portée à la bonne restitution de la limite asymptotique du modèle par le schéma. Comme précisé dans la partie 1.2.3, cette caractéristique est une réelle difficulté, et le choix d'un schéma adapté, dit *asymptotic-preserving* (AP), est primordial. Des éléments numériques plus standards tels que la montée à l'ordre élevé ou la stabilité de tels schémas sont aussi abordés.

Au vu de la non-linéarité du système que nous cherchons à résoudre, il nous faut de plus sélectionner une méthode de résolution, dit solveur, adéquate pour converger le plus rapidement possible vers la bonne solution. Les options et choix retenus sont détaillés dans la partie 3.3. Celle-ci est suivie par le détail des options d'optimisations sélectionnées dans notre étude pour une fois de plus réduire le coût en temps de calcul de la méthode.

Enfin, nous nous intéressons à la discrétisation spatiale des domaines de calcul prévus dans le

cadre de cette étude. Comme toute méthode numérique, nos choix (et particulièrement celui du schéma) imposent des limitations au niveau du maillage à employer. Ceux-ci sont détaillés, et les maillages utilisés au cours de notre étude sont exposés. Notre méthode se voulant de plus "orientée-image", donc fonctionnelle à partir d'images numériques de matériaux réels, les problématiques alors engendrées sont présentées en fin de partie.

3.2 Schéma numérique

3.2.1 Propriétés nécessaires pour le schéma numérique

Pour les applications considérées et détaillées dans le paragraphe 1.1.2, nous nous devons de sélectionner un schéma numérique robuste et efficace pour approcher la solution du modèle M_1 . En outre, cette étude propose plusieurs défis d'un point de vue numérique :

- la résolution doit permettre d'obtenir des résultats convenables sur des maillages non-structurés afin de minimiser le nombre de mailles tout en capturant les discontinuités du domaine ;
- parmi les applications considérées, on prévoit l'emploi de matériaux hétérogènes avec des variations importantes de propriétés thermiques entre les différentes phases. Le schéma numérique se devra donc d'être particulièrement stable et capable de gérer les potentiels phénomènes de couches limites ;
- au vu des variations considérées, des propriétés des matériaux et des modes de transfert, le temps caractéristique du schéma peut de la même façon varier drastiquement d'une région à l'autre du domaine. Pour que les calculs ne soient pas limités par le phénomène le plus rapide, on devra considérer un schéma implicite capable d'utiliser des pas de temps variables et de grandes conditions CFL ;
- la conception du modèle M_1 permet de modéliser correctement le transport des particules dans les deux régimes limites diffusif et de transport. Ceux-ci seront tous deux rencontrés lors des mêmes calculs, au gré des paramètres et conditions utilisés. Le schéma choisit doit donc pouvoir retranscrire correctement ces deux régimes limites, mais aussi dégénérer à la bonne vitesse vers la limite diffusive. Nous nous orientons donc vers un schéma préservant la limite asymptotique du modèle (dit AP).

Échec de la préservation du caractère asymptotique pour un schéma non adapté

Nous détaillons sur un exemple simple, dans ce paragraphe, la raison pour laquelle une modification des schémas standards est souvent nécessaire pour obtenir la préservation du régime asymptotique de la part du schéma. Pour mettre en lumière l'idée derrière la modification du schéma proposé dans [30], nous réalisons ci-dessous une étude de la vitesse de convergence des

termes du schéma de Rusanov [23] pour un unique modèle M_1 (2.25). Tout d'abord, on écrit pour toutes mailles K d'un maillage \mathcal{T} le schéma Volumes Finis implicite aux flux de Rusanov :

$$\frac{\mathcal{U}_K^{n+1} - \mathcal{U}_K^n}{\Delta t} - \frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} |e| \mathcal{F}_e^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{K,e} = \sigma_K S(\mathcal{U}_K^{n+1}) \quad (3.1)$$

$$\mathcal{F}_e^n \cdot \mathbf{n}_{K,e} = \frac{1}{2} \left([F(\mathcal{U}_K^n) + F(\mathcal{U}_L^n)] \cdot \mathbf{n}_{K,e} - c(\mathcal{U}_L^n - \mathcal{U}_K^n) \right), \text{ avec } S(\mathcal{U}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -cF_x \\ -cF_y \\ -cF_z \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

avec Δt le pas de temps, $\mathbf{n}_{K,e}$ la normale sortante par le coté e de la maille K , et L la maille voisine de K par le coté e . Sans perte de généralité et par souci de simplicité, les calculs suivants sont exprimés en deux dimensions. Sur un maillage 2D non-structuré, on peut donc détailler le schéma sur trois équations :

$$\frac{E_K^{n+1} - E_K^n}{\Delta t} = -\frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} \begin{pmatrix} F_{x,K}^{n+1} + F_{x,L}^{n+1} \\ F_{y,K}^{n+1} + F_{y,L}^{n+1} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n}_{K,e} + \frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} c (E_L^{n+1} - E_K^{n+1}) \quad (3.3)$$

$$\frac{F_{x,K}^{n+1} - F_{x,K}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} c^2 \begin{pmatrix} P_{xx,K}^{n+1} + P_{xx,L}^{n+1} \\ P_{xy,K}^{n+1} + P_{xy,L}^{n+1} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n}_{K,e} + \frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} c (F_{x,L}^{n+1} - F_{x,K}^{n+1}) - c\sigma_K F_{x,K}^{n+1} \quad (3.4)$$

$$\frac{F_{y,K}^{n+1} - F_{y,K}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} c^2 \begin{pmatrix} P_{yx,K}^{n+1} + P_{yx,L}^{n+1} \\ P_{yy,K}^{n+1} + P_{yy,L}^{n+1} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n}_{K,e} + \frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} c (F_{y,L}^{n+1} - F_{y,K}^{n+1}) - c\sigma_K F_{y,K}^{n+1} \quad (3.5)$$

Pour éprouver la préservation de l'asymptotique de ce schéma, on utilise à nouveau les valeurs des vitesses de convergences (2.30)–(2.33).

Décrivons les termes un par un, en commençant par l'équation (3.4), et en considérant que nous utilisons une norme L^∞ et que la solution est assez régulière :

$$\frac{F_{x,K}^{n+1} - F_{x,K}^n}{\Delta t} \simeq \partial_t F_x(t^n, x_K) = \mathcal{O} \left((1 + c\sigma t)^{-\frac{5}{2}} \right) \quad (3.6)$$

$$\frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} c^2 \begin{pmatrix} P_{xx,K}^{n+1} + P_{xx,L}^{n+1} \\ P_{xy,K}^{n+1} + P_{xy,L}^{n+1} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n}_{K,e} \simeq \operatorname{div} \left(c^2 \begin{pmatrix} P_{xx,K}^{n+1} \\ P_{xy,K}^{n+1} \end{pmatrix} \right) \quad (3.7)$$

Une fois de plus, la valeur limite de la pression est prise en utilisant la formule (2.34) obtenue dans [65]. En utilisant cette fois un développement de Taylor du premier ordre pour obtenir les valeurs

des variables au temps t^n :

$$\operatorname{div} \left(c^2 \begin{pmatrix} F_{xx,K}^{n+1} \\ F_{xy,K}^{n+1} \end{pmatrix} \right) \simeq \frac{c^2}{3} \partial_x (E_k^{n+1}) \simeq \frac{c^2}{3} (\partial_x E_K^n + \Delta t \partial_{t,x} E_K^n) = \mathcal{O} \left((1 + c\sigma t)^{-\frac{3}{2}} \right) \quad (3.8)$$

$$\frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} c (F_{x,L}^{n+1} - F_{x,K}^{n+1}) \simeq \operatorname{div} (\nabla_{KL} F_{x_K}^{n+1}) \simeq \operatorname{div} (\nabla_{KL} (F_{x_K}^n + \Delta t \partial_t F_{x_K}^n)) = \mathcal{O} \left((1 + c\sigma t)^{-\frac{5}{2}} \right) \quad (3.9)$$

avec $\nabla_{KL} = \begin{pmatrix} \partial_{\vec{KL}} \\ \partial_{\vec{KL}^\perp} \end{pmatrix}$ l'opérateur de dérivation sur la base $\begin{pmatrix} \vec{KL} \\ \vec{KL}^\perp \end{pmatrix}$, et $KL \cdot \vec{KL}^\perp = 0$

$$F_{x,K}^{n+1} = F_{x,K}^n + \Delta t \partial_t F_{x,K}^n + \dots \simeq F_x(t^n, x_k) = \mathcal{O} \left((1 + c\sigma t)^{-\frac{3}{2}} \right) \quad (3.10)$$

Ces expressions révèlent les termes dominants de l'équation (3.4), en $\mathcal{O} \left((1 + c\sigma t)^{-\frac{3}{2}} \right)$, qui devient alors :

$$F_x = -\frac{c}{3\sigma} \partial_x E \quad (3.11)$$

De la même façon, on peut conclure que :

$$F_y = -\frac{c}{3\sigma} \partial_y E \quad (3.12)$$

On peut noter que les équations (3.11)–(3.12) correspondent à la loi de Fourier, ce qui montre que notre calcul est pour le moment sur la bonne voie, car c'est typiquement le résultat que l'on retrouve sur le système continu. On peut réaliser le même traitement pour (3.3) :

$$\frac{E_K^{n+1} - E_K^n}{\Delta t} \simeq \partial_t E(t^n, x_K) = \mathcal{O} \left((1 + c\sigma t)^{-2} \right) \quad (3.13)$$

$$\frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} \begin{pmatrix} F_{x,K}^{n+1} + F_{x,L}^{n+1} \\ F_{y,K}^{n+1} + F_{y,L}^{n+1} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n}_{KL} \simeq \operatorname{div} \begin{pmatrix} F_{x,K}^{n+1} \\ F_{y,K}^{n+1} \end{pmatrix} = \mathcal{O} \left((1 + c\sigma t)^{-2} \right) \quad (3.14)$$

$$\frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} c (E_L^{n+1} - E_K^{n+1}) \simeq \operatorname{div} (cd_{KL} \nabla_{KL} E) = \mathcal{O} \left((1 + c\sigma t)^{-2} \right) \quad (3.15)$$

avec $d_{KL} = \left\| \overrightarrow{KL} \right\|$. Les termes dominants de l'équation (3.3) donnent :

$$\partial_t E = -\operatorname{div} \left(\begin{pmatrix} F_x \\ F_y \end{pmatrix} - cd_{KL} \nabla_{KL} E \right) \quad (3.16)$$

Ce qui, en remplaçant les flux avec leurs valeurs obtenues dans (3.11)–(3.12), donne finalement :

$$\partial_t E = \operatorname{div} \left(\frac{c}{3\sigma} \nabla E + cd_{KL} \nabla_{KL} E \right) \quad (3.17)$$

qui ne correspond pas à la limite diffusive du modèle M_1 (2.29). Le terme $\text{div}(cd_{KL}\nabla_{KL}E)$, introduit par le terme de diffusion numérique dans la première équation de (3.15), n'est pas attendu dans l'équation limite. Il est par ailleurs tout à fait inapproprié car il introduit une diffusion anisotrope dans des directions qui dépendent du maillage. On peut de plus noter qu'il n'est pas prépondérant, et donc que le modèle est une approximation convenable de la limite, seulement dans le cas où $cd_{KL} \ll 1$, ce qui en général est une condition totalement déraisonnable. Cela prouve qu'un schéma bien spécifique ayant la caractéristique de conserver le comportement asymptotique doit être utilisé pour mitiger cet effet. On peut de plus rappeler que l'équation du flux renvoie bien la loi de Fourier, ce qui peut indiquer que la bonne équation serait obtenue si la diffusion numérique sur l'énergie était contrôlée. On peut aussi souligner que le terme problématique peut uniquement être démasqué par l'étude des vitesses de convergence.

Nécessité d'un schéma implicite

Pour appuyer l'usage d'un schéma implicite dans notre étude, on peut évaluer le pas de temps explicite nécessaire à la résolution, en utilisant les propriétés d'un matériau hétérogène composé d'air et de carbone, ce qui peut typiquement être utilisé pour la protection thermique en rentrée atmosphérique. Notre modèle étant composé de 2 modèles M_1 , un pour le rayonnement et un pour la conduction, le pas de temps Δt est ainsi limité par le plus faible des deux :

$$\Delta t \leq \min(\Delta t_R, \Delta t_m) \quad (3.18)$$

Pour le schéma de Rusanov (3.1–3.2) (qui est proche de notre choix final de schéma), on doit respecter pour chaque mode la condition CFL suivante :

$$\forall K \in \mathcal{T}, \Delta t_j \leq \frac{1}{c(\sigma + \frac{1}{\Delta x_K})}, j \in \{R, m\} \quad (3.19)$$

Avec Δx_K le pas d'espace sur la maille K . On peut ainsi répertorier les pas de temps maximums utilisables pour chaque modes et chaque matériaux dans le tableau 3.1. Dans ces conditions, on

Matériau	Air	Carbone
Δt_R	$3\Delta x \times 10^{-9}$	5×10^{-16}
Δt_m	$3\Delta x \times 10^{-9}$	8×10^{-13}

TABLE 3.1 – Pas de temps explicites radiatifs Δt_R et conductifs Δt_m maximums du schéma (3.1–3.2), en considérant les pas d'espace Δx tels que $10^{-7} \ll \Delta x \ll 10^{-2}$

remarque dans un premier temps que les pas de temps explicites sont extrêmement faibles, puisque que l'on cherche à observer l'état stationnaire de phénomènes qui pourraient être de l'ordre de la seconde. De plus, on remarque que le transfert par rayonnement dans le carbone est bien trop restrictif par rapport aux autres transports de chaleur, et imposerait ainsi un pas de temps 10^3

à 10^7 fois plus faible que celui nécessaire à la bonne convergence des autres modes, ce qui est catastrophique du point de vue de la pertinence en temps de calcul de notre approche. Pour rester compétitif, il nous faut donc un schéma implicite assez robuste pour venir à bout d'une résolution avec un pas de temps très important.

3.2.2 Schéma de Rusanov avec correction asymptotique

Présentons à présent le schéma numérique qui fait l'objet de cette étude, et qui est donc adapté aux besoins de notre contexte. Outre les propriétés discutées dans la section précédente, il faut noter que les paramètres matériaux obtenus sur les échantillons réels sont donnés pour chaque cellule du maillage. Un schéma Volumes Finis sur maillage non structuré est donc considéré. À l'ordre 1 en temps et en espace, il est basé sur une modification du schéma de Rusanov (3.1–3.2) [69]. Ces modifications ont bien entendu pour objectif de faire correspondre le profil asymptotique du schéma à celui du modèle M_1 . Elles sont basées sur le schéma introduit dans [30] et [31], à la différence qu'une version implicite est cette fois utilisée, étant donné les grands pas de temps qui seront nécessaires à la résolution, comme mentionné dans la partie précédente. Le principe de cette modification est de contrôler le terme de diffusion présent dans l'équation sur l'énergie dans le régime de diffusion (3.15), et qui prive le schéma de la bonne limite de diffusion. Le schéma considéré est le suivant, pour toute maille K (sur un maillage 3D non-structuré) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathcal{U}_K^{n+1} - \mathcal{U}_K^n}{\Delta t} - \frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} |e| \mathcal{F}_e^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{K,e} = \sigma_K S(\mathcal{U}_K^{n+1}) \end{array} \right. \quad (3.20)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{F}_e^n \cdot \mathbf{n}_{K,e} = \frac{1}{2} \left([F(\mathcal{U}_K^n) + F(\mathcal{U}_L^n)] \cdot \mathbf{n}_{K,e} - c_e \boldsymbol{\theta}_e (\mathcal{U}_L^n - \mathcal{U}_K^n) \right), \boldsymbol{\theta}_e = \begin{pmatrix} \frac{1}{(1+c_e \sigma_{ed} t)^\alpha} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \right. \quad (3.21)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} S(\mathcal{U}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -cF_x \\ -cF_y \\ -cF_z \end{pmatrix} \end{array} \right. \quad (3.22)$$

avec $\mathcal{U} = {}^t \left(E \ F_x \ F_y \right)$ le vecteur des variables conservatives composé de l'énergie et des composantes du flux, σ_K l'opacité dans la maille K , L la maille voisine de K par l'interface e de normale sortante $\mathbf{n}_{K,e}$, c_e et σ_{ed} la célérité et l'opacité à l'interface e (c.f. 3.2.8) respectivement, et $\alpha = 1$ un paramètre dont le choix sera argumenté dans la partie 3.2.4.

L'utilisation d'un schéma de Rusanov de vitesse d'onde c est raisonnable au vu des valeurs propres du modèle M_1 , incluses en module dans $[\frac{c}{\sqrt{3}}, c]$ [55]. On introduit ensuite le terme $\boldsymbol{\theta}_e$ (eq. (3.21)) pour amortir les effets de la diffusion numérique quand le terme source devient dominant,

pour assurer la convergence vers la bonne limite de diffusion. L'obtention de cette propriété est détaillée dans la section suivante. Ce schéma a été choisi pour sa simplicité, sa capacité à obtenir sans efforts la préservation du régime asymptotique sur des maillages non-structurés, mais aussi sa disposition à s'étendre naturellement vers un schéma d'ordre supérieur. Le pas de temps correspondant à la version explicite de ce schéma est $\Delta t_{\text{expl}} = \min_{K \in \mathcal{T}} \left(\frac{\Delta x_k / c}{1 + \sigma_K \Delta x_k} \right)$ (avec $\Delta x_k = \frac{|K|}{p_k}$, p_k étant le périmètre de la maille K), ce qui est bien trop restrictif dans notre contexte pour un couplage entre plusieurs modes de transfert de chaleur. On peut notamment estimer que pour un transfert de chaleur dans l'air, on aurait besoin, au vu des valeurs des paramètres thermiques, d'un pas de temps conductif $\Delta t_{\text{expl}}^{(\text{cond})} \underset{10^{11} \Delta x \gg 1}{\simeq} 10^{-16} \text{s}$ et d'un pas de temps radiatif $\Delta t_{\text{expl}}^{(\text{rad})} \simeq \Delta x \times 10^{-8} \text{s}$. Ces deux pas de temps, en plus d'être potentiellement très différents selon la valeur du pas d'espace Δx , sont extrêmement restreints, et inutilisables pour une méthode visant à atteindre le régime stationnaire (nécessitant $t_{\text{max}} \gg 1 \text{s}$). En raison de cette large gamme d'applications, et pour être en mesure d'obtenir une réponse rapide aux problèmes stationnaires lorsque cela est nécessaire, l'emploi d'une version implicite de ce schéma est impératif. L'un des défis de cette étude réside dans le fait que le schéma présenté a été développé dans une version explicite, avec une condition CFL quelque peu restrictive. Il n'était donc pas certain que la version implicite répondrait convenablement à l'utilisation de grands pas de temps avant cette étude.

3.2.3 Précédentes utilisations

Le schéma numérique (3.20–3.22) a été choisi pour résoudre notre problème car il a permis d'obtenir des résultats concluants dans de précédentes études. Il a été théorisé et présenté une première fois pour des applications sur des équations de Goldstein-Taylor dans [30], dans une version 1D explicite et semi-explicite jusqu'à l'ordre 4 en espace. La volonté était d'appliquer une correction simple au schéma HLL afin d'obtenir une préservation du régime asymptotique tout en obtenant une méthode permettant une montée simple vers l'ordre élevée. Les résultats obtenus étaient alors assez encourageants pour envisager une utilisation sur des modèles plus complets.

Des travaux ont ensuite été menés pour une extension multi-dimensionnelle dans le but d'obtenir la conservation asymptotique d'un modèle M_1 électronique [70]. Les résultats présentés se limitent à un schéma explicite, structuré et d'ordre 1, mais ont permis d'affirmer la possibilité d'extension du schéma vers des problèmes 2D.

Une dernière approche a permis d'étudier une extension non-structurée de (3.20–3.22) et d'établir sa capacité à gérer des problèmes raides en deux dimensions [31]. Plusieurs applications à des systèmes de lois de conservations différents ont été menés sur une version d'ordre élevée (couplée à une méthode MOOD [71]). Elles ont une fois de plus affirmé la capacité du schéma à obtenir des

résultats cohérents en régime asymptotique, en utilisant des méthodes simples de montée en ordre. Le schéma n'était cependant une fois de plus pas utilisé dans sa forme implicite, et c'est d'ailleurs une des spécificités de cette étude que de vérifier la stabilité de cette option, avec des pas de temps importants.

3.2.4 Vérification de la limite asymptotique

Reproduisons à présent l'étude de comportement asymptotique menée dans le paragraphe 3.2.1 en utilisant cette fois la valeur prévue pour θ_e , et en revenant une fois de plus en 2D. La procédure décrite dans les équations (3.3–3.17) est donc reproduite, en ajoutant la correction asymptotique θ_e dans l'équation de l'énergie (3.3) :

$$\frac{E_K^{n+1} - E_K^n}{\Delta t} = -\frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} \begin{pmatrix} F_{x,K}^{n+1} + F_{x,L}^{n+1} \\ F_{y,K}^{n+1} + F_{y,L}^{n+1} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n}_{K,e} + \frac{1}{K} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} c \frac{1}{(1 + c\sigma_{ed}t)^\alpha} (E_L^{n+1} - E_K^{n+1}) \quad (3.23)$$

La limite du terme de diffusion numérique (3.15), mitigée par le facteur θ_e devient alors :

$$\frac{1}{K} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} c \frac{1}{(1 + c\sigma_{ed}t)^\alpha} (E_L^{n+1} - E_K^{n+1}) \simeq \operatorname{div} \left(\frac{\nabla_{K,e} E}{(1 + c\sigma_{ed}t)^\alpha} \right) = \mathcal{O}((1 + c\sigma t)^{-2-\alpha}) \quad (3.24)$$

Tant que $\alpha > 0$, ce terme, qui était précédemment source de problèmes, n'est pas prépondérant. Les termes dominants de (3.3) donnent alors :

$$\partial_t E = -\operatorname{div} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

ce qui finit par donner :

$$\partial_t E = \operatorname{div} \left(\frac{c}{3\sigma} \nabla E \right) \quad (3.26)$$

Grâce à l'emploi de la correction asymptotique θ_e , le terme (3.24) est contrôlé, et n'intervient plus dans la forme asymptotique du système. Ce développement prouve donc la capacité de ce schéma à préserver la limite asymptotique du modèle. On peut de plus détailler le schéma limite obtenu à l'asymptote :

$$\frac{E_K^{n+1} - E_K^n}{\Delta t} = -\frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} \frac{c}{3\sigma_{ed}} ((\nabla_K E_K)^{n+1} + (\nabla_L E_L)^{n+1}) \cdot \mathbf{n}_{K,e} \quad (3.27)$$

$$\nabla_M E_M^{n+1} = \frac{1}{|M|} \sum_{g \in \partial M} \frac{|g|}{2} (E_M^{n+1} + E_N^{n+1}) \cdot \mathbf{n}_{M,g} \quad , \quad \forall M, N \in \mathcal{T} \text{ tel que } M \cap N = g \quad (3.28)$$

On peut noter que le schéma limite (3.27) nous est imposé mais qu'il décrit néanmoins correctement l'équation désirée (3.26). On remarque toutefois qu'il ne correspond pas vraiment à ce que

l'on aurait pu prévoir. En effet, le voisinage nécessaire à ce schéma comprend les voisins d'ordre 2. Cette construction pourrait être problématique, voir difficile à gérer numériquement et encore davantage pour passer à l'ordre supérieur en espace. Cela ne nous impacte cependant pas directement, le schéma que nous utilisons (3.20–3.22) ayant un stencil compact à l'ordre 1. Ainsi, nous ne nous intéresserons jamais au schéma (3.27), si ce n'est pour valider notre méthode.

Concernant à présent le choix du paramètre α , il a été précisé dans (3.24) que $\alpha > 0$ est une condition nécessaire à la préservation du régime asymptotique. De plus, pour s'assurer que le schéma converge à la bonne vitesse vers sa limite asymptotique, le développement de Taylor utilisé dans les équations (3.13) et (3.14) doit être prolongé pour pouvoir certifier que le terme décrit dans l'équation (3.24) n'est pas prédominant devant les termes suivants du développement limité :

$$\frac{E_K^{n+1} - E_K^n}{\Delta t} \simeq \partial_t E(t^n, x_K) + \frac{\Delta t}{2} \partial_t^2 E(t^n, x_K) = \mathcal{O}((1 + c\sigma t)^{-2}) + \mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{5}{2}}\right) \quad (3.29)$$

$$\frac{1}{K} \sum_{e \in \partial K} \frac{|e|}{2} \begin{pmatrix} F_{x,K}^{n+1} + F_{x,L}^{n+1} \\ F_{y,K}^{n+1} + F_{y,L}^{n+1} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n}_{K,e} \simeq \operatorname{div} \begin{pmatrix} F_{x,K}^{n+1} \\ F_{y,K}^{n+1} \end{pmatrix} + \frac{\Delta x_k}{2} \operatorname{div} \left(\nabla \begin{pmatrix} F_{x,K}^{n+1} \\ F_{y,K}^{n+1} \end{pmatrix} \right) \quad (3.30)$$

$$= \mathcal{O}((1 + c\sigma t)^{-2}) + \mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{5}{2}}\right) \quad (3.31)$$

Ainsi le choix $\alpha \in]0, \frac{1}{2}[$ rendrait le terme (3.24) non négligeable devant les termes attendus, et pourrait interférer avec le régime asymptotique du schéma. Il nous faut donc imposer $\alpha > \frac{1}{2}$ (ici en 2D) pour nous en prémunir. La valeur minimale de α selon les dimensions est résumée dans le tableau 3.2. On notera que cette information est uniquement accessible via la méthode de la vitesse de convergence, alors qu'un développement de Chapman-Enskog ne permettrait d'obtenir que la forme du schéma limite.

Dimension	1	2	3
α_{\min}	1/2	1/2	1

TABLE 3.2 – Valeur minimale du paramètre α pour obtenir la bonne limite asymptotique selon la dimension du problème

3.2.5 Préservation de l'ensemble des états admissibles

Pour assurer l'intégrité physique des résultats renvoyés par le schéma (3.20–3.22), il nous faut vérifier qu'il permet de préserver l'ensemble des états admissibles \mathcal{A} . Pour des raisons de simplicité de la démonstration, on considère dans un premier temps le schéma 2D (3.32–3.34), dans lequel la réduction de diffusion numérique s'applique également au terme de flux, donc avec $\theta_e = \frac{1}{(1+c\sigma_{ed}t)^\alpha} I_d$. De plus, on suppose que la résolution est faite à l'aide d'une méthode de Newton exacte.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathcal{U}_K^{n+1} - \mathcal{U}_K^n}{\Delta t} - \frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} |e| \mathcal{F}_e^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{K,e} = \sigma_K S(\mathcal{U}_K^{n+1}) \end{array} \right. \quad (3.32)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{F}_e^n \cdot \mathbf{n}_{K,e} = \frac{1}{2} \left([F(\mathcal{U}_K^n) + F(\mathcal{U}_L^n)] \cdot \mathbf{n}_{K,e} - c_e \theta_e (\mathcal{U}_L^n - \mathcal{U}_K^n) \right), \text{ with } \theta_e = (1 + c_e \sigma_{ed} t)^\alpha \end{array} \right. \quad (3.33)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} S(\mathcal{U}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -cF_x \\ -cF_y \end{pmatrix} \end{array} \right. \quad (3.34)$$

On rappelle dans un premier temps les propriétés suivantes :

- L'ensemble \mathcal{A} est un cône convexe, *i.e.* $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}^+, \mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2 \in \mathcal{A} \Rightarrow \alpha \mathcal{U}_1 + \beta \mathcal{U}_2 \in \mathcal{A}$
- Le schéma 2D (3.32 – 3.34) est une combinaison convexe de schémas 1D.

