



HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

de La Rochelle Université

Science & Technologie

Mention: Mathématiques appliquées et applications des mathématiques

Spécialité : **Modélisation, Méthodes numériques, Analyse numérique**

présentée et soutenue publiquement

par

MOHAMED MAHDI TEKITEK

Autour de la méthode de Boltzmann sur réseau à plusieurs temps de relaxation

Asymptotique, conditions aux limites et applications à la mécanique des fluides, la thermique, l'acoustique et traitement d'images.

Soutenue publiquement le 8 janvier 2021 devant le jury composé de :

RÉMI ABGRALL	Rapporteur	Professeur, Université de Zurich, Suisse
CATHERINE CHOQUET	Présidente	Professeure, La Rochelle Université
FRANÇOIS DUBOIS	Examinateur	Professeur, CNAM, Paris
MOHAMED GHIDAOUI	Examinateur	Professeur, HKUST, Hong Kong
BENJAMIN GRAILLE	Rapporteur	MCF HDR, Université Paris Saclay
LI-SHI LUO	Examinateur	Professeur, Old Dominion Université, USA
PIERRE SGAUT	Rapporteur	Professeur, Aix-Marseille Université
EZEDDINE SEDIKI	Examinateur	Professeur, Université Tunis El Manar, Tunisie

REMERCIEMENTS

En premier lieu, je souhaite remercier mes rapporteurs, Rémi Abgrall, Benjamin Graille et Pierre Sagaut pour avoir pris le temps de relire et d'évaluer cette habilitation.

Je tiens également à remercier Catherine Choquet, en tant que directrice de mon laboratoire le MIA, pour avoir accepté de présider mon jury. Je la remercie sincèrement pour l'aide, le soutien et la confiance sur le plan professionnel et humain depuis mon recrutement en 2018.

Le professeurs François Dubois, Mohamed Ghidaoui, Li-Shi Luo et Ezzedine Seddiki m'ont fait l'honneur d'accepter de faire partie de mon jury. Je les en remercie chaleureusement.

Je tiens à remercier très sincèrement les professeurs François Dubois et Pierre Lallemand que j'ai eu la chance de côtoyer depuis mon DEA, il y a plus de dix ans déjà, à l'université Paris-Sud Orsay. A la suite de ma thèse, j'ai eu également l'opportunité et le plaisir de collaborer avec Pierre et François sur des sujets autour de la méthode LBM. Que ces quelques mots puissent leur exprimer la gratitude et la profonde admiration que j'éprouve à leur égard ainsi que toute mon amitié.

Je voudrais remercier tout particulièrement le professeur Michel Berthier sans qui ce travail n'aurait pas été possible. Il a contribué à ma venue à La Rochelle et m'a fait découvrir des nouvelles applications autour des EDP et de l'image. Il a en outre accepté de relire ce mémoire, qui a bénéficié de ses nombreuses remarques. Il m'a fait confiance et beaucoup soutenu sur tous les plans ; pour tout cela je lui dois un immense merci.

Les travaux présentés dans ce mémoire ont été souvent réalisés en collaboration avec d'autres collègues. Les résultats obtenus n'auraient pas été possibles sans eux et je souhaite donc les remercier, en espérant n'avoir oublié personne : Chao-An Lin (Université de Tsing Hua, Hsinshu) pour son invitation à Taiwan, Makram Hamouda (Université de l'Indiana), Sylvain Faure (Université de Paris-Saclay), Roger Temam (Université de l'Indiana) pour son invitation aux USA, Moez Louati (HKUST Hong Kong) et Mohamed Ghidaoui (HKUST Hong Kong) pour son invitation à Hong Kong.

Du côté de l'université de La Rochelle, je remercie les membres du laboratoire MIA, en particulier Christophe Saint-Jean avec lequel j'ai souvent travaillé dans une ambiance très sympathique. Je remercie aussi Bernard, Laurent et Renaud pour les moments agréables partagés autour d'un repas ou d'un café. Je remercie aussi les membres du département mathématiques, pour l'ambiance agréable en particulier Abdallah, Antoine, Catherine, Cyril, Fabienne, Gilles, Laurence, Laurent, Moussa, Nadir, Noel, Rafik et Souleymane. Je remercie aussi les secrétaires, notamment Céline, Roselyne et Isabelle (du DRPI) pour leur gentillesse et efficacité.

Enfin, j'ai une pensée toute particulière pour ma famille en rédigeant ces lignes, surtout mon père Ali, à ma mère Najette et ma femme Nihel. Merci pour votre soutien et votre présence, tout simplement.

A mon père ALI qui nous a quitté...Merci Papa.

SOMMAIRE

Introduction générale	1
Synthèse des travaux	3
1 Introduction	5
2 La méthode LBM à plusieurs temps de relaxation dite MRT	9
3 Equations de la diffusion anisotrope	15
4 Paramètres quartiques/"magiques" et super convergence	23
5 Analyse des conditions aux limites et des transferts au bord	31
6 Applications à la mécanique des fluides et la thermique	43
7 La dissipation de la méthode LBM pour l'acoustique	57
8 La méthode LBM pour la segmentation d'images 3D	75
Bibliographie	99

INTRODUCTION GÉNÉRALE

En vue de l'obtention de l'habilitation à diriger les travaux de recherche, je présente dans ce mémoire mes travaux de recherche effectués après ma thèse de Doctorat jusqu'à mes dernières publications en tant que maître assistant à la Faculté des Sciences de Tunis et maître de conférences contractuel à l'université de La Rochelle.

Ce manuscrit se compose de six chapitres qui sont la synthèse de mes travaux publiés après 2008. Le premier et le deuxième sont une introduction générale de la méthode de Boltzmann sur réseau.

Le troisième chapitre est consacré à l'étude de consistance de la méthode LBM. Il s'agit de dériver les EDP équivalentes (macroscopiques) à partir d'un schéma LBM donné. Ensuite une application de la méthode LBM pour les problèmes de diffusion isotrope et anisotrope est présentée. On présente aussi une méthode pour évaluer le gradient discret et les flux dans le cas de diffusion isotrope et anisotrope. Les résultats sont validés numériquement et les performances de la méthode sont comparées à d'autres méthodes numériques.

Le quatrième chapitre concerne les paramètres quartiques (dits "magiques") pour les conditions aux limites de la méthode LBM. En effet, en utilisant les développements asymptotiques de Taylor (étude de consistance), dans le cas où on utilise un schéma LBM à plusieurs temps de relaxation (Multiple Relaxation Time, MRT), il existe un jeu de paramètres du schéma pour lequel le schéma au bord est exact à l'ordre deux. Ainsi le schéma LBM devient exact pour des solutions polynomiales de degré deux (*i. e.* type Poiseuille) d'où l'appellation "magiques". Ce résultat a été trouvé en premier par Ginzburg et Alder en 1994, en utilisant les développements type Chapman-Enskog.

Le cinquième chapitre traite l'analyse des conditions aux limites type rebond (dites "bounce-back") pour la méthode LBM. Ces conditions aux limites sont utilisées pour imposer une condition de Dirichlet sur la vitesse dans le cas LB pour les fluides et pour imposer une condition type Neumann sur la température dans le cas LB pour la thermique. Ici une nouvelle méthode d'analyse du schéma LB au bord, basée sur des développements asymptotiques de Taylor, est utilisée pour le bounce-back et pour les transferts paroi. Ces développements sont ensuite validés numériquement sur un cas test non trivial.

Le sixième chapitre concerne des applications de la méthode de Boltzmann à la mécanique des fluides et la thermique. En particulier, le problème de la cavité chauffée naturellement est considéré. Pour cela la méthode LBM est utilisée deux fois avec deux populations différentes : une pour modéliser le fluide et une pour modéliser la thermique. Un maillage très fin est utilisé ainsi que des calculs parallèles type "Message-passing-Interface" (MPI) sur CPU et sur carte graphique (GPU), afin de valider numériquement la méthode et de comparer les résultats obtenus aux autres méthodes numériques type spectrales et volumes finis. Ensuite la méthode LBM est utilisée pour modéliser une cavité chauffée naturellement mais avec un coefficient de diffusion thermique non-isotrope.

Le septième chapitre étudie le mécanisme de dissipation de la méthode LBM lors de

la modélisation des ondes acoustiques. En effet le cas test du coup de bélier dans une conduite d'eau est considéré. Ce problème génère une onde (de pression) acoustique qui se propage le long de la conduite. La méthode LBM est utilisée pour modéliser les ondes acoustiques. Les différents cas tests démontrent que la méthode LBM peut être utilisée pour l'acoustique, mais on constate que les ondes à haute fréquences sont dissipées.

Le huitième chapitre présente une application de la méthode LBM au traitement d'image. En effet la méthode est utilisée pour modéliser le terme de diffusion qui apparait dans les EDP de Allen-Cahn. Une des difficultés qui apparait dans ce type d'application à 3 dimensions d'espace est comment régler les différents paramètres du schéma MRT. Sachant que certains de ces paramètres n'apparaissent pas dans les EDP équivalentes (au moins jusqu'à l'ordre deux), il faut bien les fixer sans perdre la stabilité du schéma. Enfin une autre difficulté qui elle est liée à l'application, nous force à choisir une très petite diffusion pour avoir des résultats compétitifs d'identification de contour. L'idée est de choisir un jeu de paramètres LBM qui assure une exactitude du schéma à l'ordre quatre. Ceci a permis de fixer tout les paramètres LBM, en minimisant la diffusion numérique tout en restant stable.

SYNTHÈSE DES TRAVAUX

INTRODUCTION

En 1973, apparaissent les automates cellulaires, les gaz booléens sur réseau proposés par Hardy, de Pazzis et Pomeau [HPP73]. En effet dans cette méthode [FdH87] l'espace, le temps, les vitesses et le nombre de particules présentes à un instant donné en un point donné sont discrets. Ainsi l'évolution continue d'un fluide décrite au niveau mesoscopique via l'équation de Boltzmann [Bo1872]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial t} = Q(f), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad v \in \mathbb{R}^3, t > 0, \quad (1.1)$$

se traduit par deux étapes fondamentales :

- l'étape de propagation : c'est le transport des particules avec leur vitesses discrètes vers les noeuds voisins.
- l'étape de collision : si des particules se rencontrent sur le même noeud, leur nouvelle vitesse/direction sera déterminée par des règles de collisions.

Ainsi on dispose d'un simulateur, très simple de point de vue programmation/algorithme sur ordinateur, pour modéliser les écoulements fluides. Cependant, les automates cellulaires souffrent de plusieurs défauts qui ont limité leur développement : bruit intrinsèque, valeur imposée à la limite des coefficients de transport et non respect de l'invariance de Galilée.

L'idée de la méthode de Boltzmann sur réseau, plus connue par l'acronyme LBM (Lattice Boltzmann Method), apparaît d'abord dans les travaux de Mac Namara & Zanetti [MZ88], à la fin des années quatre-vingt. En effet cette nouvelle idée, consiste à garder un réseau discret, sans perdre le caractère de simplicité de l'algorithme, et à introduire la distribution de la masse (une variable continue) f qui décrit la population moyenne sur un site donné du réseau, ayant une vitesse discrète imposée par le réseau (maillage). Si on note x l'espace, t le temps et (v_j) $0 \leq j \leq J$ les J vitesses discrètes associées au réseau, une forme discrète de l'équation de Boltzmann continue, s'écrit :

$$f_i(x + v_i, t + 1) = f_i(x, t) + Q_i(f)(x, t) \quad (1.2)$$

où x désigne un site du réseau.

Remarques :

- L'approche de Higuera, Succi et Benzi [HSB89], consiste à réécrire l'opérateur de collision Q de l'Eq. (1.2). En effet, on dispose d'une distribution d'équilibre $f_i^{eq}(x, t)$ et d'une matrice de collision S_{ij} qui permet d'écrire le i -ème terme de l'opérateur de collision $Q_i(f)$ sous la forme :

$$Q_i(f) = \sum_{j=0}^J S_{ij}(f_j - f_i^{eq}) \quad (1.3)$$

- Le schéma (1.2) décrit l'évolution entre les instants t et $t+1$, ce qui sous entend que le pas de temps Δt vaut 1 et le pas d'espace Δx vaut aussi 1. Ce choix s'explique par le fait que la communauté des physiciens a gardé des automates cellulaires l'emploi d'un pas de temps et d'un pas d'espace unité.
- L'approche Higuera, Succi et Benzi [HSB89], découle de l'approximation dite BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) de l'opérateur de collision $Q(f)$ de l'équation (1.1) par $\frac{1}{\tau}(f - f^{eq})$ (où τ est un temps caractéristique).

Depuis, ces modèles ont connu un développement intensif et la méthode est maintenant considérée comme un moyen indépendant pour simuler la mécanique des fluides. En effet la figure 1.1 montre la tendance du nombre d'articles publiés relatifs à la méthode LB par année depuis 1990.

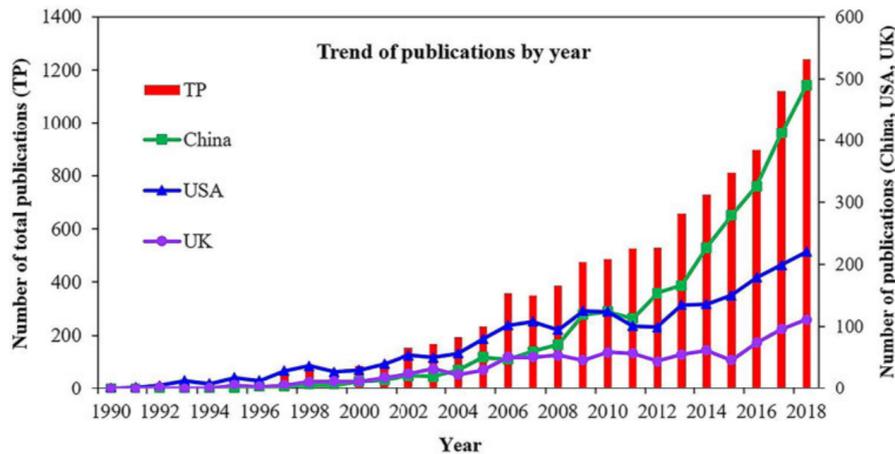


FIGURE 1.1 – Tendance du nombre d'articles publiés relatifs à la méthode LB [LLF20]

Des travaux approfondis [BSV92, CD98a, CD98b, Ra04, RZ97, Su01, ST06, Wo00, YM03, Zh04] couvrent les différents aspects de la théorie et les applications de cette méthode. Le tableau 1.1, montre le 20 premiers domaines où la méthode LBM est la plus utilisée.

Mais la plupart des travaux se limitent à l'opérateur très particulier de collision à un seul temps de relaxation dit BGK (Bhatnagar-Gross-Krook). On note que la méthode LBM est obtenue à partir de la discétisation de l'équation de Boltzmann continue (1.2) pour modéliser des (EDP) Équations aux Dérivées Partielles (équation de la chaleur, Naviers-Stokes, etc. . .). Mais, ici se cache une des difficulté majeur de cette méthode, qui est relativement très simple de point de vue algorithmique, mais demande beaucoup de travail pour comprendre ce qu'on est en train de résoudre réellement (la vraie EDP macroscopique). C'est à dire, il faut faire des calculs de consistance, a priori, de la méthode LBM pour comprendre ce qu'on est en train de résoudre réellement à l'échelle macroscopique. Enfin, on ne dispose pas, aujourd'hui de théorème de convergence de la méthode LBM. En effet il n'existe pas de preuve/théorème de stabilité de la méthode que dans des cas particuliers simples en une dimension d'espace.

Depuis 2008, après la soutenance de ma thèse de doctorat, je me suis intéressé, dans un premier lieu, à des aspects théoriques de la méthode du type consistance et équations macroscopiques équivalentes. Cela a permis une meilleure compréhension de la méthode LBM, de développer aussi un outil d'étude des conditions aux limites et d'avoir de nouveaux résultats. Dans un deuxième lieu, j'ai aussi appliqué la méthode

Rank	Research area	TP	TPR%	TC	ACPP
1	Mechanics	2515	27.02	49673	19.75
2	Physics, Mathematical	1860	19.98	62225	33.45
3	Physics, Fluids & Plasmas	1583	17.01	56481	35.68
4	Computer Science, Interdisciplinary Applications	1367	14.69	31129	22.77
5	Thermodynamics	1236	13.28	20939	16.94
6	Engineering, Mechanical	1058	11.37	17298	16.35
7	Physics, Multidisciplinary	806	8.66	21299	26.43
8	Engineering, Chemical	711	7.64	15993	22.49
9	Chemistry, Physical	582	6.25	13123	22.55
10	Materials Science, Multidisciplinary	532	5.72	9847	18.51
11	Mathematics, Applied	493	5.30	6572	13.33
12	Mathematics, Interdisciplinary Applications	408	4.38	5458	13.38
13	Energy & Fuels	357	3.83	8236	23.07
14	Physics, Applied	318	3.42	3831	12.05
15	Engineering, Multidisciplinary	290	3.12	3112	10.73
16	Water Resources	239	2.57	5892	24.65
17	Physics, Atomic, Molecular & Chemical	199	2.14	6277	31.54
18	Nanoscience & Nanotechnology	192	2.06	2738	14.26
19	Physics, Condensed Matter	172	1.85	2638	15.34
20	Multidisciplinary Sciences	167	1.79	3885	23.26

TP total papers, *TPR%* the percentage of papers of journals in total publications, *TC* total citations, *ACPP* average citations per publication.

TABLE 1.1 – Les 20 premiers domaines de recherche qui contribuent à la recherche scientifique utilisant la méthode LB. [LLF20]

LBM pour des problèmes suivants : diffusion anisotrope, convection naturel dans une cavité chauffée, acoustique et traitement d'images.

LA MÉTHODE LBM À PLUSIEURS TEMPS DE RELAXATION DITE MRT

On va rappeler ici le schéma de Boltzmann sur réseau [Du07] (à plusieurs temps de relaxation dit MRT) de la façon la plus générale. En particulier, en gardant un pas de discrétisation d'espace Δx et de temps Δt quelconques, alors qu'ils sont figés à la valeur unité (*i.e.* $\Delta x = \Delta t = 1$) dans les traitements usuels des physiciens.

Notations : Soit Ω un domaine borné de \mathbb{R}^d et \mathcal{L} un maillage régulier de pas $\Delta x > 0$. On note $\mathcal{L}^0 = \{x_i \in (\Delta x \mathbb{Z})^d, 1 \leq i \leq K\}$ l'ensemble des K sommets ou sites (éléments géométriques de dimension zéro) et \mathcal{L}^1 l'ensemble des arêtes (éléments géométriques de dimension un) qui joignent les éléments de \mathcal{L}^0 .

Soit $x \in \mathcal{L}^0$, on définit l'ensemble V_x des voisins du sommet x . On a alors : $V_x = \{y_j \in \mathcal{L}^0; y_j = x + e_j \Delta x; 0 \leq j \leq J\}$, où J est le nombre de sommets voisins directs de x , et les e_j sont des vecteurs donnés de \mathbb{R}^d .

On suppose que le nombre de voisins J est fini et indépendant du sommet x . Ainsi pour tout sommet $x \in \mathcal{L}^0$, on a pour tout $j \in \{1, 2, \dots, J\}$, $x + e_j \Delta x = y_j \in \mathcal{L}^0$. On suppose aussi qu'on a des propriétés de symétrie centrale par rapport au sommet x :

$$\begin{aligned} e_0 &= 0 \\ \forall j \in \{1, 2, \dots, J\}, \exists \sigma(j) \in \{1, 2, \dots, J\}; e_{\sigma(j)} &= -e_j. \end{aligned}$$

On cite ici quelques exemples de réseau régulier :

- Le modèle D1Q3 modèle monodimensionnel à 3 vitesses discrètes (*i.e.* $J=2$). Les vecteurs e_j sont donnés par : $e_0 = (0, 0)$, $e_1 = (1, 0)$, $e_2 = (-1, 0)$, (voir Fig. 1).

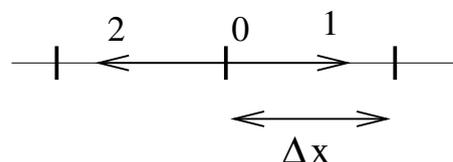


FIGURE 2.1 – Réseau du modèle D1Q3

- Le modèle D2Q9 est un modèle bidimensionnel à 9 vitesses discrètes (*i.e.* $J = 8$). Les

vecteurs e_j sont donnés par (voir Fig. 2.2) :

$$\begin{aligned} e_0 &= (0, 0), \\ e_{1,3}, e_{2,4} &= (\pm 1, 0), (0, \pm 1), \\ e_{5,6,7,8} &= (\pm 1, \pm 1). \end{aligned} \quad (2.1)$$

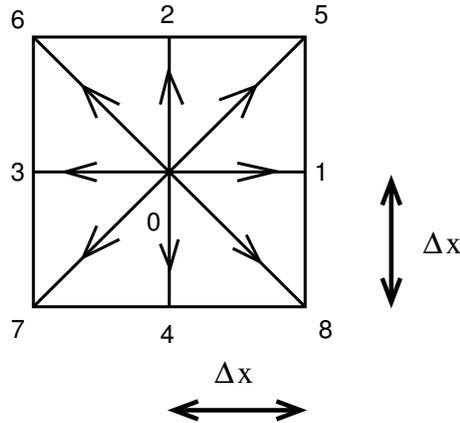


FIGURE 2.2 – Réseau du modèle D2Q9

• Le modèle D3Q19 [dHGM02] tridimensionnel à 19 vitesses discrètes (*i.e.* $J = 18$). Les vecteurs c_j sont donnés par (voir Fig. 2.3) :

$$\begin{aligned} c_0 &= (0, 0, 0), \\ c_{1,2}, c_{3,4}, c_{5,6} &= (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1), \\ c_{7,\dots,10}, c_{11,\dots,14}, c_{15,\dots,18} &= (\pm 1, \pm 1, 0), (0, \pm 1, \pm 1), (\pm 1, 0, \pm 1). \end{aligned}$$

Soit $\Delta t > 0$ un pas de temps fixe. On définit une échelle de vitesse :

$$\lambda \equiv \frac{\Delta x}{\Delta t}. \quad (2.2)$$

On introduit alors les vitesses discrètes définies par :

$$v_j = \lambda e_j, \quad 0 \leq j \leq J.$$

Ainsi si x est un nœud du réseau, alors le point $x + \Delta t v_j$ est un nœud du réseau :

$$x \in \mathcal{L}^0 \implies x + \Delta t v_j \in \mathcal{L}^0, \quad \forall j = 1, 2, \dots, J.$$

On note que l'ensemble V_x des voisins du nœud x contient $J + 1$ voisins : En effet, il y a les J voisins directs associés aux vitesses v_j , $1 \leq j \leq J$ et le nœud x lui même associé à la vitesse discrète nulle v_0 .

Le schéma LBM :

Le schéma LBM décrit la distribution des particules $f_j(x_i, t)$ en x_i de vitesse v_j à l'instant t . En chaque nœud du réseau, on dispose de $J + 1$ distributions f_j . L'évolution, en un pas de temps Δt , se compose de deux étapes fondamentales :

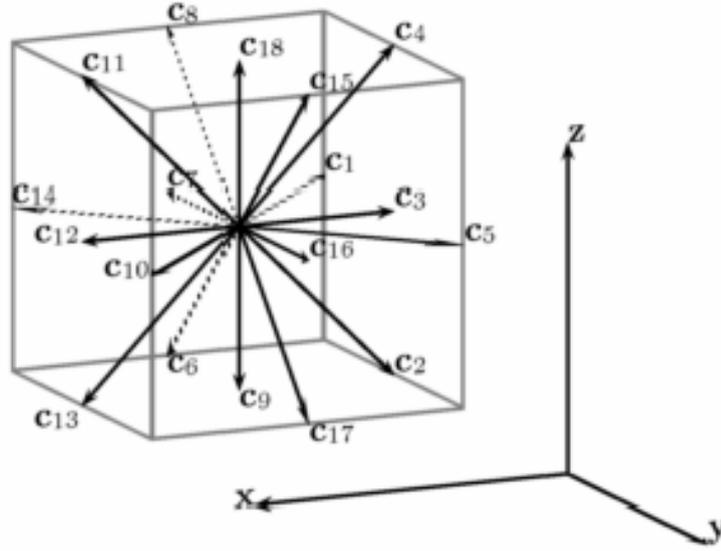


FIGURE 2.3 – Réseau du modèle D3Q19

1. Advection : transport des particules vers les $J + 1$ voisins,
2. Collision : redistribution des f_j dans chaque nœud.

Ces deux étapes sont décrites par l'équation suivante :

$$f_i(x, t + \Delta t) = f_i^*(x - v_i \Delta t, t), \quad 0 \leq i \leq J - 1, \quad x \in \mathcal{L}, \quad (2.3)$$

où l'indice * désigne les quantités après collision. Soit $x_i \in \mathcal{L}^0$ un nœud du réseau, on a alors la définition naturelle de la masse ρ , l'impulsion q et l'énergie cinétique e :

$$\rho(x_i, t) = \sum_{j=0}^J f_j(x_i, t) \quad (2.4)$$

$$q^\alpha(x_i, t) \equiv \rho(x_i, t) u^\alpha(x_i, t) = \sum_{j=0}^J v_j^\alpha f_j(x_i, t), \quad 1 \leq \alpha \leq d, \quad (2.5)$$

$$e(x_i, t) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^J |v_j|^2 f_j(x_i, t), \quad (2.6)$$

où v_j^α sont les composantes cartésiennes des vitesses discrètes du réseau. On introduit l'espace vectoriel $\mathbb{V} \equiv \mathbb{R}^{J+1}$ engendré par les vecteurs $e_j, 0 \leq j \leq J$.

• **Etape de collision** Cette étape modélise l'indice * dans l'équation (2.3), elle est locale en espace. Il est commode de décrire cette étape dans l'espace des moments [dH92]. On introduit les moments m_k comme étant des combinaisons linéaires des f_j , soit :

$$m_k = \sum_{j=0}^J M_{k,j} f_j, \quad 0 \leq k \leq J, \quad (2.7)$$

où $(M_{k,j})_{0 \leq k, j \leq J}$ est une matrice dans $\mathcal{M}_J(\mathbb{R})$. On distingue alors deux types de moments :

• Les moments **conservés** : Le choix du nombre des moments conservés va déterminer le nombre d'équations hydrodynamiques. Pour modéliser les écoulements fluides où

on a $d + 1$ équations scalaires macroscopiques (l'équation scalaire de conservation de masse et l'équation vectorielle de conservation de vitesse), on a besoin de $d + 1$ moments conservés. Ainsi on introduit les variables conservées la masse ρ et l'impulsion q :

$$\begin{aligned}\rho_*(x_i, t) &= \rho(x_i, t) \\ q_*^\alpha(x_i, t) &= q^\alpha(x_i, t), \quad \forall \alpha = 1, 2, \dots, d,\end{aligned}$$

où l'indice * désigne les quantités après collision.

Remarque : Avec $d + 1$ moments conservés, on n'a pas d'équation macroscopique pour l'énergie, qui n'est pas conservée. On parle alors de modèle athermique. Si on ajoute la conservation de l'énergie, on devra utiliser $d + 2$ moments conservés et on obtiendra $d + 2$ équations macroscopiques (e. g. modèle avec effets thermiques [dH92]). Dans le cas du problème d'advection-diffusion d'une quantité scalaire (e.g. équation de la chaleur), où on a une seule équation macroscopique, on a seulement un scalaire ρ qui est conservé au cours de l'étape de collision.

On définit le vecteur W composé par les moments conservés :

$$W(x, t) = (\rho(x, t), q^1(x, t), \dots, q^d(x, t)). \quad (2.8)$$

Pour $0 \leq k \leq d$, on prend les m_k identiques aux moments conservés :

$$m_0 \equiv \rho, \quad m_\alpha \equiv q^\alpha, \quad 1 \leq \alpha \leq d.$$

Ainsi les $d + 1$ lignes de la matrice $M = (M_{k,j})_{0 \leq k, j \leq J}$ sont fixées :

$$M_{0,j} = 1, \quad M_{\alpha,j} = v_j^\alpha, \quad 0 \leq j \leq J, \quad 1 \leq \alpha \leq d. \quad (2.9)$$

• Les moments **non-conservés** : On suppose que les moments non-conservés relaxent linéairement vers leur valeur d'équilibre :

$$\frac{d}{dt}(m_k - m_k^{eq}) + \frac{1}{\tau_k}(m_k - m_k^{eq}) = 0, \quad d + 1 \leq k \leq J,$$

où τ_k et m_k^{eq} sont respectivement le temps de relaxation et la valeur d'équilibre du moment m_k . Les moments à l'équilibre m_k^{eq} , $d + 1 \leq k \leq J$ sont fonction des moments conservés :

$$m_k^{eq} \equiv \Psi_k(W), \quad d + 1 \leq k \leq J. \quad (2.10)$$

Pour les moments conservés (i.e. $k \leq d$), on a :

$$m_k^{eq} \equiv m_k, \quad 0 \leq k \leq d. \quad (2.11)$$

En utilisant le schéma d'Euler explicite pour l'évolution des m_k par collision, on trouve :

$$m_k^*(x, t) = (1 - s_k)m_k(x, t) + s_k m_k^{eq}(x, t), \quad d + 1 \leq k \leq J, \quad (2.12)$$

où $s_k \equiv \frac{\Delta t}{\tau_k}$ est le rapport entre le pas de temps Δt et le temps de relaxation τ_k . On remarque ici qu'on a la condition naturelle de stabilité du schéma d'Euler explicite [St86] :

$$0 \leq \Delta t \leq 2\tau_k.$$

On suppose alors que les taux de relaxation vérifient :

$$0 < s_k \leq 2, \quad d + 1 \leq k \leq J.$$

On choisit les moments m_k , sous la contrainte que la matrice $M = (M_{k,j})_{0 \leq k, j \leq J}$ est inversible. Ainsi on définit l'espace des moments \mathbb{M} en bijection avec l'espace \mathbb{V} .

$$\begin{aligned} \mathcal{M} : \quad \mathbb{V} &\quad \rightarrow \quad \mathbb{M} \\ f = (f_0, f_1, \dots, f_J) &\quad \mapsto \quad \mathcal{M}(f) = M.f = m = (m_0, m_1, \dots, m_J), \end{aligned} \quad (2.13)$$

Pour une valeur donnée des moments m_k , on peut calculer la distribution f correspondante :

$$f_j = \sum_{k=0}^J (M^{-1})_{j,k} m_k, \quad 0 \leq j \leq J,$$

où $(M^{-1})_{j,k}$ est la matrice inverse de la matrice M .

Pour une distribution donnée f , on calcule les f^* après collision de la manière suivante : On passe à l'espace des moments \mathbb{M} :

$$m_k = \sum_{j=0}^J (M)_{k,j} f_j,$$

ensuite on applique (2.12), et finalement on revient à l'espace des \mathbb{V} :

$$f_j^* = \sum_{k=0}^J (M^{-1})_{j,k} m_k^*, \quad 0 \leq j \leq J,$$

• **Etape d'advection** Cette étape décrit le déplacement des particules de vitesse v_j du nœud $x_i \in \mathcal{L}^0$ vers le $j^{\text{ème}}$ voisin $x_i + v_j \Delta t \in \mathcal{L}^0$. La densité $f_j(x_i + v_j \Delta t, t + \Delta t)$ est égale à la densité collisionnée $f_j^*(x_i, t)$ du nœud x_i au temps t :

$$f_j(x_i + v_j \Delta t, t + \Delta t) = f_j^*(x_i, t), \quad 0 \leq j \leq J. \quad (2.14)$$

On peut interpréter le schéma de transport (2.14) comme un schéma décentré amont pour l'équation d'advection :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_j f = 0, \quad 0 \leq j \leq J,$$

avec un nombre de Courant-Friedrichs-Lewy égal à l'unité. Il est classique [St86] de voir que cette étape est exacte.

CONSISTANCE ET ÉQUATIONS ÉQUIVALENTES

Dans mes travaux, l'étude théorique de consistance de la méthode LBM est basée sur un développement de Taylor générique à l'aide de la méthode de l'équation aux dérivées partielles équivalente. Cette méthode est proposée par Dubois en 2005 (voir [Du07, Du08a]). Elle permet d'obtenir de manière formelle un développement de type "Chapman-Enskog" [CC70] du schéma où le petit paramètre est simplement le pas de discrétisation. A l'ordre zéro, le gaz sur réseau est à l'équilibre thermodynamique, à l'ordre un, il vérifie les équations d'Euler de la dynamique des gaz et à l'ordre deux les équations de Navier Stokes. Les ordres supérieurs permettent une compréhension de l'effets des paramètres non physiques de la méthode LBM et d'améliorer l'ordre de précision du schéma en volume. On peut aussi appliquer cette méthode de développement de Taylor au schéma au bord pour analyser les différents conditions aux limites.

STABILITÉ

La méthode LBM ne possède pas a priori de propriété de positivité générale et la stabilité de la méthode est en conséquence réduite aux "petites" perturbations autour d'une valeur constante. Toutefois, on peut montrer la stabilité numérique de la méthode [LL00] en utilisant une analyse à un point type Von Neumann, bien sur pour un cas test donnée et pour un jeu de paramètres donné.

EQUATIONS DE LA DIFFUSION ANISOTROPE

Ce chapitre est consacré à la modélisation de la diffusion anisotrope. On montre que la méthode LBM est capable de modéliser des problèmes de type chaleur avec des coefficients de diffusion thermique fortement anisotropes. Les résultats obtenus sur un benchmark sont comparés à d'autres méthodes numériques. L'outil essentiel d'analyse est la méthode développement de Taylor [Du07, Du08a] pour les EDP macroscopiques équivalentes.

EQUATIONS ÉQUIVALENTES

Le schéma de Boltzmann sur réseau est entièrement défini par les relations (2.3) (2.12), (2.10), (2.7) et le vecteur des moments conservés W . On dispose alors d'un grand nombre de paramètres : la géométrie du maillage régulier \mathcal{L}^0 de pas d'espace Δx , le pas de temps Δt , la matrice des moments M , le nombre des moments conservés, les temps de relaxation s_k et les fonctions d'équilibre Ψ_k .

Remarque : On note ici, que le grand nombre de paramètres dont dispose le schéma MRT LBM, est une richesse de la méthode. En effet, LBM avec un seul temps de relaxation (SRT), dit aussi "BGK", est un cas particulier de MRT. En plus parmi ces paramètres sont soit fixés par le problème à modéliser soit libres (*i.e.* ne jouent aucun rôle dans les équations équivalentes d'ordre deux). Ces paramètres libres sont choisis de manière à assurer la stabilité du schéma, augmenter l'ordre de convergence en volume ou améliorer la précision du schéma au bord.

On considère ici le modèle bi-dimensionnel à 9 vitesses (D2Q9). Pour ce modèle on choisit

alors les 9 moments suivants :

$$\begin{aligned}
m_0 &= T = \sum_{i=0}^8 f_i, & m_1 &= \lambda \sum_{i=0}^8 c_i^1 f_i, & m_2 &= \lambda \sum_{i=0}^8 c_i^2 f_i, \\
m_3 &= -4f_0 - \sum_{i=1}^4 f_i + 2 \sum_{i=5}^8 f_i, & m_4 &= 4f_0 - 2 \sum_{i=1}^4 f_i + 2 \sum_{i=5}^8 f_i, \\
m_5 &= 2(f_1 - f_3) + f_5 - f_6 - f_7 + f_8, \\
m_6 &= 2(f_2 - f_4) + f_5 + f_6 - f_7 - f_8, \\
m_7 &= f_1 - f_2 + f_3 - f_4 \quad \text{et} \quad m_8 = f_5 - f_6 + f_7 - f_8,
\end{aligned}$$

où c_i^α est la α -ième composante du vecteur c_i et λ est la vitesse du réseau (voir Eq. (2.2)). On note que ces moments ont un sens physique [LL00] : En effet $m_0 \equiv T$ représente la température (densité), m_1, m_2 sont les flux de chaleur selon les directions x et y , m_3 est l'énergie, m_4 est le carré de l'énergie, m_5, m_6 sont le flux d'énergie selon les directions x et y et m_7, m_8 sont les moments tensoriels d'ordre deux. Pour modéliser l'équation de la chaleur seul le moment m_0 est conservé car on a une seule équation macroscopique scalaire. En ce qui concerne les autres moments (non-conservés) [HCB54], on suppose qu'ils relaxent vers leur valeurs d'équilibres selon l'équation (2.12). La distribution d'équilibre m_k^{eq} des moments non conservés dans l'équation (2.12) déterminera l'équation macroscopique du schéma. En effet en prenant la distribution d'équilibre décrite par : $m_1^{eq} = 0, m_2^{eq} = 0, m_3^{eq} = \alpha T, m_4^{eq} = \beta T, m_5^{eq} = 0, m_6^{eq} = 0, m_7^{eq} = a_{xx}T$ et $m_8^{eq} = a_{xy}T$, et en utilisant les développements de Taylor [Du07] ou bien la méthode de Chapman-Enskog [CC70, FdH87] on obtient l'équation de diffusion suivante à l'ordre deux en Δx :

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \text{div}(K \nabla T) = O(\Delta x)^3. \quad (3.1)$$

où $K = (k_{i,j})_{1 \leq i,j \leq 2}$ est le tenseur de diffusion avec

$$\begin{aligned}
k_{11} &= \frac{\lambda \Delta x}{6} \left(\frac{1}{s_1} - \frac{1}{2} \right) (4 + \alpha + 3a_{xx}), \\
k_{12} &= k_{21} = \frac{\lambda \Delta x}{2} \left(\frac{1}{s_1} + \frac{1}{s_2} - 1 \right) a_{xy}, \\
k_{22} &= \frac{\lambda \Delta x}{6} \left(\frac{1}{s_2} - \frac{1}{2} \right) (4 + \alpha - 3a_{xx}).
\end{aligned}$$

Remarques : L'équation (3.1) montre que LBM, est capable de modéliser une équation de diffusion anisotrope. D'un autre coté on remarque qu'il y a des paramètres LBM qui n'apparaissent pas dans l'équation (3.1). Cela signifie que la méthode dispose de paramètres libres qui n'ont pas d'effet physique et qui peuvent être fixer dans le but de d'assurer la stabilité et/ou d'augmenter l'ordre de précision de la méthode.

Dans le cas où $a_{xx} = a_{xy} = 0$ et $s_1 = s_2 = s$ on obtient l'équation de diffusion isotrope :

$$\frac{\partial T}{\partial t} - K \Delta T = O(\Delta x)^2,$$

où $K \equiv \frac{\lambda \Delta x (4 + \alpha)}{6} \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right)$ est le coefficient de diffusion.

On note que, si on prend $m_1^{eq} = \lambda v_x T$ et $m_2^{eq} = \lambda v_y T$, l'équation équivalente du schéma est l'équation de convection-diffusion [GdH07] :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \nabla T - K \Delta T = O(\Delta x)^2, \quad (3.2)$$

où $v = (v_x, v_y)$ est le champ de vitesse.

CONDITIONS AUX LIMITES

Dans ce paragraphe on s'intéresse aux conditions aux limites pour la méthode LBM. Soit le bord $\partial\Omega$ qui coupe l'arête entre le nœud fluide x_b et le nœud extérieur $x_e \equiv x_b - \Delta x$ (voir la Figure 3.1).

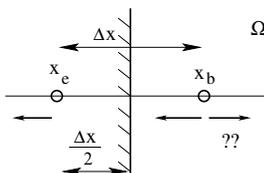


FIGURE 3.1 – Une arête du bord qui coupe le lien entre le nœud x_b et le nœud x_e . Le nœud x_b est un nœud (intérieur) fluide qui a au moins un nœud voisin $x_b + v_i \Delta t$ qui n'est pas fluide. Le nœud x_e est un nœud fictif à l'extérieur du domaine fluide.

À l'instant $t + \Delta t$, on doit définir la distribution inconnue $f_1(x_b, t + \Delta t) = f_1^*(x_e, t)$ qui arrive du nœud x_e . Ainsi ce choix de la distribution va déterminer les conditions aux limites. Ici, on s'intéresse aux conditions limites de type Dirichlet sur le bord $\partial\Omega$ qui coupe le lien entre x_e et x_b en $x_e + \frac{\Delta x}{2}$ (half way boundary condition).

Proposition 1. *Dubois, Lallemand, Tekitek [7]*

Pour imposer la température donnée $T(x_e + \frac{\Delta x}{2})$ sur le bord $\partial\Omega$ dans la configuration de la Figure 3.1 à l'ordre 1 en Δt on applique le schéma suivant :

$$f_1(x_b, t + \Delta t) = -f_3(x_e, t + \Delta t) + \frac{1}{36}(4 - \alpha - 2\beta + 9a_{xx})T(x_e + \frac{\Delta x}{2}).$$

$$f_5(x_b, t + \Delta t) = -f_7(x_e, t + \Delta t) + \frac{1}{36}(4 + \alpha + 2\beta + 9a_{xy})T(x_e + \frac{\Delta x}{2}).$$

$$f_8(x_b, t + \Delta t) = -f_6(x_e, t + \Delta t) + \frac{1}{36}(4 - \alpha - 2\beta - 9a_{xy})T(x_e + \frac{\Delta x}{2}).$$

Remarque : On note que, si on a des conditions aux limites de Dirichlet homogènes (i.e $T(x_e + \Delta x) = 0$) on retrouve les conditions aux limites classiques dites "anti-bounce back" [16].

GRADIENT ET FLUX DE TEMPÉRATURE

La méthode de Boltzmann possède plusieurs paramètres/variables par nœud si on la compare aux méthodes numériques classiques telles que les volumes finis, différences finies, etc . . . Ainsi, la méthode LBM nous procure beaucoup d'informations par nœud sur la solution. En effet pour le problème de diffusion on a : la solution T , la dérivée première et seconde en espace de T pour tous les nœud du réseau. En plus la méthode nous donne aussi les flux le long des interfaces entre les volumes de contrôle K (où K est un carrée de côté Δx et de centre un nœud x).

Proposition 2. *Dubois, Lallemand, Tekitek [7]*

Le gradient de la solution sur le nœud x_i à l'instant t est donné par :

$$\frac{\partial T}{\partial x}(x_i, t) = -\frac{6(s_1[4 + \alpha - 3a_{xx}]m_1(x_i, t) - 6s_2a_{xy}m_2(x_i, t))}{\Delta t \lambda^2(4 + \alpha)^2 - 9(a_{xx}^2 + a_{xy}^2)} + O(\Delta t^2), \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial y}(x_i, t) = \frac{6(6s_1a_{xy}m_1(x_i, t) - s_2[4 + \alpha + 3a_{xx}]m_2(x_i, t))}{\Delta t \lambda^2(4 + \alpha)^2 - 9(a_{xx}^2 + a_{xy}^2)} + O(\Delta t^2). \quad (3.4)$$

Remarque : On peut calculer l'expression du gradient T en utilisant les moments m_5 et m_6 .

Proposition 3. Dubois, Lallemand, Tekitek [1]

Les dérivées secondes en espace de la solution T sur le nœud x_i à l'instant t sont données directement par le schéma en fonction de m_3 , m_7 et m_8 .

En effet on a les développements suivant à l'ordre deux des moments non conservés [Du08b] :

$$\begin{aligned} m_3 &= \alpha\rho + \Delta t^2 \left(\frac{1}{2} + \sigma_3 \right) \lambda^2 \left[\left(\sigma_1 \frac{4 + \alpha + 3a_{xx}}{6} + \sigma_5 \frac{\alpha + \beta - 3a_{xx}}{3} \right) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\sigma_2 \frac{4 + \alpha + 3a_{xx}}{6} + \sigma_6 \frac{\alpha + \beta + 3a_{xx}}{3} \right) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_5 + \sigma_6) a_{xy} \frac{\partial^2 T}{\partial xy} \right], \\ m_7 &= a_{xx}\rho + \Delta t^2 \left(\frac{1}{2} + \sigma_7 \right) \frac{\lambda^2}{3} \left[\left(\sigma_1 \frac{4 + \alpha + 3a_{xx}}{6} - \sigma_5 \frac{\alpha + \beta - 3a_{xx}}{3} \right) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\sigma_6 \frac{\alpha + \beta + 3a_{xx}}{3} - \sigma_2 \frac{4 + \alpha - 3a_{xx}}{6} \right) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + (\sigma_1 - \sigma_2 + \sigma_6 - \sigma_5) a_{xy} \frac{\partial^2 T}{\partial xy} \right], \\ m_8 &= a_{xy}\rho + \Delta t^2 \left(\frac{1}{2} + \sigma_8 \right) \frac{\lambda^2}{3} \left[(2\sigma_2 + \sigma_6) a_{xy} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + (2\sigma_1 + \sigma_5) a_{xy} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \right. \\ &\quad \left. \left(\sigma_1 \frac{4 + \alpha + 3a_{xx}}{3} + \sigma_2 \frac{4 + \alpha - 3a_{xx}}{3} + \sigma_5 \frac{\alpha + \beta - 3a_{xx}}{3} + \sigma_6 \frac{\alpha + \beta + 3a_{xx}}{3} \right) \frac{\partial^2 T}{\partial xy} \right]. \end{aligned}$$

A l'aide d'opérations algébriques élémentaires on obtient l'expression de $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$ et $\frac{\partial^2 T}{\partial xy}$ en fonction de m_3 , m_7 et m_8 .

On note qu'on peut aussi avoir l'expression des dérivées secondes en espace de la solution T en fonction de m_4 , m_7 et m_8 .

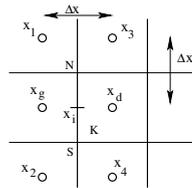


FIGURE 3.2 – Interface (SN).

Le flux à l'interface (SN) entre deux nœuds du réseau x_g et $x_d \equiv x_g + \Delta x$ peut être donné par :

$$\begin{aligned} j_{SN}(x_g + \frac{\Delta x}{2}, t + \Delta t) &= \lambda (f_1(x_d, t + \Delta t) - f_3(x_g, t + \Delta t)) + \\ &\quad + \lambda \Psi_1 (f_5(x_d, t + \Delta t) - f_7(x_2, t + \Delta t) + f_5(x_3, t + \Delta t) - f_7(x_d, t + \Delta t)) + \\ &\quad + \lambda \Psi_2 (f_8(x_d, t + \Delta t) - f_6(x_1, t + \Delta t) + f_8(x_4, t + \Delta t) - f_6(x_d, t + \Delta t)), \end{aligned} \quad (3.5)$$

où Ψ_1 et Ψ_2 sont deux scalaires à déterminer.

Proposition 4. *Dubois, Lallemand, Tekitek [7]*

Flux normal : Il existe Ψ_1 et Ψ_2 tels que la quantité (3.5) vérifie :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x} \int_{SN} \text{div}(\mathbf{K} \cdot \nabla T) \cdot n_{SN} dy &= K_{11} \frac{\partial T}{\partial x}(x_i, t) + K_{12} \frac{\partial T}{\partial y}(x_i, t) + O(\Delta x) = \\ &= -j_{SN}(x_i, t + \Delta t) + O(\Delta x) \end{aligned}$$

Dans le cas d'un problème de diffusion isotrope (i.e. $a_{xx} = a_{yy} = 0$), on trouve $\Psi_1 = \Psi_2 = \frac{1}{2}$.

RÉSULTATS NUMÉRIQUES

• **Test 1** On commence par valider notre schéma en prenant un problème simple 1D suivant :

$$-Ku''(x) = c \quad \text{dans }]0, 1[, \quad u(0) = u(1) = 0.$$

On prend des conditions au bord périodiques en y et "anti-bounce back" en x pour imposer des conditions aux limites de Dirichlet homogènes (voir le Théorème 1). La figure 3.3 montre l'erreur relative ℓ^2 entre la solution exacte $u(x) = 4x(1 - x)$ et la solution obtenue par le schéma LBM D2Q9. La figure montre une convergence numérique d'ordre 2. C'est l'ordre de convergence théorique de la méthode LBM. Cela valide notre travail.

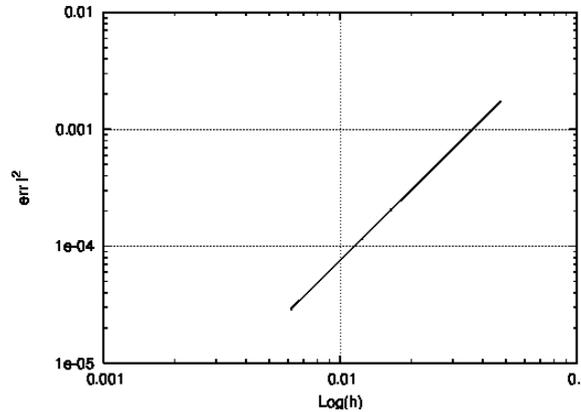


FIGURE 3.3 – erreur relative ℓ^2 v.s Log(h).

• **Test 2 "Oblique flow"** On considère le problème de diffusion anisotrope dit "Ecoulement oblique" ou "Oblique flow" :

$$-\text{div}(\mathbf{K} \nabla u) = 0 \quad \text{in } \Omega =]0, 1[^2, \quad u = \bar{u} \quad \text{on } \partial\Omega. \quad (3.6)$$

où $\mathbf{K} = R_\theta \text{diag}(1, 10^{-3}) R_\theta^{-1}$, R_θ est une rotation d'angle $\theta = 40$ degré et $\bar{u} = 1$ sur $(0, 0.2) \times \{0\} \cup \{0\} \times (0, 0.2)$, 0 sur $(0.8, 1) \times \{1\} \cup \{1\} \times (0.8, 1)$, $\frac{1}{2}$ sur $(0.3, 1) \times \{0\} \cup \{0\} \times (0.3, 1)$, $\frac{1}{2}$ sur $(0, 0.7) \times \{1\} \cup \{1\} \times (0, 0.7)$. Les figures 3.4 et 3.5 montrent l'approximation de la solution par le schéma D2Q9 sur des maillages de taille $(2^{i+1} \times 2^{i+1})$, $i = 2..7$, après convergence (i.e. $2 \cdot 10^6$ itérations), avec $s_1 = 1.3$, $s_2 = 1.8$ et $\beta = 1$ les autres paramètres sont fixés pour avoir \mathbf{K} égale au tenseur de diffusion donné dans (3.6). Pour tenir compte des conditions au bord \bar{u} on utilise le schéma décrit dans la proposition 1.

Cela montre que notre schéma LBM modélise un tenseur de diffusion à forte anisotropie tout en tenant des conditions au bord de Dirichlet discontinues sur la température (voir [2] pour la comparaison avec d'autres méthode numériques).

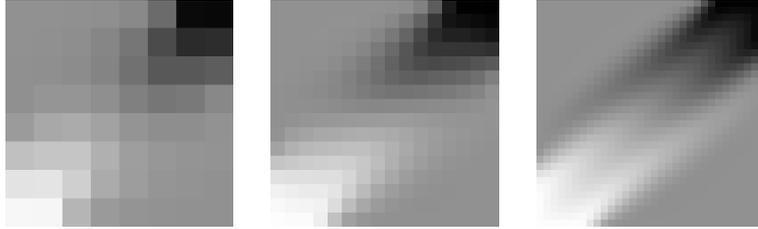


FIGURE 3.4 – Solutions du problème "oblique flow" sur différent maillage de taille $(2^{i+1} \times 2^{i+1})$, $i = 2$ (à gauche), $i = 3$ (centre), $i = 4$ (à droite). L'échelle de gris correspond à une variation linéaire de 0 (noir) à 1 (blanc).



FIGURE 3.5 – Solutions du problème "oblique flow" sur différent maillage de taille $(2^{i+1} \times 2^{i+1})$, $i = 5$ (à gauche), $i = 6$ (centre), $i = 7$ (à droite).

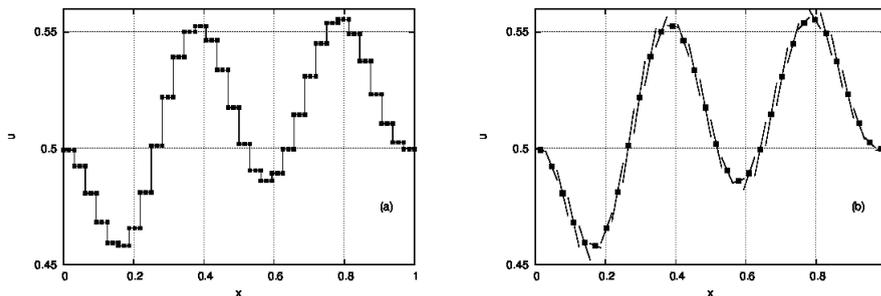


FIGURE 3.6 – Solutions du problème "oblique flow" avec un maillage de taille (32×32) en $y = 17$. (a) Solution vs x au centre et au bord du volume de contrôle K . (b) Solution vs x en utilisant le développement de Taylor au centre du volume de contrôle K où la quantité ∇u est calculée directement par le schéma de Boltzmann.

Enfin la méthode LBM fournit, en plus de la solution approchée, le gradient discret ∇u sans aucun calcul supplémentaire. La figure 3.6 (a) montre l'interpolé de la solution et la figure 3.6 (b) représente la solution en utilisant ∇u qui est directement fourni par le schéma. Cela valide numériquement les formules du gradient de la température données dans la proposition 2.

CONCLUSION

Nous avons montré comment utiliser le schéma Boltzmann sur réseau pour simuler un problème de diffusion anisotrope. On a présenté des résultats de convergence sur un cas test simple. Ensuite on a utilisé la méthode pour un cas test dit "oblique flow" où le tenseur de diffusion est fortement anisotrope. Les résultats obtenus pour ce "benchmark" sont comparés à d'autres méthodes numériques lors du congrès FVCA V, Aussois, 8-13 juin 2008. D'autre part, vu que la méthode LBM possède beaucoup d'inconnues par nœud du réseau (9 inconnues pour le modèle D2Q9) ; cela permet de calculer directement les dérivées premières et deuxièmes en espace de la solution comme des combinaisons linéaires de ces inconnues locales.

On peut retrouver en détails les résultats numériques dans les articles [1, 2] (voir annexe).

PARAMÈTRES QUARTIQUES/"MAGIQUES" ET SUPER CONVERGENCE

Les conditions aux limites sont utilisées pour imposer une vitesse donnée (ou une pression) sur un nœud donné. En général, il existe une différence entre la vitesse théorique imposée au bord et celle mesurée numériquement. Cette différence est due aux erreurs de troncature (ordre de précision) du schéma au bord. Vu que la méthode LBM possède plusieurs paramètres dont certains sont fixés par la physique, d'autres restent libres. Ces paramètres libres peuvent être fixés dans le but d'assurer la stabilité de la méthode et/ou de réduire les erreurs de troncature. Ainsi, dans ce travail, on montre que pour un choix particulier de ces paramètres LB, on obtient un schéma au bord d'ordre deux. C'est à dire la différence entre la vitesse imposée au bord et la vitesse mesurée numériquement est nulle jusqu'à l'ordre deux en Δx . Dans ce cas, la méthode LBM est d'ordre deux en volume et au bord. Cela peut se voir, dans le cas où on considère une solution polynomiale d'ordre deux (quartique type Poiseuille), par une erreur numérique nulle (précision machine). Ainsi, pour ce cas test et pour un choix particulier des paramètres (dits "magiques" par la communauté LB) la méthode est exacte et on a une super convergence. L'outil principal ici, est la méthode de l'équation équivalente [Du08a, Du08b] pour déterminer l'exactitude du schéma au bord pour le problème de Poiseuille. En premier lieu, nous considérons un problème de diffusion 1D et nous montrons que les paramètres "magiques" (*i.e.* quartiques) dépendent du choix de la distribution d'équilibre des moments non conservés. Dans un second lieu, nous considérons un écoulement Poiseuille en 2 dimensions d'espace (2D). Nous montrons que les paramètres "magiques" dépendent aussi de la manière avec laquelle on implémente la force dans le schéma LBM. On note enfin que ces résultats ont été étudiés la première fois pour un écoulement de Poiseuille par Ginzburg et Alder [GA94].

PROBLÈME DE DIFFUSION THERMIQUE 1D

On considère le schéma LBM D1Q3 classique. Les 3 moments $\{m_\ell\}$ sont obtenus comme combinaison linéaire des f_j : La densité $m_0 \equiv \rho \equiv f_0 + f_1 + f_2$, la vitesse $m_1 \equiv q \equiv \lambda(f_1 - f_2)$ et l'énergie $m_2 \equiv \epsilon \equiv \frac{\lambda^2}{2}(f_1 + f_2)$.

- **Premier choix de la matrice des moments M**

Avec ce choix de moments la matrice M est donnée par :

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & -\lambda \\ 0 & \frac{\lambda^2}{2} & \frac{\lambda^2}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Pour modéliser un problème de diffusion, on conserve un seul moment, durant l'étape de collision, à savoir la densité $\rho \equiv T$. Les autres moments relaxent suivant l'équation (2.12) vers leurs valeurs d'équilibres (m_1^{eq}, m_2^{eq}). Ces valeurs vont déterminer l'EDP équivalente. En effet, en prenant le choix suivant :

$$m_1^{eq} = 0 \quad \text{et} \quad m_2^{eq} = \zeta \frac{\lambda^2}{2} \rho \quad (4.2)$$

et en utilisant Taylor [Du07], on trouve l'équation de diffusion à l'ordre deux en Δx :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \Delta t \lambda^2 \sigma_1 \zeta \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = O(\Delta x^2), \quad (4.3)$$

où

$$\sigma_\ell \equiv \left(\frac{1}{s_\ell} - \frac{1}{2} \right), \quad \ell \in \{1, 2\}. \quad (4.4)$$

Le coefficient de diffusion \mathcal{K} est donné par $\Delta t \lambda^2 \sigma_1 \zeta$.