La première propriété est directe, tandis que les calculs nécessaires à la démonstration de la seconde sont similaires à ceux présentés dans [67]. De la même façon, on arrive à la conclusion que le schéma 2D (3.32 – 3.34) est bien une combinaison convexe de schéma 1D, et donc conserve l'ensemble des états admissibles tant que c'est le cas du schéma 1D (3.35) :

$$U_K^{n+1} = U_K^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_K} (\mathcal{F}_{KL}^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{K,e} - \mathcal{F}_{KK}^{n+1} \cdot \mathbf{n}_{K,e}) \quad (3.35)$$

Vu que les équations sont invariantes par rotation, on peut admettre sans perte de généralité que $\mathbf{n}_{K,e} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. On s'intéresse à présent au schéma 1D suivant, en utilisant la notation $\theta = \frac{1}{(1+c\sigma_{ed}t)^\alpha}$:

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x_K} \left(F(U_{i+1}) - F(U_i) - c\theta(U_{i+1} - U_i) \right) \quad (3.36)$$

De la même façon que dans [30], ce schéma peut être perçu comme un schéma de type Godunov associé à un solveur approché de Riemann. Pour compléter le solveur, on a besoin d'introduire les états intermédiaires U_L^* and U_R^* qui apparaissent entre les pentes caractéristiques $\frac{x}{t} = -c\theta$ et $\frac{x}{t} = c\theta$. En supposant que les propriétés du domaine sont homogènes, on obtient alors les expressions suivantes :

$$E_L^* = E_R^* = \frac{1}{2}(E_i + E_{i+1}) - \frac{1}{2c\theta}(F_{x,i+1} - F_{x,i}) \quad (3.37)$$

$$F_{L,\gamma}^* = F_{R,\gamma}^* = \frac{1}{1+c\sigma\Delta t} \left(\frac{1}{2}(F_{\gamma,i} + F_{\gamma,i+1}) - \frac{c^2}{2c\theta}(P_{x\gamma,i+1} - P_{x\gamma,i}) \right), \quad \gamma \in \{x, y\} \quad (3.38)$$

Le solveur conserve les états admissibles si les états intermédiaires $\frac{x}{t} = -c\theta$ et $\frac{x}{t} = c\theta$ le font aussi. C'est le cas si $\theta \geq \frac{|F|}{cE}$, ce qui peut être obtenu en posant $\alpha \leq \frac{1}{2}$. Ainsi, tant que le solveur de Newton converge, on a la certitude que le schéma utilisant $\theta_e = \frac{1}{(1+c\sigma_{ed}t)^\alpha} I_d$ conserve l'ensemble des états admissibles.

Pour rappel, d’après les paragraphes précédents, le choix du paramètre $\alpha \geq \frac{1}{2}$ est suffisant pour que notre schéma préserve l’asymptotique, au vu des valeurs asymptotiques de E et F données dans (2.30) and (2.32). On peut cependant souligner qu’en pratique le solveur JFNK (*c.f.* 3.3.2) utilisé dans notre code ne garantit pas la préservation des états admissibles dans ses boucles internes. Ainsi, l’idée pour le schéma (3.20–3.22) est de conserver l’intégralité de la diffusion numérique sur les équations de flux radiatifs (sans impacter la propriété AP du schéma) afin de rendre le schéma plus stable, et donc continuer d’obtenir des résultats convenables sur des grands pas de temps.

Les arguments avancés ne garantissent donc pas rigoureusement que l’intégralité du calcul préserve bien l’ensemble des états admissibles, mais montrent que le schéma est construit sur un base saine dans cette optique. Ce raisonnement est confirmé par les résultats numériques présentés dans le dernier chapitre, en considérant l’utilisation d’une stratégie d’adaptation du pas de temps et d’un contrôle de θ_e pour améliorer la convergence dans des cas particulièrement raides.

3.2.6 Stabilité

Pour renforcer le raisonnement précédent, nous avons cherché à prouver par le calcul que notre schéma est numériquement stable. Nous avons pour cela recherché les valeurs propres du système (2.25).

Notre schéma est stable si les valeurs propres du système sont contenues dans la zone de stabilité absolue $\{z \in \mathbb{C}, 1 < |1 - z|\}$, soit à l’extérieur du cercle de rayon 1 et de centre (1;0) sur le domaine complexe [72]. Ce calcul est différent selon les maillages et les conditions de bord utilisées, et il est donc à refaire en cas de doute sur la stabilité.

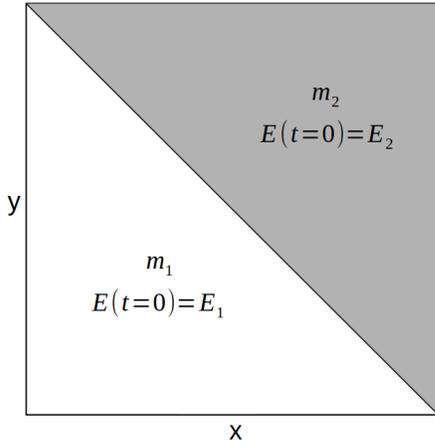
Pour prendre la mesure de la stabilité du schéma sur un cas simple, nous cherchons ici à éprouver sa stabilité sur un cas raide de Riemann en deux dimensions, avec une discontinuité initiale sur un domaine hétérogène, présentés sur la figure 3.1a et le tableau 3.3.

Le problème étudié est le suivant :

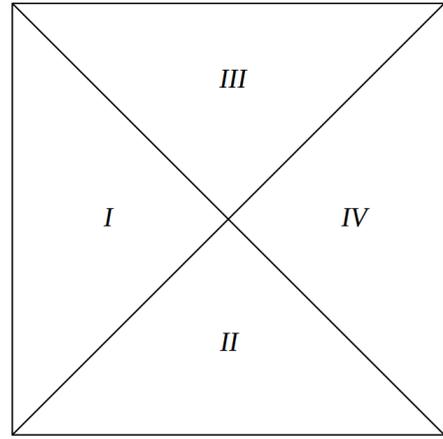
— **CI** :

Paramètre	Valeur		Unité
$L_x = L_y$	1		m
t_{\max}	1.17×10^{-4}		s
	m₁	m₂	
c	18500	18500	m.s ⁻¹
σ	1.2×10^4	4.1×10^4	m ⁻¹
E_0	1.42×10^9	4.26×10^8	J.m ⁻³

TABLE 3.3 – Paramètres utilisés dans le cas test pour trouver les valeurs propres du système



(a) Domaine utilisé pour le cas du tableau 3.3



(b) Maillage utilisé pour le calcul analytique des valeurs propres

FIGURE 3.1 – Cas utilisé pour le calcul des valeurs propres

— Problème de Riemann 2D

$$\begin{cases} E(t=0, x, y) = E_1 & \text{si } x + y < \frac{1}{2} \\ E(t=0, x, y) = E_2 & \text{sinon} \\ F_x(t=0, x, y) = F_y(t=0, x, y) = 0 \end{cases}$$

— **CL :**

— En x, y : Neumann homogène

— **Domaine :** Figure 3.1a

— **Paramètres :** Tableau 3.3

$$\frac{dU}{dt} = AU \tag{3.39}$$

Vérifions une première fois par le calcul analytique la stabilité sur un domaine à quatre mailles, présenté sur la figure 3.1b. La matrice de déplacement A , obtenue en mettant le système sous la forme (3.39), est alors (3.40) :

$$A = I_{12} + \quad (3.40)$$

$$\begin{pmatrix} c\theta_{112}\Delta t\sqrt{2} & 0 & -\frac{2c^2\Delta t}{3} & -c\theta_1\Delta t\sqrt{2} & \frac{c^2\Delta t}{3} & -\frac{c^2\Delta t}{3} & -c\theta_{12}\Delta t\sqrt{2} & -\frac{c^2\Delta t}{3} & -\frac{c^2\Delta t}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c\Delta t\beta_1 & 0 & \Delta t & -c\Delta t\sqrt{2} & 0 & -\Delta t & -c\Delta\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2\Delta t & 0 & c\Delta t\beta_1 & \Delta t & -c\Delta t\sqrt{2} & 0 & -\Delta t & 0 & -c\Delta t\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ -c\theta_1\Delta t\sqrt{2} & -\frac{c^2\Delta t}{3} & \frac{c^2\Delta t}{3} & c\theta_{112}\Delta t\sqrt{2} & -\frac{2c^2\Delta t}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & -c\theta_{12}\Delta t\sqrt{2} & -\frac{c^2\Delta t}{3} & -\frac{c^2\Delta t}{3} \\ -\Delta t & -c\Delta t\sqrt{2} & 0 & -2\Delta t & c\Delta t\beta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta t - c\Delta\sqrt{2} & 0 & 0 \\ \Delta t & 0 & -c\Delta t\sqrt{2} & 0 & 0 & c\Delta t\beta_1 & 0 & 0 & 0 & -\Delta t & 0 & -c\Delta t\sqrt{2} \\ -c\theta_{12}\Delta t\sqrt{2} & \frac{c^2\Delta t}{3} & \frac{c^2\Delta t}{3} & 0 & 0 & 0 & c\theta_{122}\Delta t\sqrt{2} & \frac{c^2\Delta t}{6} & 0 & -c\theta_2\Delta t\sqrt{2} & \frac{c^2\Delta t}{3} & -\frac{c^2\Delta t}{3} \\ \Delta t & -c\Delta t\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\Delta t & c\Delta t\beta_2 & 0 & \Delta t & -c\Delta t\sqrt{2} & 0 \\ \Delta t & 0 & -c\Delta t\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c\Delta t\beta_2 & -\Delta t & 0 & -c\Delta t\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & -c\theta_{12}\Delta t\sqrt{2} & \frac{c^2\Delta t}{3} & \frac{c^2\Delta t}{3} & -c\theta_2\Delta t\sqrt{2} & -\frac{c^2\Delta t}{3} & \frac{c^2\Delta t}{3} & c\theta_{122}\Delta t\sqrt{2} & \frac{2c^2\Delta t}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta t & -c\Delta t\sqrt{2} & 0 & -\Delta t & -c\Delta t\sqrt{2} & 0 & 0 & c\Delta t\beta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta t & 0 & -c\Delta t\sqrt{2} & \Delta t & 0 & -c\Delta t\sqrt{2} & 2\Delta t & 0 & c\Delta t\beta_2 \end{pmatrix}$$

avec $\begin{cases} \theta_{112} = \theta_1 + \theta_{12} \\ \theta_{122} = \theta_{12} + \theta_2 \\ \beta_1 = 2\sqrt{2} + \sigma_1 \\ \beta_2 = 2\sqrt{2} + \sigma_2 \end{cases}$, θ_{12} étant la valeur de θ à l'interface entre les deux matériaux, obtenue

tel qu'indiqué dans le paragraphe 3.2.8, et I_{12} la matrice identité de taille 12. Les valeurs propres obtenues à partir de A apparaissent comme indiqués sur la figure 3.2. Dans ce cas, la partie réelle des valeurs propres est strictement négative, ce qui indique que le schéma est A-stable.

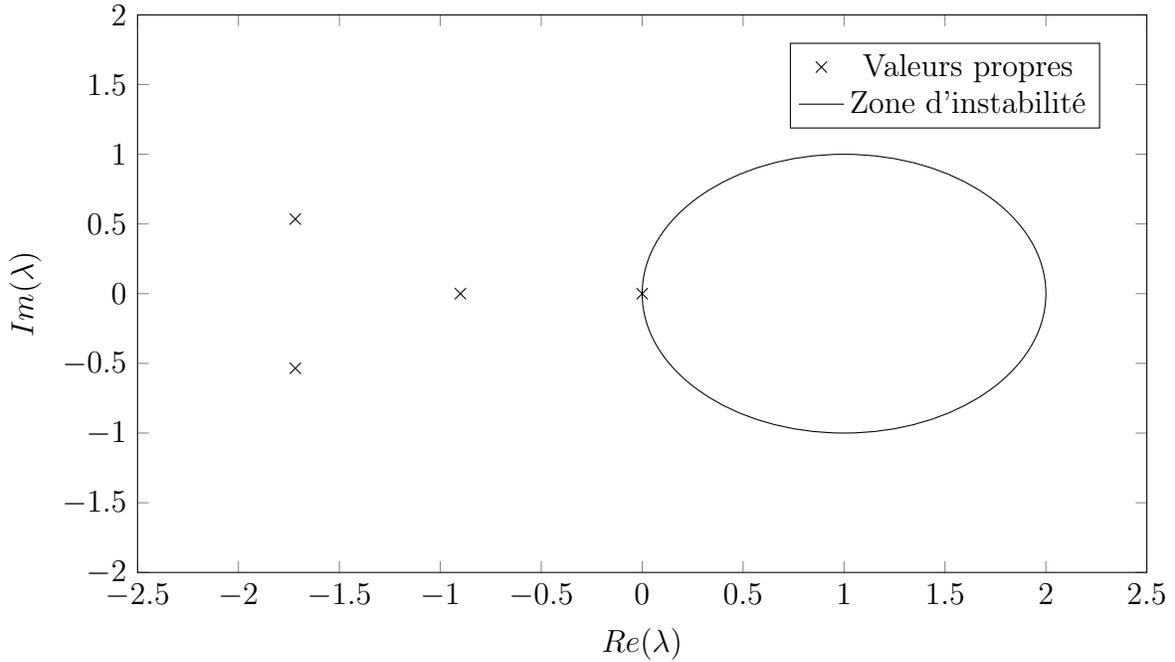


FIGURE 3.2 – Valeurs propres du système dans le cas 3.3 obtenues par le calcul sur le maillage 3.1b (d'autres valeurs propres de l'ordre de $\lambda = -10^8 + 0i$ ne sont pas affichées car évidemment hors de la zone d'instabilité)

Dans un second temps, on cherche à confirmer ce résultat sur un maillage plus raffiné, en obtenant la matrice de déplacement ainsi que les valeurs propres du système numériquement, à l'aide de notre code de calcul. On utilise un maillage non structuré de 1.6×10^3 mailles, celles-ci épousant la discontinuité axiale du domaine. Une fois de plus, les parties réelles des valeurs propres (présentées dans la figure 3.3) sont strictement négatives, ce qui finit d'attester de la stabilité du schéma numérique et de notre code de calcul dans ce cas.

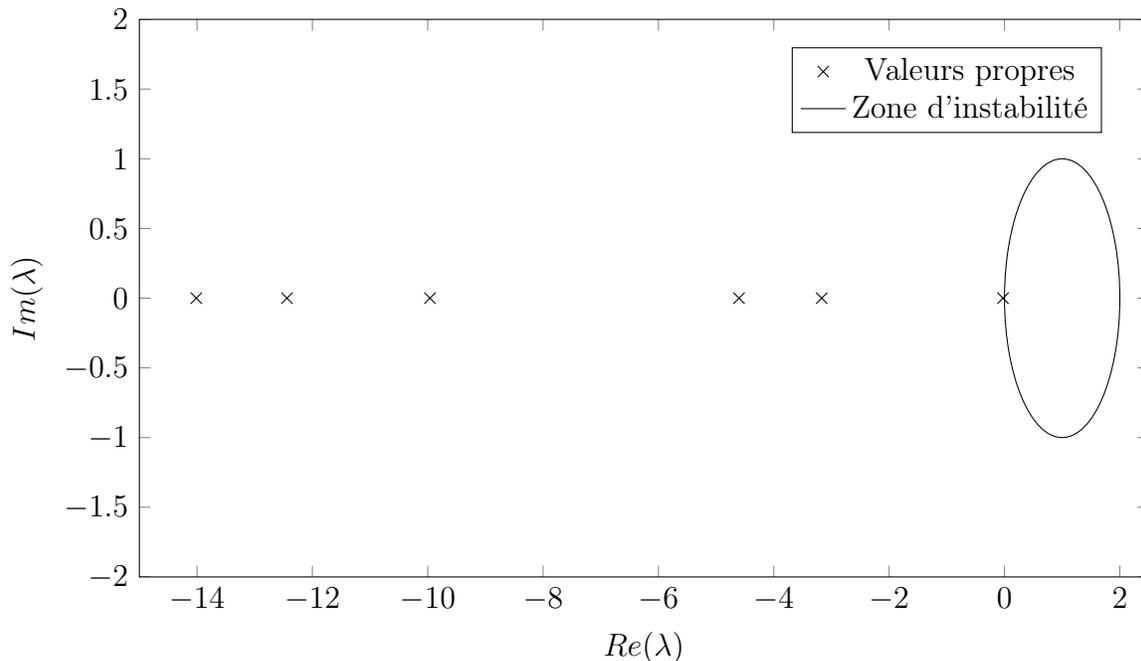


FIGURE 3.3 – Valeurs propres du système dans le cas 3.3 obtenues numériquement sur un domaine de 1.6×10^3 mailles (d'autres valeurs propres telles que $Re(\lambda_i) \gg -20$ ne sont pas affichées car évidemment hors de la zone d'instabilité)

3.2.7 Ordre supérieur

Un des principaux avantages de ce schéma émerge lors du passage aux ordres supérieurs. Cette étape est généralement complexe pour les schémas conservant l'asymptotique, comme cela a pu être souligné dans d'autres études [67]. Cependant, le système (3.20–3.21) est naturellement compatible avec l'accroissement de l'ordre du schéma sans plus de complications et sans affecter le caractère AP du schéma [30]. Ces caractéristiques sont excellentes au vu de la discontinuité des paramètres thermiques envisagés pour cette étude. Dans ce qui suit, seul l'ordre 2 est présenté, mais des ordres élevés peuvent être obtenus sans pertes des propriétés du schéma [31].

Pour des raisons de simplicité, un schéma de Barth-Jespersen [73] a été choisi pour la montée à l'ordre 2, même si un schéma de WENO [74] est envisagé pour les ordres supérieurs, avec la même

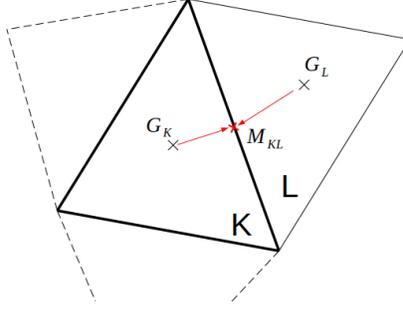


FIGURE 3.4 – Schéma des notations utilisé pour le schéma de Barth-Jespersen

modification que ce qui suit. Le principe est d'utiliser le flux numérique (3.41) à la place du terme $\mathcal{F}_e(\mathcal{U}_K^n, \mathcal{U}_L^n) \cdot \mathbf{n}_{K,e}$ dans l'équation (3.20) :

$$\mathcal{F}_e^n \cdot \mathbf{n}_{K,e} = \frac{1}{2} \left([F(\mathcal{U}_K^{*,n}) + F(\mathcal{U}_L^{*,n})] \cdot \mathbf{n}_{K,e} - c_e \theta_e (\mathcal{U}_L^{*,n} - \mathcal{U}_K^{*,n}) \right) \quad (3.41)$$

avec

$$\mathcal{U}_i^* = \mathcal{U}_i + \overrightarrow{\nabla U}_i \cdot \overrightarrow{G_i M_i} \quad (3.42)$$

G_i et M_i étant respectivement le centre de masse de la maille i et le centre de l'interface entre les deux mailles d'intérêt, comme détaillé sur la figure 3.4. Le gradient $\overrightarrow{\nabla U}_i$ est quand à lui calculé à l'aide d'une formule de Gauss-Green sur les mailles duales dont les sommets sont pris comme les centres de la maille i et ses voisins :

$$\overrightarrow{\nabla U}_i = \min_j \left(\frac{1}{|j|} \sum_{e_j \in \partial j} |e_j| \overrightarrow{n}_{e_j} \bar{U}_j \right) \quad (3.43)$$

j étant l'indice des mailles duales créées à partir de i et ses voisins, \overrightarrow{n}_{e_j} la normale sortante de j sur l'interface e_j , et \bar{U}_j la valeur moyenne de U sur les sommets de j .

Enfin, pour obtenir également un ordre 2 en temps, on choisit d'utiliser un schéma de Crank-Nicolson :

$$\tilde{u}^{n+1} = u^n - \Delta t H(u^n) \quad (3.44)$$

$$\tilde{\tilde{u}}^{n+1} = u^n - \Delta t H(u^{n+1}) \quad (3.45)$$

$$u^{n+1} = \frac{\tilde{u}^{n+1} + \tilde{\tilde{u}}^{n+1}}{2} \quad (3.46)$$

3.2.8 Gestion des discontinuités

Le schéma (3.20–3.22) dénote la nécessité d'obtenir les valeurs de différents paramètres physiques aux interfaces entre les mailles. Cette propriété est une difficulté à l'interface entre deux

milieux d'un domaine hétérogène, et tout particulièrement en cas de discontinuité importante entre les propriétés physiques des deux phases. Deux paramètres sont en cause : la célérité c_e et l'opacité σ_{ed} à l'interface e .

Discontinuité de célérité

On remarque que dans les équations (2.2) et (2.5), la célérité est considérée comme constante sur l'ensemble du domaine. Plaçons-nous en 1D, avec un terme source nul. En toute cohérence, l'équation de Boltzmann aurait dû s'écrire :

$$\partial_t I(t, x, \mu, \nu) + \mu \operatorname{div}_x(c(x)I(t, x, \mu, \nu)) = 0 \quad (3.47)$$

$$\Leftrightarrow \partial_t I(t, x, \mu, \nu) + c(x)\mu \operatorname{div}_x(I(t, x, \mu, \nu)) = -c'(x)I(t, x, \mu, \nu) \quad (3.48)$$

Ainsi, avant de considérer une valeur de célérité à l'interface c_e , il nous faut introduire un terme supplémentaire dans le terme source du modèle. Ce terme étant discontinu, il faut de plus le lisser dans l'espace pour pouvoir résoudre le système. Cet ajout engendre de nouveaux problèmes. Il augmente notamment la raideur du système, et complexifie les démonstrations liées à la préservation de l'asymptotique présentées dans les parties 3.2.1 et 3.2.4. Pour ces raisons et devant la durée finie de cette étude, nous avons restreint le modèle et les applications et supposé les vitesses c et c_m constantes sur l'ensemble du domaine. L'extension du modèle à des discontinuités de vitesse des particules est laissée ouverte à une future étude. On notera toutefois que si l'approximation $c = \text{cste}$ est convenable dans nos applications, l'approximation $c_m = \text{cste}$ peut quand à elle être acceptable si l'on considère les autres paramètres λ , ρ et C_v constants et donc que les variations d'opacités σ_m sont uniquement liés aux variations de vitesse c_m . En effet, tant que l'on se place en régime parabolique (ce qui sera le cas dans nos applications pour le modèle sur les phonons), le modèle est équivalent à

$$\partial_t E = \operatorname{div}\left(\underbrace{\frac{c_m}{3\sigma_m}}_{\frac{\lambda}{\rho C_v}} E\right) \quad (3.49)$$

Discontinuité d'opacité

Pour connaître le comportement des différentes opacités à l'interface entre deux milieux, on peut remonter à une version simplifiée des équations cinétiques (2.2–2.5) à la base du modèle. En se plaçant en 1D, en régime stationnaire et en considérant uniquement le terme d'absorption, on obtient l'équation suivante :

$$c\mu\partial_x I(\mu, x) = -c\sigma I(\mu, x), \quad (3.50)$$

dont on peut obtenir une solution analytique simple :

$$I(\mu, x) = I_0 \exp\left(-\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma(x) dx\right) \quad (3.51)$$

avec I_0 une constante. Ainsi, cette relation nous informe que l'opacité provenant du terme d'absorption, que l'on retrouve dans le second membre du modèle M_1 (2.25), est obtenue en cas de discontinuité spatiale par

$$\sigma_{ed} = \int_0^x \sigma(x) dx \quad (3.52)$$

ce qui correspond entre deux mailles à une moyenne arithmétique des valeurs de part et d'autre de l'interface.

$$\sigma_{ed} = \frac{\sigma_K + \sigma_L}{2} \quad (3.53)$$

On peut remarquer que cette relation est consistante avec l'expression de l'opacité matière σ_m (1.6) définie comme proportionnelle à la conductivité thermique λ . En cas de discontinuité, la valeur à l'interface λ_e est obtenue par moyenne harmonique des conductivités des milieux voisins (d'après la loi de Fourier) :

$$\lambda_e = \frac{2}{\frac{1}{\lambda_K} + \frac{1}{\lambda_L}} \quad (3.54)$$

Cette propriété suggère bien l'emploi d'une moyenne arithmétique pour l'opacité matière à l'interface. Ces relations seront confirmées par les cas d'applications présentés dans les paragraphes 4.1.4 à 4.1.5.

3.2.9 Conditions aux limites

Besoins en conditions limites

Nous avons établi dans la partie 1.1.2 que la principale utilisation souhaitée pour le code de calcul ici créé consiste à produire des calculs d'homogénéisation sur des géométries obtenues à partir de matériaux réels. En particulier, on cherche à obtenir la valeur homogène de la conductivité thermique λ . Dans cette optique, on peut recréer numériquement l'approche expérimentale utilisée pour ces applications. La méthode flash [75] permet notamment d'obtenir une mesure de la diffusivité thermique $\kappa = \frac{\lambda}{\rho c_p}$, en éclairant momentanément une face du matériau d'intérêt, puis en mesurant l'évolution de la température sur la face opposée. Ainsi, on peut recréer numériquement ce cas, pour obtenir des résultats lorsque cette méthode expérimentale est difficile à mettre en place, trop coûteuse, ou tout simplement pour valider notre approche. Pour reproduire cette expérience, il nous faut introduire des conditions aux limites adaptées. Ici, il nous faut imposer une impulsion de Dirac en flux sur une des faces, et une condition de sortie. Des conditions de Marshak et de Neumann homogène sont donc nécessaires pour recréer ce genre de cas.

On peut toutefois simplifier cette approche car l'outil numérique nous permet de mettre en place des méthodes irréalisables expérimentalement. Ainsi, pour obtenir une mesure de la conductivité thermique sur un matériau hétérogène, on peut réaliser, en régime stationnaire, le cas suivant :

$$\begin{cases} \text{CI} : \nabla_x E^0 = \text{cte} , F^0 = 0 \\ \text{CL} : E_r = \text{cte} , E_l = \text{cte} , E_l > E_r \\ \nabla_x F = 0 \underset{\text{Fourier}}{\Rightarrow} \lambda = L_x \rho C_v \frac{|F^\infty|}{E_l - E_r} \end{cases} \quad (3.55)$$

Ainsi, on peut récupérer la valeur de la conduction thermique homogénéisée λ une fois que l'état stationnaire est atteint et que le flux est constant sur l'ensemble du domaine. Cette approche nécessite donc d'apporter une condition limite de Dirichlet constante au code.

Pour couvrir d'autres possibilités d'utilisation de notre méthode, ou simplement pour des cas de validation purement numériques, nous considérons de plus des conditions périodiques et de Dirichlet non-constantes.