On considère le cas test de Poisson 1D suivant :

$$\begin{cases} -\mathbf{K}u''(x) = c & \text{dans }]0, 1[, \\ u(0) = 0, \\ u(1) = 0. \end{cases} \quad (4.5)$$

On utilise des conditions aux limites de "anti-bounce back" en $x = 0$ et $x = 1$ pour imposer $u(0) = u(1) = 0$:

$$f_1(x_b, t + \Delta t) = -f_3(x_e, t + \Delta t) = -f_3^*(x_b, t),$$

(voir Figure 4.1). Enfin une force en volume (δp) est ajoutée au schéma pour modéliser le terme c du problème (4.5). Ainsi, on peut écrire le schéma de Boltzmann comme suit :

- $\mathbf{m} = M\mathbf{f}$
- $\tilde{m}_0 = m_0 + \frac{\delta p}{2}$
- on mesure les moments
- collision
- $\tilde{m}_0 = m_0 + \frac{\delta p}{2}$
- $\mathbf{f} = M^{-1}\mathbf{m}$
- advection et condition aux limites

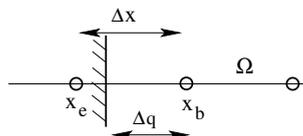


FIGURE 4.1 – Surface du bord qui coupe l'arête entre les nœuds x_b (un nœud fluide) et $x_e \equiv x_b - \Delta x$ (un nœud fictif à l'extérieur du domaine).

La solution exacte du problème (4.5) est donnée par : $u(x) = x(1-x)c/(2K)$. On regarde ici, la position du bord numérique $x_b - \Delta q$ qui se situe entre les nœuds x_b et x_e (voir Figure 4.1). Le bord numérique correspond à la position où la solution numérique obtenue par la méthode LBM u_{LBM} s'annule. On a alors le résultat suivant :

Proposition 5. *Dubois, Lallemand, Tekitek[3]*

Pour le schéma D1Q3 défini par (2.3), (7.3) et (7.5), la solution numérique, calculée par le schéma Boltzmann décrit ci-dessus, s'annule en $\Delta q = \frac{\Delta x}{2}$ (le bord est exactement au milieu) si la condition suivante est satisfaite :

$$\sigma_1 \sigma_2 = \frac{1}{8}.$$

Dans cette configuration le schéma au bord "anti-bounce back" est exact à l'ordre 2 en Δx et le bord est exactement en $\Delta q = \frac{\Delta x}{2}$.

• **Deuxième choix de la matrice des moments M**

On change ici le choix de la matrice des moments du schéma D1Q3 comme suit :

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & -\lambda \\ -2\lambda^2 & \lambda^2 & \lambda^2 \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Les moments et la distribution d'équilibre sont alors donnés par :

$$\begin{aligned} m_0 &= \rho = f_0 + f_1 + f_2, \\ m_1 &= \lambda(f_1 - f_2), & m_1^{eq} &= 0, \\ m_2 &= \lambda^2(-2f_0 + f_1 + f_2), & m_2^{eq} &= \lambda^2 \tilde{\zeta} \rho. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Pour ce choix, la matrice des moments (4.6) est orthogonale. Et l'équation équivalente est donnée par :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \Delta t \lambda^2 \sigma_1 \frac{2 + \tilde{\zeta}}{3} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = O(\Delta t^2). \quad (4.8)$$

Le coefficient de diffusion thermique K est égal à $\Delta t \lambda^2 \sigma_1 \frac{2 + \tilde{\zeta}}{3}$.

Dans cette configuration on a le résultat suivant :

Proposition 6. *Dubois, Lallemand, Tekitek[3]*

Pour le schéma D1Q3 défini par (2.3), (4.6) et (7.5), la solution numérique calculée par le schéma Boltzmann décrit ci-dessus, s'annule en $\Delta q = \frac{\Delta x}{2}$ (le bord est exactement au milieu) si la condition suivante est satisfaite :

$$\sigma_1 \sigma_2 = \frac{3}{8}.$$

Dans cette configuration le schéma au bord "anti-bounce back" est exact à l'ordre 2 en Δx et le bord est exactement en $\Delta q = \frac{\Delta x}{2}$.

La figure 4.2 montre la position réelle (numérique) du bord Δq (là où la solution LBM u_{LBM} s'annule) en fonction du produit des paramètres $\sigma_1 \sigma_2$ pour le problème de diffusion en 1D avec 21 nœuds. On voit que le bord est exactement en $\frac{\Delta x}{2}$ si $\sigma_1 \sigma_2 = \frac{1}{8}$ et si $\sigma_1 \sigma_2 = \frac{3}{8}$ pour le premier choix et deuxième choix de la matrice M , respectivement. Ainsi les résultats numériques correspondent aux résultats théoriques.

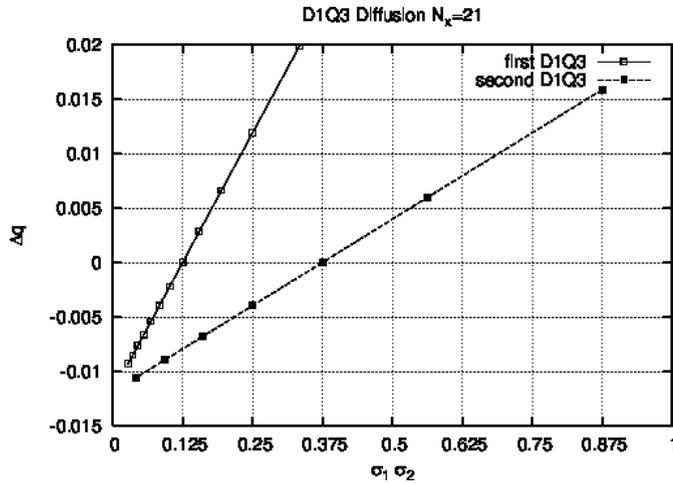


FIGURE 4.2 – La position réelle du bord Δq en fonction du produit $\sigma_1 \sigma_2$.

ÉCOULEMENT DE POISEUILLE 2D

On considère le modèle classique D2Q9 (voir [LL00]). Au début, on étudie un écoulement de Poiseuille avec une force en volume imposée et des conditions au bord périodiques. Ensuite on étudie le même écoulement, sans force imposée en volume, mais avec une différence de pression entre l'entrée et la sortie du tube. L'évolution du schéma de Boltzmann est donnée par l'équation (2.3), et la matrice des moments est donnée par :

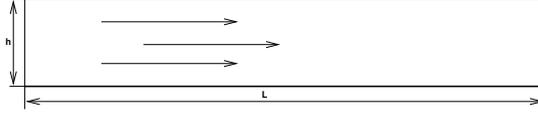
$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & 0 & -\lambda & 0 & \lambda & \lambda & -\lambda & -\lambda \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & -\lambda & \lambda & -\lambda & -\lambda & \lambda \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

L'étape de collision est décrite par (2.12) où la distribution d'équilibre est donnée par :

$$\begin{aligned} m_3^{eq} &= \alpha \rho, & m_4^{eq} &= \beta \rho, \\ m_5^{eq} &= -\frac{j_x}{\lambda}, & m_6^{eq} &= -\frac{j_y}{\lambda}, \\ m_7^{eq} &= 0, & m_8^{eq} &= 0. \end{aligned}$$

• **Description des deux écoulements de Poiseuille avec/sans force en volume :** On considère l'écoulement de Poiseuille dans un domaine (tube) $\Omega = [0, l] \times [0, h]$ (voir la figure 4.3). Soient $\mathbf{u}(t, x, y) = (u, v)$ la vitesse du fluide et p la pression solutions des équations :

$$\begin{cases} -\nu \Delta \mathbf{U} + \frac{1}{\rho} \nabla p = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \end{cases} \quad (4.10)$$

FIGURE 4.3 – Domaine $\Omega = [0, l] \times [0, h]$.

avec les conditions aux bords suivantes :

$$\begin{cases} p(0, y) = \delta p, \\ p(l, y) = -\delta p \\ \mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}(x, h) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (4.11)$$

La solution du problème sans force en volume est donnée par :

$$\begin{cases} u(x, y) = u(y) = Ky(h - y), \\ v(x, y) = 0, \\ P(x, y) = P(x) = K'x + P_0, \end{cases} \quad (4.12)$$

où $K = \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{2\rho\nu}$, K' et P_0 sont des constantes.

On note que le problème décrit par les équations (4.10), (4.11) est équivalent à un écoulement poussé par une force constante \mathbf{f} entre deux murs parallèles où on prend des conditions périodiques à l'entrée et à la sortie du tube (*i.e.* dans la direction Ox). Ainsi le problème (4.10), (4.11) devient :

$$\begin{cases} -\nu\Delta\mathbf{U} = \mathbf{f}, \\ \mathbf{U}(\mathbf{x}, \mathbf{0}) = \mathbf{U}(\mathbf{x}, \mathbf{h}) = \mathbf{0}, \end{cases} \quad (4.13)$$

où $\mathbf{f} = (f_x, 0)$ est une force constante. La solution est donnée par :

$$u(y) = \frac{f_x}{2\nu}y(h - y). \quad (4.14)$$

LBM POUR POISEUILLE AVEC FORCE IMPOSÉE EN VOLUME

On utilise le schéma de Boltzmann D2Q9 pour simuler l'écoulement de Poiseuille décrit par l'équation (4.13). On prend alors $m_3^{eq} = \alpha\rho$, $m_4^{eq} = \beta\rho$, $m_5^{eq} = -\frac{q_x}{\lambda}$, $m_6^{eq} = -\frac{q_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = 0$, $m_8^{eq} = 0$ et $s_7 = s_8$. On fixe $s_8 = \left(\frac{1}{2} + \frac{3\nu}{\lambda^2\Delta t}\right)^{-1}$ pour avoir la même viscosité ν que celle donnée dans (4.13).

Soit un maillage régulier $\mathcal{L}^0 = \{x_{i,j} \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}, 1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y\}$, de paramètre $\Delta x = 1$ du domaine $\Omega = [0, l] \times [0, h]$. On fixe le pas de temps $\Delta t = 1$. L'évolution du schéma de Boltzmann durant un pas temps Δt est décrite comme suit :

A l'instant $t = t_0 = 0$ on initialise $f(x_{i,j}, t_0) = 0$ pour $0 \leq i \leq N_x$ et $0 \leq j \leq N_y$.

- Avec la matrice M on calcule les moments m_k .
- On change la vitesse j_x en ajoutant la moitié de la force f_x :

$$\tilde{j}_x = j_x + \frac{f_x}{2},$$

où \tilde{j}_x est la vitesse avant l'étape de collision.

- On mesure les moments macroscopiques : densité ρ et vitesses j_x, j_y
- On applique l'étape de collision dans l'espace des moments :

$$m_\ell^* = (1 - s_\ell)m_\ell + s_\ell m_\ell^{eq}, \quad 3 \leq \ell \leq 8.$$

- On ajoute la moitié de la force f_x à la vitesse j_x :

$$j_x = \tilde{j}_x + \frac{f_x}{2},$$

où \tilde{j}_x est la vitesse après l'étape de collision.

- On revient à l'espace des f en utilisant la matrice $M^{-1} : f_\alpha^*(x_{i,j}, t_0)$.
- On applique l'étape d'advection pour obtenir les $f_\alpha(x_{k,l}, t_0 + 1)$ pour $0 \leq \alpha \leq 8$, si $x_{k,l} = x_{i,j} + v_\alpha$ est un nœud du maillage (i.e. $x_{k,l} \in \mathcal{L}^0$).
- Pour le nœud du bord $x_{i,j} \in \mathcal{L}_B^0$, on applique :
 - "Bounce back" pour $x_{i,1}$ et x_{i,N_x} où $1 \leq i \leq N_x$:

$$\begin{aligned} f_4(i, 1) &= -f_2(i, 0), \\ f_5(i, 1) &= -f_7(i - 1, 0), \\ f_6(i, 1) &= -f_8(i + 1, 0). \end{aligned}$$

- Conditions périodiques pour $x_{1,j}$ et $x_{N_x,j}$ où $1 \leq j \leq N_y$.

On répète ces étapes jusqu'à convergence à l'état stationnaire (i.e. écoulement de Poiseuille).

Proposition 7. Dubois, Lallemand, Tekitek [3]

Le schéma de Boltzmann sur réseaux D2Q9 décrit par (2.3), (4.9), la solution numérique du problème de Poiseuille s'annule exactement en $\Delta q = \frac{\Delta x}{2}$ (i.e. $j_y = 0$) si la condition :

$$\sigma_5 \sigma_8 = \frac{3}{8}, \quad (4.15)$$

est satisfaite. Dans cette configuration le schéma de "bounce-back" est exact jusqu'à l'ordre 2 en Δx .

LBM POUR POISEUILLE SANS FORCE IMPOSÉE EN VOLUME

On peut aussi modéliser un écoulement de Poiseuille décrit par (4.10), (4.11) (i.e. sans utiliser une force f_x mais en imposant un gradient de pression). Les étapes de l'algorithme du schéma restent les mêmes en prenant $f_x = 0$ et en changeant les conditions aux limites pour les nœuds $x_{1,j}$ et $x_{N_x,j}$ où $1 \leq j \leq N_y$ (i.e. à l'entrée du tube $x = 0$ et la sortie $x = l$) comme suit :

$$\begin{cases} f_1(1, i) = -f_3(0, i) + \frac{4-\alpha-2\beta}{18} \delta p, \\ f_5(1, i) = -f_7(0, i - 1) + \frac{4+2\alpha+\beta}{18} \delta p, \\ f_8(1, i) = -f_6(0, i + 1) + \frac{4+2\alpha+\beta}{18} \delta p. \end{cases}$$

$$\begin{cases} f_3(N_x, i) = -f_3(N_x - 1, i) - \frac{4-\alpha-2\beta}{18} \delta p, \\ f_6(N_x, i) = -f_6(N_x - 1, i) - \frac{4+2\alpha+\beta}{18} \delta p, \\ f_7(N_x, i) = -f_7(N_x - 1, i) - \frac{4+2\alpha+\beta}{18} \delta p. \end{cases}$$

Proposition 8. Dubois, Lallemand, Tekitek [3]

En utilisant le schéma de Boltzmann sur réseau D2Q9, l'écoulement de Poiseuille (sans force en volume) avec une pression imposée à l'entrée et à la sortie du tube, le bord se trouve en $\Delta q = \frac{\Delta x}{2}$ si la condition :

$$\sigma_5 \sigma_8 = -\frac{3}{8} \frac{\alpha + 4}{\alpha + 2\beta - 4}, \quad (4.16)$$

est satisfaite.

La figure 4.4 montre la position numérique du bord Δq pour le problème de Poiseuille en fonction du produit des paramètres $\sigma_1 \sigma_2$ avec un maillage de taille 100 (*i.e.* $N_x = 100$, $N_y = 21$). La figure montre que le bord est exactement en $\frac{\Delta x}{2}$ pour $\sigma_5 \sigma_8 = \frac{3}{16}$ (voir la courbe ■) pour ce choix de paramètres $\alpha = -2, \beta = 1$ et pour $\sigma_1 \sigma_2 = \frac{3}{8}$ (voir la courbe □) pour ce choix de paramètres $\alpha = -2.5, \beta = 2.5$. Ceci valide numériquement les résultats (4.15) et (4.16) dits "magiques" pour la position du bord.

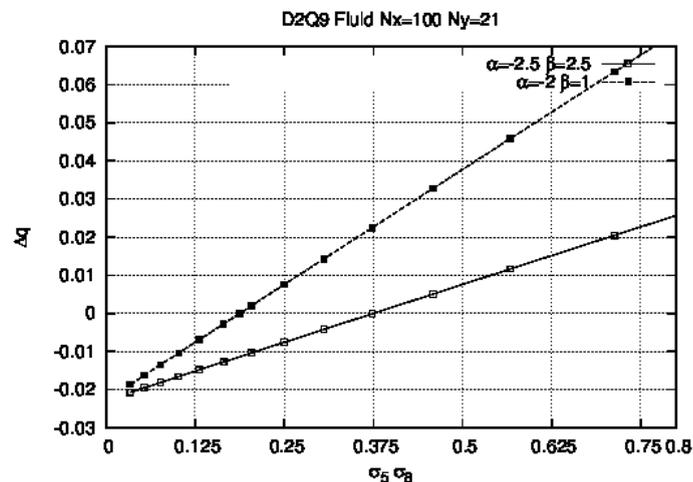


FIGURE 4.4 – Position du bord Δq en fonction du produit des paramètres $\sigma_5 \sigma_8$.

CONCLUSION

On a montré que les paramètres dits "magiques" dépendent non seulement du choix de l'équilibre mais aussi du choix des moments (*i.e.* le choix de la matrice des moments M) et de la manière dont la force est implémentée. Les détails des résultats ainsi que les démonstrations sont publiés dans [3] (Voir annexe).

Dans un travail ultérieur on étudie la dépendance des paramètres "magiques" en fonction de l'implémentation de la force dans les schémas LBM D1Q3, D2Q9 et D2Q3. Ces résultats sont publiés dans les actes du congrès European Workshop on High Order Nonlinear Numerical Methods for Evolutionary PDEs, (HONOM 2013), Bordeaux, France, March 18-22, 2013 [4] (Voir annexe). Enfin on a établi les paramètres "magiques" pour des écoulements simples de type Poiseuille. Pour des écoulements plus compliqués, il faut développer en détails tous les termes qui apparaissent dans les conditions aux limites (Bounce Back, Anti-Bounce Back ...). Ces développements dans le cas général sont traités dans le chapitre suivant et sont publiés dans [6, 13, 16] (Voir annexe).

ANALYSE DES CONDITIONS AUX LIMITES ET DES TRANSFERTS AU BORD

On s'intéresse ici à l'analyse détaillée du schéma au bord type "Bounce-Back" pour imposer des conditions aux limites. Cette analyse consiste à considérer un pas de temps du schéma au bord. Ensuite, un développement de Taylor (type équations équivalentes) des moments conservés au bord permet d'étudier l'exactitude du schéma numérique et de comprendre ce qu'on impose numériquement (réellement). Cette méthode d'analyse au bord est appliquée, dans un premier lieu, au schéma type "Bounce-Back". Ces résultats sont publiés dans [6, 13]. Dans un deuxième temps, on a analysé le schéma de type "Anti bounce back" et ces résultats sont publiés dans [16]. On présente ici la méthode d'analyse, seulement pour un schéma au bord type "Bounce-Back" et dans le cas D2Q9. Une autre application de cette méthode d'analyse au transfert paroi est aussi présentée ici.

ANALYSE DU SCHÉMA AU BORD RÉFLEXION SPÉCULAIRE DIT "BOUNCE-BACK".

Soit x un nœud intérieur, l'évolution du schéma D2Q9 est décrite alors par l'équation (voir Eq. (2.3)) suivante :

$$f_i(x, t + \Delta t) = f_i^*(x - v_i \Delta t, t), \quad 0 \leq i \leq 8,$$

où $*$ désignent les quantités après la collision. Pour ce nœud intérieur x , on a les relations suivantes :

$$\begin{cases} f_2^*(x) - f_4^*(x) &= \frac{2}{3\lambda} j_y(x) + O(\Delta t), \\ f_5^*(x) - f_7^*(x) &= \frac{2}{6\lambda} (j_x + j_y)(x) + O(\Delta t), \\ f_6^*(x) - f_8^*(x) &= \frac{2}{6\lambda} (-j_x + j_y)(x) + O(\Delta t). \end{cases} \quad (5.1)$$

où $\lambda \equiv \frac{\Delta x}{\Delta t}$ est la vitesse du réseau.

Si on considère, maintenant, le bord du bas (voir la figure 5.1) alors les $f_i^*(x - v_i \Delta t)$ pour $i \in \{2, 5, 6\} \equiv \mathcal{B}$ sont inconnues. Le schéma de (réflexion spéculaire) Bounce-back au bord inférieur pour imposer une vitesse donnée (J_x, J_y) est donné par :

$$\begin{cases} f_2(x, t + \Delta t) = f_4^*(x) + \frac{2}{3\lambda} J_y(x, t + \frac{\Delta t}{2}) + O(\Delta t), \\ f_5(x, t + \Delta t) = f_7^*(x) + \frac{2}{6\lambda} (J_x + J_y)(x - \frac{\Delta x}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}) + O(\Delta t), \\ f_6(x, t + \Delta t) = f_8^*(x) + \frac{2}{6\lambda} (-J_x + J_y)(x + \frac{\Delta x}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}) + O(\Delta t). \end{cases} \quad (5.2)$$

Remarque : Le Bounce back consiste à reproduire le schéma LBM pour un nœud intérieur (voir Eq. (5.3)) et suppose que les distributions sont proches de l'équilibre (Voir

[GdH03]).

Le développement asymptotique de Taylor permet d'analyser le schéma de Boltzmann et d'avoir les équations (EDP) équivalentes. L'idée ici consiste à utiliser le même outil pour analyser avec précision le schéma au bord. On réécrit alors le bounce back d'une manière la plus générale :

$$f_j(x, t + \Delta t) = f_\ell^*(x, t) + \sigma_j(x', t'), \quad j \in \mathcal{B}, \quad (5.3)$$

où l'indice ℓ est l'opposé de l'indice j de manière que $v_j + v_\ell = 0$, et $\sigma_j(x', t')$ est une vitesse donnée sur le bord. En introduisant la matrice $T_{j,\ell}$ le schéma de Boltzmann (5.3) s'écrit pour un nœud du bord x :

$$f_j(x, t + \Delta t) = \sum_\ell T_{j,\ell} f_\ell^*(x, t) + \sigma_j + \sum_\ell U_{j,\ell} f_\ell^*(x - v_j \Delta t, t), \quad (5.4)$$

où la matrice $U_{j,\ell} = 1$ si $\ell = j \notin \mathcal{B}$ et $U_{j,\ell} = 0$ sinon. C'est à dire dans la configuration de la Figure 5.2, les matrices T et U sont données par :

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{et } T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Remarque : Si $j \notin \mathcal{B}$ (i. e. le nœud x est intérieur) l'équation (5.4) précédente devient : $f_j(x, t + \Delta t) = f_j^*(x - v_j \Delta t, t)$. On retrouve ainsi l'équation (2.3) du schéma de Boltzmann.

On introduit alors l'espace des moments m_k (voir [dH92]) :

$$m_k = \sum_j M_{kj} f_j.$$

On rappelle que l'étape de collision est donnée par (2.12) :

$$m_l^* = \sum_k (J_0)_{l,k} m_k$$

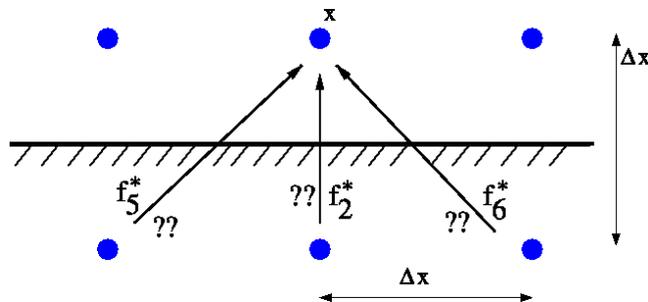


FIGURE 5.1 – Bord du bas.

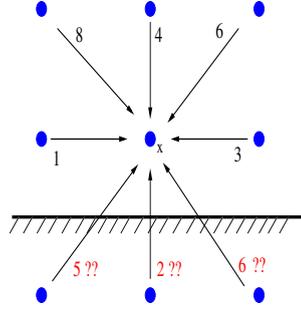


FIGURE 5.2 – Les f_i ($i = 2, 5, 6$) inconnues sont à définir pour avoir un schéma au bord.

où la matrice J_0 est donnée par [LL00]. Pour simplifier, on considère la distribution suivante à l'équilibre : $e^{eq} = \alpha \lambda^2 \rho$, $xx^{eq} = xy^{eq} = 0$, $q_x^{eq} = -\lambda^2 j_x$, $q_y^{eq} = -\lambda^2 j_y$, $e_2^{eq} = \lambda^4 \beta \rho$. On rappelle la matrice des moments M (voir [LL00]).

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & 0 & -\lambda & 0 & \lambda & -\lambda & -\lambda & \lambda \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & -\lambda & \lambda & \lambda & -\lambda & -\lambda \\ -4\lambda^2 & -\lambda^2 & -\lambda^2 & -\lambda^2 & -\lambda^2 & 2\lambda^2 & 2\lambda^2 & 2\lambda^2 & 2\lambda^2 \\ 0 & \lambda^2 & -\lambda^2 & \lambda^2 & -\lambda^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda^2 & -\lambda^2 & \lambda^2 & -\lambda^2 \\ 0 & -2\lambda^3 & 0 & 2\lambda^3 & 0 & \lambda^3 & -\lambda^3 & -\lambda^3 & \lambda^3 \\ 0 & 0 & -2\lambda^3 & 0 & 2\lambda^3 & \lambda^3 & \lambda^3 & -\lambda^3 & -\lambda^3 \\ 4\lambda^4 & -2\lambda^4 & -2\lambda^4 & -2\lambda^4 & -2\lambda^4 & \lambda^4 & \lambda^4 & \lambda^4 & \lambda^4 \end{pmatrix}.$$

La matrice de collision J_0 est donnée par :

$$J_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha s_3 \lambda^2 & 0 & 0 & 1 - s_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -s_7 \lambda^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_7 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -s_7 \lambda^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_7 & 0 \\ \beta s_8 \lambda^4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_8 \end{pmatrix}$$

En utilisant les matrices M , U et T le schéma de Boltzmann pour un nœud du bord x s'écrit :

$$m_k(x, t + \Delta t) = (MTM^{-1})_{k,l} m_l^*(x, t) + (MUM^{-1})_{k,l} m^*(x - v_l \Delta t, t) + M\sigma_j.$$

Avec l'aide de la matrice de collision J_0 on obtient :

$$\begin{cases} m_k(x, t + \Delta t) = (MTM^{-1}J_0)_{k,l} m_l(x, t) \\ \quad + (M_{k,l}U_{l,j}M_{j,p}^{-1}(J_0)_{p,q}) m_q(x - v_l \Delta t, t) \\ \quad + M_{k,l}\sigma_l. \end{cases}$$

Pour obtenir l'équation équivalente du schéma au bord (le bounce-back dans ce cas), on fait le développement de Taylor à l'ordre 0, 1 et 2 dans l'équation ci-dessus.

Proposition 9. Dubois, Lallemand, Tekitek [6]

Ordre zéro Les moments solutions du schéma avec conditions aux limites de bounce back sont solutions à l'ordre zéro de :

$$Km = M\sigma + O(\Delta t),$$

où la matrice $K \equiv I - M(T + U)M^{-1}J_0$. On obtient pour le schéma D2Q9 :

$$m_0 = (\rho, J_x, J_y, \alpha\rho\lambda^2, 0, 0, -\lambda^2 J_x, -\lambda^2 J_y, \beta\rho\lambda^4)^t,$$

où les vitesses J_x et J_y sont données au bord.

$$K = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{\lambda} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2-s_7}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-s_7}{3\lambda^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -s_3 \alpha \lambda^2 & 0 & \lambda(1-s_7) & s_3 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-s_7}{\lambda} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\lambda(1+s_7)}{3} & 0 & s_4 & 0 & 0 & \frac{1-s_7}{3\lambda} & 0 \\ 0 & \frac{\lambda(2-s_7)}{3} & 0 & 0 & 0 & s_4 & \frac{1-s_7}{3\lambda} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2\lambda^2(1+s_7)}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1+2s_7}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\beta s_8 \lambda^4 & 0 & -s_7 \lambda^3 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda(1-s_7) & s_8 \end{pmatrix}$$

La matrice K est singulière. En effet le vecteur $\mu_0 \equiv (1, 0, 0, \alpha\lambda^2, 0, 0, 0, 0, \beta\lambda^4)^t$ est générateur de $\ker K$.

$$K \cdot \mu_0 = 0_{\mathbb{R}^9}$$

Proposition 10. Dubois, Lallemand, Tekitek [6]

Ordre un : Les moments du schéma avec conditions aux limites de bounce back sont solutions à l'ordre un de :

$$Km = M\sigma + \Delta t [M\partial\sigma - \partial_t m - B^\alpha \partial_\alpha m] + O(\Delta t^2)$$

où la matrice $B_{k,p}^\alpha = \sum_{\ell,j,q} M_{k,\ell} U_{\ell,j} v_j^\alpha M_{j,q}^{-1} (J_0)_{q,p}$, et $\alpha = 1, 2$.

On a alors :

$$m = m_0 + \Delta t m_1 + O(\Delta t^2),$$

où m_0 est donné par la proposition précédente et

$$m_1 = K^{-1} \cdot (M\partial\sigma - \partial_t m_0 - B^\alpha \partial_\alpha m_0).$$

On a alors une relation de compatibilité à satisfaire : $\partial_t \rho + \partial_x J_x + \partial_y J_y - \frac{1}{\lambda} \left[\partial_t J_y + \left(\frac{2}{3} + \frac{\alpha}{6} \right) \lambda^2 \partial_y \rho \right] = O(\Delta t)$.

qui est une combinaison linéaire des équations équivalentes du schéma Boltzmann intérieur.

Proposition 11. Dubois, Lallemand, Tekitek [6]

Ordre deux : Les moments du schéma avec conditions aux limites de bounce back sont solutions à l'ordre deux de :

$$\begin{cases} Km = M\sigma + \Delta t [M\partial\sigma - \partial_t m - B^\alpha \partial_\alpha m] + \\ + \frac{1}{2} \Delta t^2 [M\partial^2 \sigma - \partial_t^2 m + \tilde{B}^{\alpha,\beta} \partial_\alpha \partial_\beta m] + O(\Delta t^3). \end{cases}$$

où la matrice $\tilde{B}_{k,\ell}^{\alpha,\beta} = \sum_{k,j,q} M_{k,p} U_{p,j} v_j^\alpha v_j^\beta M_{j,q}^{-1} (J_0)_{q,\ell}$, $1 \leq \alpha, \beta \leq 2$.

On a alors :

$$m = m_0 + \Delta t m_1 + \Delta t^2 m_2 + O(\Delta t^3),$$

où m_0, m_1 sont donnés par les propositions précédentes et

$$m_2 = K^{-1} \cdot \left[-\partial_t m_1 - B^\alpha \partial_\alpha m_1 + \frac{1}{2} \left(M \partial^2 \sigma - \partial_t^2 m_0 + \tilde{B}^{\alpha,\beta} \partial_\alpha \partial_\beta m_0 \right) \right].$$

On a cette fois la relation de compatibilité d'ordre deux :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho + \partial_x J_x + \partial_y J_y - \frac{1}{\lambda} \left[\partial_t J_y + \left(\frac{2}{3} + \frac{\alpha}{6} \right) \lambda^2 \partial_y \rho \right] \\ + \frac{\Delta t}{\lambda} \left[\alpha_{xy} \partial_x \partial_y J_x + \beta_{tt} \partial_t^2 J_y + \beta_{ty} \partial_t \partial_y J_y + \beta_{xx} \partial_x^2 J_y \right. \\ \left. + \beta_{yy} \partial_y^2 J_y + \gamma_{tt} \partial_t^2 \rho + \gamma_{xx} \partial_x^2 \rho + \gamma_{yy} \partial_y^2 \rho \right] = O(\Delta t^2) \end{array} \right.$$

où

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{xy} = -\frac{\lambda}{12} (2\alpha\sigma_3 - \alpha - 10), \quad \beta_{tt} = -\frac{1}{2\lambda}, \quad \beta_{ty} = -\frac{1}{2}, \quad \beta_{xx} = \frac{\lambda}{3} \sigma_4, \\ \beta_{xy} = -\frac{\lambda}{12} (2\alpha\sigma_3 - 4\sigma_4 - \alpha - 10), \quad \gamma_{tt} = \frac{1}{2}, \\ \gamma_{xx} = \frac{\lambda^2}{12} (6\alpha\sigma_7 + 4\beta\sigma_7 + 8\sigma_7 - \alpha - 4), \\ \gamma_{yy} = -\frac{\lambda^2}{36(2\sigma_7+1)} [(6\alpha + 4\beta + 8)\sigma_3\sigma_7 - (6\alpha + 4\beta + 8)\sigma_4\sigma_7 \\ + (6\alpha + 24)\sigma_7 + 3\alpha + 12]. \end{array} \right.$$

Cette relation de compatibilité est toujours vraie, si on suppose que les équations équivalentes du schéma Boltzmann intérieur sont vérifiées à l'ordre deux.

Proposition 12. Dubois, Lallemand, Tekitek [6]

Vitesses à l'ordre deux au nœud proche du bord :

$$\left\{ \begin{array}{l} j_x = J_x + \frac{\Delta x}{2} \lambda \partial_y J_x + \frac{\Delta x}{6} \lambda \sigma_7 (3\alpha + 2\beta + 4) \partial_x \rho + \\ + \Delta x^2 \left[\alpha_{xx} \partial_x^2 J_x + \alpha_{yy} \partial_y^2 J_x + \beta_{xy} \partial_x \partial_y J_y + \gamma_{xy} \partial_x \partial_y \rho \right] + O(\Delta t^3) \\ \\ j_y = J_y + \frac{\Delta x}{2} \lambda \partial_y J_y + \\ + \Delta x^2 \left[\delta_{xy} \partial_x \partial_y J_x + \eta_{xx} \partial_x^2 J_y + \eta_{yy} \partial_y^2 J_y + \zeta_{yy} \partial_y^2 \rho \right] + O(\Delta t^3) \end{array} \right.$$

pour $y = \frac{\Delta x}{2}$, où

$$\begin{aligned} \alpha_{xx} &= \frac{1}{48} (48\beta\sigma_7^2 + 72\alpha\sigma_7^2 + 96\sigma_7^2 + 36\alpha\sigma_7 + 48\sigma_7 + 16\beta\sigma_7\sigma_8 + \\ &+ 24\alpha\sigma_7\sigma_3 + 24\beta\sigma_7 + 16\sigma_4\sigma_7 + 16\sigma_7\sigma_8 - 4\beta - 6 - 7\alpha) \\ \alpha_{yy} &= \frac{1}{48} (12 - 32\sigma_4\sigma_7) \\ \beta_{xy} &= \frac{1}{48} (48\sigma_7^2\beta + 72\alpha\sigma_7^2 + 96\sigma_7^2 + 16\beta\sigma_7\sigma_8 + 16\sigma_7\sigma_8 + 36\alpha\sigma_7 \\ &+ 24\beta\sigma_7 + 24\alpha\sigma_7\sigma_3 + 48\sigma_7 - 48\sigma_4\sigma_7 - 7\alpha - 4\beta) \\ \delta_{xy} &= -\frac{\alpha}{48}; \quad \eta_{xx} = \frac{1}{24}; \quad \eta_{yy} = \frac{1}{48} (8 - \alpha) \\ \zeta_{yy} &= \frac{\lambda}{72(1+2\sigma_7)} (12 + 3\alpha + 6\alpha\sigma_7 + 8\sigma_4\sigma_7 - 8\sigma_7\sigma_3 + 24\sigma_7 + \\ &+ 6\sigma_4\alpha\sigma_7 + 4\sigma_4\beta\sigma_7 - 6\alpha\sigma_7\sigma_3 - 4\beta\sigma_7\sigma_3) \end{aligned}$$

VALIDATION EXPÉRIMENTALE DES DÉVELOPPEMENTS DU BOUNCE BACK

Le but de ce paragraphe est de valider numériquement les coefficients de la Proposition 4 précédente.

Premier cas test : Ecoulement de Poiseuille.

- Avec une force en volume imposée.

Soit le domaine $\Omega = [1, N_x] \times [1, N_y]$. On considère le schéma de Boltzmann D2Q9 MRT classique, où la distribution d'équilibre est $m_3^{eq} = \alpha\rho$, $m_4^{eq} = \beta\rho$, $m_5^{eq} = -\frac{j_x}{\lambda}$, $m_6^{eq} = -\frac{j_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = m_8^{eq} = 0$. Avec les conditions aux limites suivantes : **Périodique** en $i = 1$ (entrée) et $i = N_x$ (sortie) et **Bounce back** en $j = 1$ et $j = N_y$ pour imposer $j_x = 0$. On impose une force en volume uniforme f_x pour modéliser ∇p . Dans cette configuration, en utilisant le développement de j_x dans la proposition 12, on trouve que la vitesse s'annule ($j_x = 0$ numériquement) au bord, en $y = 0$ "exactement" si :

$$\left(\frac{1}{s_4} - \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2}\right) \equiv \sigma_4\sigma_7 = \frac{3}{16}.$$

On retrouve, alors dans ce cas, les résultats des paramètres magiques (quartiques) cf. [GA94] et [3].

- Sans imposée une force en volume.

Ici on implémente un écoulement de Poiseuille en imposant un gradient de pression. On change alors les conditions aux limites comme suit : Anti-Bounce back à l'entrée ($i = 1$) et à la sortie ($i = N_x$) du tube pour imposer respectivement δp et $-\delta p$. Bounce back en bas ($j = 1$) et en haut $j = N_y$ du tube pour imposer $j_x = 0$.

Dans cette configuration, en utilisant le développement de j_x dans la proposition 12, on trouve que la vitesse s'annule ($j_x = 0$ numériquement) au bord, en $y = 0$ "exactement" si :

$$\sigma_4\sigma_7 = -\frac{3}{8} \frac{\alpha + 4}{\alpha + 2\beta - 4}.$$

On retrouve dans ce cas aussi, les résultats des paramètres magiques (quartiques) cf. [GA94] et [3].

Deuxième cas test : Ecoulement "accordéon".

Soit $\Omega =]0, L[\times]0, h[$ un domaine rectangulaire, avec des conditions périodiques en $x = 0$ et $x = L$. Pour les bords $y = 0$ et $y = h$ on impose : $u(x, 0) = u(x, h) = u_0 \cos(2k\pi\frac{x}{L})$, $v(x, 0) = v(x, h) = 0$, $0 < x < L$, où k est un entier. En régime Stokes (linéaire) l'état stationnaire est donné par la fonction de courant ψ : ($u = \frac{\partial\psi}{\partial y}$, $v = -\frac{\partial\psi}{\partial x}$)

$$\psi = f(y) \cos\left(\frac{2k\pi}{L}x\right),$$

avec $f(y) = a \sinh\left(\frac{2k\pi}{L}y\right) + b y \cosh\left(\frac{2k\pi}{L}y\right) + c y \sinh\left(\frac{2k\pi}{L}y\right)$, où $\{a, b, c\}$ sont obtenus grâce aux conditions aux limites $f = 0$ et $\partial_y f = u(x, 0)$ sur les bords $y = 0$ et $y = h$. En utilisant $f(y)$ on obtient la densité qui vaut :

$$\rho(x, y) = \frac{\nu L}{2k\pi c_0^2} \sin\left(\frac{2k\pi}{L}x\right) \left(\frac{d^3 f}{dy^3} - \left(\frac{2k\pi}{L}\right)^2 \frac{df}{dy} \right),$$

où ν est la viscosité et $c_0^2 = \frac{4+\alpha}{6}\lambda^2$ est la vitesse du son. Pour ce cas test, on a une solution exacte où toutes les dérivées partielles de la vitesse ne sont pas nulles. Cela nous permet de valider numériquement tous les termes du développement des moments (j_x et j_y) à l'ordre deux donnés dans la proposition 12. Les figures (5.3) et (5.4) montrent les courbes de différences entre les vitesses au bord obtenus par le schéma Boltzmann et les vitesses (exactes) imposées au bord en fonction du pas d'espace Δx . Les figures montrent des droites dont les pentes sont l'ordre de convergence. Les différentes pentes sont calculées dans le tableau 5.1. Ces ordres sont en concordance avec les résultats théoriques donnés dans la proposition 12.

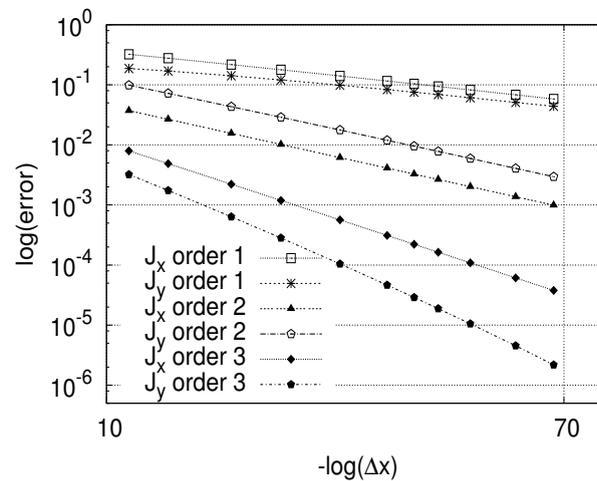


FIGURE 5.3 – Différence entre $j_x - J_x$ et $j_y - J_y$ en fonction de Δx . Ratio $\frac{N_x}{N_y} = 1$.

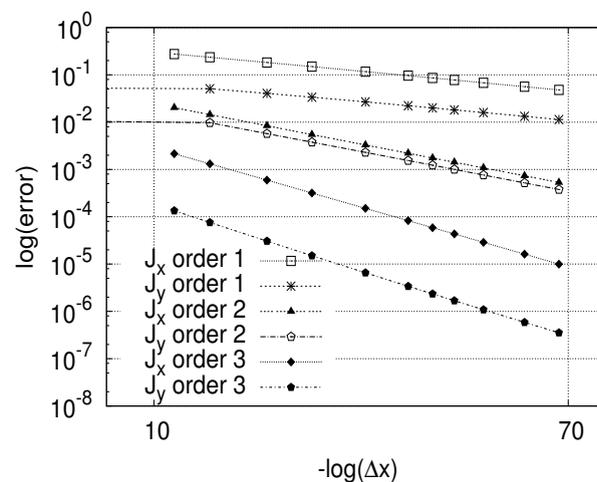


FIGURE 5.4 – Différence entre $j_x - J_x$ et $j_y - J_y$ en fonction de Δx . Ratio $\frac{N_x}{N_y} = 4$.

TRANSFERT DES MOMENTS

- Le but ici est d'estimer les transferts des impulsions à travers la paroi en utilisant l'analyse schéma du bounce back, afin de pouvoir utiliser ces formules/estimations de transfert dans des cas réels tels que la cavité entraînée et de comparer les résultats LB aux autres méthodes numériques (spectrales...).

Pour fixer les idées, on considère la configuration décrite par la figure (5.5). Dans ce cas, sur le nœud x_b du bord les échanges de moments dus à la paroi sont :

$$\begin{cases} In & f_8^*(x_l) - f_7^*(x_r) \\ Out & f_5^*(o_l) - f_6^*(o_r). \end{cases}$$

Ainsi le transfert est donné par :

$$T_C \equiv [f_8^*(x_l) - f_7^*(x_r)] - [f_5^*(o_l) - f_6^*(o_r)]$$

Ratio	Ordre	j_x	j_y	Ratio	Ordre	j_x	j_y
1	1	0.903	0.807	2	1	0.950	0.883
	2	1.988	1.944		2	2.006	1.972
	3	2.935	4.022		3	2.961	3.694
4	1	0.967	0.905	8	1	0.972	0.910
	2	2.014	1.980		2	2.017	1.983
	3	2.974	3.290		3	2.976	3.174

TABLE 5.1 – Ordres de convergence, mesurés en norme ℓ^2 pour les composantes x et y de la vitesse, pour un ratio $R = \{1, 2, 4, 8\}$.

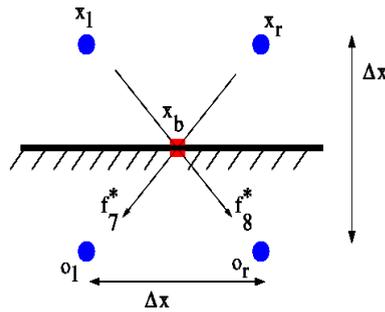


FIGURE 5.5 – Transfert des moments : stencil dit "croix".

En utilisant alors le bounce-back, le transfert des moments devient :

$$T_C = 2 [f_8^*(x_l) - f_7^*(x_r)] + \text{termes imposés au bord.} \quad (5.5)$$

Proposition 13. *Dubois, Lallemand, Tekitek [6]*

Stencil "Croix" : En utilisant le développement de Taylor au bord sur l e transfert des moments T_C (voir Eq. (5.5)) à la paroi à l'ordre deux, avec le schéma bounce back, on a :

$$\left\{ \begin{array}{l} T_C = \frac{1}{3\lambda} J_x + \tau - \frac{\Delta t}{\lambda} \left(\frac{1}{2} + \sigma_4 \right) (\partial_t J_x + c_0^2 \partial_x \rho) + \frac{\Delta t}{6\lambda} \partial_t J_x \\ \quad + \Delta t^2 \left(\theta_{tt} \partial_t^2 J_x + \theta_{ty} \partial_t \partial_y J_x + \theta_{xx} \partial_x^2 J_x + \theta_{yy} \partial_y^2 J_x \right. \\ \quad \left. + \beta_{tx} \partial_t \partial_x J_y + \beta_{xy} \partial_x \partial_y J_y + \kappa_{tx} \partial_t \partial_x \rho + \kappa_{xy} \partial_x \partial_y \rho \right) + O(\Delta t^3) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \theta_{tt} = \frac{1}{24\lambda} (24\sigma_4^2 + 48\sigma_4\sigma_7 + 24\sigma_4 + 24\sigma_7 + 7), \\ \theta_{ty} = -\frac{1}{6}(8\sigma_4^2 + 5\sigma_4 + 1), \theta_{xx} = \frac{1}{6}(\sigma_4 + 1)(2\sigma_4 + 1), \\ \theta_{yy} = \frac{1}{6}\sigma_4(2\sigma_4 + 1), \beta_{tx} = -\frac{1}{6}(\sigma_4 + 1), \beta_{xy} = \frac{1}{6}(2\sigma_4 + 1), \\ \kappa_{tx} = \frac{\lambda}{24}(2\sigma_4 + 1)[2\alpha\sigma_3 + (2\alpha + 8)\sigma_4 - (2\alpha + 4\beta - 8)\sigma_7 + \alpha + 8], \\ \kappa_{xy} = -\frac{\lambda^2}{72(2\sigma_7 + 1)} \left[(12\alpha + 8\beta + 16)\sigma_3\sigma_4\sigma_7 + (28\alpha + 8\beta + 80)\sigma_4^2\sigma_7 + (8\alpha + 32)\sigma_4^2 \right. \\ \quad \left. + (6\alpha + 4\beta + 8)\sigma_3\sigma_7 + (38\alpha + 12\beta + 104)\sigma_4\sigma_7 + (10\alpha + 40)\sigma_4 \right. \\ \quad \left. + (4\alpha + 16)\sigma_7 - \alpha - 2\beta + 4 \right]. \end{array} \right.$$

Dans la configuration décrite par la figure (5.6), on définit le transfert paroi par :

$$T_H(x_i, t) \equiv 2 [f_8^*(x_i, t) - f_7^*(x_i, t)] + \text{termes imposés au bord.}$$

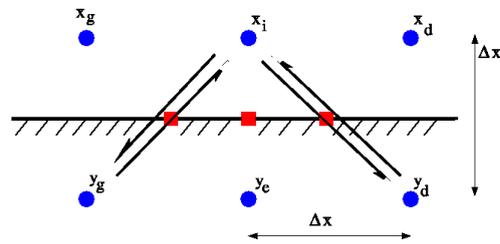


FIGURE 5.6 – Transfert des moments : stencil dit "accent circonflexe".

Proposition 14. *Dubois, Lallemand, Tekitek [6]*

Stencil "accent circonflexe" : *En utilisant les développements de Taylor au nœud du bord x sur le transfert des moments T_H à l'ordre deux, pour un écoulement de Poiseuille, avec le schéma de bounce back, on obtient :*

$$T_H = \Delta t \sigma_4 \frac{\lambda}{3} \frac{\partial j_x}{\partial y} + \Delta t^2 \left[\sigma_4 \frac{\lambda^2}{9} \frac{4+2\alpha+\beta}{4+\alpha} \frac{\partial^2 j_x}{\partial y^2} \right] + O(\Delta t^3).$$

TESTS NUMÉRIQUES

On reprend ici les mêmes cas tests qui ont permis de valider les formules des développements de la vitesse au bord :

- Ecoulement de Poiseuille avec un gradient de pression imposé : La Figure 5.7 montre la différence entre le transfert T_H calculé par Boltzmann et $\tau = \nu \partial_y j_x$ en fonction de Δx . On a alors une droite de pente 1 ce qui valide le premier terme de la proposition 14. La Figure 5.8 valide le deuxième terme de la proposition 14. En effet, dans ce cas, on a une erreur de l'ordre de l'erreur machine.

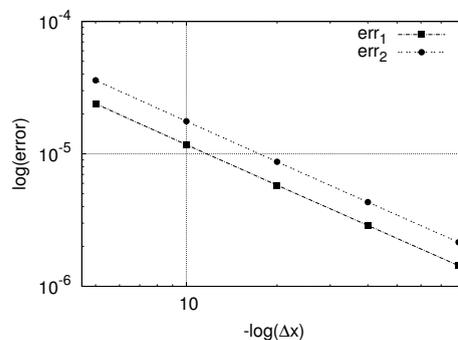


FIGURE 5.7 – Différence entre $T_H = 2 [f_8^*(x_i) - f_7^*(x_i)]$ et $\tau = \nu \partial_y j_x$ vs Δx . \circ pour $\alpha = -2$ et $\beta = 1$, $*$ pour $\alpha = -2.5$ et $\beta = 2.5$.

- Ecoulement "accordéon" : La solution analytique de ce cas test est donnée dans le paragraphe précédent. Les figures (5.9) et (5.10) valident numériquement les différents termes des propositions 13 et 14.

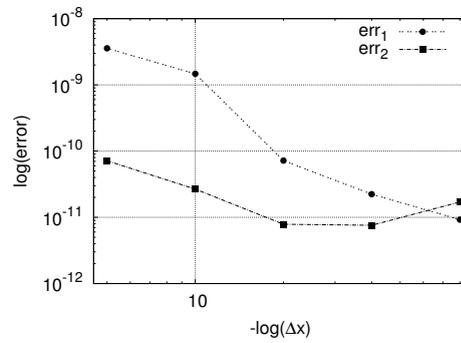


FIGURE 5.8 – Différence entre $T_H = 2 [f_8^*(x_i) - f_7^*(x_i)]$ et T donnée par la proposition vs Δx . \circ pour $\alpha = -2$ et $\beta = 1$, $*$ pour $\alpha = -2.5$ et $\beta = 2.5$.

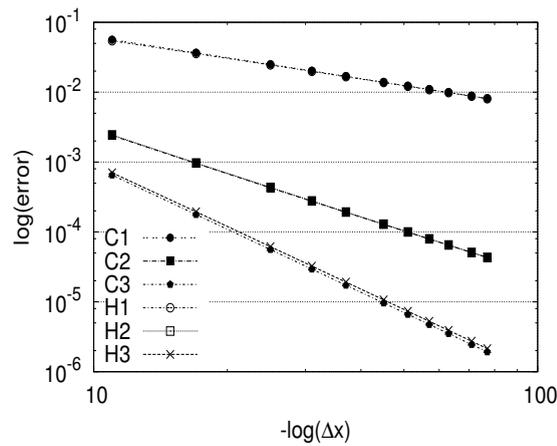


FIGURE 5.9 – Courbe de convergence pour les deux stencils. Ratio $\frac{N_x}{N_y} = 4$, $\alpha = -2$ et $\beta = 1$.

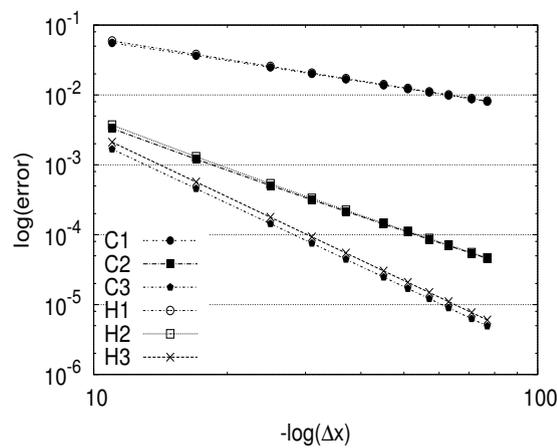


FIGURE 5.10 – Courbe de convergence pour les deux stencils. Ratio $\frac{N_x}{N_y} = 4$, $\alpha = -3$ et $\beta = 1$.

CONCLUSION

On a développé une analyse formelle, plus rigoureuse, du développement de Taylor pour analyser le schéma bounce back au bord. On a aussi établi des formules de développements précis des transferts paroi. Finalement on a validé numériquement ces développements d'analyse théoriques de Taylor pour les conditions aux limites et pour les échanges des moments au bord. Cette méthode d'analyse [6] permet de donner l'ordre d'exactitude du schéma au bord et nous a permis aussi de retrouver les paramètres "magiques". Enfin on a utilisé cette méthode d'analyse pour étudier le schéma anti-bounce back [16] et bounce back généralisé [13]. Les détails des résultats sont publiés dans les deux papiers [13] et [16] (voir annexe).

APPLICATIONS À LA MÉCANIQUE DES FLUIDES ET LA THERMIQUE

Dans cette partie on s'intéresse aux applications de la méthode LBM. En effet le but ici est :

1. Pourvoir modéliser la convection naturelle dans une cavité carrée différentiellement chauffée en utilisant deux fois la methode LBM avec deux population différentes (une population pour modéliser le fluide et une autre population pour modéliser la thermique).
2. Explorer les capacités du schéma à modéliser des écoulements non stationnaires pour des grands nombres de Rayleigh.
3. Modéliser la convection naturelle dans une cavité carrée lorsque la diffusion thermique est anisotrope.

Ces travaux ont donné lieu à deux publications à savoir [7] et [11] (voir annexe).

La convection naturelle dans une cavité est un problème classique très étudié car il a beaucoup d'applications dans plusieurs domaines tels que : capteurs solaires, isolation par double vitrage, le refroidissement des réacteurs nucléaires, . . . C'est pour cela que la convection naturelle d'un fluide dans une cavité rectangulaire différentiellement chauffée est devenue un sujet classique dans le domaine du transfert thermique.

DESCRIPTION DU PROBLÈME

Soit Ω la cavité de dimension $]0, H[\times]0, H[$. On considère alors le problème décrit par (voir Figure 6.1) les équations suivantes :

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \nu \Delta \mathbf{v} - \beta \mathbf{g} (T - T_m) \vec{j} \quad \text{dans } \Omega, \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad \text{dans } \Omega, \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla T = \kappa \Delta T, \quad (6.3)$$

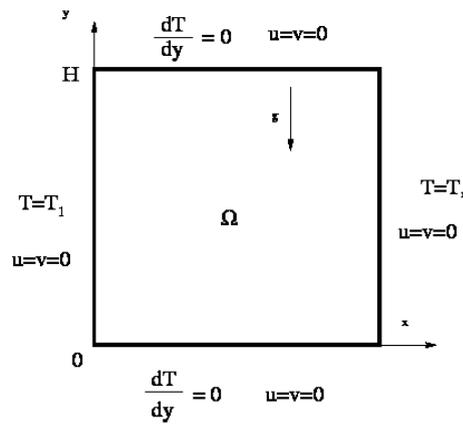


FIGURE 6.1 – Configuration du problème de convection naturelle dans une cavité carrée.

où $\mathbf{v} = (u, v)$, $T_m = (T_l + T_r)/2$.
avec les conditions aux limites :

$$\begin{cases} u &= v = 0 \text{ sur } \partial\Omega \\ T &= T_l \text{ sur } \{0\} \times [0, H] \\ T &= T_r \text{ sur } \{H\} \times [0, H] \\ \frac{\partial T}{\partial y} &= 0 \text{ sur } [0, H] \times \{0\} \text{ et } [0, H] \times \{H\} \end{cases} \quad (6.4)$$

On note que ce problème est obtenu à l'aide de l'approximation de Boussineq et il est caractérisé par : le nombre de Rayleigh noté $Ra \equiv \frac{g\beta Pr(T_r - T_l)H^3}{\nu^2}$ et le nombre de Prandtl noté $Pr \equiv \frac{\nu}{\kappa}$.

Pour modéliser ce problème deux schémas de Boltzmann seront utilisés. Le premier pour résoudre les équations du fluide (*i.e.* Eqs (6.1) et (6.2)) et le deuxième pour résoudre l'équation de la chaleur (*i.e.* Eq (6.3)).

• **Schéma D2Q9 pour le fluide**

On considère le schéma MRT D2Q9 classique [LL00] défini par l'équation (2.3). La matrice M des moments est donnée par l'équation (4.9). La distribution d'équilibre des moments non conservés \mathbf{m}^{eq} est donnée par :

$$\begin{aligned} m_0^{eq} \equiv \rho^{eq} &= \rho, & m_1^{eq} &\equiv J_x^{eq} = j_x, & m_2^{eq} &\equiv J_y^{eq} = j_y, \\ m_3^{eq} \equiv e^{eq} &= -2\rho + \frac{3}{\rho}(j_x^2 + j_y^2), & m_4^{eq} &\equiv \epsilon^{eq} = \rho - \frac{3}{\rho}(j_x^2 + j_y^2), \\ m_5^{eq} \equiv q_x^{eq} &= -j_x, & m_6^{eq} &\equiv q_y^{eq} = -j_y, \\ m_7^{eq} \equiv p_{xx}^{eq} &= \frac{1}{\rho}(j_x^2 - j_y^2) \text{ et} & m_8^{eq} &\equiv p_{xy}^{eq} = \frac{j_x j_y}{\rho}. \end{aligned}$$

On considère les coefficients de relaxation donnés par la matrice diagonale \mathbf{S} :

$$\mathbf{S} = \text{diag}[0, 0, 0, s_3, s_4, s_5, s_5, s_7, s_7].$$

En utilisant la méthode de Taylor [Du08a], on montre que ce schéma D2Q9 modélise les équations macroscopiques suivantes :

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) + \partial_y(\rho v) = O(\Delta t^2), \quad (6.5)$$

$$\begin{aligned}
\partial_t(\rho u) &+ c_s^2 \partial_x \rho + \partial_x(\rho u^2) + \partial_y(\rho uv) = \\
&= \Delta t \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{3} [\partial_x^2(\rho u) + \partial_{xy}(\rho v)] + \\
&+ \Delta t \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{3} (\partial_x^2(\rho u) - \partial_y^2(\rho u)) + O(\Delta t^2), \\
\partial_t(\rho v) &+ c_s^2 \partial_y \rho + \partial_y(\rho v^2) + \partial_x(\rho uv) = \\
&= \Delta t \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{3} [\partial_{yx}^2(\rho u) + \partial_{yy}^2(\rho v)] + \\
&+ \Delta t \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{3} (\partial_x^2(\rho v) - \partial_y^2(\rho v)) + O(\Delta t^2),
\end{aligned}$$

où la vitesse du son $c_s \equiv \lambda \sqrt{\frac{1}{3}}$, la viscosité de volume $\zeta \equiv \Delta t \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{3}$ et la viscosité de cisaillement $\nu \equiv \Delta t \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{3}$.