Conditions aux limites de Marshak

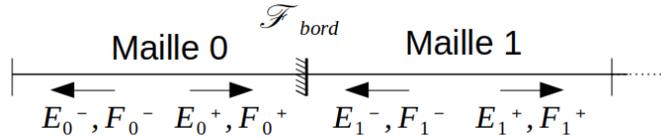


FIGURE 3.5 – Obtention du flux au bord du domaine avec une condition de Marshak 1D

Pour les applications considérées dans cette étude, les domaines et donc les maillages, générés à partir d'imageries numériques de matériaux réels, sont des polyèdres à bords normaux, essentiellement des cubes ou des parallélépipèdes. De plus, les applications concernées par des conditions aux limites de Marshak sont des jets de rayons normaux à la surface du domaine (laser ou source de chaleur assez lointaine). On pourrait donc à priori considérer que le problème aux bords du domaine est unidimensionnel. Cependant, il n'y a à priori aucune raison que le flux sortant du domaine soit normal à la surface. L'apport du flux tangentiel étant pourtant négligeable devant sa composante normale, nous conservons l'hypothèse du problème 1D. Les valeurs F^\pm et P^\pm sont alors retrouvées à partir de la valeur de l'intensité 1D I . Avec les modèles P_1 et M_1 , on a respectivement :

$$\begin{cases} I_{P_1} = \frac{1}{4\pi} (cE + 3\vec{F} \cdot \Omega) \quad , \quad \Omega = \begin{pmatrix} \mu \\ \mu \cos \phi \\ \mu \sin \phi \end{pmatrix} \end{cases} \quad (3.56)$$

$$\begin{cases} I_{M_1} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \left(\exp\left(\frac{h\nu}{kT}(1 - \beta\mu)\right) - 1 \right)^{-1} \end{cases} \quad (3.57)$$

avec $\beta = \frac{2-\sqrt{4-3*f^2}}{f}$, $f = \frac{\|F\|}{cE}$

On peut alors définir l'énergie E , le flux \vec{F} et la pression \bar{P} :

$$E = \frac{1}{c} \int_{S_2} I d\nu d\Omega \quad (3.58)$$

$$\vec{F} = \int_{S_2} I \Omega d\nu d\Omega \quad (3.59)$$

$$\bar{P} = \frac{1}{c} \int_{S_2} I \Omega \otimes \Omega d\nu d\Omega \quad (3.60)$$

On rappelle que l'on souhaite résoudre le système suivant :

$$\begin{cases} \partial_t E + \text{div} \cdot \vec{F} = 0 \\ \partial_t \vec{F} + \frac{c^2}{3} \text{div} \bar{P} = -c\sigma \vec{F} \end{cases} \quad (3.61)$$

Le flux à l'interface \mathcal{F}_{bord} que l'on recherche pour la condition limite, s'écrit donc, d'après la figure 3.5, sous la forme :

$$\mathcal{F}_{bord} = F \begin{pmatrix} E_0 + E_1 \\ \vec{F}_0 + \vec{F}_1 \end{pmatrix} \cdot \vec{n} = \begin{pmatrix} F_n \\ P_{nn} \\ P_{n\tau} \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

avec n et τ représentant les directions normale et tangentielle. On peut donc retrouver par le calcul les valeurs qui nous intéressent.

$$\vec{F}_i^+ = \frac{1}{4\pi c} \int_0^{2\pi} \int_0^1 cE \begin{pmatrix} \mu \\ \mu \cos \phi \\ \mu \sin \phi \end{pmatrix} + 3F_{i,x}\mu \begin{pmatrix} \mu \\ \mu \cos \phi \\ \mu \sin \phi \end{pmatrix} + 3F_{i,y}\mu \cos \phi \begin{pmatrix} \mu \\ \mu \cos \phi \\ \mu \sin \phi \end{pmatrix} + 3F_{i,z}\mu \sin \phi \begin{pmatrix} \mu \\ \mu \cos \phi \\ \mu \sin \phi \end{pmatrix} d\mu d\phi \quad (3.63)$$

$$F_{i,x}^+ = \frac{1}{4\pi c} \int_0^{2\pi} \int_0^1 cE\mu + 3F_x\mu^2 + 3F_x\mu^2 \cos \phi + 3F_z\mu^2 \sin \phi d\mu d\phi \quad (3.64)$$

$$F_{i,x}^\pm = \pm \frac{cE_i}{4} + \frac{F_{i,x}}{2} \quad (3.65)$$

$$P_{i,xx} = \frac{1}{c} \int_{S_2} I \Omega_x \Omega_x d\nu d\Omega \quad (3.66)$$

$$= \frac{1}{c} \int_{S_2} I \mu^2 d\nu d\Omega \quad (3.67)$$

$$P_{i,xy} = \frac{1}{c} \int_{S_2} I \Omega_x \Omega_y d\nu d\Omega \quad (3.68)$$

$$= \frac{1}{c} \int_{S_2} I \mu^2 \cos\phi d\nu d\Omega \quad (3.69)$$

Au final, on notera

$$\begin{cases} F_{i,n}^{\pm} = \pm \frac{cE_i}{4} + \frac{\vec{F}_i \cdot \vec{n}}{2} \\ P_{i,nn}^{\pm} = \frac{E_i}{6} \pm \frac{3\vec{F}_i \cdot \vec{n}}{8c} \\ P_{i,n\tau}^{\pm} = \pm \frac{3\vec{F}_i \cdot \vec{\tau}}{16c} \end{cases} \quad (3.70)$$

En M_1 , on retrouvera les valeurs suivantes :

$$\begin{cases} F_i^{\pm} = \pm \frac{4\pi^5 k^4}{c^2 h^3 15} T_i^4 \frac{\beta \mp 3}{6(\beta \mp 1)^3} \\ P_i^{\pm} = \frac{4\pi^5 k^4}{c^3 h^3 15} T_i^4 \frac{1}{3(\beta \mp 1)^3} \end{cases} \quad (3.71)$$

$$\quad (3.72)$$

3.3 Solveur implicite

3.3.1 Généralités

Le schéma présenté dans la partie 3.2 trahit la nécessité d'un solveur numérique adapté à nos besoins. Nous cherchons à résoudre un système implicite et non-linéaire, pour des problèmes de grande taille et creux. Lorsque l'on cherche à résoudre des systèmes présentant un schéma implicite, il est d'usage d'éviter d'utiliser une méthode directe qui nécessiterait potentiellement de résoudre de grands systèmes creux. Pour construire des codes de calculs compétitifs, des méthodes itératives préconditionnées sont souvent préférées pour ce genre d'applications. Elles permettent d'obtenir de meilleures performances et sont plus simples à mettre en place dans une optique de calcul haute performance que les méthodes directes [76, 77].

Plusieurs choix de solveurs itératifs conviennent à notre problème, et des versions déjà optimisées sont disponibles dans des bibliothèques telles que Trilinos [78, 79] ou PETSc [80], dont il a été question de l'emploi pour cette étude. Cependant, il est nécessaire pour ces méthodes de stocker la matrice du problème, ce qui potentiellement fastidieux dans notre cas.

3.3.2 Choix

On considère pour notre solveur l'utilisation d'une méthode itérative de type Newton-Krylov. Celle-ci nous permet de ne stocker à aucun moment la matrice du problème. En contrepartie, nous devons pouvoir calculer un produit matrice/vecteur entre la Jacobienne du problème et un vecteur

présenté dans (3.74). Le calcul de cette Jacobienne étant potentiellement coûteux pour notre modèle, nous nous préviendrons de son expression en utilisant un algorithme Jacobian-Free (JFNK) [81]. Le principe est le suivant :

Le système (2.25) peut être réécrit en plaçant tous les termes sur le côté gauche, ce qui revient à chercher la solution annulant une nouvelle fonction $\mathcal{G} : \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}^{n+1}$ (dans le cas découplé) :

$$(2.25) \iff \mathcal{G}(\mathcal{U}) = 0 \tag{3.73}$$

On peut alors utiliser une méthode itérative de Newton pour approcher la solution U qui vérifie (3.73) :

$$\underbrace{\mathcal{G}'(\mathcal{U}^k)}_A \underbrace{(\mathcal{U}^{k+1} - \mathcal{U}^k)}_d = \underbrace{-\mathcal{G}(\mathcal{U}^k)}_b \tag{3.74}$$

k étant l'indice d'itération de la méthode de Newton. On doit alors résoudre le système $Ad = b$ à chaque itération, à l'aide d'une méthode de Krylov optimisée telle que GMRes [76, 77] (*c.f.* algorithme 1). Dans toutes ces méthodes, la matrice du système n'intervient que par le biais de produits matrice/vecteur. On peut tirer profit de cette caractéristique en introduisant l'approximation (3.75) pour éviter le calcul de la matrice Jacobienne :

$$\mathcal{G}'(\mathcal{U})v \sim \frac{\mathcal{G}(\mathcal{U} + \varepsilon_J v) - \mathcal{G}(\mathcal{U})}{\varepsilon_J}, \tag{3.75}$$

avec ε_J un paramètre assez petit pour assurer une bonne approximation mais assez grand pour éviter l'intervention d'erreurs d'arrondis importantes.

Algorithm 1 GMRes

```
1: Initialisation : CI :  $d_0$ 
2:  $r_0 = b - Ad_0$ ,  $\beta = \|r_0\|_2$ ,  $v_1 = r_0/\beta$ 
3: while  $i \leq j$  do
4:    $w := Av_j$ 
5:   while  $i \leq j$  do
6:      $h_{i,j} := (w, v_i)$ 
7:      $w := w - h_{i,j}v_i$ 
8:   end while
9:    $h_{j+1,j} = \|w\|_2$ 
10:   $v_{j+1} = w/h_{j+1,j}$ 
11: end while
12:  $V_m := [v_1, \dots, v_m]$ 
13:  $y_m := \operatorname{argmin}_y \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|_2$ , avec  $e_1 = [1, 0, \dots, 0]^T$ 
14:  $d_m = d_0 + V_m y_m$ 
15:  $r_m = b - Ad_m$ 
16: if  $|r_m| < \varepsilon$  then                                ▷ avec  $\varepsilon$  le seuil d'erreur acceptable, défini par l'utilisateur
17:   Stop Solution :  $d_m$ 
18: else
19:    $d_0 = d_m$ 
20:   Goto 2
21: end if
```

3.4 Optimisation

3.4.1 Préconditionnement

Dans les applications considérées, et notamment pour des résolutions sur des domaines fortement hétérogènes, la matrice du problème est forcément mal conditionnée. Le solveur peut alors parfois nécessiter un grand nombre d'itérations avant de converger, et c'est d'ailleurs sur ce point précis que se joue l'efficacité en temps de calcul de ce genre de méthode. Pour améliorer la convergence et donc la performance du code, on cherche à améliorer le conditionnement de la matrice du problème à l'aide d'un préconditionneur.

De la nécessité du préconditionnement

L'emploi d'un préconditionneur nécessite la résolution d'un système parfois non-linéaire, et présente donc potentiellement un coût important. Pour attester de la nécessité d'un préconditionnement, nous avons étudié l'évolution du conditionnement de la matrice du problème pour plusieurs jeux de paramètres. Ceux qui apparaissent dans la Jacobienne et donc sont susceptibles de modifier le conditionnement du problème sont le pas de temps Δt , le pas d'espace Δx et les valeurs d'opacité σ . Le conditionnement κ_A de la matrice a été étudié sur le cas unidimensionnel

suivant :

— **CI :**

$$\begin{cases} T^0(x) = T_0 + (T_1 - T_0) \frac{x}{L_x} - \frac{T_0}{50} \exp\left(-\frac{(x-L_x/2)^2}{0.003}\right) \\ E^0(x) = 100 T^0(x) \\ F^0(x) = 0 \end{cases} \quad (3.76)$$

— **CL :**

— En x : Dirichlet, $E(0) = E_l$; $E(L_x) = E_r$

— En y, z : Périodique

— **Paramètres :**

Paramètre	Valeur	Unité	Paramètre	Valeur	Unité
L_x	0.5	m	$L_y = L_z$	0.1	m
T_0	1000	K	T_1	990	K
E_{left}	10^5	J.m^{-3}	E_{right}	9.9×10^4	J.m^{-3}
$F_{\text{left}} = F_{\text{right}}$	0	m	N_{cells}	$5.1 \times 10^2 \rightarrow 1.6 \times 10^3$	mailles
c	1	m.s^{-1}	σ_m	$1 \rightarrow 10^7$	m^{-1}
CFL	$10^{-1} \rightarrow 10^3$	—			

TABLE 3.4 – Paramètres utilisés pour le test de conditionnement

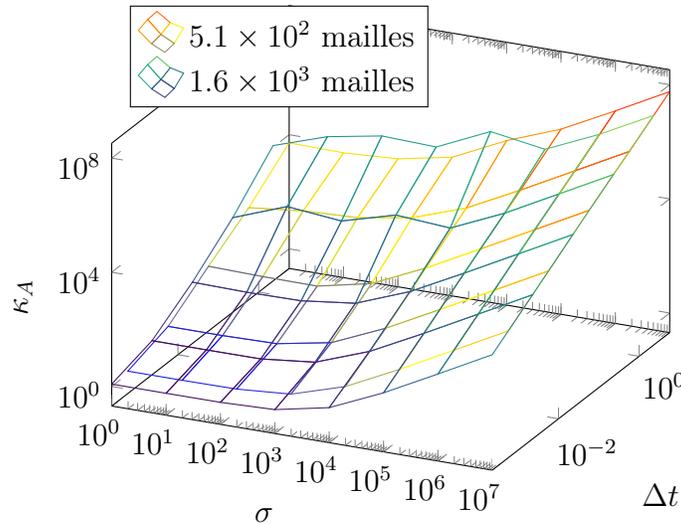


FIGURE 3.6 – Variation du conditionnement κ_A de la matrice du problème, pour un système mono-M1

Ce test a été soumis à deux limitations :

— En nombre de mailles : La plage de nombre de mailles utilisée est très réduite pour ce test. Cette modélisation étant tri-dimensionnelle, elle nécessite une taille de maillage minimale pour obtenir des résultats cohérents et donc exploitables. A contrario, l'obtention du conditionnement nécessite le calcul des valeurs singulières de la matrice du problème, qui devient

rapidement excessivement coûteux en 3 dimensions. Pour cette raison, le taille du maillage a dû être limitée.

- En valeur de condition CFL : Ce cas ne permet pas d'atteindre des pas de temps trop importants car le schéma n'est pas assez stable pour que le solveur converge avec un pas de temps initial trop grand, au vu des conditions choisies (ce problème est traité plus tard avec une CFL adaptative, décrite dans la partie 3.4.2).

Le cas présenté n'est donc pas très adapté au calcul du conditionnement de la matrice du problème, mais il suffit tout de même à donner une idée de sa valeur, et mettre en lumière son évolution, présentée sur la figure 3.6.

Cette étude a été menée sur un système mono-M1, utilisant les paramètres σ_m et c_m du tableau 3.4, sur quelques itérations. Si la dépendance du conditionnement de la matrice au pas d'espace n'a pu être établie, on peut mettre en cause la restriction en nombre de mailles qui ne nous a pas permis de mener cette étude à son terme. Cependant, la forte dépendance en σ et Δt ne fait aucun doute, avec un conditionnement allant de $\kappa_A = 1.2$ pour le couple $(\sigma, \Delta t) = (1, \Delta t_{expl})$, et $\kappa_A = 5.7 \times 10^7$ pour $(\sigma, \Delta t) = (10^7, 10^3 \Delta t_{expl})$.

Les résultats présentés sur la figure 3.6 témoignent bien de l'augmentation exponentielle du conditionnement du système avec l'évolution des variables σ et Δt . Un mauvais conditionnement étant synonyme de difficulté de convergence pour le solveur, il devient évident qu'un préconditionnement de la matrice est nécessaire au bon fonctionnement du code.

Flexible GMRes

Pour améliorer le conditionnement du problème, une solution à la fois élégante et commode consiste à utiliser un algorithme de Flexible-GMRes [82, 76] (*c.f.* algorithme 2). Le principe est d'utiliser une seconde méthode de relaxation (et donc potentiellement un second algorithme GMRes) pour approcher la solution du problème $Ad = b$ sur quelques itérations, résultant ainsi en un préconditionneur implicite à droite. De cette façon, un préconditionneur conventionnel n'a pas besoin d'être implémenté, ce qui est efficace tant en terme de calcul que de programmation. Le seul inconvénient de cette méthode est qu'elle nécessite davantage d'espace mémoire pour fonctionner, car elle requiert de garder en mémoire un certain nombre de vecteurs supplémentaires (les z_j dans l'algorithme 2). Si l'on peut se permettre ce surplus d'espace mémoire, il est montré dans [82] que cette méthode peut être plus efficace qu'un préconditionneur direct selon les cas. D'autre part, cette solution a prouvé son efficacité dans notre cas, comme le montre les résultats 3.6.

Algorithm 2 Flexible GMRes

```
1: Initialisation : CI :  $d_0$ 
2:  $r_0 = b - Ad_0$ ,  $\beta = \|r_0\|_2$ ,  $v_1 = r_0/\beta$ 
3: while  $i \leq j$  do
4:   Résoudre  $z_j = A^{-1}v_j$  ▷ Avec l'algorithme de préconditionnement (ici GMRes)
5:    $w := Az_j$ 
6:   while  $i \leq j$  do
7:      $h_{i,j} := (w, v_i)$ 
8:      $w := w - h_{i,j}v_i$ 
9:   end while
10:   $h_{j+1,j} = \|w\|_2$ 
11:   $v_{j+1} = w/h_{j+1,j}$ 
12: end while
13:  $Z_m := [z_1, \dots, z_m]$ 
14:  $H_m := (h)_{i,j}$ 
15:  $y_m := \operatorname{argmin}_y \|\beta e_1 - H_m y\|_2$ , avec  $e_1 = [1, 0, \dots, 0]^T$ 
16:  $d_m = x_0 + Z_m y_m$ 
17:  $r_m = b - Ad_m$ 
18: if  $|r_m| < \varepsilon$  then ▷ avec  $\varepsilon$  le seuil d'erreur acceptable, défini par l'utilisateur
19:   Stop Solution :  $d_m$ 
20: else
21:    $d_0 = d_m$ 
22:   Goto 2
23: end if
```

Variable	Valeur	Unité
c	1	m.s^{-1}
σ	1	m^{-1}
t_{\max}	1	s
$L_x = L_y$	1	m
CFL	1	-

TABLE 3.5 – Paramètres utilisés pour le test des préconditionneurs

Ordre en espace du schéma	Non-préconditionné	Préconditionnement linéaire	Flexible-GMRes
1	22477	7542	2306
2	29150	11677	4228

TABLE 3.6 – Nombre d’itérations du solveur de Krylov nécessaires pour mener à bien le calcul, pour différentes méthodes de préconditionnement, en utilisant un schéma d’ordre 1 ou 2 implicite et un pas de temps maximum de $\Delta t_{\max} = 50\Delta t_{\text{exp}}$.

Les résultats présentés dans le tableau 3.6 indiquent la vitesse de convergence de chaque méthode par le biais du nombre de boucles de Krylov nécessaires au calcul. Ceux-ci soulignent que l’emploi du préconditionneur Flexible-GMRes a permis de réduire significativement le nombre de boucles de Krylov nécessaires au calcul, et donc d’améliorer l’efficacité du solveur. On notera de plus que si le préconditionneur linéaire permet d’améliorer la convergence, cette méthode est bien inférieure à la deuxième en terme d’accélération. On peut conjecturer que les résultats approchés par le modèle P_1 ne sont pas suffisamment proches de la solution du M_1 pour obtenir des résultats satisfaisants lorsque l’on est trop loin du régime de diffusion. Dans la suite, on pourrait imaginer de se rapprocher du M_1 pour assurer des bons résultats quel que soit le régime. Pour cela, il est envisagé de linéariser le M_1 à chaque pas de temps en fixant la valeur de χ dans la Jacobienne $\mathcal{G}'(U^n)$.

On notera toutefois que les améliorations décrites ici sont suffisantes pour réaliser des calculs sur des domaines 2D non-structurés composés de plus de 10^6 mailles avec des moyens de calcul modestes. D’autres résultats sur des domaines plus importants seront présentés dans le chapitre suivant.

Adimensionnement

En plus du mauvais conditionnement potentiel du système, la convergence du solveur est de plus rendue plus difficile (voir impossible) par l’approche multi-modale du transfert de chaleur. On cherche en effet à traiter dans la même matrice des valeurs d’un ordre de grandeur très différent, ce qui nuit indéniablement à la convergence et introduit le risque d’éclipser un des phénomènes devant l’autre. Pour mettre les valeurs des deux modes au même ordre de grandeur afin de pouvoir traiter sereinement le problème, on doit avant toute chose adimensionner le problème. Plutôt que de résoudre le problème $Ad = b$ (3.74), on introduit une matrice diagonale $D \in M_{nN,nN}(\mathbb{R})$ sans

termes diagonaux nuls (et donc inversible) dans l'équation [76], n étant la dimension du problème et N le nombre de mailles. On note d_g la diagonale de D , qui en 2D est choisie comme étant :

$$d_g = \begin{pmatrix} \vdots \\ E_i \\ cE_i \\ cE_i \\ \vdots \end{pmatrix}, i \in [1, N] \quad (3.79)$$

De cette façon on va plutôt chercher à résoudre $AD^{-1}Dd = b$, soit les deux problèmes $AD^{-1}y = b$ et $Dd = y$, ce qui est peu coûteux vu que D est diagonal. Cette opération permet de gérer efficacement les problèmes engendrés par les différences d'ordres de grandeur entre les modes de transfert de chaleur.

Remarque : Avec la présence d'un des préconditionneurs décrits dans les parties précédentes, la forme du système est modifiée. Une attention particulière est requise pour que ces opérations n'interagissent pas négativement entre elles. Ainsi dans l'algorithme 2, la matrice AD^{-1} est utilisée à la place de A , pour obtenir la solution d_m . La solution d est ensuite obtenue par la résolution de $Dd = d_m$.

3.4.2 Gestion du pas de temps

Comme signalé dans 3.2.1, les besoins de nos calculs impliquent l'emploi d'un schéma implicite avec des pas de temps importants, ce qui peut rendre le problème potentiellement instable. Pour faire face à ce phénomène, un algorithme de contrôle de la CFL est ajouté au solveur. En partant de $\Delta t = \text{CFL} \Delta t_{\text{expl}}$, avec $\text{CFL} = 1$, le principe est de doubler la valeur de la condition CFL si la convergence est atteinte sans plus de difficultés tous les quelques pas de temps, ou au contraire de la réduire si le solveur peine à converger. Cette astuce garantit une progression régulière avec des pas de temps très petits au début du calcul, avant d'augmenter progressivement. Les calculs engendrés par cette étude ont attesté de la stabilité apportée par cette méthode, bien que l'on a pu remarquer que le pas de temps finissait toujours par stagner autour d'une valeur, dépendant bien entendu du cas (dans le chapitre 4, les valeurs de CFL finales obtenues pour chaque cas sont explicitées).

3.4.3 Parallélisme - Accélération

Pour minimiser le temps de calcul sur des maillages fins, une stratégie de parallélisation a été mise en place. Le code étant construit manuellement, sans utiliser de bibliothèque de calcul optimisée, la parallélisation a aussi dû se faire manuellement. De plus, bien que ce projet prévoyait

initialement de diviser le calcul pour traiter différentes parties du domaine sur plusieurs nœuds de calcul à la fois, le temps imparti à cette étude n'a pas permis de se focaliser sur l'optimisation du code. Ainsi, seule une parallélisation OpenMP a été mise en place, dans le but de répartir les points stratégiques du calcul (le produit matrice/vecteur et l'orthogonalisation de Gram-Schmidt) sur plusieurs processeurs d'un même nœud. Au vu des applications considérées, un tel choix ne devrait pas être une limitation pour le moment, les maillages envisagés étant de l'ordre du million de mailles. L'accélération résultante est calculée pour le cas suivant :

On considère un calcul conducto-radiatif uni-dimensionnel (mais sur un maillage 3D) sur un milieu homogène, dont les paramètres de vitesse et d'opacité sont les mêmes pour les deux modes de transports. Une perturbation est installée dans la solution stationnaire, et l'on regarde à quelle vitesse sont traités les calculs pour 600 pas de temps (avec une CFL adaptative), en fonction du nombre de processeurs utilisés. Les résultats sont présentés dans la figure 3.7.

— **CI :**

$$\begin{cases} T^0(x) = T_0 + (T_1 - T_0) \frac{x}{L_x} - \frac{T_0}{50} \exp\left(-\frac{(x-L_x/2)^2}{0.003}\right) \\ E_m^0(x) = \rho C_v T^0(x) \\ E_r^0(x) = a_R T^0(x) \\ F^0(x) = 0 \end{cases} \quad (3.80)$$

— **CL :**

— En x : Dirichlet, $E(0) = E_l$; $E(L_x) = E_r$

— En y, z : Périodique

— **Maillage :** Version plus raffinée de 3.13

— **Paramètres :**

Paramètre	Valeur	Unité	Paramètre	Valeur	Unité
L_x	0.5	m	$L_y = L_z$	0.1	m
T_0	1000	K	T_1	990	K
E_l	6.79×10^{10}	m	E_r	6.72×10^{10}	m
$F_l = F_r$	0	m	t_{\max}	0.87	s
c	1.85×10^4	m.s^{-1}	c_m	1.85×10^4	m.s^{-1}
ρ	2000	kg.m^{-3}	C_v	710	J.kg.K^{-2}
σ_e	6.85×10^7	m^{-1}	σ_s	0	m^{-1}
σ_m	6.85×10^7	m^{-1}			

TABLE 3.7 – Paramètres utilisés pour le test d'accélération

Si l'on peut voir sur la figure 3.7 que la parallélisation nous a permis de diviser grandement le temps de calcul, la méthode n'est pas optimalement optimisée, et on obtient le temps de calcul

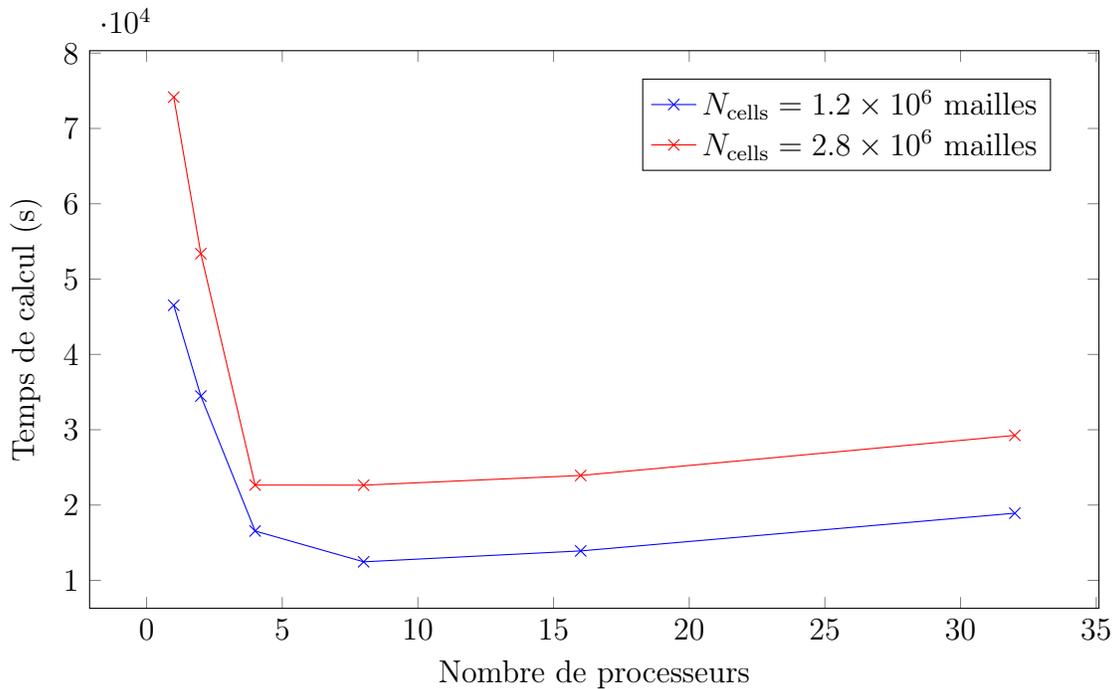


FIGURE 3.7 – Accélération obtenue pour une parallélisation avec OpenMP sur le cas présenté ci-dessus.