• Schéma D2Q9 pour la thermique

On note ici les distributions du schéma D2Q9 pour modéliser l'advection diffusion par g_i avec $i = 0, 1, \dots, 8$ au lieu des f_i . On réécrit alors l'évolution du schéma donnée par l'équation (2.3) sous la forme suivante :

$$g_i(x, t + \Delta t) = g_i^*(x - v_i \Delta t, t), \quad 0 \leq i \leq 8, \quad x \in \mathcal{L}.$$

Pour avoir une seule équation équivalente (6.3), on conserve lors de l'étape de collision (2.12) un seul moment : $T(x, t) \equiv m_0(x, t) = \sum_{i=0}^8 g_i(x, t)$. Ainsi on a $T^* = T$. Pour les moments non conservés, ils relaxent selon (2.12), où la distribution d'équilibre est donnée par :

$$\begin{aligned}
\tilde{m}_1^{eq} &= \tilde{\alpha} T + 3T(u^2 + v^2), \\
\tilde{m}_2^{eq} &= \tilde{\beta} T, \\
\tilde{m}_3^{eq} &= uT, \\
\tilde{m}_4^{eq} &= uT(-1 + 3(u^2 + v^2)), \\
\tilde{m}_5^{eq} &= vT, \\
\tilde{m}_6^{eq} &= vT(-1 + 3(u^2 + v^2)) \\
\tilde{m}_7^{eq} &= a_x T + T(u^2 - v^2), \\
\tilde{m}_8^{eq} &= a_y T + T(uv),
\end{aligned}$$

où (u, v) est la vitesse du fluide. La matrice diagonale de relaxation $\tilde{\mathbf{S}}$ est donnée par :

$$\tilde{\mathbf{S}} = \text{diag}[0, \tilde{s}_1, \tilde{s}_2, \tilde{s}_3, \tilde{s}_4, \tilde{s}_5, \tilde{s}_6, \tilde{s}_7, \tilde{s}_8]$$

En utilisant la méthode de Taylor [Du08b, 1], le schéma de Boltzmann décrit ci-dessus résout l'équation d'advection diffusion suivante :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} &= \frac{c_s^2 \Delta t}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\tilde{s}_1} \right) (\tilde{\alpha} + 3a_x + 4) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \\
&+ \frac{c_s^2 \Delta t}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\tilde{s}_2} \right) (\tilde{\alpha} + 3a_x + 4) \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \\
&+ \frac{3c_s^2 \Delta t}{2} a_y \left(\frac{1}{\tilde{s}_1} + \frac{1}{\tilde{s}_2} - 1 \right) \frac{\partial^2 T}{\partial xy}.
\end{aligned} \tag{6.6}$$

On note si $s_k = \tilde{s}_1 = \tilde{s}_2$ et $a_x = a_y = 0$, l'équation précédente devient l'équation d'advection (avec la vitesse $\mathbf{V} = (u, v)$) diffusion (isotrope) suivante :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla T = \kappa \Delta T$$

où $\kappa = c_s^2 \Delta t \frac{\tilde{\alpha} + 4}{2} (\frac{1}{s_k} - \frac{1}{2})$ et $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}$ sont respectivement -2 et 1 .

DOUBLE POPULATIONS LBM POUR LE PROBLÈME COUPLÉ

En utilisant l'approximation de Boussinesq, qui suppose que la force exercée sur le fluide dépend linéairement de la température, c'est à dire :

$$F_y = \beta g_y (T - T_{ref}) \quad (6.7)$$

Cette force F_y est ajoutée dans l'espace des moments avant et après l'étape de collision (voir [4]), comme le décrit l'algorithme suivant :

—

$$\bar{j}_y = j_y + \frac{F_y}{2}, \quad \bar{q}_y = q_y - \frac{F_y}{2},$$

— Mesure des moments macroscopiques.

— Collision (2.12) dans l'espace des moments.

—

$$j_y = \bar{j}_y^* + \frac{F_y}{2}, \quad q_y = \bar{q}_y^* - \frac{F_y}{2},$$

Remarque : Les deux schémas de Boltzmann sont couplés. En effet le schéma fluide dépend de la température T via la force F_y et le schéma d'advection diffusion dépend du fluide via la vitesse de convection du fluide $\mathbf{V} = (u, v)$.

GÉOMÉTRIE ET CONDITIONS AUX LIMITES

On considère la convection naturelle dans une cavité $\Omega =]0, H[\times]0, H[$ (voir la figure 6.1). Les deux murs horizontaux de la cavité sont adiabatiques *i.e.* $\partial T / \partial y = 0$. Ainsi, les conditions aux limites sont données par :

$$u = v = 0 \text{ sur } \partial\Omega \quad (6.8)$$

$$T = T_l \text{ sur } \{0\} \times [0, H] \quad (6.9)$$

$$T = T_r \text{ sur } \{H\} \times [0, H] \quad (6.10)$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} = 0 \text{ sur } [0, H] \times \{0\} \text{ et } [0, H] \times \{H\} \quad (6.11)$$

Pour les conditions aux limites de Dirichlet sur la vitesse (6.8), le schéma classique de Bounce Back est utilisé. Par exemple si on considère le nœud du bord du mur inférieur x_b (voir la figure 6.2), le schéma Bounce Back est donné par :

$$\begin{cases} f_2(x_b, t + \Delta t) = f_4(x_e, t + \Delta t) = f_4^*(x_b, t), \\ f_5(x_b, t + \Delta t) = f_7(x_c, t + \Delta t) = f_7^*(x_b, t), \\ f_6(x_b, t + \Delta t) = f_8(x_d, t + \Delta t) = f_8^*(x_b, t). \end{cases}$$

Pour les conditions aux limites de Dirichlet sur la température (6.9) et (6.10) sur les murs de gauche et de droite du domaine Ω , on utilise un schéma de anti-Bounce Back. En

effet, si une température constante θ donnée est imposée sur le mur de droite (voir la figure 6.2), on applique, alors, le schéma suivant au bord pour le noeud x_b :

$$\begin{cases} g_3(x_b, t + \Delta t) = -g_1(x_e, t + \Delta t) + \frac{1}{36}(4 - \tilde{\alpha} - 2\tilde{\beta})\theta, \\ g_7(x_b, t + \Delta t) = -g_5(x_c, t + \Delta t) + \frac{1}{36}(4 + 2\tilde{\alpha} + \tilde{\beta})\theta, \\ g_6(x_b, t + \Delta t) = -g_8(x_d, t + \Delta t) + \frac{1}{36}(4 + 2\tilde{\alpha} + \tilde{\beta})\theta. \end{cases}$$

Enfin, pour les conditions aux limites de Neumann sur la température (6.11) sur les



FIGURE 6.2 – A gauche : Noeud x_b du bord en bas du domaine Ω . A droite : Noeud x_b du bord à droite du domaine Ω .

murs du haut et du bas du domaine Ω , on utilise aussi un schéma de Bounce Back. Si on considère un noeud x_b du bord bas du domaine (voir la figure droite 6.2) le schéma suivant est utilisé :

$$\begin{cases} g_2(x_b, t + \Delta t) = g_4(x_e, t + \Delta t) = g_4^*(x_b, t), \\ g_5(x_b, t + \Delta t) = g_7(x_c, t + \Delta t) = g_7^*(x_b, t), \\ g_6(x_b, t + \Delta t) = g_8(x_d, t + \Delta t) = g_8^*(x_b, t). \end{cases}$$

LA PLATEFORME DE CALCUL PARALLÈLE

Dans la mise en œuvre, le modèle SPMD ("Simple Program Multiple Data") est utilisé, pour faire les calculs parallèles. Ce qui signifie que tous les processeurs exécutent au même instant des instructions différentes d'un programme unique avec des données différentes. On va adopter dans un premier lieu les calculs parallèles sur plusieurs processeurs (CPU) où le MPI "Message-passing-Interface" est utilisé pour la communication entre les processeurs. Le domaine est alors découpé selon une direction en plusieurs sous-domaines de calculs et des cellules fictives le long des interfaces sont utilisées. Dans un deuxième lieu, les calculs sont fait sur des GPU (Graphics processing unit) au lieu des processeurs (CPU). Cela consiste à utiliser le processeur graphique (GPU) qui a une architecture massivement parallèle. En particulier la carte graphique TITAN (voire tableau 6.1) de chez NVIDIA est utilisée.

Device	Cuda cores	Memory	Bandwidth	GFLOPS (SP,DP)
TITAN	2688	6.GB	288.4 GB/sec	4500.0, 1300

TABLE 6.1 – Caractéristiques techniques de la carte graphique TITAN.

Dans le tableau 6.1 on donne les caractéristiques techniques de cette carte. Enfin, on donne ici, à titre d'exemple, si on utilise le schéma LBM sur la carte TITAN avec un

maillage (réseau) de taille 512×512 en double précision (DP), on a une performance = 824.12 MLUPS (Mega Lattice Site Updates per Second). Or si on utilise du MPI sur $5 \times (\text{core } i7 - 990X)$ on a une performance = 57.43 MLUPS. En conclusion les calculs sur GTX TITAN sont 71.7 fois plus rapide que sur un processeur core $i7 - 990X$.

RÉSULTATS NUMÉRIQUES

Le paramètre qui contrôle la solution est le nombre Rayleigh

$$Ra = \beta g (T_r - T_l) H^3 Pr / \nu^2.$$

Ici le nombre de Prandtl est fixé $Pr = \frac{\nu}{\kappa} = 0.71$. On définit le nombre de Nusselt moyen sur le mur chaud par :

$$\overline{Nu} = -\frac{1}{(T_r - T_l)} \int_0^H \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{\text{hot wall}} dy.$$

Ainsi, les quantités à calculer qui caractérisent la solution sont :

- la vitesse horizontale maximale sur le plan médian horizontal de la cavité u_{max} et sa position y
- la vitesse verticale maximale sur le plan médian vertical de la cavité v_{max} et sa position x ,
- le Nusselt moyen \overline{Nu} ,
- le maximum de la fonction "stream" ψ_{max} sur tout le domaine Ω .

Remarque : Toutes les vitesses sont normalisées en utilisant la vitesse de diffusion χ/H . La température est sans dimension, les positions x et y sont normalisées par H .

• Convergence et dépendance de la solution à la taille du réseau :

On commence par étudier la convergence du schéma et la dépendance de la solution à la taille des maillages. En effet, le tableau 6.2 montre les solutions numériques pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ en utilisant des maillages de tailles différentes. La solution calculée par LBM approche les solutions "benchmark" données par De Vahl Davis [Dav83] et Le Quéré [LeQ91]. Le tableau 6.2 donne aussi une convergence d'ordre 2 pour les différentes quantités mesurées. Ici, comme on ne connaît pas la solution exacte, la convergence est calculée par rapport à une solution de référence obtenue sur un maillage très fin de taille 1001×1001 .

Pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^8$, on a aussi étudié la dépendance de la solution à la taille du maillage pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^8$ pour les tailles suivantes : 495×495 , 987×987 et 2016×2016 . Le tableau 6.3 montre que les quantités calculées par la méthode de Boltzmann s'approchent de la solution "benchmark" de Le Quéré [LeQ91].

• Premier cas : Ecoulement laminaire ($10^3 \leq Ra \leq 10^6$) :

Beaucoup de travaux ont traité la cavité chauffée pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^3, 10^4, 10^5$ et 10^6 . On compare alors nos résultats aux travaux suivants :

1. Vahl Davis [Dav83] (différences finies d'ordre deux et schéma d'extrapolation de Richardson).
2. Mayne *et al.* [MU00] (éléments finis adaptatives).
3. Kuznik *et al.* [KVR07] Dixit *et al.* [DB06] et Liu *et al.* [LL10] (Boltzmann sur réseau avec un seul temps de relaxation BGK) et Mezhhab *et al.* [MMB10], Wang *et al.* [WW13] (LBM avec plusieurs temps de relaxation D2Q9 pour le fluide et D2Q5 pour la température.)

TABLE 6.2 – Convergence et dépendance à la taille des maillages pour $Ra = 10^6$.

Taille du maillage	\overline{Nu}	u_{max}	y	v_{max}	x
47^2	9.5729	64.6766	0.8414	222.8704	$3.6585 \cdot 10^{-2}$
57^2	9.2079	64.8453	0.8508	218.5256	$4.3859 \cdot 10^{-2}$
81^2	8.8913	64.8181	0.8456	218.6303	$4.3209 \cdot 10^{-2}$
161^2	8.7828	64.8375	0.8478	220.1784	$4.0372 \cdot 10^{-2}$
225^2	8.8006	64.8393	0.8511	220.7288	$3.7777 \cdot 10^{-2}$
321^2	8.8139	64.8403	0.8489	220.5115	$3.8940 \cdot 10^{-2}$
615^2	8.8226	64.8391	0.8495	220.5741	$3.8211 \cdot 10^{-2}$
Solution de référence	8.8241	64.8372	0.8495	220.5739	$3.7993 \cdot 10^{-2}$
Accuracy	2.109	2.0154	1.9261	2.0592	1.7571
Davis [Dav83]	8.817	64.630	0.850	219.360	$3.8 \cdot 10^{-2}$
Le Quéré [LeQ91]	8.825	64.483	0.850	220.559	$3.8 \cdot 10^{-2}$

Le tableau 6.4 compare les résultats numériques obtenus avec des maillages de tailles 105×105 , 155×155 , 205×205 et 255×255 , respectivement pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^3$, 10^4 , 10^5 et 10^6 avec les résultats cités ci dessus.

• **Deuxième cas** : ($10^7 \leq Ra \leq 10^8$) :

Le Tableau 6.5 montre les résultats LBM pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^7$ et $Ra = 10^8$ utilisant, respectivement, un maillage de taille 987×987 et 2016×2016 .

Dans le tableau 6.6 on compare nos résultats aux résultats obtenus par ([LeQ91], [MP84], [DB06], [KVR07], [MMB10] et [CL14]) pour $Ra = 10^7$ et $Ra = 10^8$. On note que nos résultats et ceux de Contrino *et al.* [CL14] sont les plus proches aux résultats de Le Quéré [LeQ91].

Les solutions pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^7$ et $Ra = 10^8$ sont présentées dans les figures 6.5 (lignes de courant) et 6.6 (isothermes).

• **Cas instationnaire** ($Ra > 10^8$) :

Paolucci *et al.* [PC89] et Le Quéré [LeQ91] ont donné une approximation de la valeur du Rayleigh critique, la valeur du nombre Rayleigh à partir de laquelle la solution devient non stationnaire. Ils montrent que le Rayleigh critique est très proche de 2×10^8 . Notre schéma LBM donne une solution stationnaire pour $Ra = 2 \times 10^8$ et une solution non stationnaire pour $Ra = 2.05 \times 10^8$.

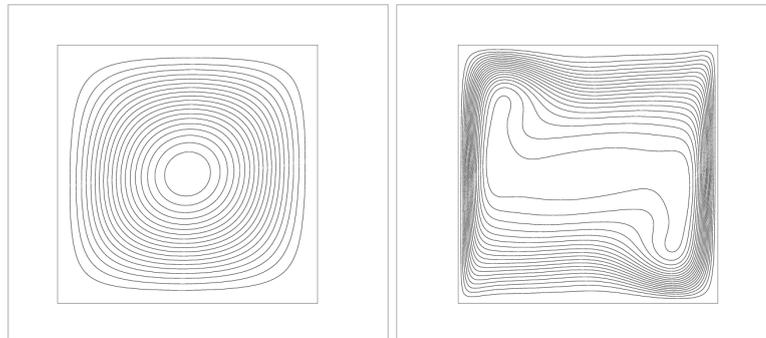
Les figures 6.7 et 6.8 montrent l'évolution des quantités \overline{Nu} , u_{max} , y , v_{max} , et x au cours du temps pour $Ra = 2.05 \times 10^8$. On remarque que la solution est périodique dans ce cas.

Pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^9$ et $Ra = 10^{10}$ on a une solution non stationnaire. En effet les figures 6.9, 6.10 et 6.11 donnent l'évolution du Nusselt \overline{Nu} , le maximum de la vitesse verticale u_{max} et sa position y pour $x = 1/2$, le maximum de la vitesse horizontale v_{max} et sa position x pour $y = 1/2$, pour $Ra = 10^9$ et $Ra = 10^{10}$.

Le Tableau 6.6 compare nos résultats LBM aux résultats de Markatos *et al.* [MP84] et Dixit *et al.* [DB06]. Enfin le Tableau 6.7 donne le maximum, le minimum et la moyenne des quantités u_{max} , y , v_{max} , x et \overline{Nu} .

TABLE 6.3 – Dépendance à la taille des maillages pour $Ra = 10^6$.

Mesh size	Nu	Umax	Y	Vmax	X
495^2	29.97	313.97	0.926	2219.3	0.011
987^2	30.20	319.81	0.927	2222.8	0.011
2016^2	30.22	321.59	0.928	2222.7	0.012
Le Quéré [LeQ91]	30.22	321.88	0.928	2222.2	0.012

FIGURE 6.3 – Les lignes de courant ("Streamlines") : à gauche pour un nombre Rayleigh $Ra=10^3$, à droite pour un nombre Rayleigh $Ra=10^6$.

CONCLUSION

On a utilisé un schéma de Boltzmann sur réseau (à double populations) pour modéliser la convection naturelle dans une cavité différentiellement chauffée. Pour un nombre de Rayleigh $\leq 10^6$, le schéma de Boltzmann donne des résultats très proches des solutions "benchmark". Pour $Ra=10^7$ et 10^8 on a des résultats meilleurs que ceux de Dixit *et al.* [\[DB06\]](#), Kuznik *et al.* [\[KVR07\]](#) et Mezrhab *et al.* [\[MMB10\]](#). En effet nos résultats sont les plus proches de la solution référence (benchmark) de Le Quéré [\[LeQ91\]](#). On a donné aussi une approximation du Rayleigh critique $2.05 \cdot 10^8$, en concordance avec les résultats précédents. Enfin, on a utilisé ce schéma de Boltzmann sur réseau (à double populations) pour modéliser la convection naturelle dans une cavité lorsque la diffusion est anisotrope. Les résultats numériques obtenus sont publiés dans l'article [\[Z\]](#) (voir annexe).

TABLE 6.4 – Comparaison des résultats numériques. Davis [Dav83], Mayne *et al.* [MU00], Liu *et al.* [LL10], Dixit *et al.* [DB06], Kuznik *et al.* [KVR07], Mezrhab *et al.* [MMB10] et Wanget *al.* [WW13].

Ra		[Dav83]	[MU00]	[LL10]	[DB06]	[KVR07]	[MMB10]	[WW13]	Present
10^3	u_{max}	3.649	3.6493	3.649	3.6529	3.636	3.667	3.6494	3.6494
	y	0.813	0.8125	0.810	0.8125	0.809	—	0.8132	0.8146
	v_{max}	3.697	3.6962	3.698	3.682	3.686	3.714	3.6974	3.6975
	x	0.178	0.1790	0.180	0.17183	0.174	—	0.1783	0.1791
	\overline{Nu}	1.1178	1.1149	1.115	1.11272	1.117	1.112	1.1178	1.1178
10^4	u_{max}	16.178	16.1798	16.154	16.163	16.167	16.202	16.1834	16.1855
	y	0.823	0.8235	0.820	0.828	0.821	—	0.8232	0.8239
	v_{max}	19.617	19.6177	19.614	19.569	19.597	19.644	19.6278	19.6294
	x	0.119	0.1195	0.120	0.125	0.120	—	0.1189	0.1199
	\overline{Nu}	2.243	2.2593	2.229	2.247	2.246	2.241	2.2448	2.2444
10^5	u_{max}	34.73	34.7741	34.508	35.521	34.962	34.805	34.7430	34.7470
	y	0.855	0.8535	0.855	0.8554	0.854	—	0.8546	0.8551
	v_{max}	68.590	68.6920	68.595	68.655	68.578	68.630	68.6318	68.6323
	x	0.066	0.0665	0.065	0.0664	0.067	—	0.06588	0.066978
	\overline{Nu}	4.519	4.4832	4.489	4.5226	4.518	4.519	4.5218	4.5200
10^6	u_{max}	64.63	64.6912	63.456	64.186	64.133	64.793	64.8277	64.8403
	y	0.850	0.8460	0.848	0.8496	0.860	—	0.8498	0.8489
	v_{max}	219.360	220.8331	219.788	219.866	220.537	219.663	220.5506	220.5115
	x	0.0379	0.0380	0.036	0.0371	0.038	—	0.03779	0.03894
	\overline{Nu}	8.799	8.8811	8.750	8.805	8.792	8.817	8.8192	8.8139

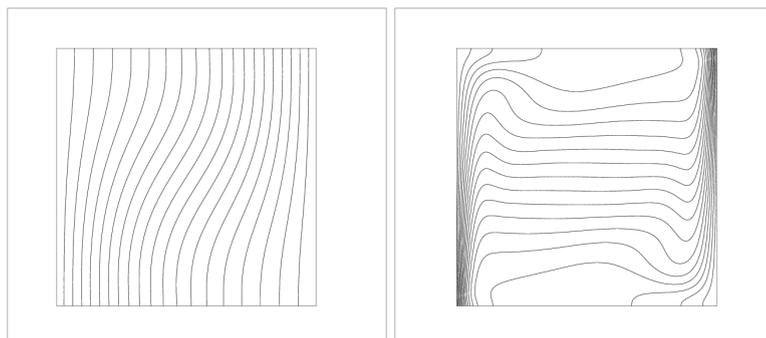


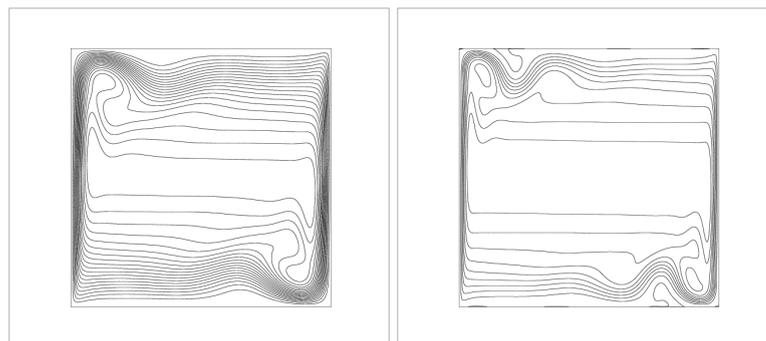
FIGURE 6.4 – Isothermes : à gauche pour un nombre Rayleigh $Ra=10^3$, à droite pour un nombre Rayleigh $Ra=10^6$.

TABLE 6.5 – Solutions calculées pour $Ra = 10^7$ et $Ra = 10^8$ utilisant respectivement un maillage de taille 987×987 et 2016×2016 .

Ra	10^7	10^8
ψ_{max}	30.1564	53.8356
u_{max}	148.5561	321.5927
y	0.8789	0.9278
v_{max}	699.1368	2222.7265
x	0.0217	0.0121
\overline{Nu}	16.5216	30.2218

TABLE 6.6 – Comparaison aux autres résultats : Le Quéré [LeQ91], Markatos *et al.* [MP84], Dixit *et al.* [DB06], Kuznik *et al.* [KVR07], Mezrhab *et al.* [MMB10] et Contrino *et al.* [CL14] pour $Ra = 10^7$, $Ra = 10^8$, 10^9 et 10^{10} .

$Ra = 10^7$	Present	[LeQ91]	[MP84]	[DB06]	[KVR07]	[MMB10]	[CL14]
ψ_{max}	30.1564	30.1649	–	–	–	30.140	30.176
u_{max}	148.5561	148.5954	–	164.236	148.768	148.400	148.585
y	0.8789	0.879	–	0.851	0.881	–	0.8793
v_{max}	699.1368	699.1795	–	701.922	702.029	998.300	699.3224
x	0.0217	0.021	–	0.020	0.020	–	0.0213
\overline{Nu}	16.5216	16.523	–	16.79	16.408	16.510	16.5230
$Ra = 10^8$	Present	[LeQ91]	[MP84]	[DB06]	[KVR07]	[MMB10]	[CL14]
ψ_{max}	53.8356	53.8475	–	–	–	53.323	53.9149
u_{max}	321.5927	321.875	514.3	389.877	321.457	305.332	321.9063
y	0.9278	0.928	0.941	0.937	0.940	–	0.5530
v_{max}	2222.7265	2222.39	1812	2241.374	2243.36	2169.562	2222.3279
x	0.0121	0.012	0.0135	0.0112	0.0121	–	0.0120
\overline{Nu}	30.2218	30.225	32.045	30.506	29.819	30.033	30.2241
$Ra = 10^9$	Present	[LeQ91]	[MP84]	[DB06]	[KVR07]	[MMB10]	[CL14]
u_{max}	530.8379	–	–	503.24	–	–	–
y	0.9231	–	–	0.966	–	–	–
v_{max}	7110.7323	–	–	6820.07	–	–	–
x	0.0064935	–	–	0.0064	–	–	–
\overline{Nu}	54.210	–	–	57.350	–	–	–
$Ra = 10^{10}$	Present	[LeQ91]	[MP84]	[DB06]	[KVR07]	[MMB10]	[CL14]
u_{max}	1569.41	–	2323	2323	–	–	–
y	0.8559	–	0.9625	0.94023	–	–	–
v_{max}	22730.24	–	16890	21463	–	–	–
x	$3.9370 \cdot 10^{-3}$	–	0.0055	0.49072	–	–	–
\overline{Nu}	99.109	–	156.85	103.663	–	–	–

FIGURE 6.5 – Lignes de courant "streamlines" pour $Ra = 10^7$ (à gauche) et $Ra = 10^8$ (à droite).

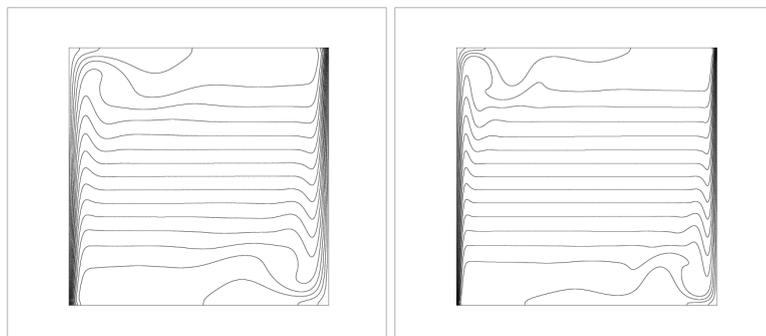


FIGURE 6.6 – Isothermes pour $Ra = 10^7$ (à gauche) et $Ra = 10^8$ (à droite).

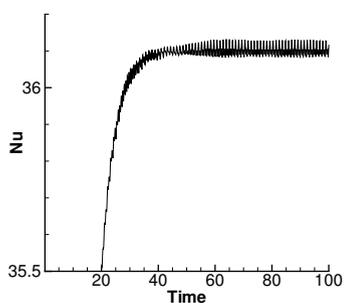


FIGURE 6.7 – Le Nusselt \overline{Nu} en fonction du temps pour $Ra = 2.05 \cdot 10^8$

TABLE 6.7 – Résultats numériques pour $Ra = 10^9$ et $Ra = 10^{10}$.