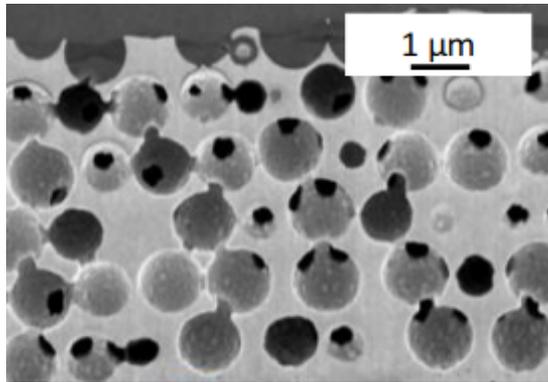
minimal pour $N_{proc} = 8$. Cela témoigne d’une grande partie séquentielle présente dans notre calcul et d’un trop grand nombre de communications entre les processus, et il sera primordial d’améliorer l’optimisation dans le futur. Par manque de temps, ce travail n’a pas été plus poussé au cours de cette thèse.

3.5 Maillages

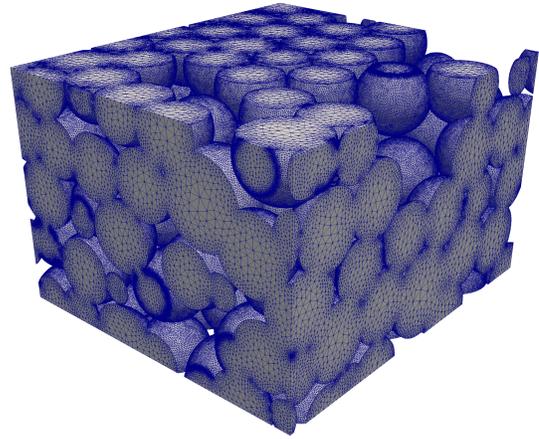
3.5.1 Objectifs : des maillages basés images

On rappelle que l’objectif de cette étude est de pouvoir analyser des matériaux réels grâce à des maillages reconstitués à partir des différentes méthodes d’acquisitions disponibles au LCTS. Les images microscopiques sont dans un premier temps acquises par exemple par tomographie et numérisées (ex : 3.8a), pour ensuite être traitées. Cette étape permet de différencier les phases présentes dans le matériaux, avant de créer un maillage non-structuré adapté autour des discontinuités de phases du milieu. À titre d’exemple, cette procédure a été utilisée par le passé dans [83] et a permis d’obtenir un maillage de l’intérieur des pores d’une électrode poreuse 3.8b, à partir d’images du matériau 3.8a.

Les méthodes d’imagerie numérique permettent d’obtenir des images cubiques de 512 voxels de côté, ce qui permet à priori de générer un maillage naïf d’environ 10^8 mailles, en faisant correspondre une maille à chaque voxel. Pour gagner quelques ordres de grandeurs en nombres de



(a) Image obtenue par analyse FIB-SEM, Baux et al. [83] : Pores d'une électrode poreuse en or obtenue à partir d'un milieu opalescent



(b) Maillage créé sur un volume élémentaire du matériaux poreux, à partir de l'image numérique 3.8a

FIGURE 3.8 – Création d'un maillage à partir d'une image 3D en niveaux de gris

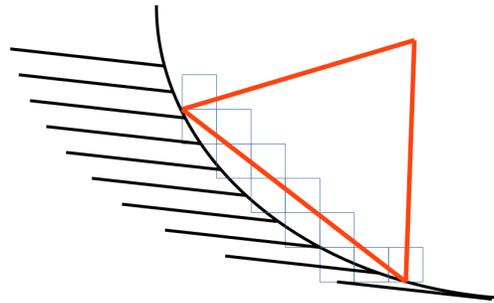


FIGURE 3.9 – Schéma illustrant le gain en nombre de mailles obtenu par un maillage non-structuré adapté pour discrétiser une surface

mailles, un maillage non-structuré et adapté aux discontinuités de phases est généré sans pour autant dégrader l'acquisition de la surface par rapport au maillage voxelisé, tel qu'on peut le voir sur la figure 3.9.

3.5.2 Maillages utilisés

Nous présentons ici les différents maillages utilisés pendant notre étude, et dont des références seront faites dans la partie 4. On notera que notre méthode ne nécessite pas l'emploi d'un maillage admissible, ce qui nous apporte une grande latitude dans la génération de nos maillages.

Ceux qui sont présentés ici n'ont été construits que dans un cadre purement académique, afin de tester et valider notre code de calcul. Ils ont été principalement générés à l'aide de l'outil `gmsh` [84] sur des domaines simples.

En deux dimensions

Pour travailler sur des cas bidimensionnels, nous avons principalement utilisé des maillages carrés de différentes tailles. Celui présenté en partie sur la figure 3.10 présente 50 mailles triangulaires de côté, pour une discrétisation totale de 6.6×10^3 mailles. Pour pouvoir utiliser simplement des conditions aux limites périodiques, utiles pour certains cas tests, les cellules en bord de domaine sont périodiques, c'est à dire qu'elles sont les réflexions de celles présentes sur le bord opposé. Des versions successives de plus en plus raffinées de ce maillage ont été créées, allant jusqu'à 1.0×10^5 mailles, pour mener des expériences de calcul d'ordre du schéma numérique.

Nous avons aussi travaillé avec des maillages rectangulaires pour fournir des cas de validation uni-dimensionnels sur un maillage 2D, dont la solution analytique est plus simple à obtenir, ou pour comparer les résultats à un code 1D validé. Des cas présentant des discontinuités de propriétés thermiques ont aussi été observés, et pour ceux-ci, nous avons maillé des domaines hétérogènes (figure 3.11), présentant un milieu ambiant (en rouge) et un second matériau (en bleu) arrangé selon des plaques planes parallèles.

En trois dimensions

Nous avons étendu notre code de calcul au cas tridimensionnel, et il a donc fallu générer des maillages permettant des validations sur ce genre de domaines. Dans un premier temps, nous avons cherché à retrouver les résultats obtenus en 2D, et nous avons donc généré une extension des domaines précédents en trois dimensions, avec les maillages 3.12 et 3.13. Nous avons ensuite travaillé sur un domaine purement 3D pour réaliser des calculs "orienté image" tel qu'il était prévu pour cette étude. Par manque de temps, nous avons uniquement travaillé sur un matériau généré numériquement (figure 3.14a), mais le maillage correspondant 3.14b a été généré de la même façon qu'il l'aurait été pour une image réelle.

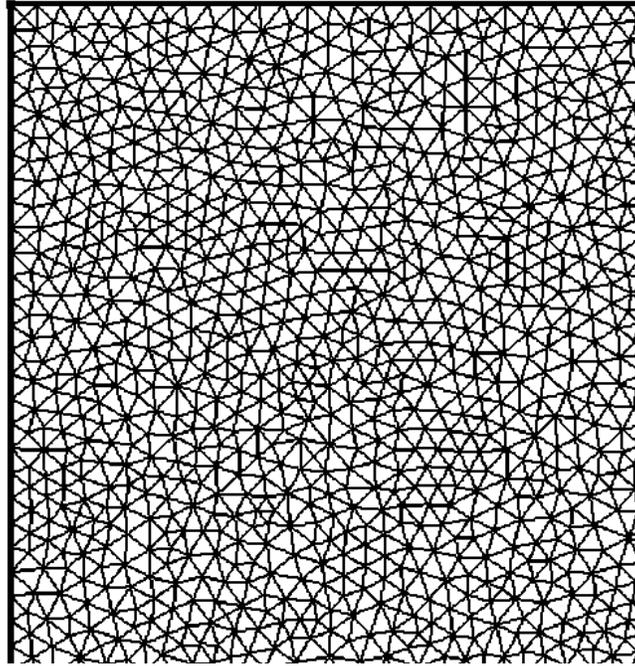


FIGURE 3.10 – Maillage carré non-structuré et périodique de 6.6×10^3 mailles au total. On représente ici un quart du maillage le plus grossier utilisé dans le cas 4.1.1.

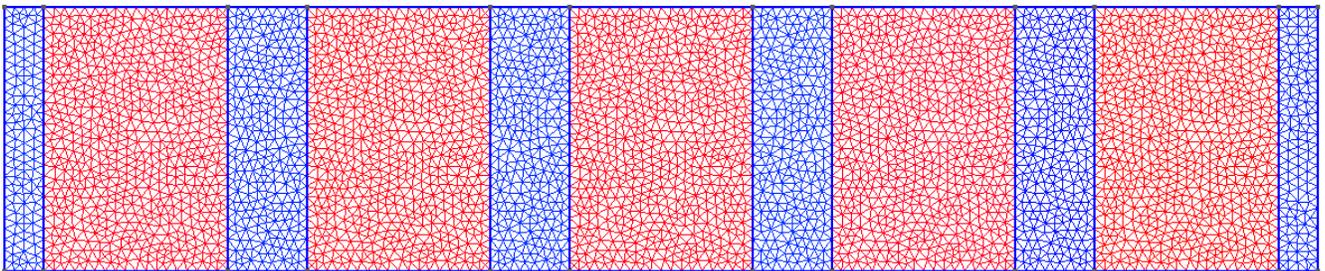


FIGURE 3.11 – Maillage rectangulaire non-structuré et périodique établi sur un domaine hétérogène composé d'un milieu ambiant et de plaques planes parallèles, d'un total de 8.4×10^3 mailles.

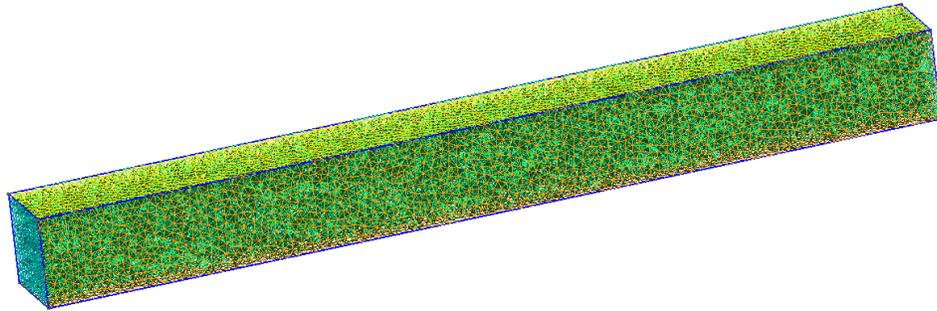


FIGURE 3.12 – Maillage 3D utilisé pour les cas unidimensionnels homogènes (4.3×10^4 mailles).

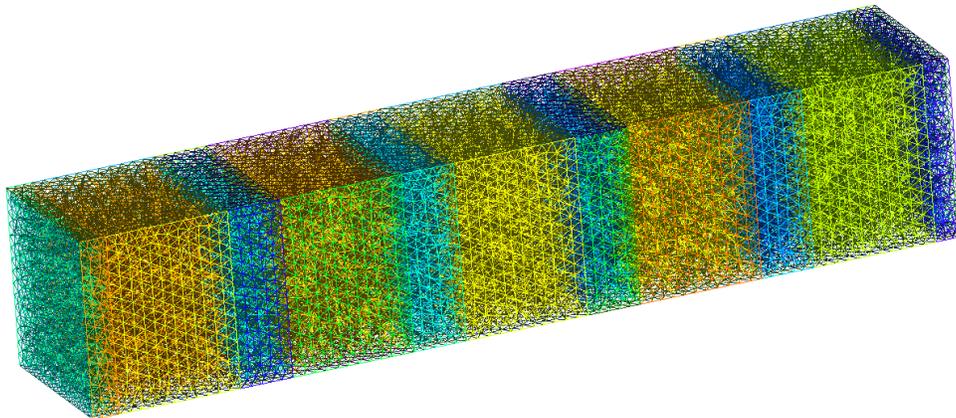
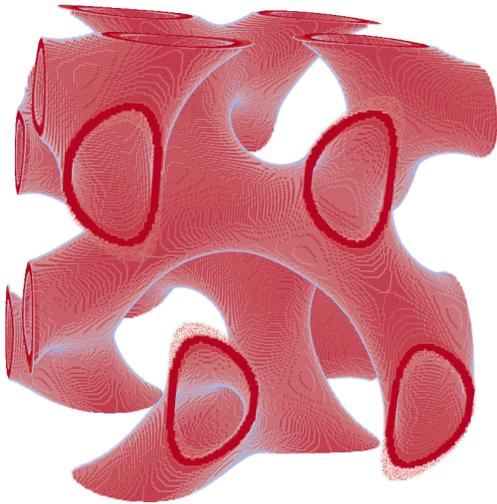
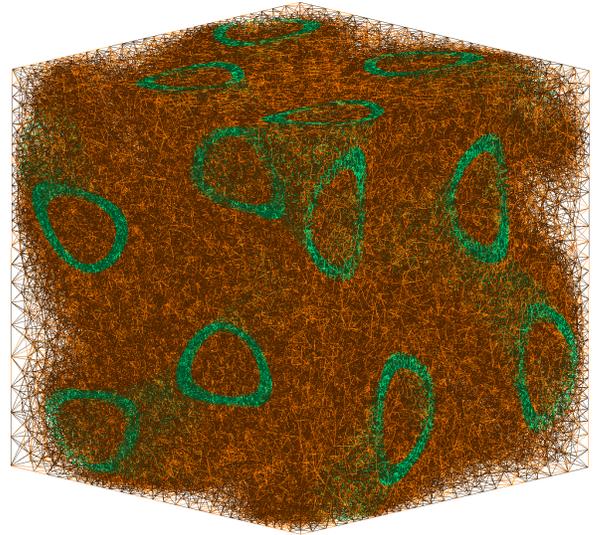


FIGURE 3.13 – Maillage 3D (équivalent au 3.11) utilisé pour les cas unidimensionnels hétérogènes (1.6×10^5 mailles).



(a) Matériau poreux gyroïdal généré numériquement.



(b) Maillage 3D non structuré (1.5×10^6 mailles) généré à partir de l'image 3.14a à l'aide de l'outil de maillage MMG [85].

FIGURE 3.14 – Maillage généré à partir d'une image numérique.

3.5.3 Limitations sur les maillages

Bien que le schéma supporte l'emploi de maillages non-admissibles, il n'est pas pour autant stable au point de fournir des résultats cohérents sur n'importe quel maillage. Nous avons fait face à un certain nombre de dysfonctionnements au cours de notre étude, qui nous ont permis d'établir des limitations à respecter quant au choix d'un maillage. On notera que doivent être exclus :

- Les maillages dont une ou plusieurs mailles partagent plus d'une face avec le bord du domaine. Cette limitation est classique pour l'utilisation de schémas volumes finis. On impose donc pour un domaine Ω de dimension n maillé sur N mailles T_K :

$$\forall K \in [1, N] \quad \sum_{j=1}^{1+n} \delta_{\{e_{K,j} \cap \partial\Omega\} = e_{K,j}} \leq 1 \quad \text{avec } e_{K,j} \text{ le } j\text{-ième côté de } T_K \quad (3.81)$$

- Les maillages dont les irrégularités entre les éléments sont trop importantes (angles trop aigus, volumes quasi-nuls...) [86].
- Les maillages favorisant clairement une ou plusieurs directions devant les autres, ce qui nuirait à la qualité des calculs.

Chapitre 4

Résultats numériques

Les outils numériques présentés dans la partie précédente ont été utilisés pour mettre au point plusieurs codes de calcul ayant pour objectif de modéliser le transfert de chaleur conducto-radiatif. Les deux codes principaux sur lesquels cette thèse s'appuie sont des codes utilisant la Méthode des Volumes Finis fonctionnant sur des maillages de simplexes non-structurés, pour résoudre principalement des modèles P_1 , M_1 et multi- M_1 . Le premier est une version utilisant la méthode développée dans les chapitres précédents en 2 dimensions d'espace. Il a été construit pendant les 2 premières années de cette thèse dans le but de comprendre les mécanismes en jeu et de développer les outils numériques nécessaires au code final. Une fois que cette base saine a été développée et amplement validée, un code tridimensionnel a été construit par extension du premier. La majeure partie des cas tests ont ensuite été à nouveau réalisés sur cette version, afin d'assurer sa validité, celui-ci étant considéré comme le "livrable" de cette étude. On notera toutefois que faute de temps, certaines améliorations optionnelles n'ont pas pu être intégrées à la version 3D. C'est notamment le cas du schéma d'ordre 2 en espace et en temps, ainsi que le préconditionnement par méthode Flexible-GMRes.

Dans cette partie sont présentés un certain nombre de cas tests utilisés pour valider et analyser le fonctionnement de ces 2 codes. Dans un premier temps, avant de considérer le modèle couplé décrit dans la partie 2.3.2, la validité de notre démarche pour résoudre un unique système M_1 est éprouvée. On s'attachera donc dans la partie 4.1 à vérifier que l'erreur numérique occasionnée par notre méthode est conforme à l'ordre du schéma utilisé. Il sera ensuite vérifié que le schéma utilisé permet d'approcher convenablement la transition du modèle M_1 vers sa limite asymptotique. Enfin, un premier cas d'homogénéisation purement conducteur sera réalisé pour s'assurer que notre méthode est fonctionnelle avant de passer au transfert conducto-radiatif. Dans un second temps, la capacité de nos codes à modéliser ce dernier sera ensuite éprouvée dans la partie 4.2.

4.1 Transfert de chaleur non-couplé - Validation numérique de la méthode

4.1.1 Solution exacte - Calcul d'ordre

Pour obtenir une première validation du code mis au point, un premier cas test est mis au point pour vérifier l'ordre du schéma numérique. Pour cela, les résultats numériques sont comparés à une solution analytique (4.1) du modèle P_1 , plus aisément obtenue que pour le modèle M_1 . Ce système (eqs. (2.49-2.50)) peut être vu comme la linéarisation d'un M_1 proche de l'équilibre. En dehors de la définition de la pression radiative, la structure du code n'est pas affectée ; c'est donc un cas approprié pour vérifier la consistance des résultats obtenus.

Le test sera mené en deux et trois dimensions, pour attester de la validité de ces deux versions du code. Le cas utilisé est bidimensionnel, avec les caractéristiques suivantes :

— **Solution analytique :**

$$\begin{cases} E_{\text{exact}}(t, \mathbf{x}) = E_0 e^{\frac{-c\sigma t}{2}} \left(\cos(zt) \left(\frac{1}{2} + \frac{z}{c\sigma} \right) + \sin(zt) \left(\frac{1}{2} - \frac{z}{c\sigma} \right) \right) \left(\cos\left(\frac{2\pi x}{L_x}\right) + \cos\left(\frac{2\pi y}{L_y}\right) \right) \\ F_{x,\text{exact}}(t, \mathbf{x}) = F_0 \frac{2\pi c}{3\sigma L_x} e^{\frac{-c\sigma t}{2}} (\cos(zt) + \sin(zt)) \sin\left(\frac{2\pi x}{L_x}\right) \\ F_{y,\text{exact}}(t, \mathbf{x}) = F_0 \frac{2\pi c}{3\sigma L_y} e^{\frac{-c\sigma t}{2}} (\cos(zt) + \sin(zt)) \sin\left(\frac{2\pi y}{L_y}\right) \\ F_{z,\text{exact}}(t, \mathbf{x}) = 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

avec $z = \frac{c}{6} \sqrt{\frac{48\pi^2}{L_x^2} - \sigma^2}$ [87, 67], $E_0 = 1 \text{ J.m}^{-3}$ et $F_0 = 1 \text{ W.m}^{-3}.\text{s}$.

— **CI :** (4.1) à $t = 0$

— **CL :** Périodiques

— **Maillage :** 3.10 et raffinements successifs

— **Paramètres :**

Variable	Value	unit
$L_x = L_y = L_z$	1	m
c	1	m.s^{-1}
σ	1	m^{-1}
t_{max}	1	s
CFL	1	-

TABLE 4.1 – Paramètres utilisés pour le cas test 4.1.1.

L'erreur L^2 est calculée entre la solution numérique obtenue au temps t_{max} et la formulation analytique de la solution, pour des raffinements de maillage différents. La pente de l'erreur ainsi

Énergie ($\text{J}\cdot\text{m}^{-3}$)

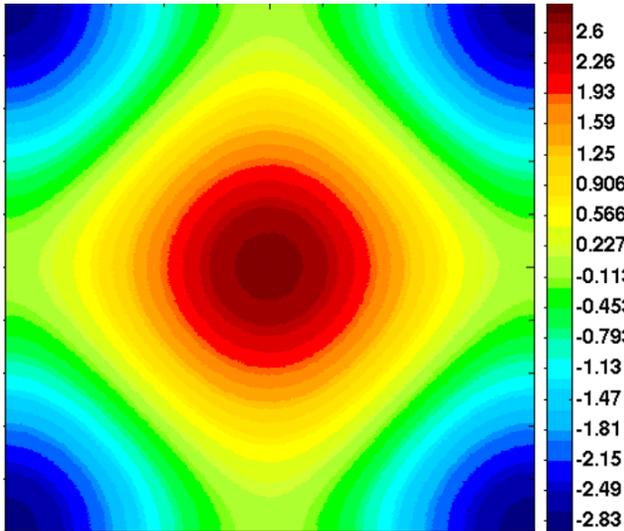


FIGURE 4.1 – Solution analytique continue de l'énergie sur un maillage 2D non-structuré de $1.05 \cdot 10^5$ mailles, à $t = 0$ s.

Erreur absolue sur l'énergie $|E - E_{exact}|$ ($\text{J}\cdot\text{m}^{-3}$)

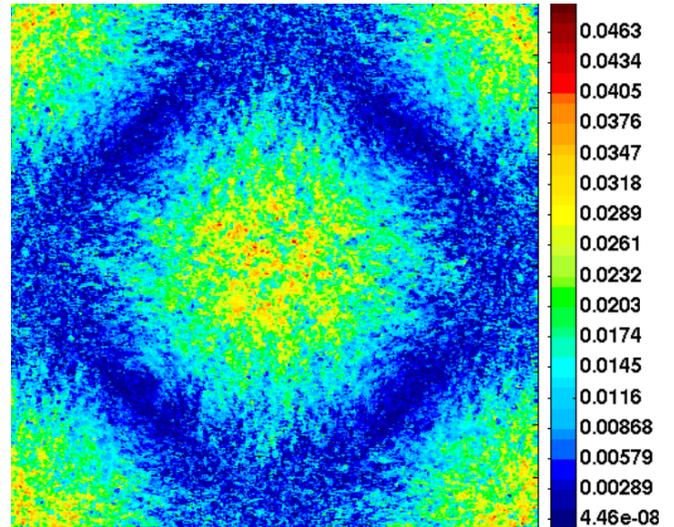
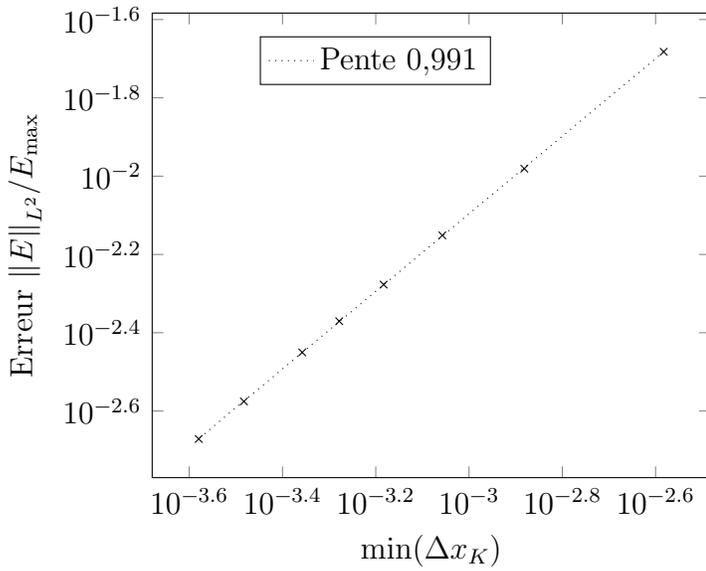
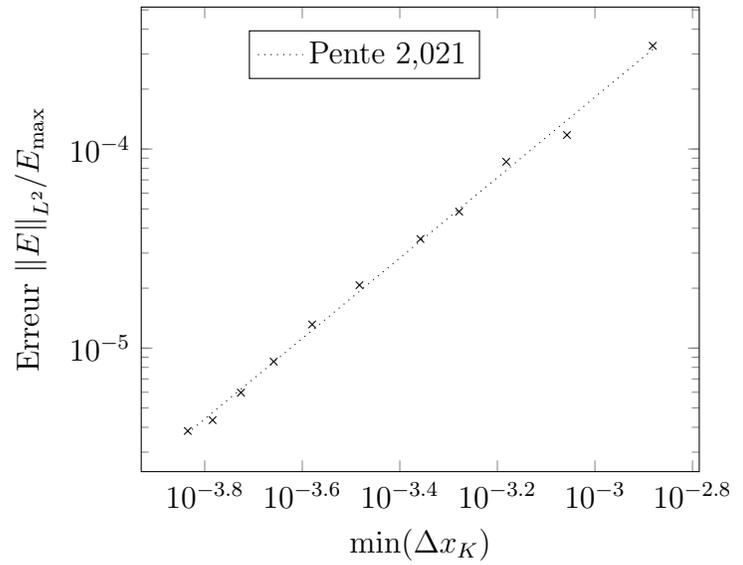


FIGURE 4.2 – Erreur sur l'énergie obtenue entre la solution analytique et la solution numérique, pour un schéma d'ordre 1, à $t = t_{\max}$.

obtenue en fonction du pas d'espace devrait alors correspondre à l'ordre en espace du schéma utilisé. De tels calculs ont été menés pour les schémas d'ordre 1 et 2 ((3.20 – 3.21) et (3.41)). Les résultats présentés sur les figures 4.3a et 4.3b en 2D, et 4.4a en 3D, confirment que la solution analytique est approchée correctement, l'erreur avec la solution numérique dépendant uniquement de l'ordre du schéma utilisé. L'étude 3D avec un schéma spatial d'ordre 2 n'a cependant pas pu être menée à bien, car le code présentait encore des erreurs au moment de la rédaction de ce manuscrit.

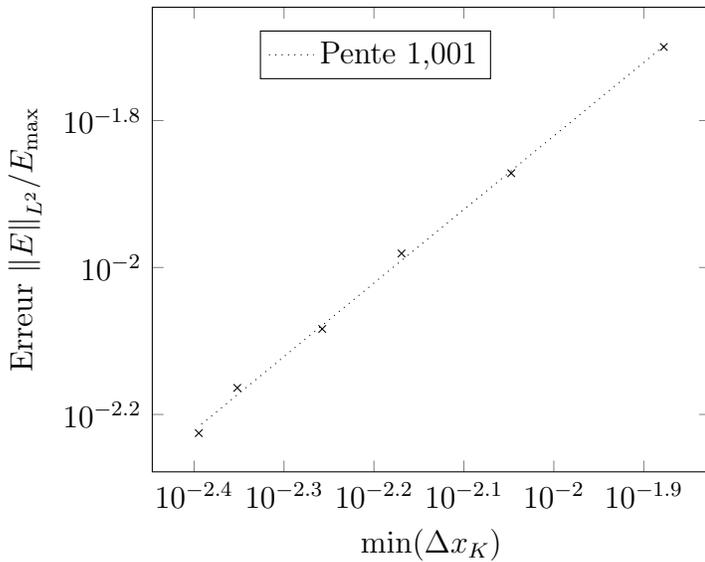


(a) Schéma d'ordre 1 en espace.

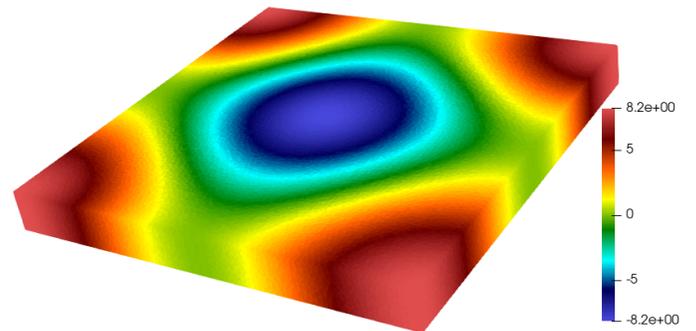


(b) Schéma d'ordre 2 en espace.

FIGURE 4.3 – Erreur L^2 entre la solution analytique (4.1) et la solution obtenue numériquement, adimensionnée par E_{\max} la valeur maximum de l'énergie à $t = 0$ s, en 2 dimensions.



(a) Erreur L^2 entre la solution analytique 4.1 et la solution obtenue numériquement avec un schéma d'ordre 1, adimensionnée par E_{\max} la valeur maximum de l'énergie à $t = 0$ s, en 3D.



(b) Solution analytique bidimensionnelle de la distribution d'énergie à $t = 0$ s, sur un maillage 3D de $4.5 \cdot 10^5$ mailles.

FIGURE 4.4 – Résultats obtenus en 3 dimensions.

4.1.2 Vitesse de convergence

Avant de chercher à obtenir des résultats sur un modèle couplé, nous devons obtenir la certitude du bon comportement *asymptotic perserving* du schéma numérique. Pour attester de la validité de notre approche et des résultats engendrés, il est indispensable de vérifier que la solution converge à la bonne vitesse vers le régime asymptotique. De cette façon, il sera assuré que le schéma (3.20–3.22) permet non seulement de décrire correctement les comportements limites, mais aussi le régime transitoire entre ceux-ci. Pour cela, il doit être montré que l’erreur avec le comportement limite réduit à une vitesse définie analytiquement à mesure que les différents paramètres deviennent grands. Ces vitesses de convergence sont établies dans [65]. En particulier, on note :

$$\|\partial_x^\beta E\|_{L^p} = \mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{n}{2}(1-\frac{1}{p})-\frac{\beta}{2}}\right) = \begin{cases} \mathcal{O}((1 + c\sigma t)^{-0.5}) & \text{si } p = 2 \\ \mathcal{O}((1 + c\sigma t)^{-1}) & \text{si } p = \infty \end{cases} \quad (4.2)$$

$$\|\partial_x^\beta F\|_{L^p} = \mathcal{O}\left((1 + c\sigma t)^{-\frac{n}{2}(1-\frac{1}{p})-\frac{\beta}{2}-\frac{1}{2}}\right) = \begin{cases} \mathcal{O}((1 + c\sigma t)^{-1}) & \text{si } p = 2 \\ \mathcal{O}((1 + c\sigma t)^{-1.5}) & \text{si } p = \infty \end{cases} \quad (4.3)$$

Dans ce qui suit, l’évolution des erreurs $\|E - E_{lim}\|_{L^p}$ et $\|F - F_{lim}\|_{L^p}$ est donc examinée, E_{lim} et F_{lim} étant respectivement les valeurs limites de E et F quand $c\sigma t$ devient grand, et $p \in \{2, \infty\}$.

Pour atteindre le régime asymptotique, le test choisi consiste à rechercher l’évolution de la solution sur un temps très long, à c et σ fixé, pour un modèle mono- M_1 . Pour s’assurer que ce comportement est conservé sur une large gamme de paramètres, les calculs seront menés pour deux valeurs d’opacité $\sigma = 10 \text{ m}^{-1}$ et $\sigma = 1000 \text{ m}^{-1}$ avec un temps de simulation allant respectivement jusqu’à $t_{\max} = 10^3 \text{ s}$ et $t_{\max} = 10^5 \text{ s}$. Cette étude est menée comme suit :

— **CI :**

$$\begin{cases} E^0(\mathbf{x}) = 1 + e^{-(\mathbf{x}-50)^2} \\ F^0(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$$

— **CL :** Neumann homogène

— **Paramètres :**

La taille du domaine est choisie suffisamment grande pour assurer que les conditions aux limites n’interfèrent pas avec la perturbation intégrée dans la solution lors de sa diffusion, comme en témoignent les figures 4.5– 4.6.

Les évolutions des erreurs avec la solution limite sont présentées dans les figures 4.7 à 4.10. Comme on pouvait s’y attendre, les erreurs $\|E - E_{lim}\|_{L^p}$ et $\|F - F_{lim}\|_{L^p}$ finissent par décroître à allure fixe avec $1 + c\sigma t$. De plus, les pentes correspondantes sont bien équivalentes aux vitesses

Variable	Valeur (cas 1)	Valeur (cas 2)	Unité
$L_x = L_y = L_z$	100	100	m
N_{cells}	3.6×10^6	3.6×10^6	mailles
c	1	1	m.s^{-1}
σ	10	1000	m^{-1}
t_{max}	10^3	10^5	s

TABLE 4.2 – Paramètres utilisés pour le cas test 4.1.2

Énergie (J.m^{-3})

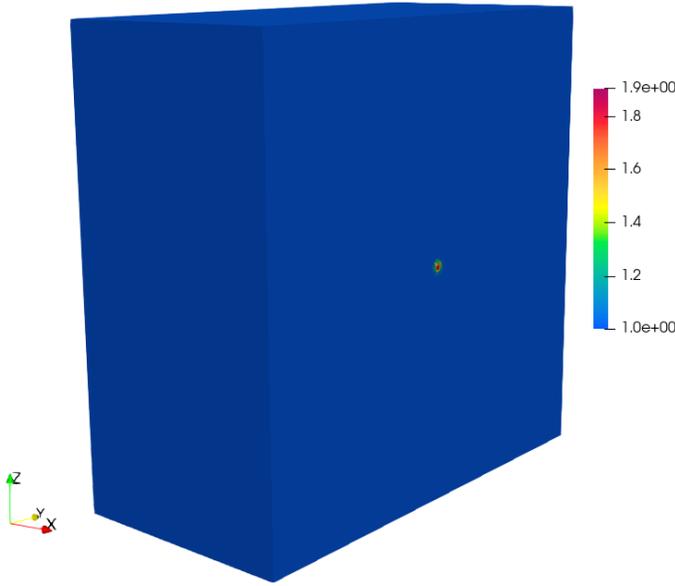


FIGURE 4.5 – Solution de l'énergie à $t = 0\text{s}$, sur un maillage 3D non-structuré de $3.6 \cdot 10^6$, pour le cas $\sigma = 10 \text{ m}^{-1}$ (vue en coupe).

Énergie (J.m^{-3})

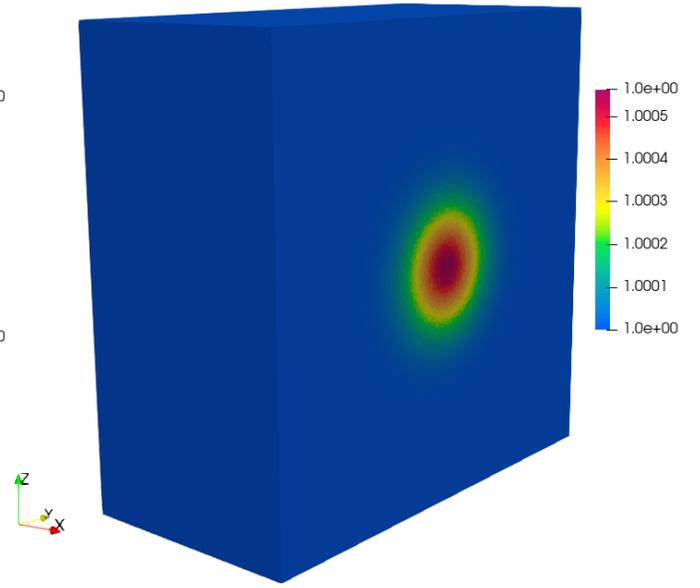


FIGURE 4.6 – Solution de l'énergie à $t = 10^3\text{s}$, sur un maillage 3D non-structuré de $3.6 \cdot 10^6$, pour le cas $\sigma = 10 \text{ m}^{-1}$ (vue en coupe).

analytiques prévues dans les équations (4.2-4.3). Les résultats pour les différents cas de figures sont condensés dans le tableau 4.3. Les vitesses de convergences qui y sont renseignées correspondent bien aux valeurs théoriques, ce qui atteste du bon comportement asymptotique observé par le schéma (3.20-3.22).

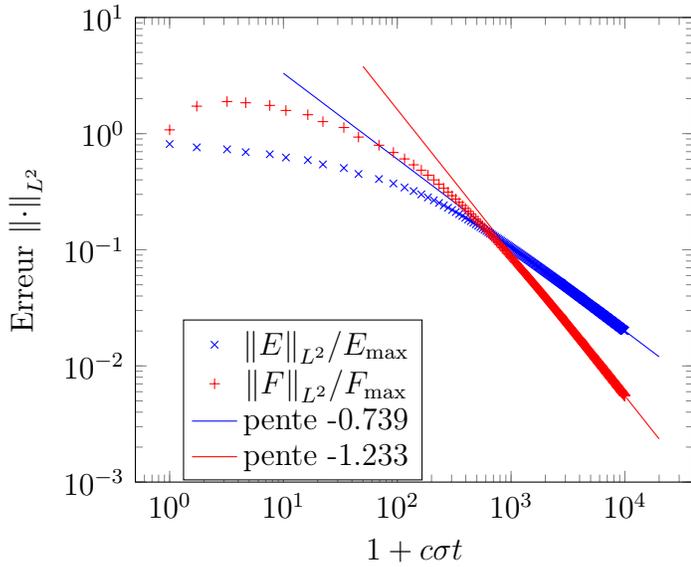


FIGURE 4.7 – Erreur L^2 adimensionnée entre les solutions numériques et leur valeur limite, en utilisant le schéma 3D d'ordre 1, avec $\sigma = 10 \text{ m}^{-1}$.

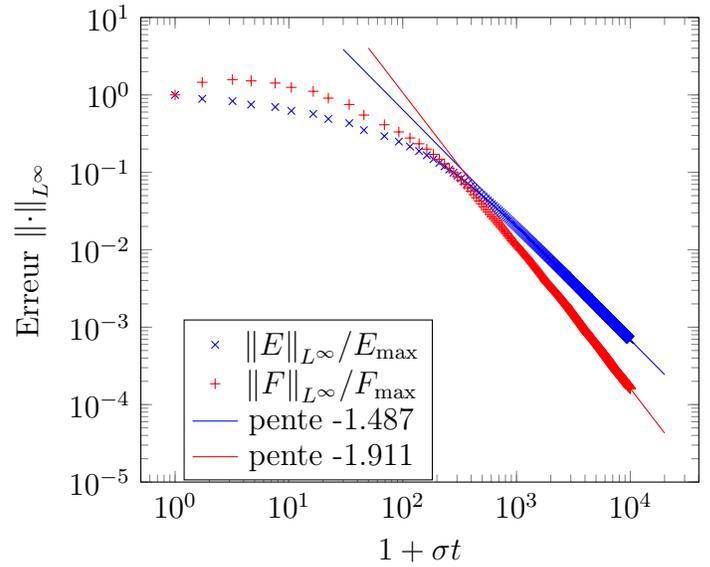


FIGURE 4.8 – Erreur L^∞ adimensionnée entre les solutions numériques et leur valeur limite, en utilisant le schéma 3D d'ordre 1, avec $\sigma = 10 \text{ m}^{-1}$.

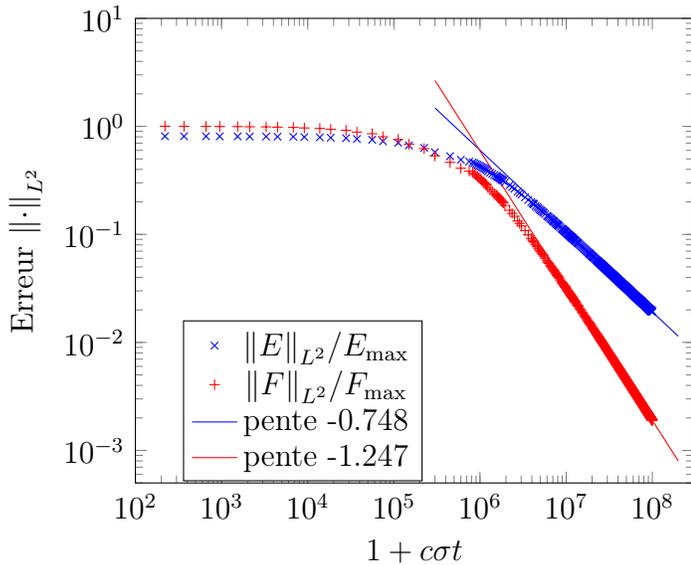


FIGURE 4.9 – Erreur L^2 adimensionnée entre les solutions numériques et leur valeur limite, en utilisant le schéma 3D d'ordre 1, avec $\sigma = 1000 \text{ m}^{-1}$.

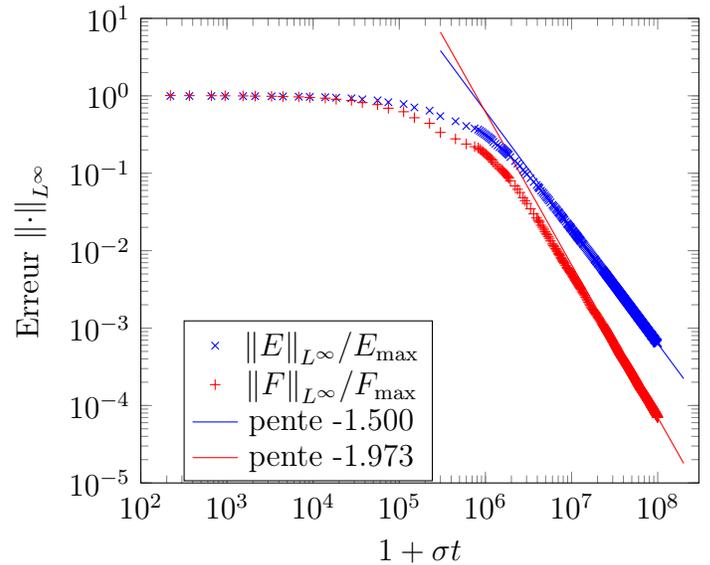


FIGURE 4.10 – Erreur L^∞ adimensionnée entre les solutions numériques et leur valeur limite, en utilisant le schéma 3D d'ordre 1, avec $\sigma = 1000 \text{ m}^{-1}$.

σ	Norme Err.	Diff. entre	Vitesse de convergence	Vit. de conv. théorique
10	L_2	E/E_{lim}	-0.739	-0.75
		F/F_{lim}	-1.233	-1.25
	L_∞	E/E_{lim}	-1.487	-1.5
		F/F_{lim}	-1.911	-2
1000	L_2	E/E_{lim}	-0.748	-0.75
		F/F_{lim}	-1.247	-1.25
	L_∞	E/E_{lim}	-1.500	-1.5
		F/F_{lim}	-1.973	-2

TABLE 4.3 – Vitesses de convergence vers la valeur limite obtenues par le schéma (3.20–3.22) à l’ordre 1 par rapport à la vitesse théorique. [65]

4.1.3 Une illustration de la nécessité d’un schéma préservant le régime asymptotique

Le cas test suivant est effectué pour illustrer l’importance de l’emploi d’un schéma AP dans le cas du modèle M_1 . Les solutions obtenues à l’aide du schéma (3.20–3.22) et de sa version naïve (*i.e.* $\theta_e = 1$) sont comparées à la limite diffusive. Le cas unidimensionnel observé est le suivant :

— **CI :**

$$\begin{cases} E^0(\mathbf{x}) = \text{cste} \\ F^0(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$$

— **CL :**

- en x : Dirichlet
- en y,z : Périodiques

— **Paramètres :**

Variable	Valeur	Unité	Variable	Valeur	Unité
c	18500	m.s^{-1}	L_x	0.3	m
σ	$6.89 \cdot 10^7$	m^{-1}	$L_y = L_z$	0.03	m
t_{max}	1	s	N_x	200	mailles
E_{left}	$1.42 \cdot 10^9$	J.m^{-3}	N_{cells}	5.4×10^4	mailles
E_{right}	$4.26 \cdot 10^8$	J.m^{-3}	E^0	$4.26 \cdot 10^8$	J.m^{-3}
F_{left}	0	W.m^{-2}	F^0	0	W.m^{-2}

TABLE 4.4 – Paramètres utilisés pour le cas 4.1.3

Ainsi en imposant une énergie E_{left} sur le bord du domaine plus grande que le champ d’énergie initial E^0 , on va chercher à observer la "diffusion" de la chaleur, tout en analysant la réponse du programme à une forte discontinuité sur la condition au bord. En effet dans une telle configuration,

le problème peut être considéré comme ayant atteint sa limite asymptotique. La solution de l'équation de diffusion (2.29) peut donc être considérée comme solution de référence au temps t_{\max} . Le problème considéré étant unidimensionnel, on peut obtenir la solution de référence numériquement en résolvant (2.29) sur un maillage 1D suffisamment fin. Cette solution est comparée avec celles obtenues avec le schéma AP (3.20–3.22) et sa version naïve sur la figure 4.11.

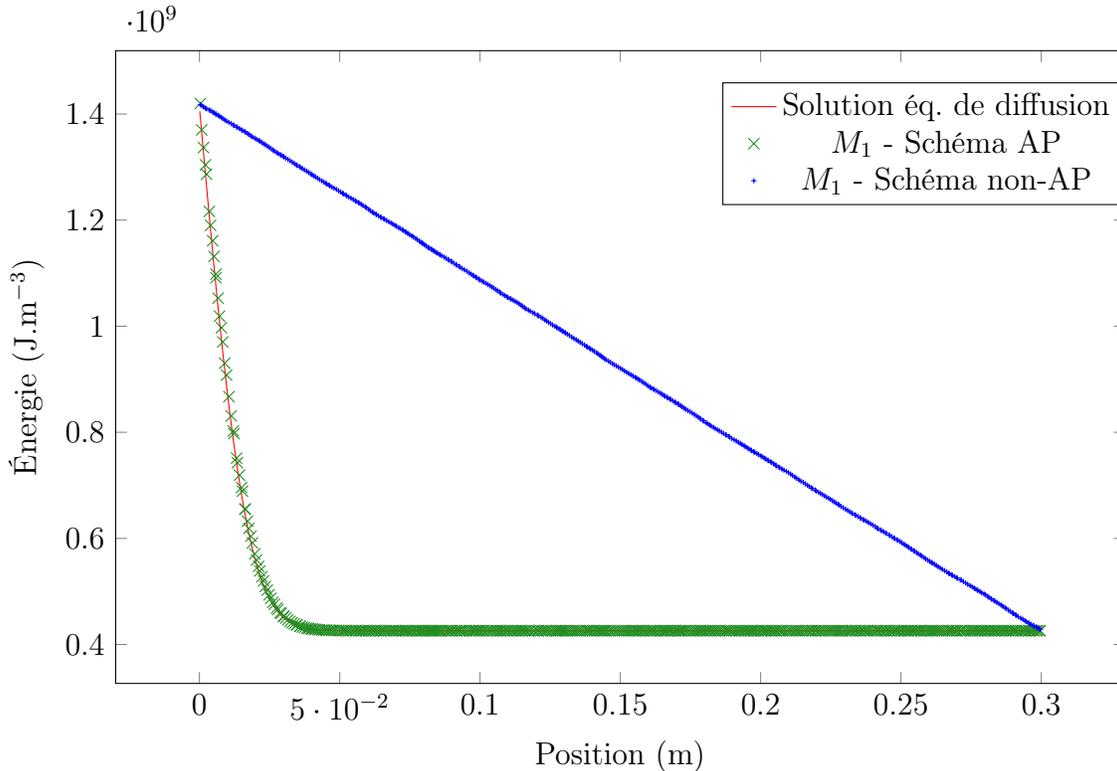


FIGURE 4.11 – Comparaison des solutions numériques obtenues pour l'équation de diffusion et le modèle M_1 avec le schéma AP proposé dans cette étude, et sa version non-AP. Ces valeurs sont récupérées à partir d'une coupe suivant les axes $y = 0.015$ m et $z = 0.015$ m.

La figure 4.11 montre que malgré le fait que la solution de référence est encore en régime transitoire à $t = t_{\max}$, la solution obtenue avec le schéma non-AP a déjà atteint son état stationnaire. En effet dans ce cas, il est déraisonnable d'imposer $\max(cd_{KL}) \ll 1$, comme décrit dans la partie 3.2.1, et le schéma limite ne représente donc pas l'équation de diffusion souhaitée. Au contraire, la solution obtenue à l'aide du schéma (3.20–3.22) décrit correctement le comportement limite, ce qui confirme que la préservation de l'asymptotique est primordiale pour décrire les comportements qui ont lieu en régime parabolique. De plus, on peut souligner que malgré la forte discontinuité initiale imposée sur la condition au bord, on parvient à obtenir un bon résultat avec un pas de temps final de $\Delta t = 2.1 \times 10^6 \Delta t_{\text{expl}}$, ce qui témoigne de la stabilité de la méthode pour décrire le comportement asymptotique du modèle M_1 .

4.1.4 Calcul d'homogénéisation sur des plaques planes en conduction pure

Pour mettre un premier pas dans le calcul des propriétés effectives d'un matériau hétérogène, nous pouvons envisager de rester sur un système mono- M_1 , sur un cas de conduction pure. Cette étape fait office de cas de validation, une solution analytique étant aisément obtainable. En effet, sur un cas unidimensionnel, il est possible de retrouver la conductivité équivalente d'un milieu hétérogène à partir de la loi de Fourier :

$$\lambda_{\text{eff theor.}} = \frac{L_{\text{tot}}}{\sum_i \frac{L_i}{\lambda_i}} \quad (4.4)$$

L_{tot} étant la longueur totale du domaine, L_i et λ_i la longueur et la conductivité thermique de chaque tranche homogène du matériau. Le cas étudié est le suivant :

— **CI :**

$$\begin{cases} E_m^0 = \left(T_l + (T_r - T_l) \frac{x}{L_x} \right) \rho C_v \\ F^0 = 0 \end{cases} \quad (4.5)$$

$$(4.6)$$

— **CL :**

— En x : Dirichlet

— En y,z : Périodique

— **Maillage :** Version plus fine de la figure 3.13, pour environ 200 mailles sur la longueur.

— **Domaine :** Figure 4.12

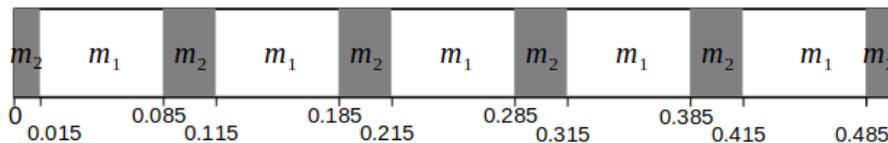


FIGURE 4.12 – Répartition des matériaux dans le domaine de calcul

— **Paramètres :** Tableau 4.5

Comme indiqué dans la partie 3.2.9, le calcul est mené jusqu'à ce que le régime stationnaire soit atteint, c'est à dire jusqu'à ce que le flux de chaleur soit constant sur l'ensemble du domaine. Cette valeur de flux F_x^∞ peut alors être utilisée pour obtenir une valeur de conductivité effective λ_{eff} via la formule (3.55).

La solution stationnaire obtenue sur l'énergie est présentée sur la figure 4.13. Comme on pouvait s'y attendre, on constate une discontinuité de pente à chaque changement de milieu, et l'énergie semble constante à l'intérieur des plaques m_2 . Cela est dû au fait que la conductivité thermique est 100 fois plus importante dans le matériau m_2 que dans le m_1 , et la pente de l'énergie est ainsi autant

Paramètre	Valeur		Unité
L_x	0.5		m
$L_y = L_z$	0.05		m
N_x	200		mailles
T_l	1000		K
T_r	990		K
	m₁	m₂	
c_m	1	1	m.s ⁻¹
σ_m	100	1	m ⁻¹
λ	0.01	1	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
ρ	3		kg.m ⁻¹
C_v	1		J.kg ⁻¹ .K ⁻¹

TABLE 4.5 – Paramètres utilisés sur le cas 4.1.4.

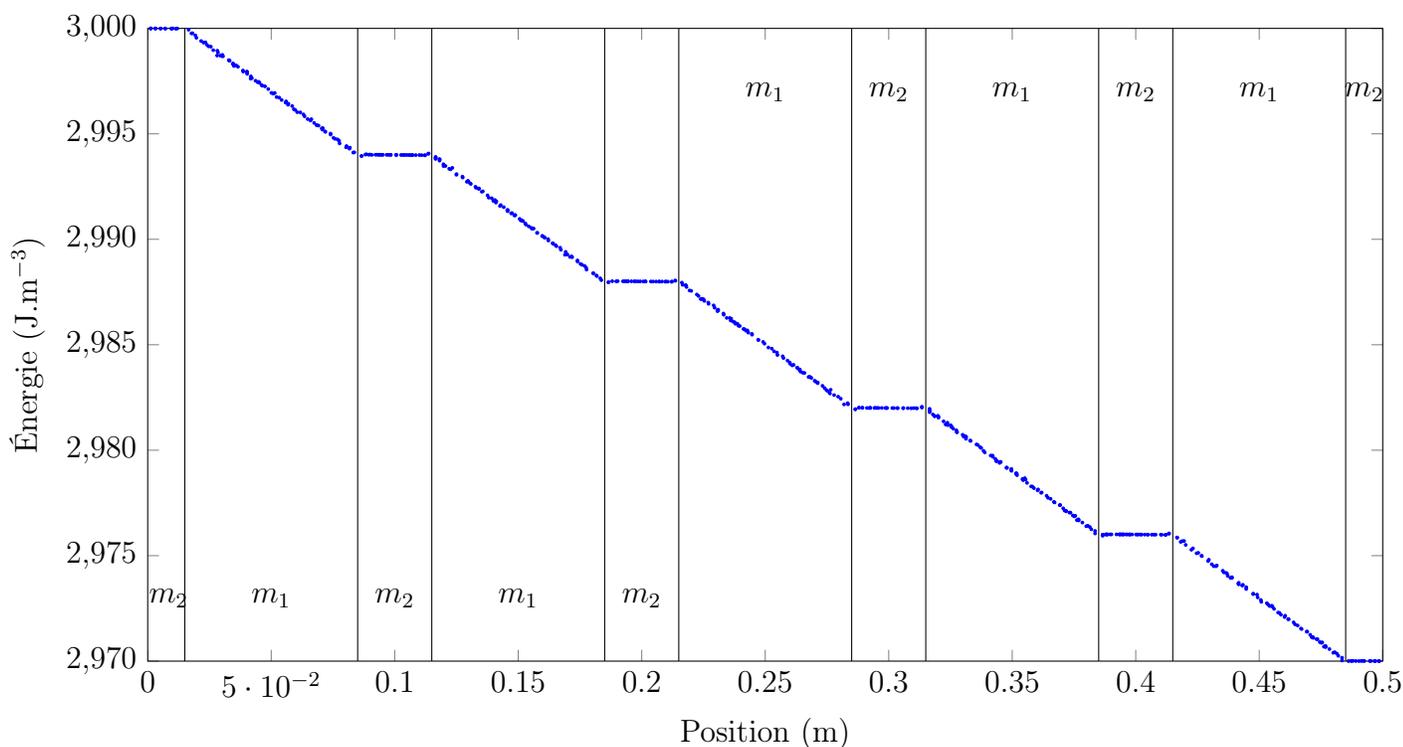


FIGURE 4.13 – Solution stationnaire obtenue sur l'énergie. Les valeurs sont récupérées à partir d'une coupe suivant les axes $y = 0.024$ m et $z = 0.024$ m.

de fois plus importante que dans le milieu ambiant m_1 . Ces résultats semblent donc satisfaisants, d'autant qu'ils ont été obtenus à l'aide d'un pas de temps allant jusqu'à $\Delta t_{max} = 2^{11} \Delta t_{expl}$.