Ra	N^2		max	min	moyenne
10^9	1001^2	\overline{Nu}	54.5267	53.9497	54.2109
		u_{max}	705.6806	398.5403	530.8379
		y	0.9765	0.8746	0.9231
		v_{max}	7175.0103	7055.7060	7110.7323
		x	0.0064935	0.0064935	0.0064935
10^{10}	2001^2	\overline{Nu}	102.2830	96.6169	99.1093
		u_{max}	2441.5322	897.1037	1569.4172
		y	0.9855	0.5052	0.8559
		v_{max}	23004.8136	22536.3544	22730.24122
		x	$3.9370 \cdot 10^{-3}$	$3.9370 \cdot 10^{-3}$	$3.9370 \cdot 10^{-3}$

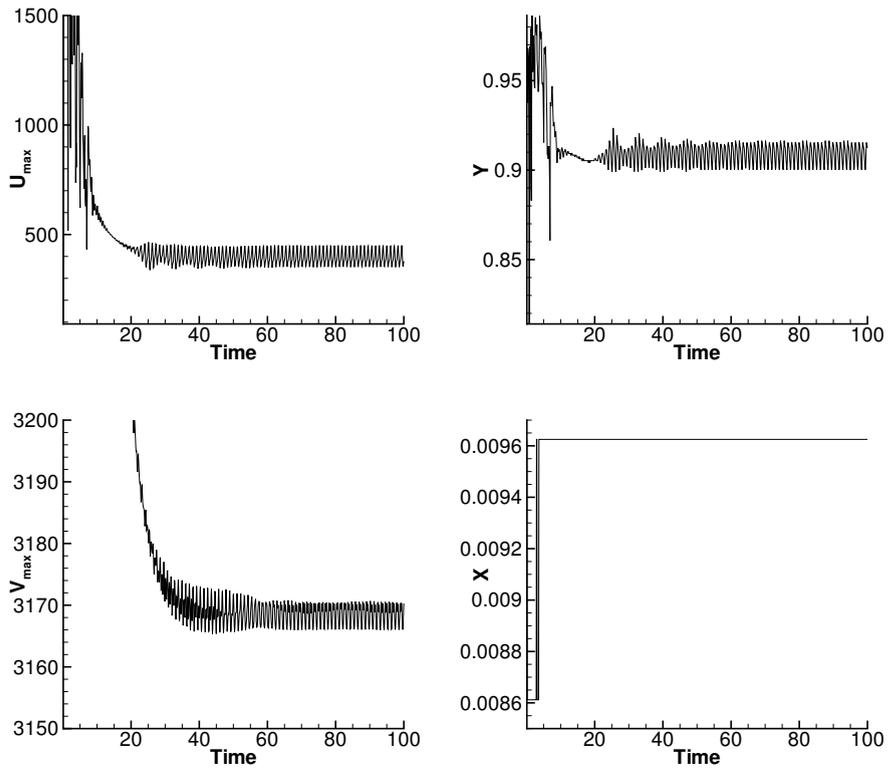


FIGURE 6.8 – Les quantités u_{max} , y , v_{max} et x en fonction du temps pour $Ra = 2.05.10^8$

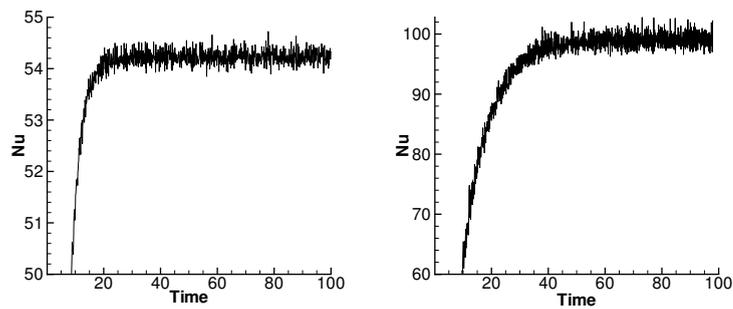


FIGURE 6.9 – Le nombre de Nusselt \overline{Nu} en fonction du temps. à gauche : pour $Ra = 10^9$; à droite : pour $Ra = 10^{10}$.

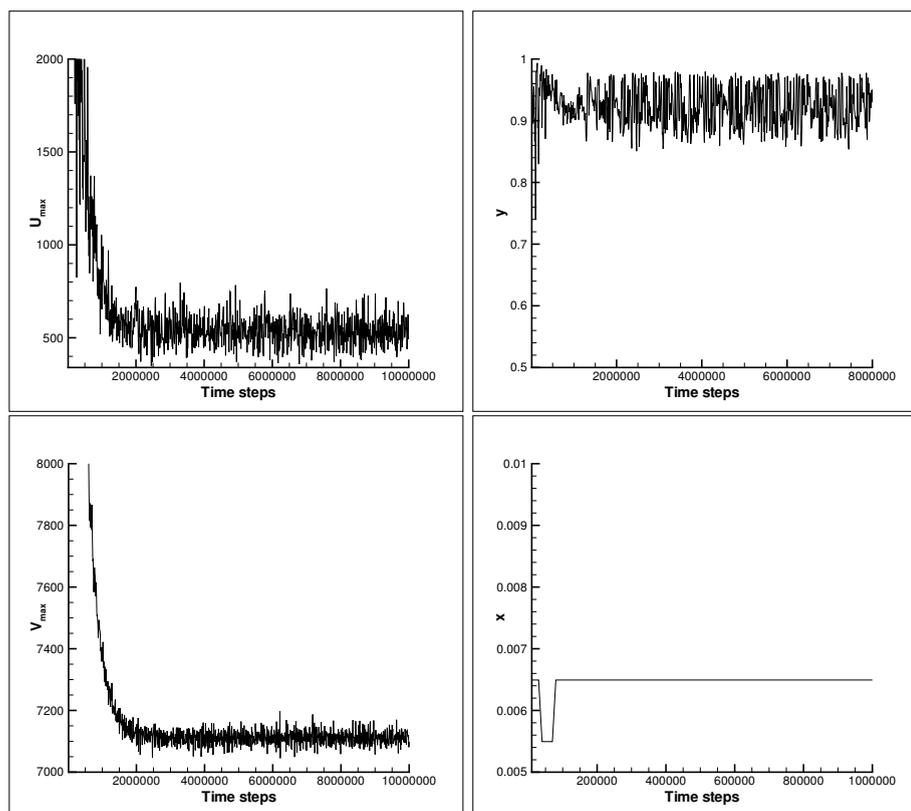


FIGURE 6.10 – Les quantités u_{max} , y , v_{max} et x en fonction du temps pour $Ra = 10^9$

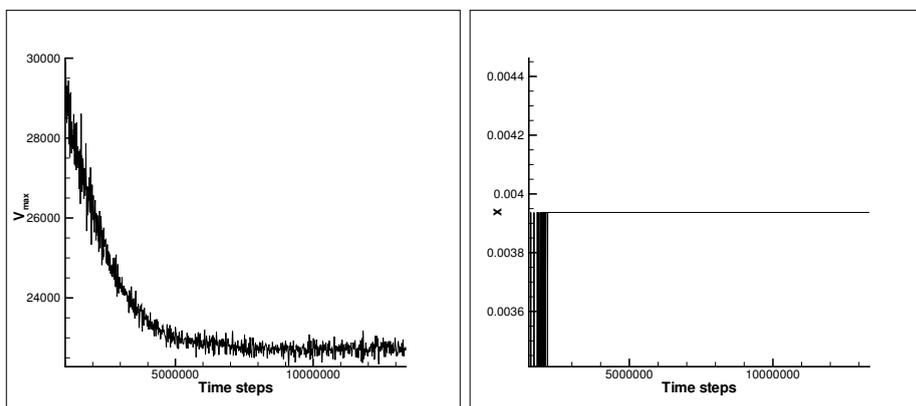


FIGURE 6.11 – Les quantités u_{max} , y , v_{max} et x en fonction du temps pour $Ra = 10^9$

LA DISSIPATION DE LA MÉTHODE LBM POUR L'ACOUSTIQUE

INTRODUCTION

Ce travail [14] aborde les points suivantes :

1. Modéliser l'équation du coup de belier (Water Hammer) : dans le domaine de l'ingénierie hydraulique et des écoulements transitoires, la méthode LBM n'est pas considéré comme adapté à la modélisation de l'écoulement compressible. En effet la méthode des caractéristiques (MOC) est préférée pour la modélisation des écoulements transitoires en 1D et la méthodes des volumes finis (FVM) est généralement utilisée pour ces écoulements en 2D. Dans ce travail, on montre que la méthode LBM est tout aussi précise que la méthode MOC. Vu que la méthode LBM est simple à programmer et pas couteuse du point de vue des calculs, elle pourrait être utilisée pour modéliser efficacement des flux transitoires en 1D. Par conséquent, dans la première partie de ce travail, des applications classiques des écoulements type coup de belier en 1D (eg. Ghidaoui [Ghi04], Chaudhry [CHA14]) sont modélisées à l'aide de la méthode LBM. Les résultats LBM sont ensuite confrontés et comparés (rapidité, précision, ordre de convergence...) aux résultats de la méthode MOC.
2. Dans la deuxième partie de ce travail, le phénomène de "surpression" de coup de bélier en 2D est modélisé à l'aide de la méthode LBM. La comparaison des résultats LBM avec ceux obtenus par un schéma de volumes finis (FVM) d'ordre 5, montre que la méthode LBM présente de la dissipation et de la dispersion numérique, quand la solution présente des discontinuités prononcées ou quand on simule des ondes acoustiques radiales à hautes fréquences.

Le choix d'utiliser LBM avec plusieurs temps de relaxations (MRT) dans ce travail est basé sur deux point essentiels : Premièrement, la méthode MRT permet un traitement séparé des termes de la viscosité de volume et de la viscosité de cisaillement. Cela permettra de comprendre et de voir les mécanismes de dissipations sur les modes des ondes radiales et longitudinales. Deuxièmement, la méthode MRT possèdent plusieurs paramètres libres, qui n'ont pas d'interprétation physique, mais qui permettent d'augmenter stabilité du schéma et de modéliser des ondes acoustiques à hautes fréquences.

LE SCHÉMA DE BOLTZMANN POUR MODÉLISER LES APPLICATIONS DU COUP DE BÉLIER

• **Le cas à une dimension d'espace (1D)** : Cette section décrit le schéma LBM pour modéliser le "coup de bélier" dans un espace de dimension un. On utilise le schéma LBM à trois vitesses discrètes (D1Q3), comme illustré dans la Figure 7.1. Soit \mathcal{L} un réseau régulier paramétré par un pas d'espace Δx (voir Figure 7.1), composé par l'ensemble de nœuds (ou de sommets) $\mathcal{L}^0 \equiv \{x_j \in (\Delta x \mathbb{Z})\}$; le paramètre Δt est le pas discret du temps et $\lambda \equiv \frac{\Delta x}{\Delta t}$ est la vitesse discrète du maillage (réseau). Les vitesses discrètes $v_i, i \in (0, 1, 2)$ sont choisies telles que $v_i \equiv c_i \frac{\Delta x}{\Delta t} = c_i \lambda$, où $c_0 = 0, c_1 = 1$ et $c_2 = -1$.

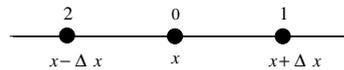


FIGURE 7.1 – Stencil pour le schéma LBM D1Q3.

On rappelle que, l'évolution du schéma LBM est décrite par l'équation (2.3) :

$$f_i(x_j, t + \Delta t) = f_i^*(x_j - v_i \Delta t, t), \quad 0 \leq i \leq 2, \quad (7.1)$$

où f_i est la fonction de distribution associée à la i -ème vitesse discrète v_i , la variable t est le temps, les x_j sont les positions des nœuds et l'exposant * désigne les quantités après la collision. Les 3 moments $\{m_\ell, \ell \in (0, 1, 2)\}$ sont obtenus par une transformation linéaire de l'espace des distributions $\{f_i, i \in (0, 1, 2)\}$ discrètes. Ces moments sont la densité $m_0 \equiv \rho \equiv f_0 + f_1 + f_2$, l'impulsion $m_1 \equiv q \equiv \rho u \equiv \lambda(f_1 - f_2)$ (où u est la vitesse du fluide) et l'énergie $m_2 \equiv \epsilon \equiv \frac{\lambda^2}{2}(f_1 + f_2)$. Cette transformation linéaire de l'espace des f vers l'espace des moments est donnée par la matrice M comme suit :

$$(m_0, m_1, m_2)^t = M (f_0, f_1, f_2)^t, \quad (7.2)$$

où

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & -\lambda \\ 0 & \frac{\lambda^2}{2} & \frac{\lambda^2}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.3)$$

Le moment (énergie) m_2 relaxe vers sa valeur d'équilibre (m_2^{eq}) suivant la formule [Du08a] :

$$m_2^* = (1 - s) m_2 + s m_2^{eq}, \quad (7.4)$$

où $s (s > 0)$ est le temps de relaxation et la valeur d'équilibre m_2^{eq} est définie par

$$m_2^{eq} = \frac{1}{2} (\alpha \lambda^2 \rho + \rho u^2). \quad (7.5)$$

En utilisant les développements de Taylor [Du08a], sur l'équation d'évolution du schéma 7.1, on obtient l'équation équivalente à l'ordre deux :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x q & = O(\Delta t^2), \\ \partial_t q + c_s^2 \partial_x \rho + \partial_x (\rho u^2) - v_0 \partial_x^2 q & = O(\Delta t^2). \end{cases} \quad (7.6)$$

où $c_s = \lambda \sqrt{\alpha}$ est la vitesse du son et

$$v_0 = \lambda^2 \Delta t (1 - \alpha) \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right) \quad (7.7)$$

est la viscosité cinématique. Le moment m_2^{eq} et Eq. (7.5) fixent l'équation macroscopique Eq. (7.6) du schéma Eq. (7.1).

L'équation d'état qui relie la pression à la densité du fluide est

$$\frac{\partial P}{\partial \rho} = c_s^2, \quad (7.8)$$

où c_s est la vitesse du son. Eq. (7.8) est valable pour les tuyaux rigides et dans ce cas c_s est environ 1440 m/s, lorsque le fluide est de l'eau. Cependant, pour des raisons de simplicité c_s est pris égal à 1000 m/s.

• **Le cas à deux dimensions d'espace (2D) :** en deux dimensions d'espace, le maillage (voir Figure 7.2) est défini par l'ensemble $\mathcal{L}^0 \equiv \{x_{i,j} \in (\Delta x \mathbb{Z}, \Delta y \mathbb{Z})\}$ avec $\Delta x = \Delta y$. Comme dans le cas précédant 1D, le schéma LBM en 2D est décrit par :

$$f_i(x_j, t + \Delta t) = f_i^*(x_j - v_i \Delta t, t), \quad i \in (0 \dots 8), \quad (7.9)$$

dans ce cas on a 9 vitesses discrètes $v_i = \lambda c_i$ (D2Q9) (see Figure 2) où $c_0 = (0, 0)$, $c_1 = (1, 0)$, $c_2 = (0, 1)$, $c_3 = (-1, 0)$, $c_4 = (0, -1)$, $c_5 = (1, 1)$, $c_6 = (-1, 1)$, $c_7 = (-1, -1)$ and $c_8 = (1, -1)$. Là encore, le schéma est basé sur les deux étapes fondamentales

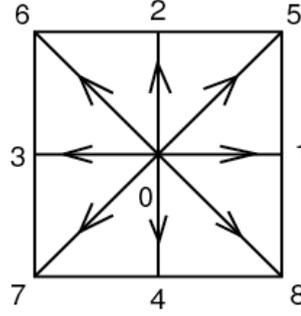


FIGURE 7.2 – Stencil pour le schéma D2Q9.

d'advection et de collision décrites dans le cas 1D. Cependant, dans le cas 2D, on a besoin de neuf moments $\{m_k, k = 0, \dots, 8\}$. Ces moments ont une signification physique (voir eg [LL00]) : $m_0 = \rho$ la densité, $m_1 = j_x$ et $m_2 = j_y$ représentent l'impulsion, m_3 est l'énergie, m_4 est le carée de l'énergie, m_5 et m_6 sont les flux de l'énergie et m_7, m_8 sont les tenseurs de contraintes [LL00]. Une transformation linéaire est utilisée (comme dans le cas 1D Eq. (7.2)) pour passer de l'espace des f_i vers l'espace des moments m_i avec la matrice M est donnée dans Eq. (4.9).

Les équations équivalents de Navier-Stokes sont obtenues en conservant les moments $m_0 = \rho$, $m_1 = j_x = \rho V_x$ et $m_2 = j_y = \rho V_y$. Les autres moments relaxent vers leur valeur d'équilibre (m_ℓ^{eq}) suivant l'équation [dH92] :

$$m_\ell^* = (1 - s_\ell) m_\ell + s_\ell m_\ell^{eq}, \quad 3 \leq \ell \leq 8, \quad (7.10)$$

En utilisant les développements de Taylor sur l'Eq. (7.9) on obtient les équations macroscopiques (équivalentes) d'ordre deux suivantes :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho V_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho V_y}{\partial y} = 0, \quad (7.11)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho V_x}{\partial t} + \lambda^2 \frac{\alpha + 4}{6} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \rho V_x^2 + \frac{\partial}{\partial y} \rho V_x V_y &= \\
= \frac{\lambda^2}{3} \Delta t \left[\frac{-\alpha}{2} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \rho \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) + \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \rho \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) V_x \right] + \\
+ \left\{ \frac{-\alpha \lambda^2}{6} \Delta t \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \left(V_x \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial V_x}{\partial x} + V_y \frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial y} + \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial V_x}{\partial x} \right) \right. \\
+ \left. \frac{\lambda^2}{3} \Delta t \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \left(V_x \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial V_x}{\partial x} + V_x \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial V_x}{\partial y} \right) \right\}, \tag{7.12}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho V_y}{\partial t} + \lambda^2 \frac{\alpha + 4}{6} \frac{\partial \rho}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \rho V_x V_y + \frac{\partial}{\partial y} \rho V_y^2 &= \\
= \frac{\lambda^2}{3} \Delta t \left[\frac{-\alpha}{2} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \rho \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) + \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \rho \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) V_y \right] \\
+ \left\{ \frac{-\alpha \lambda^2}{6} \Delta t \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \left(V_y \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial V_y}{\partial y} + V_x \frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial y} + \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial V_x}{\partial y} + \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial V_x}{\partial x} \right) \right. \\
+ \left. \frac{\lambda^2}{3} \Delta t \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \left(V_y \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial V_y}{\partial x} + V_y \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial V_y}{\partial y} \right) \right\} \tag{7.13}
\end{aligned}$$

en utilisant $j_x = \rho V_x$ et $j_y = \rho V_y$ où V_x et V_y sont respectivement les vitesses du fluide selon les directions x et y . On note que ces équations macroscopiques contiennent des termes en plus (voir les termes entre accolades Eq. (7.12) et Eq. (7.13)) par rapport aux équations classiques de Navier-Stokes. On peut montrer que ces extra-termes ont un effet négligeable par rapport aux termes visqueux.

RÉSULTATS NUMÉRIQUES ET DISCUSSIONS

• **Cas test 1D, coup de belier** : Le phénomène dit de coup de bélier en 1D, consiste en la fermeture soudaine d'une vanne en aval dans un système réservoir-tuyau-vanne (RTV) avec un débit initial non nul [WSS93] (voir Figure 7.3). On considère alors les conditions aux limites suivantes : une pression constante en amont (réservoir), et une vitesse nulle en aval ($V_x = 0$). Ces conditions aux limites sont imposées comme suit :

- En amont $P(x = 0) = p_0$: pour imposer une pression constante à l'entrée, on utilise un schéma d'anti-bounce back (anti-rebond) au bord [BFL01]

$$f_1(x_1) = -f_2^*(x_1) + \alpha \rho_0, \tag{7.14}$$

où la quantité $\rho_0 = \frac{p_0}{c_s^2}$ est donnée par la condition au bord x_1 (le premier nœud fluide).

- En aval $V_x(x = L) = 0$: pour modéliser $V_x = u_0 = 0$ au bord $x = L$, on utilise un schéma de bounce-back comme suit :

$$f_2(x_N) = f_1^*(x_N) + \frac{\rho u_0}{\lambda}, \tag{7.15}$$

où la quantité $u_0 = 0$ est donnée par la condition au bord x_N (le dernier nœud fluide).

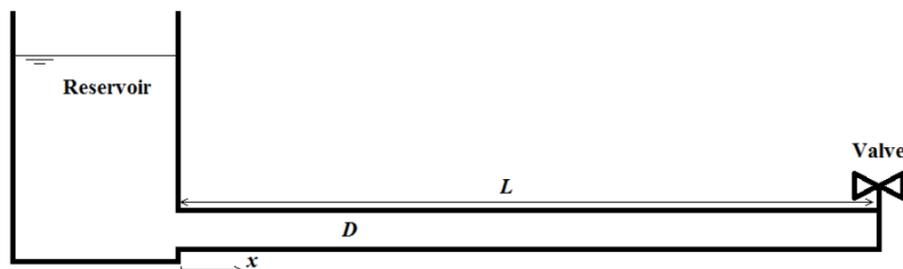


FIGURE 7.3 – Système réservoir-tuyau-vanne (RTV).

Remarque Pour assurer la stabilité du schéma, le paramètre α doit être dans $[0, 1]$ car le terme $(1 - \alpha)$ dans Eq. (7.6) doit être positif.

On considère la configuration suivante : la longueur du tuyau est $L = 1000$ m et la taille du réseau est $N_x = 101$. Ainsi, le pas d'espace est $\Delta x = L/N_x$ et la vitesse numérique de l'onde acoustique est $c_s = \frac{\Delta x}{\Delta t} \sqrt{\alpha}$. Le pas de temps discret et les paramètres de relaxations sont donnés respectivement par : $\Delta t = \sqrt{\alpha} \frac{\Delta x}{c_s}$ et $s = \left(\frac{v_0}{\lambda \Delta x (1 - \alpha)} + \frac{1}{2} \right)^{-1}$. Seul le paramètre α reste libre (non fixé). Ce paramètre représente le nombre dit Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), qui est défini par :

$$\sqrt{\alpha} = c_s \frac{\Delta t}{\Delta x}. \quad (7.16)$$

On note que pour le cas $\alpha = 1$, la viscosité cinématique équivalente (v_0) (voir Eq. (7.7)) devient nulle, et donc les équations macroscopiques (équivalentes) du schéma LBM (voir Eq. (7.6)) sont sans viscosité [Ghi04].

Trois cas tests sont considérés pour différentes valeurs de α et de s .

1. $\alpha = 1$, dans ce cas la viscosité numérique (v_0) est nulle pour toutes les valeurs de s . Par conséquent, l'écoulement est non visqueux.
2. $\alpha = 1/3$ et s est choisi tel que la viscosité v_0 soit égal à la viscosité cinématique de l'eau $10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$.
3. $\alpha = 1/3$ et $s = 1.1$.

Les figures 7.4, 7.5 et 7.6 donnent une variation de la pression normalisée (par la pression de Joukowsky ($P_{\text{Jou}} = \rho_0 V_x^0 c_s$)) au niveau du vanne en fonction du temps. Le premier cas test, représenté par la figure 7.4, montre que la méthode LBM donne la solution exacte du coup de bélier pour un système RTV avec un écoulement non visqueux. On rappelle, que la solution "exacte" est obtenu en utilisant la méthode des caractéristiques (MOC) [WSS93]. Ce résultat est intéressant car en général la méthode LBM résout les écoulements visqueux.

De plus, si $s = 1$ le schéma LBM est équivalent au schéma de différences finies suivant :

$$\begin{cases} \rho_j^{n+1} &= \frac{1}{2} \left(\rho_{j+1}^n + \rho_{j-1}^n \right) + \frac{1}{2\lambda} \left(q_{j+1}^n - q_{j-1}^n \right), \\ q_j^{n+1} &= \frac{1}{2} \left(q_{j+1}^n + q_{j-1}^n \right) - \frac{\lambda}{2} \left(\rho_{j+1}^n - \rho_{j-1}^n \right), \end{cases} \quad (7.17)$$

qui résout la densité et de la quantité de mouvement par la méthode des caractéristiques (MOC) ; où n désigne le n -ème pas de temps et j est la position du j -ème nœud.

Dans le deuxième cas test, on considère un écoulement visqueux ($\nu_0 = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$). La figure 7.5 montre que le schéma est à la limite de stabilité. Cela est dû à la valeur du temps de relaxation s (qui pilote le terme visqueux dans l'équation 7.6) trop proche de 2 ($s = 1.999999999650126$) alors que s doit être strictement plus petit que 2 pour assurer la stabilité du schéma.

Dans le troisième cas test, les paramètres α et s sont ($\alpha = 1/3$ et $s = 1.1$). Avec ces valeurs, la viscosité cinématique numérique est $\nu_0 = 5000 \text{ m}^2/\text{s}$. La figure 7.5 montre que l'onde acoustique est atténuée.

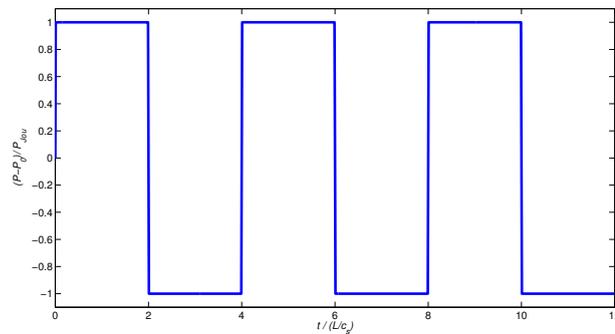


FIGURE 7.4 – Cas 1-d LB. La pression de Joukowski en fonction du temps mesurée à la sortie du tuyau (i.e. $x = x_N$) avec $\alpha = 1$ et $\nu_0 = 0$.

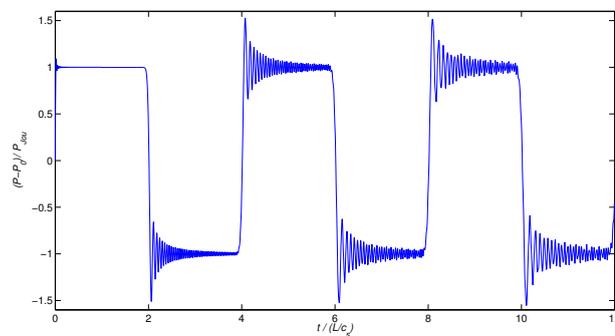


FIGURE 7.5 – Cas 1-d LB. La pression de Joukowski en fonction du temps mesurée à la sortie du tuyau (i.e. $x = x_N$) avec $\alpha = 1/3$ et $\nu_0 = 10^{-6}$.

• **Cas test de deux dimensions d'espace 2D** : Dans cette section, on considère un écoulement laminaire visqueux, décrit par la figure 7.7. On note ici que y représente la variable radiale et V_y est la vitesse radiale.

Les conditions initiales sont : une vitesse initiale constante et une pression qui varie

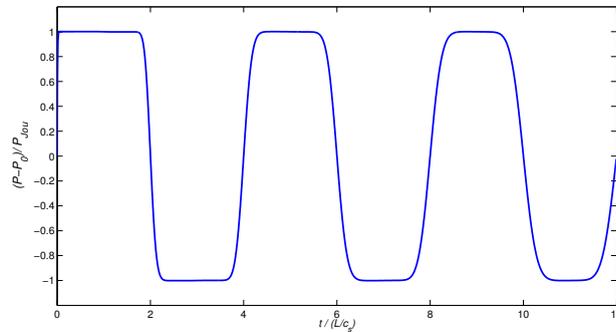


FIGURE 7.6 – Cas 1-d LB. La pression de Joukowski en fonction du temps mesurée à la sortie du tuyau (*i.e.* $x = x_N$) avec $\alpha = 1/3$ et $s = 1.1$ (*i.e.* $\nu_0 = 5000$).

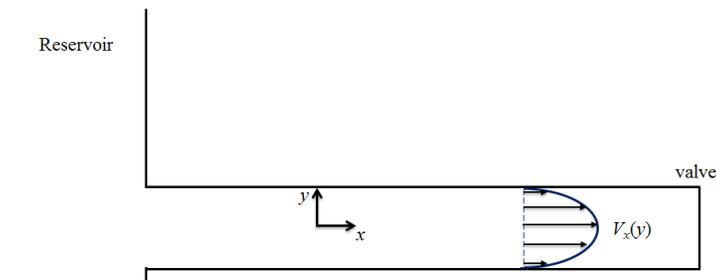


FIGURE 7.7 – Système Reservoir Tuyau Vanne (RTV).

linéairement le long du tuyau données comme suit :

$$\begin{cases} V_x(y) &= 2V_x^0 \left(1 - \frac{y^2}{R^2}\right), & 0 \leq y \leq R, \\ P(x) &= p_0 - \frac{32\rho_0 V_x^0 \nu}{D^2} x, & 0 \leq x \leq L. \end{cases} \quad (7.18)$$

où ν est le viscosité cinématique de l'eau ($\nu = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$); $D = 2R$ est le diamètre du tuyau ($D = 0.4 \text{ m}$) avec R le rayon de la conduite; la constante V_x^0 est la vitesse moyenne; ρ_0 est la densité initiale ($\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$); et la constante p_0 (jauge) est la pression dans le tuyau.