Un fois le régime stationnaire atteint, on récupère la valeur moyenne F^∞ . La valeur du flux présente quelques variations, malgré le fait que la solution n'évolue plus avec le temps, comme on peut le voir sur la figure 4.14. En dépit d'un seuil d'erreur minimal ε (*c.f.* algorithme 1) allant de 10^{-7} à 10^{-12} , la solveur considère la solution comme convergée. Ce phénomène est possiblement

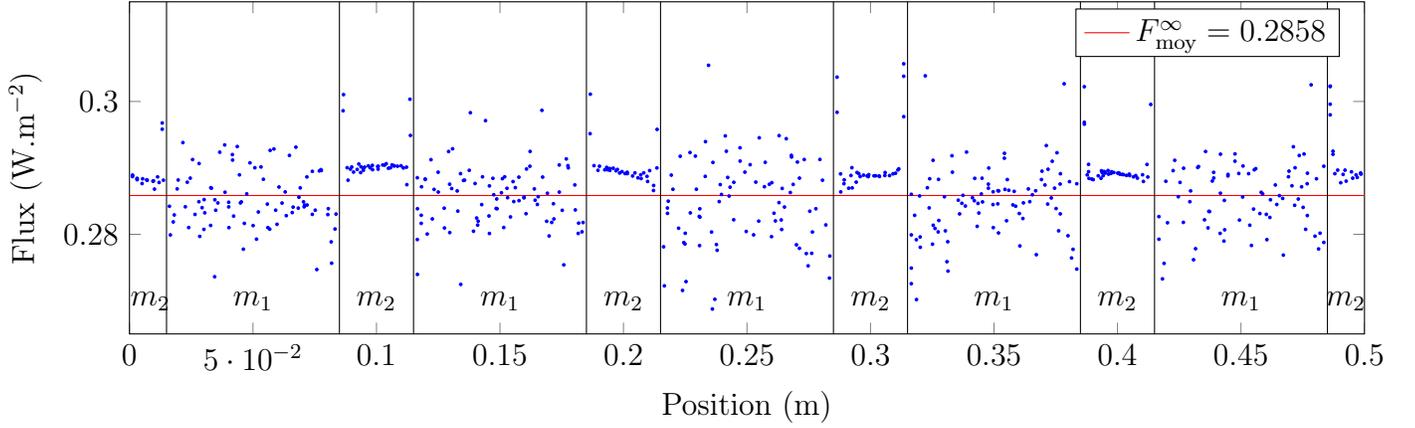


FIGURE 4.14 – Solution stationnaire obtenue sur le flux. Les valeurs sont récupérées à partir d’une coupe suivant les axes $y = 0.024$ m et $z = 0.024$ m.

dû à un mauvais conditionnement du problème, mais apparaît aussi parce que le maillage est non-structuré. On récupère malgré tout la valeur moyenne du flux sur l’ensemble du domaine $F_{x,moy}^\infty = \frac{\sum_{K \in \mathcal{T}} F_{x,K} |K|}{\sum_{K \in \mathcal{T}} |K|}$, pour obtenir la conductivité effective :

$$\lambda_{\text{eff}} = \frac{F_{x,moy}^\infty L_{tot}}{T_r - T_l} \simeq 1.429 \times 10^{-2} \text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1} \quad (4.7)$$

Cette valeur peut être comparée à la valeur théorique :

$$\lambda_{\text{eff theor.}} = \frac{L_{tot}}{\sum_i \frac{L_i}{\lambda_i}} \simeq 1.422 \times 10^{-2} \text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1} \quad (4.8)$$

La valeur ainsi obtenue numériquement est donc convenable et présente une erreur de 0.49%. Ce problème d’éparpillement de la valeur du flux est cependant inquiétant, et risque de devenir d’autant plus handicapant sur des milieux plus complexes, ainsi qu’en présence de rayonnement. Bien que la valeur moyenne du flux soit toujours proche de la valeur théorique, on retrouve un écart-type sur la valeur du flux croissant avec l’opacité σ_m , pour des cas similaires à 4.5, mais sur des milieux homogènes (figure 4.15). La valeur de c_m n’a quant à elle aucune influence sur la dispersion du flux final.

Cette tendance montre que les résultats seront potentiellement bien moins précis lorsque des grandes opacités seront considérées. Une amélioration du code est sans doute nécessaire avant de réaliser des cas d’homogénéisation conducto-radiatifs sur des milieux réalistes. Celle-ci passera sûrement par une amélioration du conditionnement de la matrice du système.

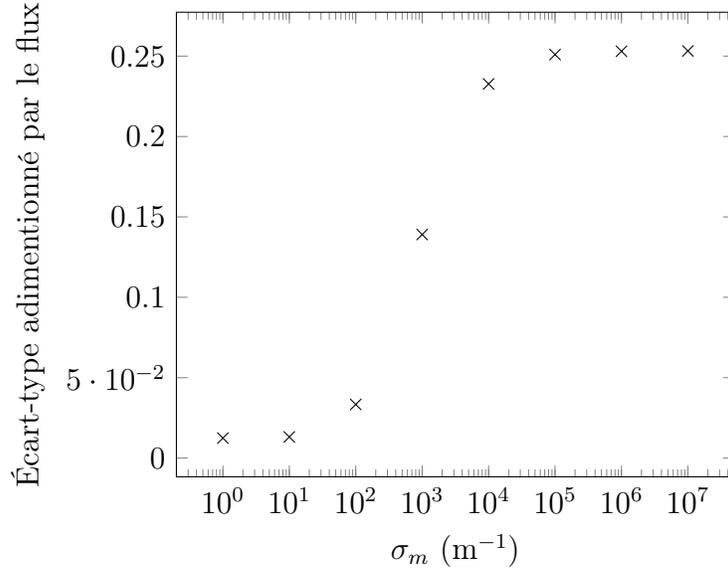


FIGURE 4.15 – Évolution de l'écart-type adimensionné du flux à F_{moy}^∞ , en fonction des valeurs de σ_m , sur un cas similaire au tableau 4.5, mais sur un milieu homogène.

4.1.5 Calcul basé image sur un matériau hétérogène complexe en conduction pure

La méthode ici développée se voulant basée image, il est primordial de pouvoir l'éprouver sur des domaines et maillages plus complexes, comme par exemple ceux présentés sur la figure 3.14. Le maillage associé n'étant pas préparé pour être périodique, un calcul d'homogénéisation n'a pas pu être mené de façon similaire à celui présenté dans la partie précédente. Une adaptation du code est nécessaire à un calcul de conductivité effective sur ce maillage, et celle-ci n'a pas été faite à ce jour. En guise de première validation, un premier calcul d'évolution d'une perturbation initiale est analysée sur le domaine 3.14a. On considère un milieu ambiant cent fois plus isolant que la partie solide, et donc l'interaction de la perturbation avec le matériau conducteur. Les paramètres utilisés sont les suivants :

— **CI :**

$$\begin{cases} E_m^0 = E_R^0 = E_0 \left[990 + 1000 \exp \left(-\frac{(\mathbf{x} - 0.5)^2}{4 \cdot 10^{-1}} \right) \right] & (4.9) \\ F^0 = 0 & (4.10) \end{cases}$$

avec $E_0 = 1 \text{ J.m}^{-3}$.

— **CL :** Dirichlet

— **Maillage :** 3.14b

— **Domaine :** Figure 3.14a. On nomme m_1 le milieu ambiant et m_2 la partie solide

— **Paramètres :**

Paramètre	Valeur		Unité
$L_x = L_y = L_z$	1		m
N_{cells}	1.4×10^6		mailles
	m₁	m₂	
c_m	100	100	m.s ⁻¹
σ_m	100	1	m ⁻¹
λ	1	100	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
ρ	3		kg.m ⁻³
C_v	1		J.kg ⁻¹ .K ⁻¹

TABLE 4.6 – Paramètres utilisés sur le cas 4.1.5.

La perturbation initiale décrite sur la figure 4.16 évolue de manière non-isotrope au cours du temps. La solution présentée dans la figure 4.17 au bout de 50 itérations confirme le rôle isolant du matériau poreux, la progression de la perturbation étant bien inférieure en son sein. Un pas de temps de $\Delta t = 4096 \Delta t_{\text{expl}}$ est atteint au cours de ce calcul, ce qui confirme la possibilité du code de fonctionner sur des images complexes. Des améliorations sont cependant encore nécessaire pour procéder à des calculs d'homogénéisation, et conclure sur la précision de cette méthode.

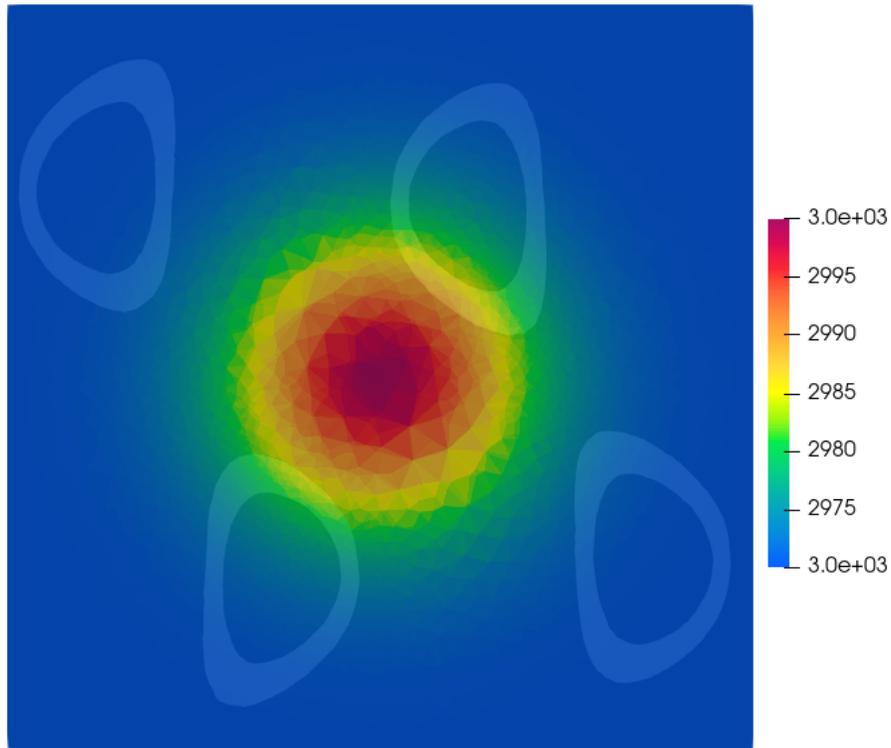


FIGURE 4.16 – Condition initiale sur l'énergie, et en blanc l'intersection du matériau avec le plan de coupe. Les valeurs sont récupérées à partir d'une coupe suivant le plan $x = 0.5$ m.

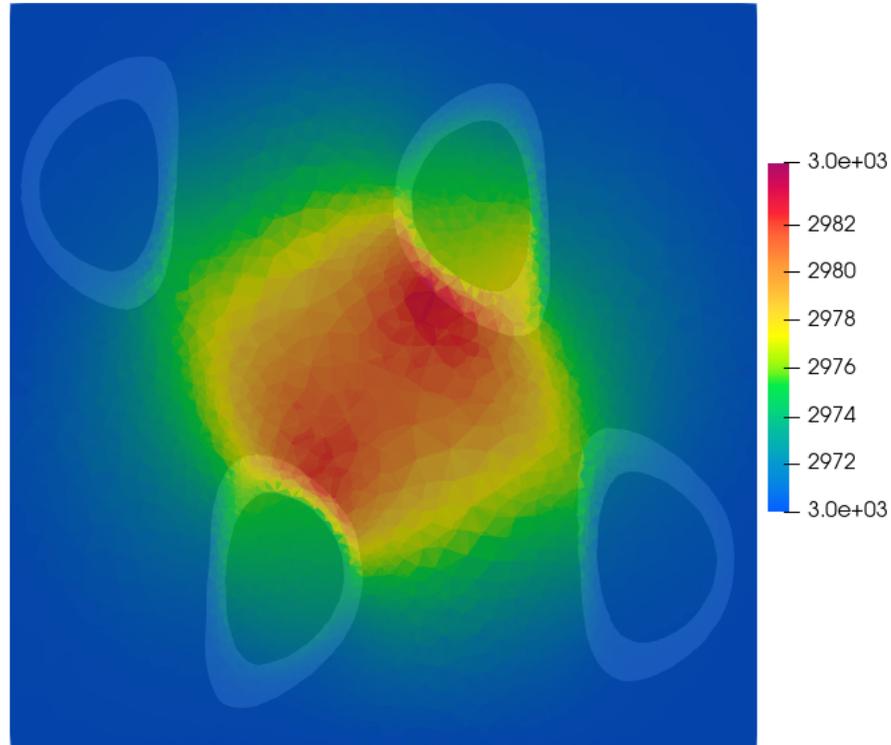


FIGURE 4.17 – Solution finale obtenue sur l'énergie à $t = 2 \times 10^{-3}$ s, et en blanc l'intersection du matériau avec le plan de coupe. Les valeurs sont récupérées à partir d'une coupe suivant le plan $x = 0.5$ m.

4.2 Couplage conducto-radiatif - Validation et résultats

Une fois que le code de calcul a passé toutes les étapes de validation pour résoudre un système M_1 , il est envisageable de le confronter au système qui fait l'intérêt de cette étude : le modèle bi- M_1 couplé (2.18–2.21). Malheureusement, la programmation de cette partie n'a commencé que quelques semaines avant le dépôt de ce manuscrit, et le code qui en découle manque donc de maturité. Si des premiers résultats encourageants ont pu être obtenus, une attention est encore nécessaire au programme, avant de pouvoir émettre un jugement sur ses capacités.

On s'attachera à valider les résultats à l'aide d'approches analytiques dans des milieux homogènes, comportant des écarts de propriétés plus ou moins importants entre les modes. Nous nous pencherons ensuite sur des milieux hétérogènes présentant des discontinuités de propriétés pour évaluer la capacité de notre approche à gérer de tels problèmes.

4.2.1 Un cas théorique

Pour analyser la première réponse du code de calcul à un système couplé de deux M_1 , le premier cas de validation consiste à observer les différents phénomènes ayant lieu pour un cas présentant peu de raideurs potentielles. Ainsi, on cherche à évaluer la réponse au couplage, et la capacité du solveur à converger dans cette situation. Le cas considéré est le suivant :

— **CI :**

$$\begin{cases} E_m^0 = E_R^0 = E_0 \left[1 + \exp \left(-\frac{(\mathbf{x} - 0.5)^2}{4 \cdot 10^{-4}} \right) \right] \\ F^0 = 0 \end{cases} \quad (4.11)$$

$$(4.12)$$

— **CL :**

— En x : Neumann homogène

— En y, z : Périodique

— **Maillage :** Figure 3.12

— **Paramètres :** Tableau 4.7

Au vu des paramètres utilisés, l'objectif n'est pas d'assister à un couplage "conducto-radiatif" au sens physique, car les deux systèmes M_1 sont soumis à un régime proche du transport. De plus, les vitesses c et c_m ont été choisies de sorte que l'on observe successivement le transport des deux gaussiennes utilisées comme conditions initiales. Enfin, on s'attend à ce que la partie "rayonnement" soit absorbée et réémise dans la partie "conduction", car le terme d'échange présent dans la partie énergie du système (2.18–2.21) est négatif à l'instant initial :

$$E_R^{eq}(t, \mathbf{x}) - E_R(t, \mathbf{x}) = a_R(E_m/\rho C_v)^4 - E_R \quad (4.13)$$

$$\simeq 2.5 \times 1.2 \times 10^{-2} - 1 \simeq -0.97 \quad (4.14)$$

Paramètre	Valeur	Unité
L_x	0.5	m
$L_y = L_z$	0.05	m
N_{cells}	1.9×10^4	mailles
N_x	$\simeq 150$	mailles
c	2000	m.s^{-1}
c_m	1000	m.s^{-1}
σ_e	1	m^{-1}
σ_s	0	m^{-1}
σ_m	1	m^{-1}

TABLE 4.7 – Paramètres utilisés pour le cas 4.2.1

Ce transfert d'énergie entre les deux modes devrait prendre fin lorsque l'énergie "radiative" a atteint la valeur d'énergie à l'équilibre. Il est ainsi possible de connaître les valeurs stationnaires des énergies E_m^∞ et E_R^∞ . Celles-ci apparaîtront une fois que la perturbation engendrée par la condition initiale a été transportée en dehors du domaine (vu les conditions limites de sortie). En enlevant cette gaussienne, on a $E_m^0 + E_R^0 = cste = 2$. Étant donné que notre système est censé conserver l'équilibre, on devrait donc avoir $E_m^\infty + E_R^\infty = cste = 2$. Ainsi, on attend à l'équilibre :

$$E_R(t \rightarrow \infty) = E_R^{eq}(t, \mathbf{x}) \quad (4.15)$$

$$= a_R \left(\frac{2 - E_R}{\rho C_v} \right)^4 \quad (4.16)$$

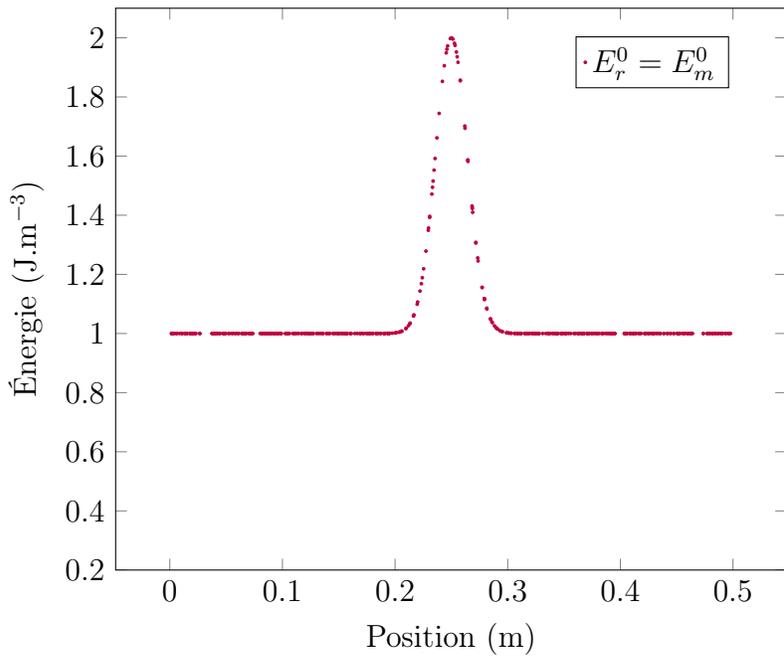
$$\Leftrightarrow \begin{cases} E_R^\infty \simeq 0.277 \text{ J.m}^{-3} \\ E_m^\infty \simeq 1.723 \text{ J.m}^{-3} \end{cases} \quad (4.17)$$

Les solutions sont présentées sur les figures 4.18. Comme il a été attendu, on peut observer que les deux modes sont en régime proche du transport. La gaussienne initiale est séparée, et une onde progresse ensuite dans toutes les directions (2 fronts sur un cas 1D) en transportant cette énergie initiale. Celle-ci progresse à la vitesse c ou c_m selon le mode, et c'est pourquoi on observe une onde deux fois plus rapide pour la partie radiative que la partie conductive. Comme précisé plus tôt, on peut aussi observer le couplage sous la forme de l'absorption de l'énergie radiative, et sa réémission sous la forme d'énergie de conduction. En lisant les valeurs finales des énergies sur la figure 4.18d, on constate que :

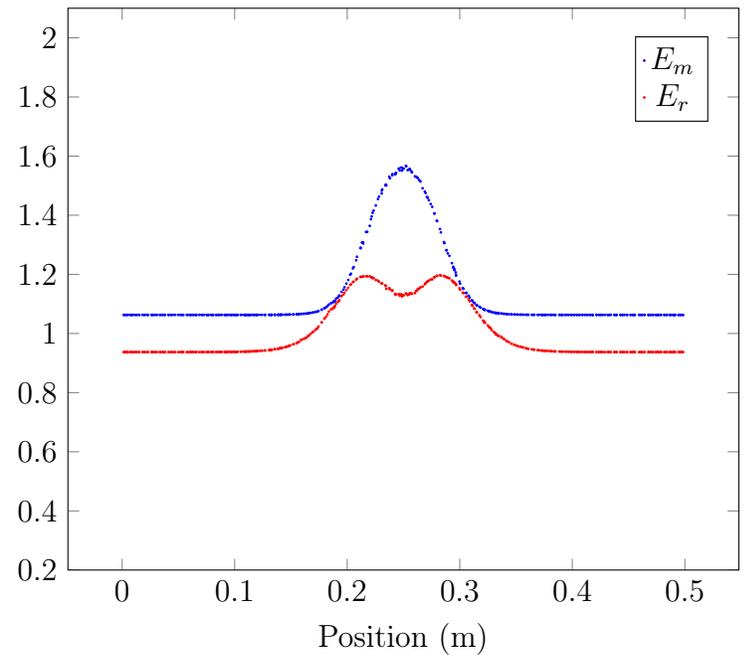
$$\begin{cases} E_R^\infty \simeq 0.297 \text{ J.m}^{-3} \\ E_m^\infty \simeq 1.753 \text{ J.m}^{-3} \end{cases} \quad (4.18)$$

Ces valeurs sont proches de celles décrites dans (4.17). Même si l'on constate des erreurs de 1% et 6% (dues aux erreurs numériques), on peut être globalement satisfait du comportement obtenu.

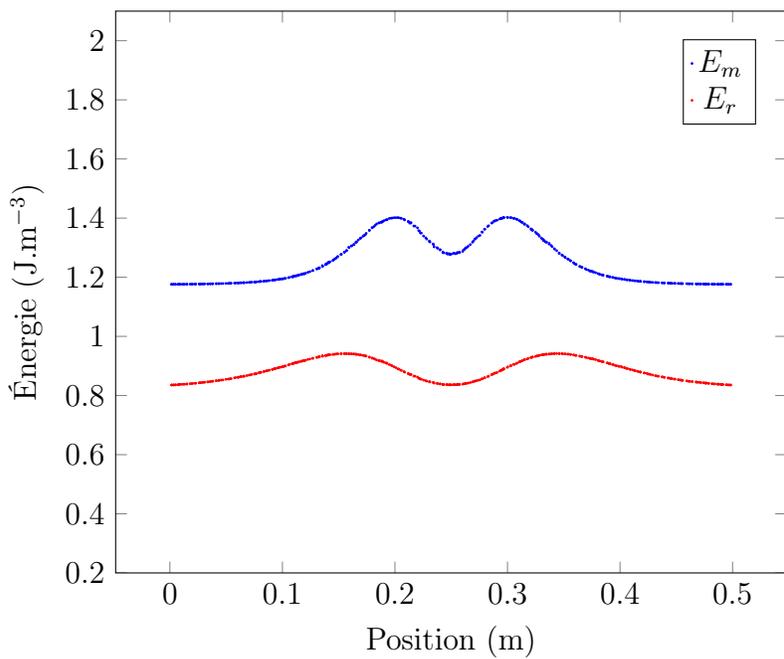
De plus, sur les 14 (*resp.* 90) itérations qui ont mené à la figure 4.18c (*resp.* 4.18d), le pas de temps implicite a déjà pu progresser jusqu'à $\Delta t = 128\Delta t_{expl}$ (*resp.* $\Delta t = 2048\Delta t_{expl}$). La stabilité ainsi montrée n'est pas étonnante, car les valeurs étant du même ordre de grandeur pour les deux modes de transport, le conditionnement du système est proche de celui d'un mono- M_1 , simplement deux fois plus grand.



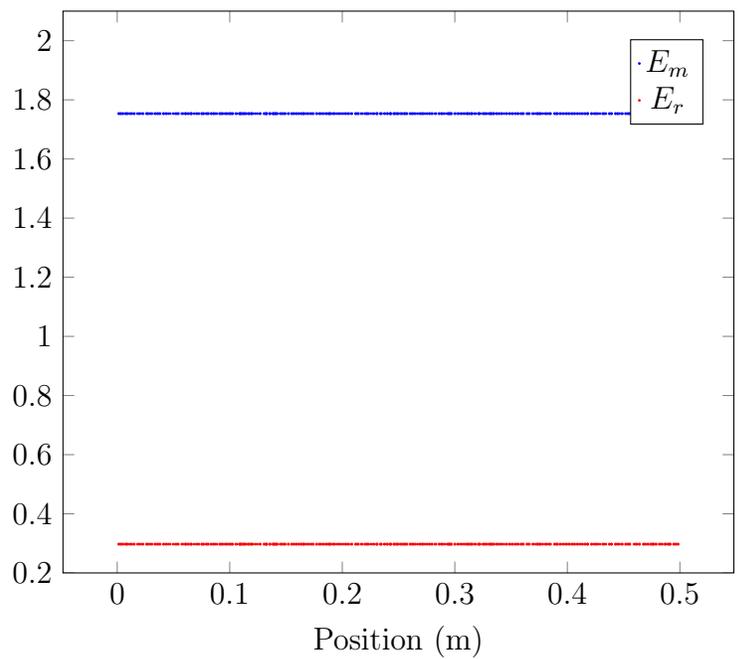
(a) $t = 0$ s



(b) $t = 2.5 \times 10^{-5}$



(c) $t = 6.9 \times 10^{-5}$



(d) $t = 1.05 \times 10^{-2}$

FIGURE 4.18 – Champs d'énergies matière E_m et radiative E_r obtenus pour le cas 4.2.1 à différents temps t . Vue en coupe selon les axes $y = 0.014$ m $z = 0.014$ m.

4.2.2 Conductivité effective sur un matériau semi-transparent homogène

Nous allons maintenant chercher à obtenir la conductivité effective d'un matériau "semi-transparent", c'est-à-dire dont les propriétés thermiques sont régies à la fois par la conduction et le rayonnement. Pour réaliser cette mesure, nous allons procéder de manière analogue à la méthode employée dans la partie 4.1.4, en considérant l'apport d'une partie radiative. Celle-ci est initialisée telle que l'énergie radiative est considérée à l'équilibre. L'objectif est une fois de plus d'obtenir une solution stationnaire au problème (et donc aussi un équilibre radiatif), et des flux constants F_R^∞ et F_m^∞ pour ainsi obtenir :

$$\lambda_{\text{eff}} = \frac{(F_R^\infty + F_m^\infty)L_x}{|T_l - T_r|} \quad (4.19)$$

La définition de la conductivité effective radiative qui mène à cette formule est présentée dans l'annexe 6.4. Ainsi, on considère le cas suivant :

— **CI :**

$$\begin{cases} T^0(x) = T_l + (T_r - T_l) \frac{x}{L_x} \end{cases} \quad (4.20)$$

$$\begin{cases} E_m^0(x) = T^0(x) \rho C_v \end{cases} \quad (4.21)$$

$$\begin{cases} E_R^0(x) = a_R T^0(x)^4 \end{cases} \quad (4.22)$$

$$\begin{cases} F^0 = 0 \end{cases} \quad (4.23)$$

— **CL :**

— En x : Dirichlet

— En y, z : Périodique

— **Maillage :** Figure 3.12

— **Paramètres :**

Paramètre	Valeur	Unité
L_x	0.5	m
$L_y = L_z$	0.05	m
N_{cells}	1.9×10^4	mailles
N_x	$\simeq 150$	mailles
σ_s	0	m^{-1}

TABLE 4.8 – Paramètres utilisés pour le cas 4.2.2

Nous avons dans un premier temps pu remarquer la difficulté de notre solveur à converger. Dans beaucoup de cas, la résolution impose une réduction de CFL bien inférieure à la condition explicite pour permettre au solveur de trouver une solution. Cette difficulté semble être due à un

mauvais adimensionnement du problème, ce défaut apparaissant lorsque le rapport entre les flux $\frac{q_m}{F_R}$ devient important.

Pour tenter d'obtenir tout de même un résultat, les paramètres du problème sont spécialement choisis pour obtenir des flux de chaleur du même ordre de grandeur pour les deux modes de transfert. On cherche donc une solution sur le cas décrit dans le tableau 4.9.

Paramètre	Valeur	Unité
T_l	1000	K
T_r	990	K
c	3.e8	m.s ⁻¹
c_m	18500	m.s ⁻¹
σ_e	10000	m ⁻¹
σ_m	4.4×10^8	m ⁻¹
t_{max}	1	s

TABLE 4.9 – Paramètres utilisés pour obtenir des flux matière et radiatif du même ordre de grandeur

Les flux de chaleur stationnaires ainsi obtenus, présentés sur la figure 4.19, rencontrent la même dispersion que celle obtenue dans la partie 4.1.4, et l'écart-type adimensionné est du même ordre de grandeur. Ce phénomène n'a donc pas pris plus d'ampleur avec le couplage. On peut alors calculer la conductivité équivalente obtenue grâce à la formule (4.19) :

$$\lambda_{\text{eff}} \simeq 2.964 \times 10^{-2} \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1} \quad (4.24)$$

Le transfert de chaleur est principalement issu du transfert radiatif sur ce calcul (comme en témoigne la figure 4.19). On peut comparer cette valeur à la conductivité effective conducto-radiative théorique λ_{Rm} (6.11) :

$$\lambda_{Rm} \simeq 2.985 \times 10^{-2} \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1} \quad (4.25)$$

On constate donc une erreur de 0.7% sur la valeur obtenue numériquement. Celle-ci est donc cohérente mais on peut espérer une plus grande précision une fois la dispersion du flux corrigée. En outre, la différence d'ordre de grandeur entre les valeurs des deux modes n'ayant pas été une source de difficulté, le solveur a pu aisément converger, et le pas de temps $\Delta t = 1.7 \times 10^7 \Delta t_{\text{expl}}$ a été atteint.

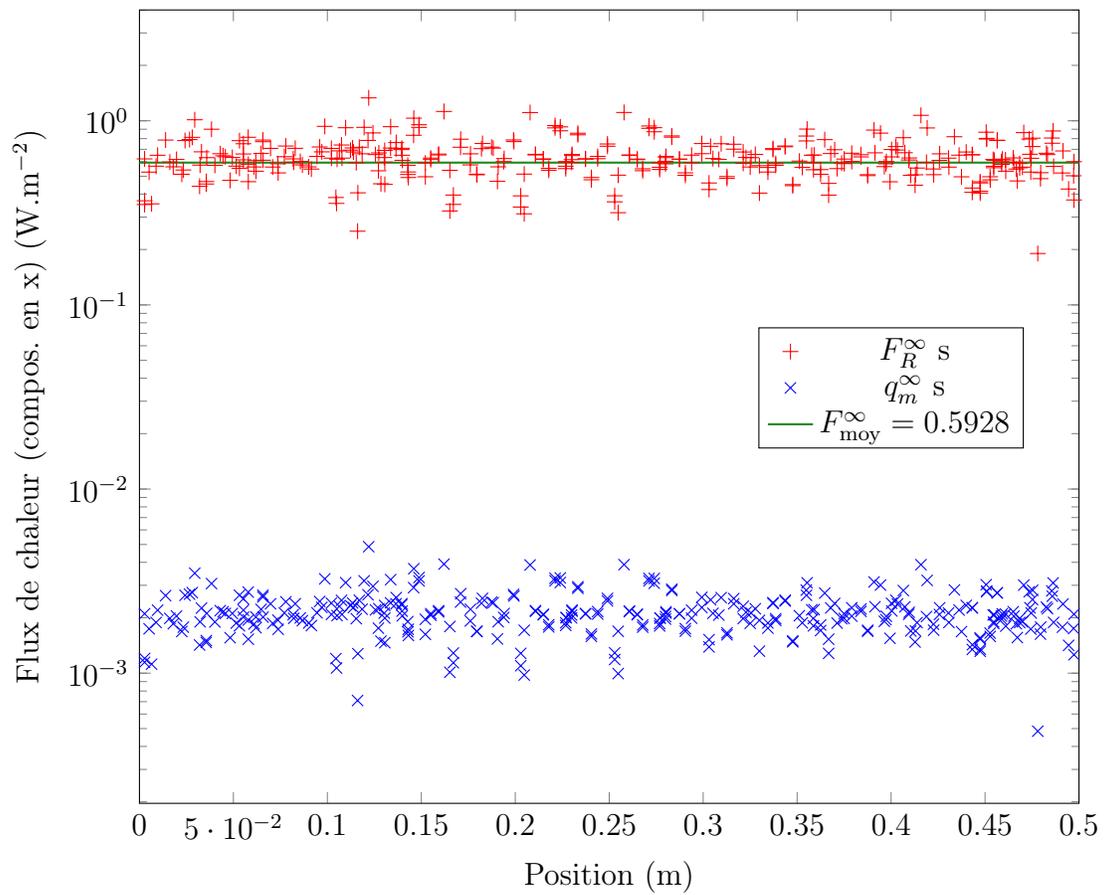


FIGURE 4.19 – Valeur des flux stationnaires obtenus pour le cas décrit par le tableau 4.9

4.2.3 Résolution instationnaire sur un matériau hétérogène

Comme précisé précédemment, il ne nous a pas été possible de travailler sur des grands écarts de valeurs d'énergie et de flux entre les deux modes, l'adimensionnement faisant encore défaut. Pour obtenir des résultats, nous nous focalisons donc sur des cas purement théoriques, comprenant des énergies radiatives et conductives du même ordre de grandeur, tel que le suivant :

— **CI :**

$$\begin{cases} E_m^0 = E_R^0 = \begin{cases} 1000 & \text{si } x < 0.25 \\ 300 & \text{sinon} \end{cases} \\ F^0 = 0 \end{cases} \quad (4.26)$$

$$(4.27)$$

— **CL :**

— En x : Neumann

— En y, z : Périodique

— **Maillage :** 3.13.

— **Domaine :** Figure 4.12

— **Paramètres :**

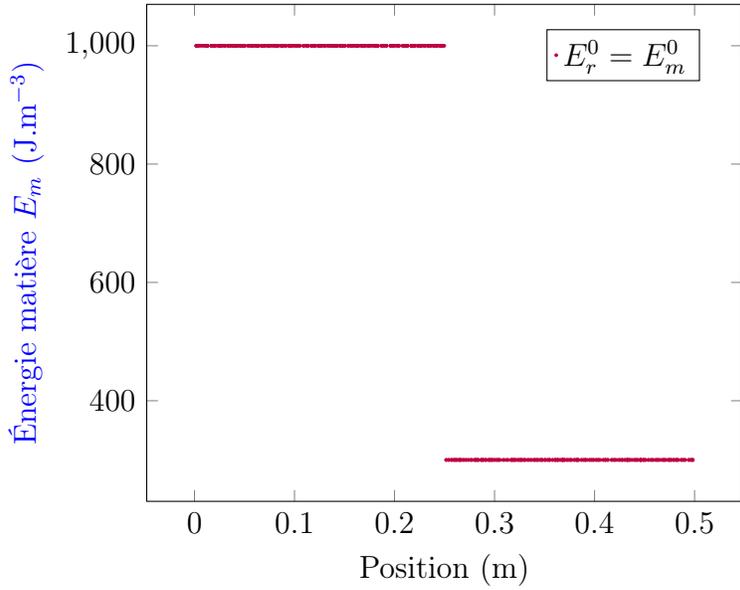
Paramètre	Valeur		Unité
L_x	0.5		m
$L_y = L_z$	0.05		m
N_{cells}	2.7×10^4		mailles
N_x	150		mailles
	m_1	m_2	
c	1000		m.s^{-1}
c_m	2000		m.s^{-1}
σ_s	0		m^{-1}
σ_e	10	1	m^{-1}
σ_m	10	1	m^{-1}
λ	0.1	1	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
ρ	3		kg.m^{-3}
C_v	1		$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$

TABLE 4.10 – Paramètres utilisés sur le cas 4.1.4.

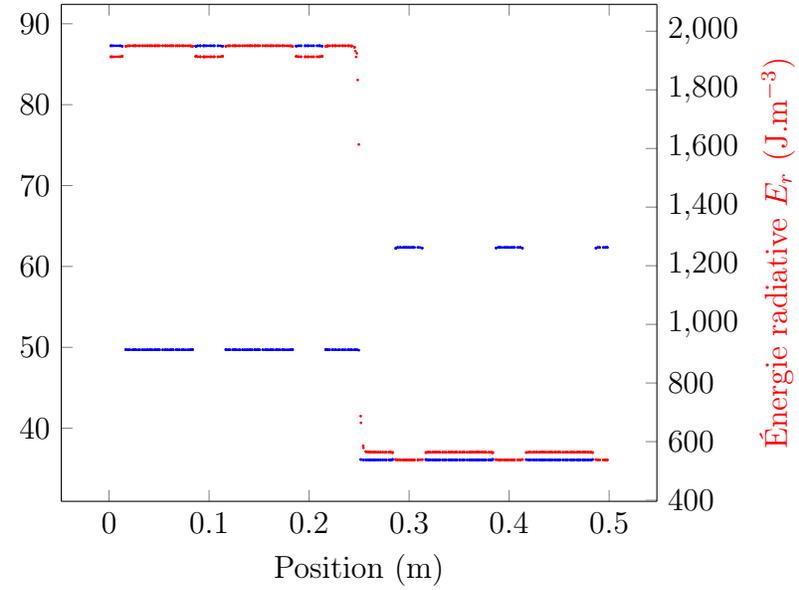
Ainsi, on va chercher à observer un problème de Riemann sur un domaine hétérogène composé de plaques planes plus propices au transfert de chaleur que le milieu ambiant. Le calcul est mené en considérant les deux modes : conduction et rayonnement. Nous allons ainsi chercher à éprouver la robustesse du schéma en observant sa réponse à une solution initiale discontinue, ainsi qu'à une discontinuité de propriétés thermiques. Les résultats sont présentés sur les figures 4.20.

On observe dès la première itération (fig. 4.20b) des discontinuités apparaître sur les deux profils d'énergie, en plus de la discontinuité initiale. Le mécanisme en cause est l'absorption de la partie rayonnement qui est dix fois plus importante sur le milieu ambiant m_1 que sur les plaques planes parallèles. Malgré cela, la solution finit par être lissée et les échanges entre les deux modes de transfert deviennent marginaux lorsque l'équilibre radiatif est localement atteint (fig. 4.20c). En temps long, on retrouve enfin un comportement caractéristique de diffusion sur un domaine hétérogène (fig. 4.20d). On retrouve ainsi une solution linéaire par morceaux, dont les segments ont une pente proportionnelle à la "conductivité" du milieu (conductivité effective radiative pour le rayonnement).

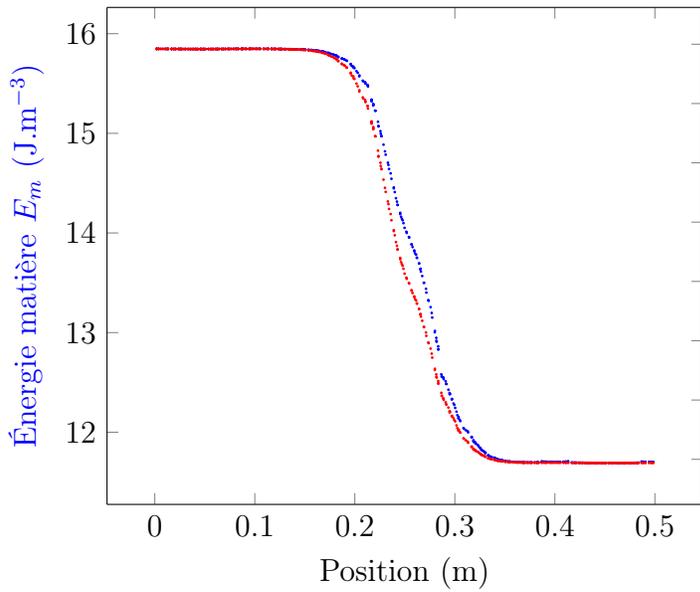
Ainsi, bien que le code de calcul dans son état actuel permette seulement de travailler sur des cas limités, ce test en particulier permet d'établir la robustesse du schéma en présence de discontinuités. On notera d'ailleurs qu'il est possible d'utiliser un pas de temps $\frac{\Delta t}{\Delta t_{expl}} = 128$ sans mettre en péril la convergence du solveur. Il permet aussi de montrer la capacité à obtenir des résultats conducto-radiatifs cohérents en régime instationnaire. Une enquête plus approfondie sera cependant nécessaire pour attester de la validité des solutions obtenues au cours du temps.



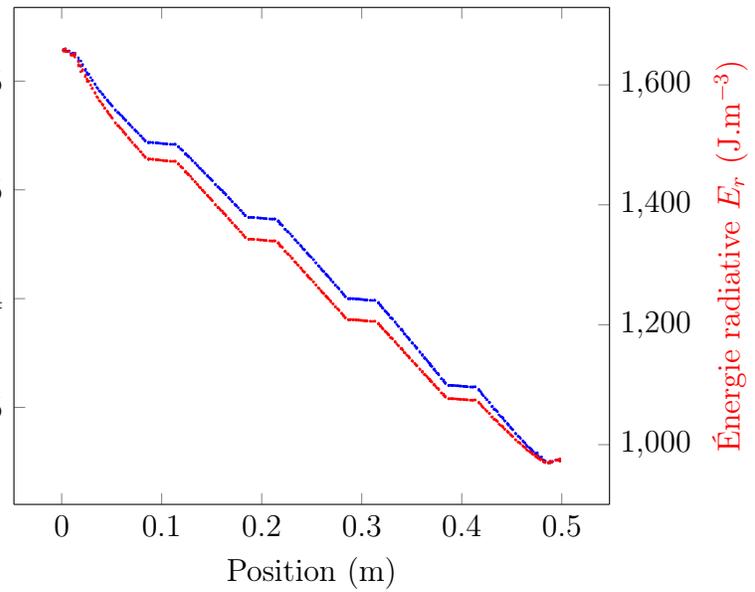
(a) $t = 0 \text{ s}$



(b) $t = 2.5 \times 10^{-7}$



(c) $t = 3.1 \times 10^{-5}$



(d) $t = 1.8 \times 10^{-3}$

FIGURE 4.20 – Champ d'énergie matière E_m et radiative E_r obtenu pour le cas 4.2.3 à différents temps t . Vue en coupe selon les axes $y = 0.014 \text{ m}$ $z = 0.014 \text{ m}$.

4.3 Limitations actuelles

Au vu des résultats obtenus dans la partie précédente, il semble que nous ne pouvons à l'heure actuelle conclure sur l'efficacité de notre méthode. En effet, bien que de nombreux cas de figures soient solubles dans la version actuelle de nos codes de calculs, beaucoup d'autres situations d'un grand intérêt pour notre application ne trouvent actuellement pas de réponse pour le système bi- M_1 . Pour résumer, nous rencontrons des difficultés :

- Pour travailler sur des cas mettant en scène des flux et énergies radiatifs et conductifs d'un ordre de grandeur très différent. Aucun résultat convainquant n'a pour le moment pu être obtenu sur ce genre de problème, pourtant central dans nos applications.
- Pour obtenir une valeur stationnaire constante du flux de chaleur. Cette information nécessaire à l'obtention d'une conductivité thermique effective manque de précision, comme il a été montré dans les parties 4.1.4 et 4.2.2.

Ces points doivent être traités avant de mener l'étude plus loin, et de tenter d'évaluer les capacités de la méthode et du code de calcul. Ces problèmes semblent tous être liés à un mauvais conditionnement de la matrice du système, et son amélioration serait grandement bénéfique. Pour le premier point, on peut aussi songer à améliorer l'adimensionnement du problème, ou essayer d'en obtenir une meilleure initialisation dans des cas présentant des raideurs.

Chapitre 5

Conclusion et perspectives

5.1 Conclusion

Au cours de cette étude, la construction et l'application d'une méthode innovante de modélisation du transfert de chaleur conducto-radiatif a été présentée. Le principe repose sur l'étude du transfert des particules porteuses d'énergie dans le milieu, à savoir les phonons et les photons, via un couple d'équations cinétiques. Il a été montré comment ces dernières ont été réduites à l'aide d'une méthode aux moments, afin d'en faciliter la résolution. Le problème se résume alors à une superposition de deux systèmes M_1 couplés, dont les caractéristiques ont pu être détaillées.

Il a été montré que la principale difficulté pour résoudre numériquement le système M_1 dans nos applications était la prise en compte de son régime asymptotique. Pour répondre à cette problématique, un schéma AP développé pour ce type de système est utilisé. Sa capacité à obtenir une bonne approximation de la solution du modèle M_1 tout en conservant l'ensemble des états admissibles a pu être éprouvée dans sa version implicite et non-structurée, qui n'avait pour le moment pas encore fait l'objet d'une étude.

Plusieurs codes de calculs ont été construits sur cette base, afin d'obtenir des modélisations du transfert de chaleur couplés, l'objectif étant d'effectuer des calculs d'homogénéisation sur des images numériques de matériaux complexes. Le développement et la mise à l'épreuve de ces codes représentent la majeure partie du travail de cette thèse. Ces codes ont passé plusieurs étapes de validation, sur des maillages 2D et 3D non-structurés, afin de confirmer leur conformité face à différentes raideurs, différentes conditions initiales et aux limites, en régime asymptotique ou non, à chaque fois avec le plus grand pas de temps possible. Les expériences impliquant un unique mode de transport de chaleur ont données des résultats encourageants sur la performance de cette méthode. Toutefois, des améliorations sont encore nécessaires pour accélérer la résolution des calculs, ou permettre celle-ci sur des domaines plus importants et complexes. Les résultats obtenus

dans des cas couplés sont quant à eux plus mitigés du fait de leur immaturité, et bien que des premières résolutions ont été effectuées, les objectifs fixés au début de la thèse ne sont pas encore atteints.

5.2 Perspectives

Il a été précisé plusieurs fois dans ces travaux que certains objectifs n'ont pas pu être atteints faute de temps. On peut donc soulever plusieurs perspectives qui peuvent être envisagés à la suite de cette thèse.

Le premier point relève de la poursuite des travaux menés. Il a été établi dans le chapitre 4 plusieurs limitations du code de calcul actuel, et des améliorations supplémentaires doivent être effectuées pour les surmonter. Les premières pistes constituent notamment à corriger la méthode d'adimensionnement, et améliorer le conditionnement de la matrice du système. Cette dernière problématique peut être abordée simplement en important le Flexible-GMRes sur la version tridimensionnelle du code, mais ce travail retourne d'avantage de la vérification que du développement à proprement parler.

Le second point est la montée en ordre qui a été mise de côté dans la fin de ces travaux. Le choix du schéma a en grande partie été motivé par sa faculté à pouvoir être couplée à des méthodes d'ordre élevé, et pourtant il n'en est que très peu question dans ce rapport. De plus, un certain temps a été consacré à la poursuite de cet objectif -ordre très élevé à l'aide d'un schéma WENO, ou au moins l'ordre 2 en 3D-, mais il a été jugé préférable de favoriser la réalisation du code 3D pour un système bi- M_1 . Une amélioration significative de ces codes consisterait donc à intégrer des méthodes d'ordre élevé, pour tirer profit des capacités du schéma numérique.

Un autre point d'importance méritant d'être exploré dans de futurs travaux concerne l'optimisation de code de calcul. Il est précisé dans le cahier des charge de cette étude que cette méthode se doit d'être compétitive en terme de temps de calcul, mais le figure 3.7 prouve que cet objectif peut être mené plus loin. La stratégie d'optimisation de ces différents codes se doit d'être repensée et l'utilisation de l'outil MPI serait bénéfique, tout en permettant de pouvoir travailler sur des maillages de taille plus importante.

Une fois cette méthode mûrie et optimisée, il serait de plus intéressant de comparer plus ample-ment les résultats obtenus avec ceux d'autres codes existants et en utilisation. Les codes SHTRAC et Termivox sont notamment disponibles au LCTS et au CEA pour réaliser des calcul d'homogénéisation stationnaire ou résoudre des problèmes thermiques instationnaires. Il serait de plus intéressant de rejoindre l'initiative portée par le GDR Tamaris de la réalisation d'un benchmark

commun pour les codes de calculs thermiques. Enfin, pour finaliser la validation de cette méthode, et avant de proposer cette méthode en utilisation au CEA, il sera nécessaire de réaliser des tests d'homogénéisation en condition réelle, et chercher à retrouver la conductivité effective d'un matériau connu à partir d'une image tomographique présentant sa composition.

Chapitre 6

Annexe

6.1 Notations

Symbole	Nom	Unité
\mathcal{A}	Ensemble de définition	-
B	Fonction de distribution de Plank	$\text{W.m}^{-2}.\text{sr}^{-1}.\text{Hz}^{-1}$
c	Célérité de la lumière	m.s^{-1}
c_m	Vitesse du second son	m.s^{-1}
C_v	Capacité thermique spécifique	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
CFL	Valeur de la condition de Courant-Friedrichs-Lewy	-
E	Énergie	J.m^{-3}
E^0	Condition initiale sur l'énergie	J.m^{-3}
E_{\max}	Valeur maximale de l'énergie	J.m^{-3}
E_{left}	Valeur de la condition limite sur l'énergie à gauche du domaine	J.m^{-3}
E_{right}	Valeur de la condition limite sur l'énergie à droite du domaine	J.m^{-3}
\mathcal{F}	Flux numérique	-
F	Flux	W.m^{-2}
F^0	Condition initiale sur le flux	W.m^{-2}
F_{\max}	Valeur de flux maximale	W.m^{-2}
h	Constante de Plank	J.s
I_d	Matrice identité	-
I_m	Intensité matière (spectrale)	$\text{W.m}^{-2}.\text{sr}^{-1}.\text{Hz}^{-1}$
I_R	Intensité radiative (spectrale)	$\text{W.m}^{-2}.\text{sr}^{-1}.\text{Hz}^{-1}$
k	Constante de Boltzman	J.K^{-1}
$L_x/L_y/L_z$	Dimensions du domaine dans les directions $x/y/z$	m
n	Dimension du problème	-
\mathbf{n}	Vecteur normal	-

N_{cells}	Nombre total de mailles	-
$N_x/N_y/N_z$	Nombre de mailles sur les axes $x/y/z$	-
P	Pression	
S	Terme source	-
\mathcal{T}	Maillage	-
T	Température	K
T^0	Condition initiale sur la température	K
T_m	Température matière	K
T_R	Température radiative	K
t_{max}	Temps final de la simulation	s
U	Vecteur des variables	-
v	Vitesse de transport	m.s^{-1}
\mathbf{x}	Vecteur position	m
∂K	Bord de la maille K	-
$\partial\Omega$	Bord du domaine de calcul	-
Δt	Taille d'un pas de temps	s
Δt_{expl}	Pas de temps du schéma explicite équivalent	s
Δt_{init}	Pas de temps initial	s
Δt_{end}	Pas de temps en fin de simulation	s
Δx	Taille du pas d'espace global	m
Δx_K	Taille du pas d'espace local sur la maille K	m
κ	Diffusivité thermique	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
κ_A	Conditionnement de la matrice du problème	-
λ	Conductivité thermique	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
μ	Direction	m
ν	Fréquence	m^{-1}
ρ	Masse volumique	kg.m^{-3}
σ	Opacité	m^{-1}
σ_e	Opacité d'émission	m^{-1}
σ_m	Opacité matière aux phonons	m^{-1}
σ_{R_s}	Opacité de diffusion radiative	m^{-1}
$\sigma_{R_s,i}$	$i^{\text{ème}}$ moment réduit de l'opacité de diffusion	m^{-1}
$\bar{\sigma}_f$	Tenseur de l'opacité de flux	m^{-1}
χ	Facteur d'Eddington	-
Ω	Domaine de calcul	-
$\mathbf{\Omega}$	Vecteur direction	-

6.2 La modélisation du transfert de chaleur conducto-radiatif en France

Nous répertorions dans le tableau 6.2 les travaux récemment publiés dans les laboratoires français concernant des méthodes de modélisation du transfert conducto-radiatif de chaleur. On précise pour chacun certaines caractéristiques d'intérêt pour notre étude, à savoir les types de milieux pris en compte, de maillages utilisés, et si la méthode emploie un couplage "fort" entre conduction et rayonnement. Ces caractéristiques varient en fonction des besoins de chaque travaux en termes d'applications visées et de méthodes numériques employées. Pour améliorer la visibilité du tableau, on définit les abréviations suivantes :

Méthodes :

- MC : Monte-Carlo
- MCS : Monte-Carlo Symbolique
- MEF : Méthode Éléments Finis
- MVF : Méthode Volumes Finis
- MDF : Méthode Différences Finies
- MOD : Méthode des Ordonnés Discrètes
- MR : Méthode de Rosseland
- GD : Galerkin Discontinue
- MA : Marches Aléatoires
- FV : Facteurs de Vue

Type de milieux pris en compte :

- O : Opaque
- T : Transparent
- ST : Semi-transparent

Publication	Laboratoire	Méthode	Maillage	Milieux
[9]	LEMTA	MEF	1D non-struc.	ST
[15]	LEMTA	MVF/MOD/MR	2D struc.	O/ST
[16]	CETHIL	MOD+MC	3D struc.	ST/T
[88]	CEA/DAM	MDF	3D Voxels	O/T
[10]	EM2C	MC	3D Voxels	O/ST/T
[11]	LEMTA	GD	2D non-struc.	O/ST/T
[14]	LTEN	MEF+MOD	3D non-struc.	O/T
[12, 13, 18]	Laplace	MCS	3D non-struc. surfacique	O/ST/T
[17]	IUSTI+LTEN	MVF+FV	3D voxels	O/T
[19, 20]	LCTS	MC/MA	3D voxels	O/ST/T

TABLE 6.2 – Liste et détail des derniers codes de modélisation du transfert de chaleur conducto-radiatif disponible dans les laboratoires français. (En rouge les couplages dits "forts").

6.3 Les schémas AP pour systèmes hyperboliques

Système d'équations	1D/multi-D structuré	2D non-structuré	3D non-structuré
Transport	[89, 90, 91, 27, 92]	[26, 21]	[29]
Télégraphe	[24, 93, 30, 92]	[26, 21]	[29]
Équations de Boltzmann	[94, 95]	–	–
M_1	[93, 96, 97, 92]	[21, 98]	–
P_1	–	[25, 21]	–
Système de Friedrichs	–	[26]	–
Équations d'Euler	[93, 92]	[21, 31]	–
Convection/Diffusion	[93]	–	–
Shallow Water	[27]	–	[28]
Radiative Hydrodynamic sys.	[99]	[21, 98]	–

TABLE 6.3 – Une liste non exhaustive de travaux sur les schémas AP pour système hyperbolique, en fonction du modèle recherché et du type de maillage considéré.