Il est important de noter qu'on passe d'un système à coordonnées cylindriques, vers un système à coordonnées cartésiennes (vu que LBM est écrit en coordonnées cartésiennes), on a des termes supplémentaires qui sont ajoutés aux équations 2-d Navier-

Stokes :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho V_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho V_x}{\partial x} = \underbrace{\frac{\rho V_y}{y}}_{\text{Termes du au système de coordonnées radiales}}, \quad (7.19)$$

Termes du au système de coordonnées radiales

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho V_y}{\partial t} + c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial r} \rho V_y^2 + \frac{\partial}{\partial x} \rho V_y V_x &= \\ &= \left[(\mu + \lambda) \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_x}{\partial x} \right) + \mu \Delta V_y \right] + \underbrace{\frac{2\mu + \lambda}{y} \left(\frac{\partial V_y}{\partial y} - \frac{V_y}{y} \right) - \frac{\rho}{y} V_y^2}_{\text{Termes du au système de coordonnées radiales}}, \end{aligned} \quad (7.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho V_x}{\partial t} + c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \rho V_y V_x + \frac{\partial}{\partial x} \rho V_x^2 &= \\ &= \left[(\mu + \lambda) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_x}{\partial x} \right) + \mu \Delta V_x \right] + \underbrace{\frac{\mu + \lambda}{y} \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\mu}{y} \frac{\partial V_x}{\partial y} - \frac{\rho}{y} V_y V_x}_{\text{Termes du au système de coordonnées radiales}}, \end{aligned} \quad (7.21)$$

où V_x est la vitesse selon x et V_y est la vitesse selon y .

Le schéma D2Q9 introduit au debut de ce chapitre (Eq. (7.9)) est utilisé pour résoudre l'équation Eq. (7.19), Eq. (7.20) et Eq. (7.21). On note que les extra-termes du au système de coordonnées radiales sont pris en compte dans le schéma LBM.

On considère le domaine $\Omega = [0, L] \times [0, H]$ et le maillage (réseau) $\mathcal{L}^0 = \{x_{i,j} \in \Delta x \mathbb{Z} \times \Delta y \mathbb{Z}, 1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y\}$ paramétrée par le pas d'espace $\Delta x = \Delta y$. Les conditions aux limites sont comme celles du cas précédent (1D), avec les conditions supplémentaires de vitesse radiale nulle et de non glissement (no slip) aux parois de la conduite. Ainsi, on utilise les schémas au bord suivants :

- En $x = 0$ (en amont) on a $P(x = 0) = p_0$: pour imposer une pression constante p_0 , on utilise un schéma d'anti-bounce back (anti-rebond) au bord comme suit :

$$\begin{cases} f_1(x_{1,j}) &= -f_3(x_{0,j}) + \frac{4-\alpha-2\beta}{18} \frac{p_0}{c_s^2}, \\ f_5(x_{1,j}) &= -f_7(x_{0,j-1}) + \frac{4+2\alpha+\beta}{18} \frac{p_0}{c_s^2}, \\ f_8(x_{1,j}) &= -f_6(x_{0,j+1}) + \frac{4+2\alpha+\beta}{18} \frac{p_0}{c_s^2}, \end{cases} \quad (7.22)$$

où p_0 est donnée au bord pour $1 \leq j \leq N_y$.

- En $x = L$ (en aval) on a $V_x(x = L) = 0$: pour imposer une vitesse nulle $V_x = 0$, on utilise un schéma bounce back (rebond) au bord comme suit :

$$\begin{cases} f_3(x_{N_x,j}) &= f_1(x_{N_x+1,j}), \\ f_6(x_{N_x,j}) &= f_8(x_{N_x+1,j+1}), \\ f_7(x_{N_x,j}) &= f_5(x_{N_x+1,j-1}) \end{cases} \quad (7.23)$$

où $1 \leq j \leq N_y$.

- A la frontière du tuyau on a $V_y(y = R) = 0$: pour imposer une vitesse nulle $V_y = 0$, on utilise un schéma bounce back (rebond) comme suit : Bounce back pour $x_{i,1}$ et

x_{i,N_y} où $1 \leq i \leq N_x$:

$$\begin{cases} f_4(x_{(i,1)}) = f_2(x_{(i,0)}), \\ f_5(x_{(i,1)}) = f_7(x_{(i-1,0)}), \\ f_6(x_{(i,1)}) = f_8(x_{(i+1,0)}). \end{cases} \quad (7.24)$$

$$\begin{cases} f_4(x_{(i,N_y)}) = f_2(x_{(i,N_y+1)}), \\ f_7(x_{(i,N_y)}) = f_5(x_{(i-1,N_y+1)}), \\ f_8(x_{(i,N_y)}) = f_6(x_{(i+1,N_y+1)}). \end{cases} \quad (7.25)$$

Le domaine est donnée par : $L = 1000\text{m}$, $D = 0.4\text{m}$ et les différents maillages (réseaux) suivants : $N_y = 20, 160$ et 500 , $N_x = \frac{N_y L}{D}$. Le nombre de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) est donné par $C_0 = c_s \frac{\Delta t}{\Delta x} = \frac{c_s}{\lambda}$, où $c_s = \lambda \sqrt{\frac{\alpha+4}{6}} = 1000\text{m/s}$ est la vitesse de l'onde. Par conséquent, le nombre CFL est $C_0 = \sqrt{\frac{\alpha+4}{6}}$. Ainsi, les paramètres LB sont fixés comme suit : $\alpha = 6C_0^2 - 4$, $\Delta t = \frac{\Delta x}{c_s} C_0$, $\alpha = -2$, et $\beta = 1$. Le pas de temps Δt et le pas de l'espace Δx sont fixés pour avoir une vitesse de propagation d'onde $c_s = 1000\text{m/s}$. Les autres paramètres de relaxation du schéma LB sont fixés par identification entre les équations Eq. (7.12), Eq. (7.13) et Eq. (7.20), Eq. (7.21) comme suit :

$$\mu_0 = \frac{\lambda^2}{3} \Delta t \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \rho = \nu_0 \times \rho \quad \Rightarrow \quad s_8 = \frac{1}{\frac{3\nu_0}{\lambda \Delta x} + \frac{1}{2}}. \quad (7.26)$$

$$\frac{\mu_0}{3} = \frac{-\alpha \lambda^2}{6} \Delta t \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \rho \quad \Rightarrow \quad s_3 = \frac{1}{\frac{1}{2} - \frac{2}{3\alpha} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right)}. \quad (7.27)$$

L'équation (7.26) est déterminée par la viscosité cinématique elle fixe le paramètre de relaxation s_8 , et l'équation (7.27), qui découle de la relation Stokes, fixe le paramètre de relaxation s_3 . Ainsi, pour modéliser le problème du coup de bélier, où $\nu_0 = 10^{-6}\text{m}^2/\text{s}$, les paramètres de relaxation sont $s_8 = 1.99999986$ et $s_3 = 199999953$. En effet, dans ce cas, le schéma LBM est instable car s_8 et s_3 sont très proches de la limite de stabilité ($s_8 < 2$, $s_3 < 2$).

Dans la suite, les différents tests sont effectués pour fixer les paramètres de relaxation s_3 et s_8 , dans le but de modéliser le coup de bélier en 2D sans perdre la stabilité du schéma. Les Figures 7.8, 7.9, 7.10 et 7.11 montrent la variation de la pression normalisée par la pression de Joukowski ($P_{Jou} = \rho_0 V_x^0 c_s$) en fonction du temps (mesurée au niveau de la vanne et sur la ligne centrale de la conduite). La Figure 7.8 montre la valeur maximale de s_8 qu'on peut prendre sans perdre la stabilité du schéma tout en respectant la relation de Stokes (Eq (7.27)). Dans ce cas, le schéma est trop dissipatif, d'où le maintien de la relation de Stokes n'est pas possible pour modéliser le coup de bélier. La Figure 7.9, on a $s_8 = 1.99965$ (i.e. viscosité $\nu_0 = 10^{-3}\text{m}^2/\text{s}$) et $s_3 = 1.1$. Avec ce choix, le schéma est beaucoup moins dissipatif et donne des résultats satisfaisants. On note que les oscillations observées sur les figures 7.8 et 7.9 sont physiques et sont dues aux ondes radiales (voir [LM16, LG17a, LG17b]). Ces ondes radiales sont excitées par la fermeture instantanée de la vanne et se propagent le long du tuyau. La figure 7.9 montre que ces ondes radiales se dissipent rapidement. Alors que, dans le cas où on augmente s_3 (1.45) sans changer la valeur de s_8 et sans perdre la stabilité, la figure 7.10 montre que les ondes radiales sont moins dissipées et que les ondes axiales restent inchangées. La figure 7.11 décrit le cas où s_3 est maintenu à la valeur maximale 1.45 alors que s_8 est égale à $s_8 = 1.9965$ pour réduire la viscosité (on a $\nu_0 = 10^{-2}\text{m}^2/\text{s}$). Dans ce cas, la figure 7.11 montre que la dissipation d'onde radiale reste inchangée tandis que les

ondes axiales sont plus dissipées que dans les cas précédents. Ces différents cas tests, montrent que le paramètre de relaxation s_3 (i.e. la viscosité de volume), gouverne le mécanisme de dissipation des ondes radiales; alors que le paramètre de relaxation s_8 (i.e. la viscosité de cisaillement), gouverne le mécanisme de dissipation des ondes axiales.

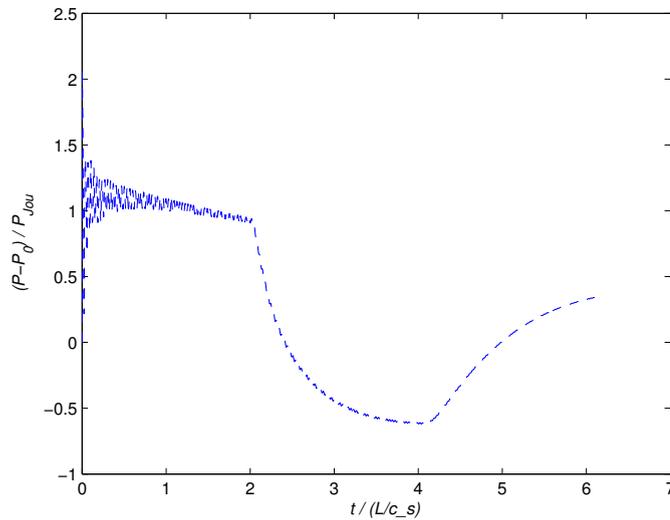


FIGURE 7.8 – Variation de la pression en fonction du temps mesurée au niveau de la vanne et sur la ligne centrale de la conduite ($x = L, y = 0$) où $s_3 = 1.75$, $s_8 = 1.4$ ($v_0 = 0.49$) et $Ny = 100$.

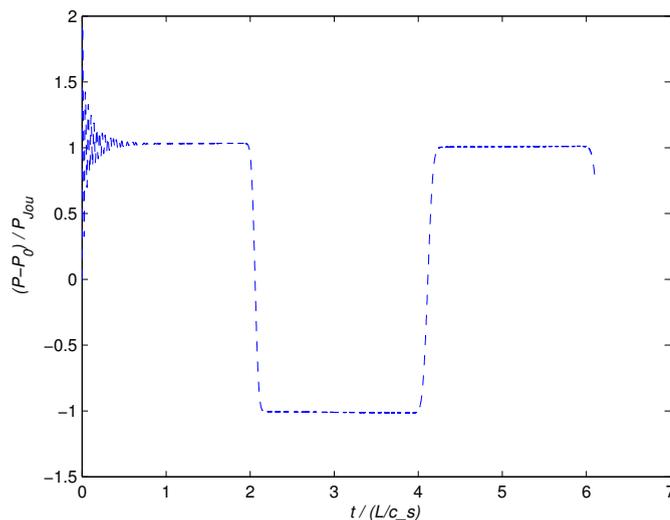


FIGURE 7.9 – Variation de la pression en fonction du temps mesurée au niveau de la vanne et sur la ligne centrale de la conduite ($x = L, y = 0$) où $s_3 = 1.1$, $s_8 = 1.99965$ ($v_0 = 10^{-3}$) et $Ny = 20$.

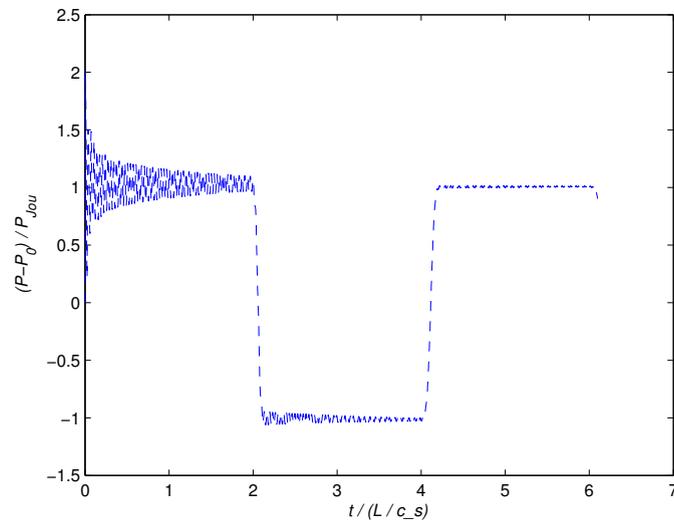


FIGURE 7.10 – Variation de la pression en fonction du temps mesurée au niveau de la vanne et sur la ligne centrale de la conduite ($x = L, y = 0$) où $s_3 = 1.45$ et $s_8 = 1.99965$ ($\nu_0 = 10^{-3}$) et $Ny = 20$.

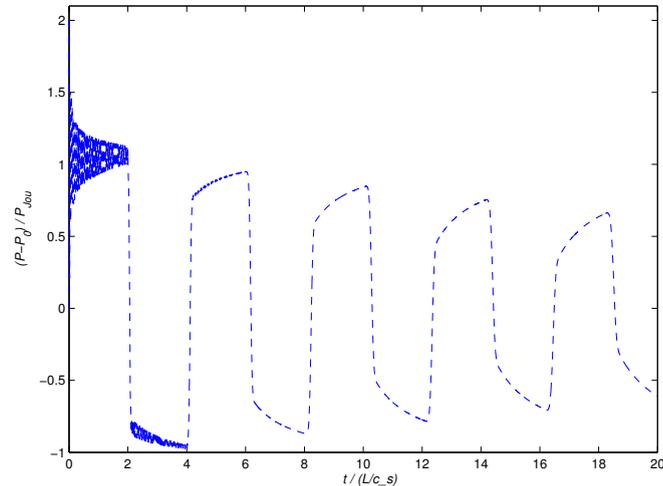


FIGURE 7.11 – Variation de la pression en fonction du temps mesurée au niveau de la vanne et sur la ligne centrale de la conduite ($x = L, y = 0$) où $s_3 = 1.45$ et $s_8 = 1.99965$ ($\nu_0 = 10^{-2}$) et $Ny = 20$.

Pour le reste des cas tests, on fixe les valeurs des paramètres de relaxation $s_3 = 1.45$ et $s_8 = 1.99965$. Dans un premier lieu, on étudie la convergence du schéma, ensuite on compare nos résultats aux autres méthodes numériques d'ordre élevé (Volumes finis type "Riemann solveur") [LM16, LG17c].

ORDRE DE CONVERGENCE DU SCHÉMA ET COMPARAISONS

Les différents maillages utilisés sont pour un nombre N_y (le nombre de nœuds dans la direction y) qui varie de $N_y = 20$ (maillage grossier), $N_y = 40, 80$ à $N_y = 160$ (maillage fin). Le nombre de nœuds N_x dans la direction x est choisi de tel sorte que $\Delta x = \Delta y$. On note que le schéma se révèle stable pour ces différents maillages. Comme on ne dispose pas de solution exacte, la solution obtenue avec $N_y = 320$ est considérée comme la solution exacte du problème. Deux cas tests de convergence sont examinés. Dans le premier cas, la durée de la mesure de la pression utilisée pour calculer les normes ℓ^1 et ℓ^2 est de L/a secondes. Ainsi, le saut important de la pression n'est pas inclut dans les calculs de convergence. Dans ce cas, le tableau 7.1 montre que l'ordre numérique de convergence est de environ 1. Dans le deuxième cas, la durée de mesure de la pression est complète (jusqu'à $6L/a$ secondes). Le tableau 7.2 montre un ordre de convergence numérique d'environ 1.

TABLE 7.1 – Ordre de convergence numériques de simulation du coup de bélier en 2D où $N_{yref} = 320$.

	ℓ_1	ℓ_2
40	1.2722	0.9280
80	1.2350	0.9810
160	1.3748	1.0947

TABLE 7.2 – Ordre de convergence numériques de simulation du coup de bélier en 2D où $N_{yref} = 320$.

	ℓ_1	ℓ_2
40	0.8331	0.7228
80	1.0914	0.8368
160	1.2740	1.0034

Le schéma D2Q9 est comparé à un schéma type volumes finis d'ordre 5 (basé sur un solveur de Riemann) (FVRS) [LM16, LG17c]. Les figures 7.12 a-d) montrent une comparaison entre le FVRS avec un maillage de taille $N_y = 20$ et le schéma LB avec les différents maillages $N_y = 20, N_y = 40, N_y = 80$ et $N_y = 160$. Pour plus de clarté de ces résultats, on a agrandi les différentes figures à des endroits différents. La figure 7.13 montre un zoom de la variation de pression en fonction du temps (jusqu'à $t = L/a$ secondes) et montre que le schéma D2Q9 LB converge au fur et à mesure que le maillage est raffiné. Cela est dû aussi que la viscosité numérique du schéma diminue quand on raffine de plus en plus le maillage (voir équation 7.26). La figure 7.13 (b) montre que la différence entre les ondes radiales devient petite entre les deux schémas pour le maillage raffiné. La figure 7.14 montre les ondes radiales pour un intervalle de temps $[4.2 L/a, 5.2 L/a]$ secondes. Ici aussi, on constate la convergence numérique du schéma LB et une bonne concordance globale entre les deux schéma LB (pour $N_y = 160$) et le schéma FVRS (Figure 7.14 (a)). Cependant, la figure 7.14 (a) montre qu'il y a une légère différence d'amplitude entre les résultats des deux schémas et que le schéma LBM est plus dispersif. En effet, la figure 7.15 montre que le schéma LB présente un effet de dispersion, en particulier quand le

maillage est grossier. Par conséquent, pour modéliser des modes supérieurs (ondes radiales et modes des ondes azimutales), qui sont de nature dispersive, il faut tenir compte de ce défaut de dispersion dû au schéma LB. Il faut, alors utiliser un maillage très fin pour palier ce défaut et assurer la précision de la modélisation du comportement d'ondes à haute fréquence.

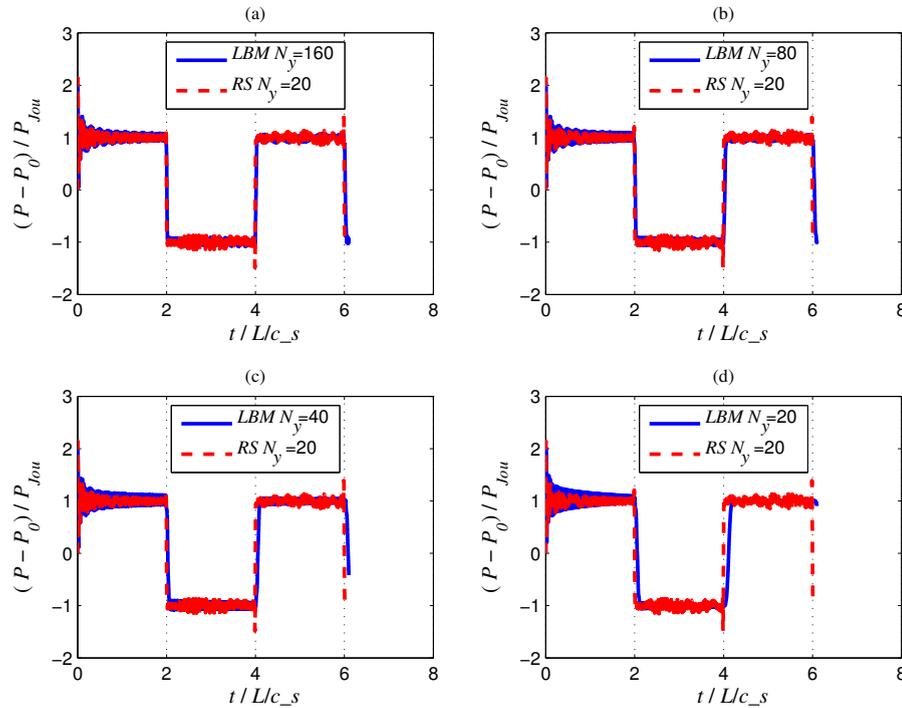


FIGURE 7.12 – Variation de la pression en fonction du temps mesurée au niveau de la vanne et sur la ligne centrale de la conduite ($x = L$, $y = 0$) en utilisant la méthode du solveur de Riemann 3eme/5eme ordre (RS) avec $N_y = 20$ et en utilisant la méthode LBM avec $s_3 = 1.45$ et $s_8 = 1.99965$ et pour les différents maillages (a) $N_y = 160$, (b) $N_y = 80$, (c) $N_y = 40$ et (d) $N_y = 20$.

DISCUSSION SUR LES PERFORMANCES DU SCHÉMA LBM LORS DE LA MODÉLISATION DES ONDES DISPERSIVES À HAUTES FRÉQUENCE

On considère dans cette section le système de conduite comme décrit par la Figure 7.16 avec les conditions initiales suivantes :

$$\begin{cases} \rho &= \rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3, \\ P &= p_0 = \rho_0 g H_0 = 1000 \times 9.81 \times 10 = 9.81 \times 10^4 \text{ Pa}, \\ V_y &= 0, \quad V_x = 0, \\ D &= 0.4 \text{ m}, \quad L = 100 \text{ m}, \\ c_s &= 1000 \text{ m/s}. \end{cases} \quad (7.28)$$

La conduite est supposée infinie et la limite en aval est suffisamment éloignée pour qu'aucune réflexion ne gêne la mesure des ondes. On considère une source d'ondes acoustiques située en amont ($x = 0$). La forme d'onde générée à la source est donnée dans la

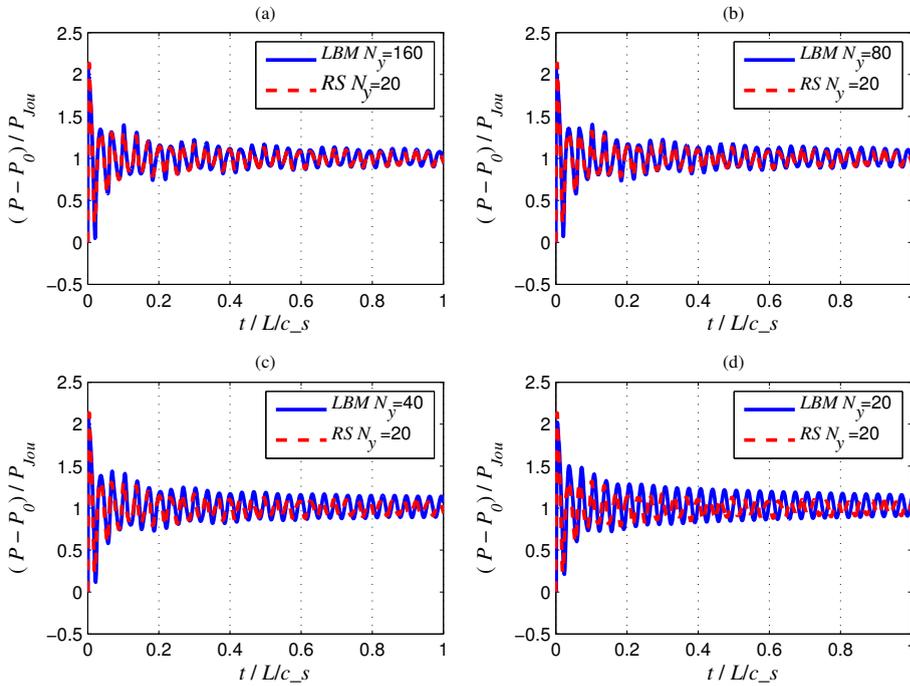


FIGURE 7.13 – Variation de la pression en fonction du temps mesurée au niveau de la vanne et sur la ligne centrale de la conduite ($x = L, y = 0$) en utilisant la méthode du Solveur de Riemann 3eme/5eme ordre (RS) avec $N_y = 20$ et en utilisant la méthode LBM avec $s_3 = 1.45$ et $s_8 = 1.99965$ et pour les differents maillages (a) $N_y = 160$, (b) $N_y = 80$, (c) $N_y = 40$ et (d) $N_y = 20$.

figure 7.17. Cette forme d'onde est choisie car elle permet de sélectionner la largeur de bande de fréquence souhaitée (FBW). La forme sélectionnée est donnée par :

$$\begin{cases} P_f(t) = P_s \exp \left[-4 \frac{w_c}{\tilde{\beta}^2} \log(10) \left(t - \frac{\tilde{\beta}}{w_c} \right)^2 \right] \sin \left[w_c \left(t - \frac{\tilde{\beta}}{w_c} \right) \right] \\ \text{where } 0 \leq t \leq t_{wave} = \frac{\tilde{\beta}}{w_c}, \end{cases} \quad (7.29)$$

où $w_c = 2\pi f_c$ est la fréquence angulaire (en rad/s) avec f_c est la fréquence centrale (en Hz); P_f est la pression dans la source; $P_s = 0.1 p_0$ est la pression maximale dans la source avec p_0 est la pression initial dans la conduite; t_{wave} est la durée pour générer l'onde dans la source; et $\tilde{\beta} = 80\pi$ est le coefficient qui controle le FBW. La source est considérée circulaire avec un diamètre donnée D_s et localisé sur la ligne centrale de la conduite. A l'instant $t = 0$ s, le fluide est supposé être au repos. Les conditions au bord à l'entrée de la conduite sont

$$\begin{cases} P(r) = \begin{cases} p_0 + P_f & \text{for } 0 < r < \frac{D_s}{2}, \\ p_0 & \text{sinon.} \end{cases} \\ V_y = 0, \\ \frac{\partial V_x}{\partial x} = 0. \end{cases} \quad (7.30)$$

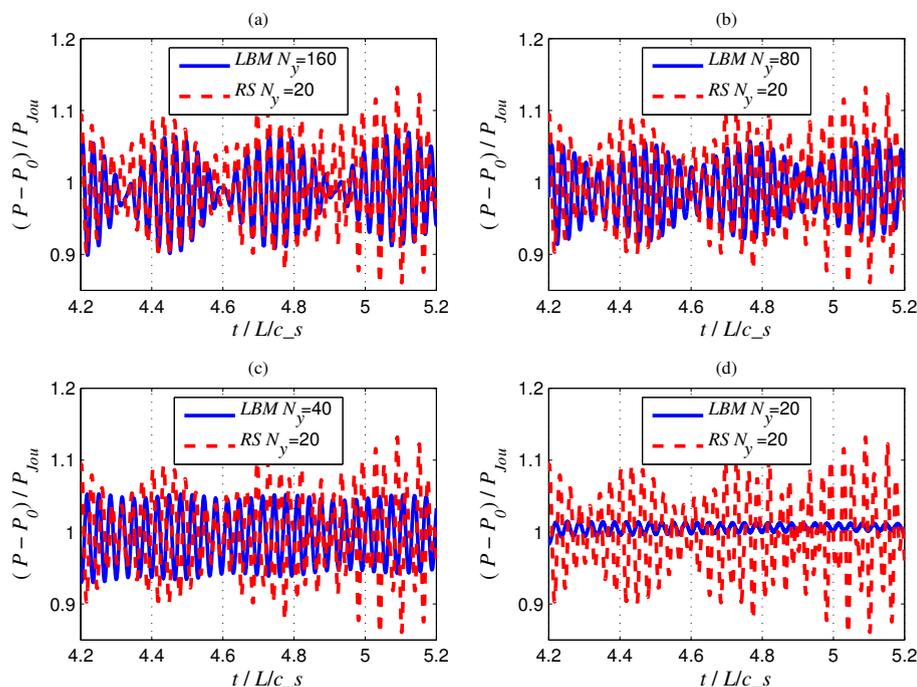


FIGURE 7.14 – Variation de la pression en fonction du temps mesurée au niveau de la vanne et sur la ligne centrale de la conduite ($x = L, y = 0$) en utilisant la méthode du Solveur de Riemann 3eme/5eme ordre (RS) avec $N_y = 20$ et en utilisant la méthode LBM avec $s_3 = 1.45$ et $s_8 = 1.99965$ et et pour les différents maillages (a) $N_y = 160$, (b) $N_y = 80$, (c) $N_y = 40$ et (d) $N_y = 20$.

En raison des effets de dispersion et dissipation dûs au schéma LB, on considère un maillage/réseau raffiné de la taille suivante $N_y \times N_x = 500 \times 62500$. Ce maillage devrait atténué les effets de dispersion. Comme le schéma LB est facilement parallélisable, le cas test est exécuté sur plusieurs (30) cœurs pour réduire le temps de calcul. Les figures 7.18 a et b montrent les variations de la pression mesurée à 25m de la source et sur la ligne centrale de la conduite ($x = 25 m, y = 0$) obtenues respectivement en utilisant les schémas FVRS et LBM. Les deux formes d'onde observés sur la figure 7.18 correspondent au mode d'onde plane et le premier mode radial [LM16, LG17a]. On note que, même en utilisant un maillage très fin, le schéma LB reste très dissipatif en comparaison avec le schéma FVRS d'ordre 5. Cela démontre la nécessité d'utiliser des schéma d'ordre élevé lors de la modélisation des ondes à hautes fréquences (dispersives). En conclusion ; l'effet des termes d'ordre élevé du schéma LB nécessiteraient une étude plus poussées pour déterminer si de meilleures résultats pourraient être obtenus pour la modélisation de ce type de problème.