6.4 Conductivité effective radiative λ_R

Plaçons-nous sur un cas 1D en rayonnement pur. On réalise une étude asymptotique du mono- M_1 . Soit $\varepsilon \rightarrow 0$ le terme asymptotique tel qu'on a à l'asymptote $t \rightarrow \frac{t}{\varepsilon}$ et $\sigma \rightarrow \frac{\sigma}{\varepsilon}$:

$$\begin{cases} \varepsilon \partial_t E + \partial_x F = 0 \\ \varepsilon \partial_t F + \partial_x c^2 P = -c \frac{\sigma}{\varepsilon} F \end{cases} \quad (6.1)$$

On définit comme précédemment le développement $F = F^{(0)} + \varepsilon F^{(1)} + \dots$. Les termes prépondérants sont ordonnés selon les puissances de ε . On a donc :

— Pour ε^{-1} :

$$F^{(0)} = 0 \quad (6.2)$$

— Pour ε^0 :

$$F^{(1)} = -\frac{c}{\sigma} \partial_x P \quad (6.3)$$

$$= -\frac{c}{3\sigma} \partial_x E \text{ en 1D et vu } F^{(0)} = 0 \quad (6.4)$$

$$= -\frac{c}{3\sigma} \partial_x (a_R T^4) \text{ à l'équilibre radiatif} \quad (6.5)$$

$$= -\frac{4c}{3\sigma} a_R T^3 \partial_x T \quad (6.6)$$

D'où la définition

$$\lambda_R(T) = \frac{4c}{3\sigma} a_R T^3 \quad (6.7)$$

De la même façon, on peut calculer en conducto-radiatif, sur un cas 1D, la conductivité effective conductive $\lambda_{m,\text{eff}} = \frac{c_m \rho C_v}{3\sigma_{f_m}}$, avec $\sigma_{f_m} = \sigma_m + \sigma_e \frac{c}{c_m} \frac{a_R T_R^4}{\rho C_v T_m}$. La conductivité radiative reste elle inchangée : $\lambda_{R,\text{eff}} = \lambda_R$

6.5 Conductivité effective conducto-radiative λ_{Rm}

De la même façon que dans la partie précédente, on suppose que les deux systèmes M_1 composant le problème sont en limite diffusive. L'objectif est cette fois-ci d'obtenir une valeur de conductivité effective λ_{Rm} à partir du problème décrit dans la partie 4.2.2. On observe donc une distribution de température linéaire sur le domaine suivant la direction x , et des flux limites conductifs et radiatifs dont la somme $F_m^\infty + F_R^\infty$ est constante. La loi de Fourier s'applique, et on a ainsi :

$$F_m^\infty + F_R^\infty = -(\lambda_m \partial_x T(x) + \lambda_R \partial_x T(x)) \quad (6.8)$$

$$= -(\lambda_m \partial_x T(x) + \alpha_R \partial_x T(x)^4), \text{ avec } \alpha_R = \frac{c}{3\sigma_{f_R}} a_R \text{ vu (6.7)} \quad (6.9)$$

En intégrant sur le domaine $[0, L_x]$, et en posant $T(0) = T_l$ et $T(L_x) = T_r$, on obtient :

$$-(F_m^\infty + F_R^\infty)L_x = \lambda_m(T_r - T_l) + \alpha_R(T_r^4 - T_l^4) \quad (6.10)$$

En considérant que $T(x)$ est linéaire, on peut ainsi obtenir une valeur globale de la conductivité effective :

$$\lambda_{Rm} = -\frac{(F_m^\infty + F_R^\infty)L_x}{T_r - T_l} = \lambda_m + \alpha_R \frac{T_r^4 - T_l^4}{T_r - T_l} \quad (6.11)$$

Bibliographie

- [1] E. Venkatapathy, B. Laub, G.J. Hartman, J.O. Arnold, M.J. Wright, and G.A. Allen. Thermal protection system development, testing, and qualification for atmospheric probes and sample return missions : Examples for Saturn, Titan and Stardust-type sample return. *Advances in Space Research*, 44(1) :138 – 150, 2009.
- [2] W. G. Fahrenholtz and G. E. Hilmas. Ultra-high temperature ceramics : Materials for extreme environments. *Scripta Materialia*, 129 :94 – 99, 2017.
- [3] T. Ogasawara, T. Aoki, M. S. Aly-Hassan, Y. Mizokami, and N. Watanabe. Ablation behavior of SiC fiber/carbon matrix composites under simulated atmospheric reentry conditions. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 42(3) :221 – 228, 2011.
- [4] J. Bourret, A. Michot, N. Tessier-Doyen, B. Nait-Ali, F. Pennec, A. Alzina, J. Vicente, C. S. Peyratout, and D. S. Smith. Thermal conductivity of very porous kaolin-based ceramics. *Journal of the American Ceramic Society*, 97(3) :938–944, 2014.
- [5] G. L. Vignoles, A. Turchi, D. Bianchi, P. Blaineau, X. Lamboley, D. Le Quang Huy, C. Levet, O. Caty, and O. Chazot. Ablative and catalytic behavior of carbon-based porous thermal protection materials in nitrogen plasmas. *Carbon*, 134 :376–390, 2018.
- [6] C. Levet. *Ablation de matériaux carbonés sous très haut flux : étude multiphysique de l'interaction matériau/écoulement : Ablation of carbonaceous materials under high flux : multi physics study of the interaction between the material and the flow*. PhD thesis, Bordeaux, 2017.
- [7] S. Kumar, J. Kushwaha, S. Mondal, A. Kumar, R.K. Jain, and G. Rohini Devi. Fabrication and ablation testing of 4D C/C composite at 10 MW/m² heat flux under a plasma arc heater. *Materials Science and Engineering : A*, 566 :102–111, 2013.
- [8] S. Loehle, T. A. Hermann, F. Zander, H. Fulge, and T. Marynowski. Ablation radiation coupling investigation in earth re-entry using plasma wind tunnel experiments. In *11th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*, page 2250, 2014.
- [9] F. Asllanaj. *Etude et analyse numérique des transferts de chaleur couplés par rayonnement et conduction dans les milieux semi-transparentes : application aux milieux fibreux*. PhD thesis, Nancy 1, 2001. Thèse de doctorat dirigée par G. Jeandel et J.-R. Roche, Mécanique et énergétique.

- [10] Y. Dauvois. *Modélisation du transfert thermique couplé conductif et radiatif au sein de milieux fibreux portés à haute température*. PhD thesis, Université Paris-Saclay (ComUE), 2016. Thèse de doctorat dirigée par F. Enguehard, D. Rochais et J. Taine, Énergétique.
- [11] M. Ghattassi, J.R. Roche, F. Asllanaaj, and M. Boutayeb. Galerkin method for solving combined radiative and conductive heat transfer. *International Journal of Thermal Sciences*, 102 :122 – 136, 2016.
- [12] L. Penazzi, S. Blanco, C. Caliot, C. Coustet, M. El Hafi, R. Fournier, M. Galtier, L. Ibarrart, and M. Roger. Toward the use of Symbolic Monte Carlo for conduction-radiation coupling in complex geometries. volume 2019-June, pages 311–318. Begell House Inc., 2019. Conference of 9th International Symposium on Radiative Transfer, RAD 2019.
- [13] L. Penazzi, S. Blanco, C. Caliot, C. Coustet, M. El Hafi, R. Fournier, J. Gautrais, and M. Sans. Transfer function estimation with smc method for combined heat transfer : Insensitivity to detail refinement of complex geometries. pages 383–386. Begell House Inc., 2021. Conference of 8th International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer, CHT 2021.
- [14] M.A. Badri, Y. Favennec, Pierre Jolivet, and Benoit Rousseau. Conductive-radiative heat transfer within SiC-based cellular ceramics at high-temperatures : A discrete-scale finite element analysis. *Finite Elements in Analysis and Design*, 178 :103410, 2020.
- [15] N. Berour. *Modélisation du transfert de chaleur par rayonnement, conduction et convection : Application aux fours verriers*. PhD thesis, Nancy 1, 2005. Thèse de doctorat dirigée par G. Jeandel et D. Lacroix, Mécanique et énergétique.
- [16] J. Randrianalisoa. *Transfert thermique par rayonnement et conduction dans les matériaux poreux micro et nanostructurés : analogie transfert de phonons et de photons*. PhD thesis, Lyon, INSA, 2006. Thèse de doctorat dirigée par D. Baillis, Énergétique et thermique.
- [17] A. Kumar, J. Vicente, J.V. Daurelle, Y. Favennec, and B. Rousseau. A numerical method based on domain decomposition to solve coupled conduction-radiation physics using parallel computing within large porous media. In *Journal of Physics : Conference Series*, volume 2116, page 012057. IOP Publishing, 2021.
- [18] M. Sans, S. Blanco, C. Caliot, M. El-Hafi, O. Farges, R. A. Fournier, and L. Penazzi. Méthode de monte-carlo symbolique pour la caractérisation des propriétés thermiques : application à la méthode flash. In *SFT 2021 - 29ème congrès Français de Thermique*, pages 293–300, 2021.
- [19] G. Vignoles. A hybrid random walk method for the simulation of coupled conduction and linearized radiation transfer at local scale in porous media with opaque solid phases. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 93 :707 – 719, 2016.
- [20] G.L. Vignoles and A. Ortona. Numerical study of effective heat conductivities of foams by coupled conduction and radiation. *International Journal of Thermal Sciences*, 109 :270 – 278, 2016.

- [21] F. Blachère and R. Turpault. An admissibility and asymptotic-preserving scheme for systems of conservation laws with source term on 2D unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 315 :98–123, 2016.
- [22] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Finite volume methods. *Handbook of numerical analysis*, 7 :713–1018, 2000.
- [23] V. V. Rusanov. The calculation of the interaction of non-stationary shock waves with barriers. *Zhurnal Vychislitel'noi Matematiki i Matematicheskoi Fiziki*, 1(2) :267–279, 1961.
- [24] S. Jin. Efficient asymptotic-preserving (AP) schemes for some multiscale kinetic equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 21(2) :441–454, 1999.
- [25] C. Buet, B. Després, and E. Franck. Design of asymptotic preserving finite volume schemes for the hyperbolic heat equation on unstructured meshes. *Numerische Mathematik*, 122(2) :227–278, 2012.
- [26] E. Franck, C. Buet, and B. Després. Asymptotic preserving finite volumes discretization for non-linear moment model on unstructured meshes. In *Finite Volumes for Complex Applications VI Problems & Perspectives*, pages 467–474, Berlin, Heidelberg, 2011. Springer Berlin Heidelberg.
- [27] W. Boscheri, M. Tavelli, and L. Pareschi. On the construction of conservative semi-Lagrangian IMEX advection schemes for multiscale time dependent PDEs. *Journal of Scientific Computing*, 90(3) :1–46, 2022.
- [28] S. Busto and M. Dumbser. A staggered semi-implicit hybrid finite volume/finite element scheme for the shallow water equations at all froude numbers. *Applied Numerical Mathematics*, 175 :108–132, 2022.
- [29] P. Anguill, P. Cargo, C. Énaux, P. Hoch, E. Labourasse, and G. Samba. An asymptotic preserving method for the linear transport equation on general meshes. *Journal of Computational Physics*, 450 :110859, 2022.
- [30] C. Chalons and R. Turpault. High-order asymptotic-preserving schemes for linear systems : Application to the goldstein-taylor equations. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 35(4) :1538–1561, 2019.
- [31] F. Blachère, C. Chalons, and R. Turpault. Very high-order asymptotic-preserving schemes for hyperbolic systems of conservation laws with parabolic degeneracy on unstructured meshes. *Computers & Mathematics with Applications*, 87 :41–49, 2021.
- [32] G. Duffa. *Ablative thermal protection systems modeling*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., 2013.
- [33] M. F. Modest and S. Mazumder. *Radiative heat transfer*. Academic press, 2021.
- [34] E. Poloni, F. Bouville, A. L. Schmid, P. I. B. G. B. Pelissari, V. C. Pandolfelli, M. L.C. Sousa, E. Tervoort, G. Christidis, V. Shklover, J. Leuthold, and A. R. Studart. Carbon ablators

- with porosity tailored for aerospace thermal protection during atmospheric re-entry. *Carbon*, 195 :80–91, 2022.
- [35] Y. Kubota, T. Fujita, Y. Kaneda, R. Inoue, and Y. Kogo. Thermal protection performance of porous carbon ablators with three different matrices. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 55(5) :1222–1229, 2018.
- [36] R.W. Fenn, S.A. Clough, W.O. Gallery, R.E. Good, F.X. Kneizys, J.D. Mill, L.S. Rothmann, E.P. Shettle, and F.E. Volz. Handbook of geophysics and the space environment, optical and infrared properties of the atmosphere. *Air Force Geophys. Lab., Hanscom Air Force, Bedford, Mass. : AS Jursa*, 1985.
- [37] Y. Dauvois, D. Rochais, F. Enguehard, and J. Taine. Statistical radiative modeling of a porous medium with semi transparent and transparent phases : Application to a felt of overlapping fibres. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 106 :601–618, 2017.
- [38] L. Dombrovsky, S. Lallich, F. Enguehard, and D. Baillis. An effect of "scattering by absorption" observed in near-infrared properties of nanoporous silica. *Journal of Applied Physics*, 107(8), 2010.
- [39] L. Babout, E. Maire, and R. Fougères. Damage initiation in model metallic materials : X-ray tomography and modelling. *Acta Materialia*, 52(8) :2475–2487, 2004.
- [40] N. Chawla, R.S. Sidhu, and V.V. Ganesh. Three-dimensional visualization and microstructure-based modeling of deformation in particle-reinforced composites. *Acta materialia*, 54(6) :1541–1548, 2006.
- [41] N. Michailidis, F. Stergioudi, H. Omar, and D.N. Tsipas. An image-based reconstruction of the 3D geometry of an Al open-cell foam and FEM modeling of the material response. *Mechanics of Materials*, 42(2) :142–147, 2010.
- [42] S. Torquato. *Random Heterogeneous Materials : Microstructure and Macroscopic Properties*, volume 16. Springer Science & Business Media, 2005.
- [43] A. El Moumen, T. Kanit, A. Imad, and H. El Minor. Computational thermal conductivity in porous materials using homogenization techniques : Numerical and statistical approaches. *Computational Materials Science*, 97 :148–158, 2015.
- [44] W. F. Huebner and W. D. Barfield. *Opacity*. Springer, 2014.
- [45] B. Dubroca and J.-L. Feugeas. Moment closure hierarchy for the radiative transfer equation. In *Inertial fusion sciences and applications 99*. 2000.
- [46] D. Del Sorbo, J.-L. Feugeas, Ph. Nicolai, M. Olazabal-Loumé, B. Dubroca, S. Guisset, M. Touati, and V. Tikhonchuk. Reduced entropic model for studies of multidimensional nonlocal transport in high-energy-density plasmas. *Physics of Plasmas*, 22(8) :082706, 2015.

- [47] H. Bloch, P. Tremblin, M. González, T. Padioleau, and E. Audit. A high-performance and portable asymptotic preserving radiation hydrodynamics code with the M_1 model. *A&A*, 646 :A123, 2021.
- [48] C. Cercignani. The Boltzmann equation. In *The Boltzmann equation and its applications*, pages 40–103. Springer, 1988.
- [49] F. Filbet and S. Jin. A class of asymptotic-preserving schemes for kinetic equations and related problems with stiff sources. *Journal of Computational Physics*, 229(20) :7625–7648, 2010.
- [50] M.L. Williams, D. Ilas, E. Sajo, D.B. Jones, and K.E. Watkins. Deterministic photon transport calculations in general geometry for external beam radiation therapy. *Medical physics*, 30(12) :3183–3195, 2003.
- [51] H. Hensel, R. Iza-Teran, and N. Siedow. Deterministic model for dose calculation in photon radiotherapy. *Physics in Medicine & Biology*, 51(3) :675, 2006.
- [52] R Viskanta. Radiation transfer and interaction of convection with radiation heat transfer. In *Advances in Heat Transfer*, volume 3, pages 175–251. Elsevier, 1966.
- [53] B. Dubroca and J.-L. Feugeas. Etude théorique et numérique d’une hiérarchie de modèles aux moments pour le transfert radiatif. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences - Series I - Mathematics*, 329(10) :915 – 920, 1999.
- [54] G. Chen. *Nanoscale energy transport and conversion : a parallel treatment of electrons, molecules, phonons, and photons*. Oxford university press, 2005.
- [55] B. Dubroca. *Étude de Régimes Microscopiques, Macroscopiques et Transitionnels basés sur des Équations Cinétiques : Modélisation et Approximation Numérique*. Habilitation à diriger des recherches, Université Bordeaux I, Mars 2000.
- [56] H. Grad. On the kinetic theory of rarefied gases. *Communications on pure and applied mathematics*, 2(4) :331–407, 1949.
- [57] C. David Levermore. Moment closure hierarchies for kinetic theories. *Journal of Statistical Physics*, 83 :1021–1065, 1996.
- [58] R. Turpault. Properties and frequential hybridisation of the multigroup M_1 model for radiative transfer. *Nonlinear Analysis : Real World Applications*, 11(4) :2514–2528, 2010.
- [59] Rodolphe Turpault. A consistent multigroup model for radiative transfer and its underlying mean opacities. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 94(3-4) :357–371, 2005.
- [60] J-F Ripoll. An averaged formulation of the M_1 radiation model with mean absorption coefficients and presumed probability density functions for turbulent flows. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 83(3-4) :493–517, 2004.

- [61] B. Dubroca and A. Klar. Half-moment closure for radiative transfer equations. *Journal of Computational Physics*, 180(2) :584–596, 2002.
- [62] A. V. Gusarov, E. Poloni, V. Shklover, A. Sologubenko, J. Leuthold, S. White, and J. Lawson. Radiative transfer in porous carbon-fiber materials for thermal protection systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 144 :118582, 2019.
- [63] C.D. Levermore. Relating Eddington factors to flux limiters. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 31(2) :149–160, 1984.
- [64] L. Gosse. *Computing Qualitatively Correct Approximations of Balance Laws : Exponential-Fit, Well-Balanced and Asymptotic-Preserving*, volume 2. Springer, 01 2013.
- [65] S. Bianchini, B. Hanouzet, and R. Natalini. Asymptotic behavior of smooth solutions for partially dissipative hyperbolic systems with a convex entropy. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 60(11) :1559–1622, 2007.
- [66] S. Rosseland. Note on the absorption of radiation within a star. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 84 :525–528, 1924.
- [67] F. Blachère. *Schémas numériques d'ordre élevé et préservant l'asymptotique pour l'hydrodynamique radiative*. PhD thesis, Nantes, 2016. Thèse de doctorat dirigée par R. Turpault, Mathématiques et leurs interactions.
- [68] R. Turpault. *Modélisation, approximation numérique et application du transfert radiatif en déséquilibre spectral couplé avec l'hydrodynamique*. PhD thesis, Bordeaux 1, 2003. Thèse de doctorat dirigée par P. Charrier, Informatique et mathématiques appliquées.
- [69] A. Harten, P. D. Lax, and B. van Leer. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review*, 25(1) :35–61, 1983.
- [70] C. Chalons and S. Guisset. An antidiffusive HLL scheme for the electronic m_1 model in the diffusion limit. *Multiscale Modeling & Simulation*, 16(2) :991–1016, 2018.
- [71] S. Diot. *La méthode MOOD Multi-dimensional Optimal Order Detection : la première approche a posteriori aux méthodes volumes finis d'ordre très élevé*. PhD thesis, Toulouse 3, 2012. Thèse de doctorat dirigée par S. Clain, et R. Loubère, Mathématiques appliquées.
- [72] G. G. Dahlquist. A special stability problem for linear multistep methods. *BIT Numerical Mathematics*, 3(1) :27–43, 1963.
- [73] T. Barth and D. Jespersen. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. In *27th Aerospace sciences meeting*, page 366, 1989.
- [74] C.W. Shu. *Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*, pages 325–432. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1998.
- [75] B. Hay. *Mesure de la diffusivité thermique par la méthode flash*. Ed. Techniques Ingénieur, 2004.

- [76] Y. Saad. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. *Notes*, 3(2nd Edition) :xviii+528, 2003.
- [77] P. N. Brown and Y. Saad. Hybrid Krylov methods for nonlinear systems of equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 11 :450–481, 1990.
- [78] The Trilinos Project Team. *The Trilinos Project Website*, 2020 (accessed May 22, 2020).
- [79] M. A Heroux, R. A. Bartlett, V. E. Howle, R. J. Hoekstra, J. J. Hu, T. G. Kolda, R. B. Lehoucq, K. R. Long, R. P. Pawlowski, E. T. Phipps, et al. An overview of the Trilinos project. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 31(3) :397–423, 2005.
- [80] S. Balay, S. Abhyankar, M. F. Adams, J. Brown, P. Brune, K. Buschelman, L. Dalcin, A. Dener, V. Eijkhout, W. D. Gropp, D. Karpeyev, D. Kaushik, M. G. Knepley, D. A. May, L. Curfman McInnes, R. Tran Mills, T. Munson, K. Rupp, P. Sanan, B. F. Smith, S. Zampini, H. Zhang, and H. Zhang. PETSc web page. <https://www.mcs.anl.gov/petsc>, 2021.
- [81] D.A. Knoll and D.E. Keyes. Jacobian-free Newton-Krylov methods : a survey of approaches and applications. *Journal of Computational Physics*, 193(2) :357–397, 2004.
- [82] Y. Saad. A flexible inner-outer preconditioned gmres algorithm. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 14(2) :461–469, 1993.
- [83] A. Baux, G. Couégnat, G.L. Vignoles, D. Lasseux, A. Kuhn, C. Carucci, N. Mano, and T.D. Le. Digitization and image-based structure-properties relationship evaluation of a porous gold micro-electrode. *Materials & Design*, 193 :108812, 2020.
- [84] C. Geuzaine and J.F. Remacle. Gmsh : A 3-D finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. *International journal for numerical methods in engineering*, 79(11) :1309–1331, 2009.
- [85] C. Dobrzynski. *MMG3D : User guide*. PhD thesis, INRIA, 2012.
- [86] P. M. Knupp. Algebraic mesh quality metrics. *SIAM journal on scientific computing*, 23(1) :193–218, 2001.
- [87] E. Franck. *Construction et analyse numérique de schémas asymptotic preserving sur maillages non structurés : Application au transport linéaire et aux systèmes de Friedrichs*. PhD thesis, Paris 6, 2012. Thèse de doctorat dirigée par B. Després, Mathématiques appliquées.
- [88] C. Heisel. *Conception et réalisation, par fabrication additive, de matériaux cellulaires architecturés*. PhD thesis, Université de Limoges, 2019.
- [89] S. Jin and C. D. Levermore. Fully-discrete numerical transfer in diffusive regimes. *Transport theory and statistical physics*, 22(6) :739–791, 1993.
- [90] A. Klar. An asymptotic-induced scheme for nonstationary transport equations in the diffusive limit. *SIAM journal on numerical analysis*, 35(3) :1073–1094, 1998.

- [91] E. W. Larsen, J. E. Morel, and W. F. Miller Jr. Asymptotic solutions of numerical transport problems in optically thick, diffusive regimes. *Journal of Computational Physics*, 69(2) :283–324, 1987.
- [92] C. Berthon and R. Turpault. Asymptotic preserving HLL schemes. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 27(6) :1396–1422, 2011.
- [93] S. Jin and C. D. Levermore. Numerical schemes for hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms. *Journal of computational physics*, 126(2) :449–467, 1996.
- [94] A. V. Bobylev and J. Struckmeier. Implicit and iterative methods for the Boltzmann equation. *Transport Theory and Statistical Physics*, 25(2) :175–195, 1996.
- [95] A. Klar. An asymptotic preserving numerical scheme for kinetic equations in the low mach number limit. *SIAM journal on numerical analysis*, 36(5) :1507–1527, 1999.
- [96] C. Buet and B. Despres. Asymptotic preserving and positive schemes for radiation hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 215(2) :717–740, 2006.
- [97] C. Berthon, J. Dubois, B. Dubroca, TH. Nguyen-Bui, and R. Turpault. A free streaming contact preserving scheme for the m_1 model. *Adv. Appl. Math. Mech*, 3 :259–285, 2010.
- [98] H. Bloch. *Development and implementation of numerical schemes for radiation hydrodynamics*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, 2021. Thèse de doctorat dirigée par P. Tremblin, M. González et E. Audit, Astronomie et Astrophysique.
- [99] E. Audit, P. Charrier, J.-P. Chièze, and B. Dubroca. A radiation-hydrodynamics scheme valid from the transport to the diffusion limit. *arXiv preprint astro-ph/0206281*, 2002.

Étude et validation d'une approche cinétique couplée pour la modélisation du transfert multimodal et multi-échelle de chaleur en milieu hétérogène

Résumé : Cette thèse a permis de mettre en application une approche innovante pour modéliser le transfert thermique conducto-radiatif dans un milieu hétérogène. L'idée est de traiter les deux modes de transfert en utilisant un seul solveur numérique basé sur des moments réduits des équations cinétiques. En particulier, le modèle M_1 doit être résolu, et il est impératif d'utiliser un schéma numérique adapté. Plusieurs défis doivent être relevés : (i) le solveur doit pouvoir être utilisé sur des maillages non-structurés pour limiter le nombre de mailles dans la reconstruction du domaine ; (ii) les applications comprennent des milieux hétérogènes, de sorte que les valeurs d'interface et les couches limites potentielles doivent être prises en compte et traitées efficacement ; (iii) le domaine pouvant inclure des matériaux contrastés avec des temps caractéristiques très différents, un tel schéma doit également fonctionner sous une forme implicite, capable de gérer des pas de temps très variables ; (iv) le modèle M_1 modélise correctement le transfert des particules porteuses d'énergie dans les limites de transport et de diffusion, ce qui implique que le schéma numérique utilisé dans le solveur doit préserver non seulement la limite asymptotique mais aussi la transition entre les deux régimes. Pour atteindre ces objectifs, une partie importante de cette étude est basée sur le choix du schéma numérique, dont la principale caractéristique est de préserver la limite asymptotique du modèle M_1 . Cette étude comprend la construction d'un code de calcul Volumes Finis permettant d'obtenir des résultats cohérents et de façon compétitive, selon les critères précédents.

Mots-clés : transfert de chaleur, schémas volumes finis, schémas asymptotic preserving, schémas implicites à grand pas de temps

Study and validation of a coupled kinetic approach for the modeling of multimodal and multiscale heat transfer in heterogeneous media

Abstract: During this thesis, I have been able to develop an innovative method to model radiative/conductive heat transfer in heterogeneous media. The idea is to handle both transfer modes using a single numerical solver based on reduced moments of the kinetic equations. In particular, the M_1 model is needed to be solved, and it is mandatory to use a robust numerical scheme. Several challenges have to be addressed : (i) the solver must be suitable for unstructured grids to restrain the number of cells; (ii) applications include heterogeneous media, so that interface values and potential boundary layers need to be efficiently handled; (iii) as the domain may include contrasting materials with very different characteristic times, such a scheme must also operate in an implicit form, able to handle vastly varying time steps; (iv) transport of energy particles in both free-streaming and diffusive limits are correctly modelled by the M_1 model, and this entails that the numerical scheme used in the solver must preserve not only the asymptotic limit to cope with both regimes. To meet these goals, a major part of this study is based on the choice of the numerical scheme, whose principal characteristic is to be asymptotic-preserving. This study includes the construction of a finite volume code that provides consistent and competitive results, in accordance with the previously specified criteria.

Keywords: heat transfers, finite volumes schemes, asymptotic-preserving schemes, large time-step implicit schemes

Institut de mathématiques de Bordeaux

UMR 5251 Université de Bordeaux, F 33405 Talence, France

Laboratoire de Matériaux Composites Thermostructuraux

UMR CNRS 5801, Université de Bordeaux, CEA, Safran, F 33600 Pessac, France