CONCLUSION

La méthode de Boltzmann sur réseau à plusieurs les temps de relaxation (MRT) est utilisée pour modéliser l'acoustique, en particulier le problème du coup de bélier en une et deux dimensions d'espace (1D et 2D). Pour le cas 1D, on a montré que la méthode LBM

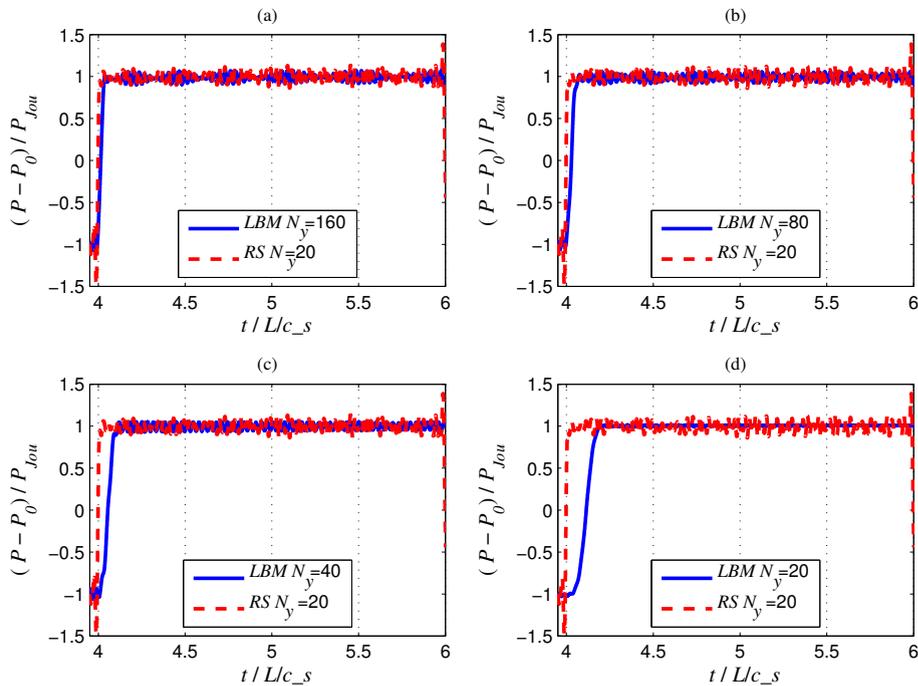


FIGURE 7.15 – Variation de la pression en fonction du temps mesurée au niveau de la vanne et sur la ligne centrale de la conduite ($x = L, y = 0$) en utilisant la méthode du Solveur de Riemann 3eme/5eme ordre (RS) avec $N_y = 20$ et en utilisant la méthode LBM avec $s_3 = 1.45$ et $s_8 = 1.99965$ et pour les différents maillages (a) $N_y = 160$, (b) $N_y = 80$, (c) $N_y = 40$ and (d) $N_y = 20$.

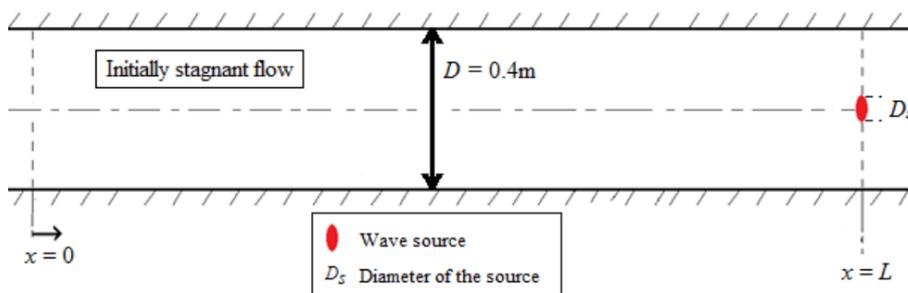


FIGURE 7.16 – Esquisse d'un système de conduite non bornée.

(MRT) donne la solution exacte du problème dans le cas d'un écoulement non visqueux. Ceci montre qu'on peu modéliser des écoulements non visqueux avec la méthode LB (il suffit de prendre α égale à 1 c'est à dire un nombre CFL égale à 1). Pour le cas 2D, le schéma LBM MRT est comparé à un schéma volumes finies d'ordre 5. Tout d'abord, le test classique du coup de bélier est considéré avec écoulement laminaire. On trouve alors que le paramètre de relaxation s_3 , qui pilote la viscosité de volume, gouverne le mécanisme de dissipation des ondes radiales. Par contre, le paramètre de relaxation s_8 , qui pilote la viscosité de cisaillement, gouverne le mécanisme de dissipation des ondes

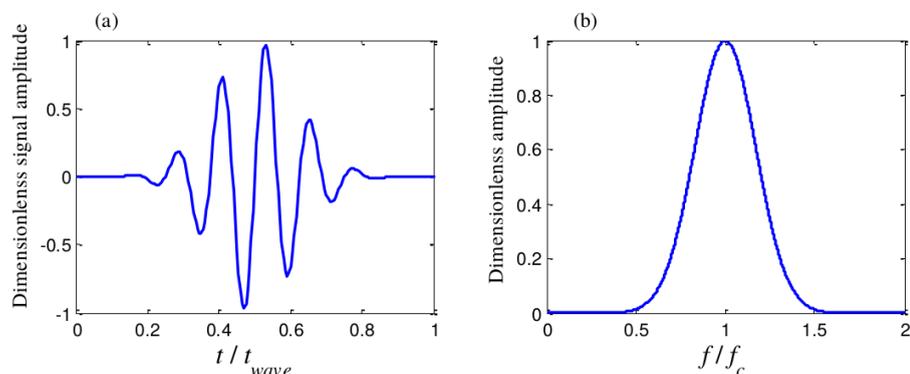


FIGURE 7.17 – Forme de la source ($\tilde{\beta} = 16/\pi$). Gauche : en fonction du temps ; Droite : en fonction de la fréquence.

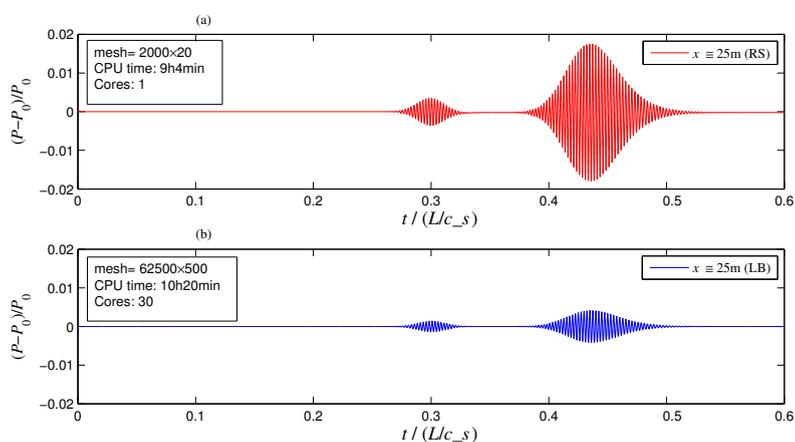


FIGURE 7.18 – Mesure de la variation de la pression en $(x = 25m, y = 0)$ où $D_s = 0.2D$. (a) Obtenue en utilisant le schéma FVRS. (b) Obtenue en utilisant le schéma LBM où $s_3 = 1.45$, $s_8 = 1.99965$.

planes. Dans l'ensemble, les résultats montrent que la méthode LBM est capable de modéliser les applications du coups de bélier à basses fréquences avec une bonne précision. Deuxièmement, un cas de test à haute fréquence est considéré, qui consiste à générer des ondes de hautes fréquences dans une conduite infinie. Dans ce cas, le mode onde plane (M0) et les premiers modes radiaux (M1) sont excités et se séparent. Les tests numériques pour ce cas test "difficile", montrent que le schéma LBM devient instable et que la dissipation/viscosité numérique (d'ordre supérieur) joue un rôle important quand on modélise des ondes à hautes fréquences. Les détails de ce travail sont publiés dans l'article [14] (voir annexe).

LA MÉTHODE LBM POUR LA SEGMENTATION D'IMAGES 3D

Ce travail traite le problème de la segmentation des tumeurs dans les images échographiques 3D. On propose une nouvelle approche basée sur une formulation variationnelle et la méthode LBM (à plusieurs temps de relaxation) MRT. En effet le terme d'attache aux données est donné par la fonction de log-vraisemblance et le terme de régularisation de l'énergie à minimiser est donné par l'équation de réaction diffusion de Allen-Cahn. Les schémas LBM D3Q7 et D3Q19 sont alors utilisés pour résoudre l'équation de diffusion non linéaire correspondante. On montre pour ces schémas comment choisir les différents paramètres LBM (plusieurs temps de relaxation, distributions d'équilibres, ...) pour obtenir un schéma exact en volume à l'ordre quatre. Ce choix s'avère plus pertinent qu'un schéma BGK (avec un seul temps de relaxation) LBM où tous les paramètres LB sont fixés par l'équation équivalente (macroscopique). Les applications numériques de cette nouvelle approche, sur des images échographiques réelles (fournies par un dermatologue), montrent des performances (augmentation de 10% l'indice de Dice et augmentation de 25 %) par rapport à la méthode level set [SCD17].

Ce chapitre est organisé comme suit : Dans un premier lieu, on commence par une brève description du schéma MRT LBM en 3 dimensions d'espace (3D) pour la segmentation utilisant les modèles de champ de phase. Ensuite, on fait une étude détaillée la consistance et de la stabilité du schéma. Enfin on montre les résultats numérique de méthode LBM sur des images échographiques synthétiques et cliniques. Ces résultats sont comparés avec d'autres approches de segmentations d'images.

LA MÉTHODE LBM MRT POUR LA SEGMENTATION D'IMAGES

Dans cette section, on décrit la méthode LBM pour une formulation variationnelle de l'énergie de Cahn-Hilliard. Le flot du gradient correspondant à cette formulation variationnelle est un problème de diffusion non linéaire [CLM92] [CLC12] [Wei99], dont la solution évolue au cours du temps vers la minimisation de cette énergie.

On considère l'énergie donnée par :

$$E_\epsilon(u) = -LL(u) + \frac{\mu}{c_W} E_\epsilon^{CH}, \quad (8.1)$$

où μ et c_W sont des constantes. Le terme $LL(u)$ représente le logarithme de la vraisemblance du rapport entre l'intensité à l'intérieur et l'extérieur de la région à segmenter

[SCD17]. Le terme de régularisation E_ϵ^{CH} est l'énergie de Cahn-Hilliard donnée par :

$$E_\epsilon^{CH}(u) = \int_{\Omega} \left(\epsilon \frac{|\nabla u|^2}{2} + \frac{1}{\epsilon} W(u) \right) dx. \quad (8.2)$$

Dans l'équation ci-dessus le terme W est une fonction potentiel à double puits définie par $W(u) = u^2(1-u)^2/2$. En utilisant la méthode de descente de gradient, on montre que la solution u (dans l'espace L^2) qui minimise l'énergie de Cahn-Hilliard (Eq. 8.2) est la solution de l'équation de réaction diffusion d'Allen-Cahn suivante :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left(\epsilon \Delta u - \frac{1}{\epsilon} W'(u) \right). \quad (8.3)$$

La dynamique de cette équation fait évoluer le champ de phase u de manière à prendre les deux valeurs distinctes, 0 et 1, dans chacune des phases. Cela crée une interface diffuse de taille ϵ où u varie d'une manière régulière de 0 à 1. Le flot du gradient de E_ϵ^{CH} est associée à une minimisation "géométrique". En effet, on peut montrer que l'énergie de Cahn-Hilliard Γ -converge, quand ϵ vers 0, vers l'aire de l'interface de transition à une constante multiplicative près $c_W = \int_0^1 W(s) ds$, qui ne dépend que de W (pour plus de détails voir par exemple [FT89] [Gur96]). On suppose maintenant que l'image à segmenter se compose de deux régions. La première, notée Ω_A est la région d'intérêt qui correspond à la phase 1, la deuxième notée Ω_B est la région "arrière-plan" qui correspond à la phase 0. On suppose que les distributions de l'intensité dans Ω_A et Ω_B sont différentes. D'après [SCD17], l'hypothèse de vraisemblance $H1$: "les distributions d'intensités $I(x)$ dans les deux régions Ω_A et Ω_B sont des variables aléatoires i.i.d. avec des distributions différentes P_A et P_B " est comparée à l'hypothèse $H0$: "toutes les distributions d'intensités en Ω_A et Ω_B sont des variables aléatoires i.i.d. suivant une distribution unique $P_{\Omega_A \cup \Omega_B}$ ". Le terme de l'attachement aux données (le terme d'énergie dans Eq. 8.1) est moins le logarithme de vraisemblance du rapport des deux hypothèses, donnée par :

$$LL = \log \left(\frac{\prod_{x \in \Omega_A} P_A(I(x)) \prod_{x \in \Omega_B} P_B(I(x))}{\prod_{x \in \Omega_A \cup \Omega_B} P_{\Omega_A \cup \Omega_B}(I(x))} \right). \quad (8.4)$$

On a alors :

$$LL = \sum_{x \in \Omega_A} \log P_A(I(x)) + \sum_{x \in \Omega_B} \log P_B(I(x)) + c, \quad (8.5)$$

où c est une constante qui ne joue pas de rôle dans la minimisation de LL . Dans la suite, les distributions P_A et P_B sont évaluées à l'aide des estimations non paramétriques de Parzen notées \hat{P}_A et \hat{P}_B . D'après le théorème d'équipartition asymptotique [CT91], on peut remplacer le terme $(1/|\Omega_A|) \sum_{x \in \Omega_A} \log P_A(I(x))$ par l'entropie $\sum_I P_A(I) \log P_A(I)$ (et de même pour P_B , \hat{P}_A et \hat{P}_B). Un calcul simple montre que :

$$\sum_I \hat{P}_A(I) \log \hat{P}_A(I) = \frac{1}{|\Omega_A|} \sum_{x \in \Omega_A} \log \hat{P}_A(I(x)) \quad (8.6)$$

$$= \text{Div}_{KL}(\hat{P}_A || P_A) + \sum_I P_A(I) \log P_A(I), \quad (8.7)$$

où Div_{KL} est la divergence de Kullback-Leibler. Ainsi, le logarithme de vraisemblance du rapport LL impliqué dans le terme d'attachement aux données s'écrit :

$$LL = (S_A + S_B), \quad (8.8)$$

avec

$$S_A = |\Omega_A| \sum_I \hat{P}_A(I) \log \hat{P}_A(I), \quad S_B = |\Omega_B| \sum_I \hat{P}_B(I) \log \hat{P}_B(I), \quad (8.9)$$

où $|\Omega_A| = \int_{\Omega_A} dx$, $|\Omega_B| = \int_{\Omega_B} dx$ et :

$$\hat{P}_A(I) = \frac{\int u^2 K_\sigma(I(x) - I) dx}{\int u^2 dx}, \quad (8.10)$$

$$\hat{P}_B(I) = \frac{\int (u - 1)^2 K_\sigma(I(x) - I) dx}{\int (u - 1)^2 dx}, \quad (8.11)$$

sont les estimations de Parzen [KFY05], [Pa62], pour les distributions P_A et P_B en fonction du champs de phase u . On note que K_σ est le noyau Gaussien avec un écart type σ . On a alors le résultat suivant :

Proposition ¹⁵. Nguyen, Tekitek, Delachartre, Berthier [15]

Le flot du gradient de l'énergie (8.1) est donné par :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 2u \log \hat{P}_A(I(x)) + 2(u - 1) \log \hat{P}_B(I(x)) + \frac{\mu}{c_W} \left(\varepsilon \Delta u - \frac{1}{\varepsilon} W'(u) \right). \quad (8.12)$$

Ainsi le flot (8.12) s'écrit sous la forme d'une équation de diffusion, avec un terme source, comme suit :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{K} \nabla u) + F, \quad (8.13)$$

où le coefficient de diffusion \mathcal{K} est donné par :

$$\mathcal{K} = \frac{\varepsilon \mu}{c_W}, \quad (8.14)$$

et le terme source F est :

$$F = 2u \log \hat{P}_A(I(x)) + 2(u - 1) \log \hat{P}_B(I(x)) - \frac{\mu}{c_W} \frac{1}{\varepsilon} W'(u). \quad (8.15)$$

L'évolution du flot du gradient (8.12) fait diminuer l'énergie E_ε vers un minimum local qui peut dépendre du choix de la condition initiale car le problème d'optimisation sous-jacent est non convexe. Dans le même temps, l'énergie $L^2 \|u\|_2$ de la solution de l'équation de diffusion non linéaire peut augmenter au cours du temps si la condition initiale se situe à l'intérieur de la tumeur. Les Figures 8.1 (a) et (b) montrent les résultats obtenus sur une image synthétique (voir Figure 8.41). Dans cet exemple, le minimum local est atteint au bout de 70 itération

LES SCHÉMAS LBM

On note que ce travail est plus exploratoire et concerne directement la possibilité d'implémenter efficacement des algorithmes de segmentation à l'échelle mésoscopique. Notre motivation première est le constat qu'il peut paraître assez artificiel de créer un modèle continu à partir de données discrètes pour ensuite le re-discrétiser à des fins d'implémentation. La question sous-jacente est la suivante : peut-on calibrer des schémas LBM qui, au-delà des lois de contraintes physiques qui sont généralement utilisées pour les

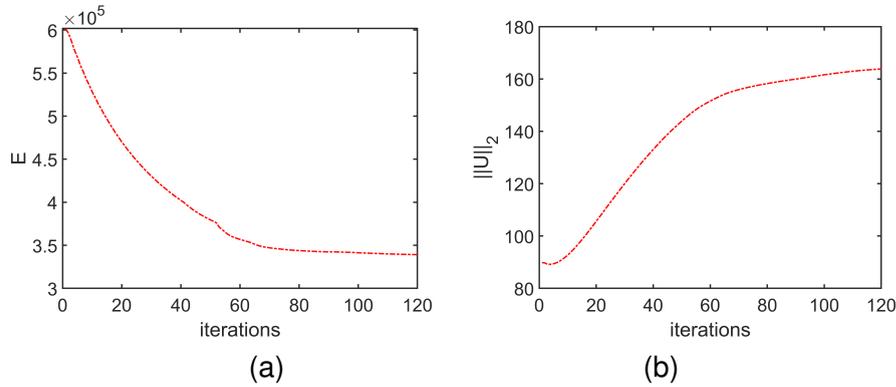


FIGURE 8.1 – (a) l'énergie E_ϵ en fonction du temps. (b) L^2 énergie $\|u\|_2$ en fonction du temps.

construire, puissent intégrer les informations pertinentes pour la segmentation ? Il existe très peu de contributions à l'heure actuelle concernant cette problématique. On peut citer [Wan17] et [Wen17] pour des implémentations de dynamiques level sets ou encore [CCS14] et [JLS99] pour du débruitage et de la détection de contours. Dans tous les cas, les schémas utilisés sont des schémas très simples de type BGK qui se révèlent plus ou moins pertinents en fonction de la complexité des images. Il est clair que la segmentation de tumeurs dans des images 3D UHF d'environ 75 millions de voxels par des schémas LBM présente des difficultés qui n'ont fait l'objet d'aucune investigation.

Compte tenu de leurs performances pour reproduire des écoulements ou des transferts de chaleurs [AFS09], [PD15], [MJA06], et de la facilité avec laquelle on peut les paralléliser, les schémas LBM sont devenus des outils numériques puissants aux applications multiples permettant des simulations en temps réel. Il est donc naturel d'essayer de construire de tels schémas pour notre problème qui implique des données particulièrement volumineuses.

Concrètement, il s'agit d'étudier la possibilité d'implémenter par un schéma LBM une équation de diffusion non linéaire, l'équation du flot (8.12), du type :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{K} \nabla u) + F, \quad (8.16)$$

dont le coefficient de diffusion \mathcal{K} est donné par :

$$\mathcal{K} = \frac{\varepsilon \mu}{c_W}, \quad (8.17)$$

et le terme source F par :

$$F = 2u \log \hat{P}_A(I(x)) + 2(u - 1) \log \hat{P}_B(I(x)) - \frac{\mu}{c_W} \frac{1}{\varepsilon} W'(u). \quad (8.18)$$

On note ici, que la principale difficulté provient de ce terme source.

• Les schémas BGK et MRT

Dans la suite, nous utiliserons deux schéma LBM 3D particuliers. Le premier est le schéma D3Q7 dont les 7 directions de vitesse et les poids sont donnés par (voir la figure 8.2) :

$$e_i = \begin{cases} (0, 0, 0) & i = 0 \\ (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1) & i = 1, 2, \dots, 6 \end{cases} \quad (8.19)$$

$$t_i = \begin{cases} 1/4 & i = 0 \\ 1/8 & i = 1, 2, \dots, 6 \end{cases} \quad (8.20)$$

Le second est le schéma D3Q19 dont les 19 directions de vitesse et les poids sont donnés par (voir la figure 8.3) :

$$e_i = \begin{cases} (0, 0, 0) & i = 0 \\ (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1) & i = 1, 2, \dots, 6 \\ (\pm 1, \pm 1, 0), (\pm 1, 0, \pm 1), (0, \pm 1, \pm 1) & i = 7, 8, \dots, 18 \end{cases} \quad (8.21)$$

$$t_i = \begin{cases} 1/3 & i = 0 \\ 1/18 & i = 1, 2, \dots, 6 \\ 1/36 & i = 7, 8, \dots, 18 \end{cases} \quad (8.22)$$

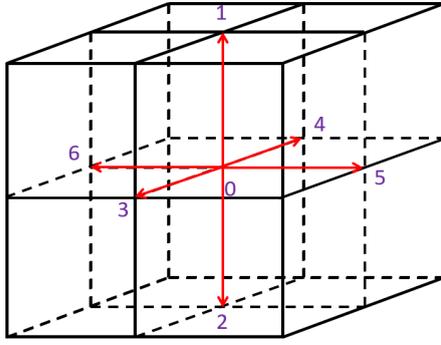


FIGURE 8.2

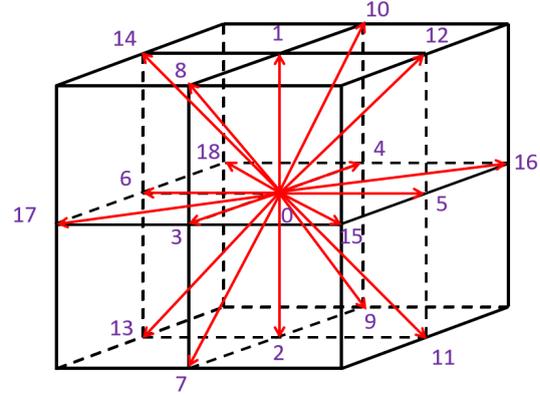


FIGURE 8.3

FIGURE 8.4 – Vitesse discrètes LBM en dimension 3 : (8.2) Le schéma D3Q7. (8.3) Le schéma D3Q19.

Les simulations que nous proposons dans la suite sont réalisées avec les réseaux D3Q7 et D3Q19. Le choix de ces réseaux peut être justifié comme suit. Le réseau D3Q27, le plus précis, nécessite beaucoup plus de calculs qui finalement n'influent que très peu sur les résultats de la segmentation. Quant au réseau D3Q15, il est connu pour introduire des oscillations numériques dues au problème de parité [dHGM02].

• **L'implémentation de la segmentation par des schémas LBM MRT** On note ici, qu'au lieu de résoudre l'équation (8.12), on résout l'équation du flot multigrilles de gradient qui est donnée par :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} / |\Omega_{\bar{x}}| = \quad (8.23)$$

$$2\bar{u} \sum_I \hat{P}_{\bar{x}}(I) \log \hat{P}_A(I) + 2(\bar{u} - 1) \sum_I \hat{P}_{\bar{x}}(I) \log \hat{P}_B(I) + \frac{\mu}{c_w} \left(\frac{\varepsilon}{a^2} \bar{\Delta} \bar{u} - \frac{1}{\varepsilon} W'(\bar{u}) \right).$$

où $\bar{\Delta}$ est l'opérateur Laplacien à l'échelle a . Il s'agit d'une équation de diffusion non linéaire de terme source :

$$F = |\Omega_{\bar{x}}| \left(2\bar{u} \sum_I \hat{P}_{\bar{x}}(I) \log \hat{P}_A(I) + 2(\bar{u} - 1) \sum_I \hat{P}_{\bar{x}}(I) \log \hat{P}_B(I) - \frac{\mu}{c_w} \frac{1}{\varepsilon} W'(\bar{u}) \right), \quad (8.24)$$

et dont le coefficient de diffusion est donné par :

$$\mathcal{K} = \frac{|\Omega_{\bar{x}}| \varepsilon \mu}{a^2 c_W}. \quad (8.25)$$

Remarque : Le passage du problème du flot de gradient (8.12) vers les problème flot multigrilles de gradient (ci-dessus), nous permet de réduire le temps de calcul, enjeu crucial pour une utilisation pratique dans un contexte clinique, et de gagner en précision et en stabilité. Pour faire ce passage vers le problème du flot multigrilles de gradient, l'image est décomposée en cellules de taille a dont les coordonnées sont notées \bar{x} avec $x = a\bar{x}$. On note aussi $\bar{u}(\bar{x}, t) = u(x, t)$, $\Omega_{\bar{x}} = \{x \in \bar{x}\}$ et $\hat{P}_{\bar{x}}(I)$ l'estimation de Parzen de la distribution d'intensité dans le volume $\Omega_{\bar{x}}$. Ainsi on obtient le problème du flot multigrilles de gradient (8.23) (ci-dessus), en écrivant $(\delta E_{\varepsilon} / \delta \bar{u})(\bar{u}) = |\Omega_{\bar{x}}| (\delta E_{\varepsilon} / \delta u)(\bar{u})$ et utilisant les hypothèses du théorème d'équipartition asymptotique [15].

À partir de maintenant, nous adoptons les notations suivantes : $\Delta x = \delta x$, $\Delta t = |\Omega_{\bar{x}}| \tau$ et $\lambda = \Delta x / \Delta t$.

• Les schémas MRT D3Q7 et D3Q19

Nous proposons deux implémentations LBM MRT de l'équation (8.23), l'une utilisant le réseau D3Q7, l'autre le réseau D3Q19. Pour cela, nous commençons par préciser comment définir la matrice \mathbf{M} en lien avec les moments considérés. Nous renvoyons à [dHGM02] pour plus d'informations.

Soit $\mathbf{m} = [m_0, m_1, \dots, m_n]^T$, pour calculer les moments m_i , on construit par Gram-Schmidt une base duale orthogonale à partir de polynômes en les vecteurs colonnes suivants (en utilisant la notation ket de Dirac) :

$$|e_x\rangle = [e_{0,x}, e_{1,x}, \dots, e_{n,x}]^T, \quad (8.26)$$

$$|e_y\rangle = [e_{0,y}, e_{1,y}, \dots, e_{n,y}]^T, \quad (8.27)$$

$$|e_z\rangle = [e_{0,z}, e_{1,z}, \dots, e_{n,z}]^T. \quad (8.28)$$

Pour le réseau D3Q7, cette base duale est donnée par (en utilisant la notation bra de Dirac) [LYZ16] :

$$\langle 1| = [1, 1, 1, 1, 1, 1, 1], \quad m_0 = \langle 1|\mathbf{u}\rangle = u, \quad (8.29)$$

$$\lambda \langle e_x| = [0, \lambda, -\lambda, 0, 0, 0, 0], \quad m_1 = \lambda \langle e_x|\mathbf{u}\rangle, \quad (8.30)$$

$$\lambda \langle e_y| = [0, 0, 0, \lambda, -\lambda, 0, 0], \quad m_2 = \lambda \langle e_y|\mathbf{u}\rangle, \quad (8.31)$$

$$\lambda \langle e_z| = [0, 0, 0, 0, 0, \lambda, -\lambda], \quad m_3 = \lambda \langle e_z|\mathbf{u}\rangle, \quad (8.32)$$

$$7 \langle e_x^2 + e_y^2 + e_z^2| - 6 \langle 1| = [-6, 1, 1, 1, 1, 1, 1], \quad m_4 = 7 \langle e_x^2 + e_y^2 + e_z^2|\mathbf{u}\rangle - 6 \langle 1|\mathbf{u}\rangle, \quad (8.33)$$

$$3 \langle e_x^2| - \langle e_x^2 + e_y^2 + e_z^2| = [0, 2, 2, -1, -1, -1, -1], \quad m_5 = \langle 2e_x^2 - (e_x^2 + e_y^2 + e_z^2)|\mathbf{u}\rangle, \quad (8.34)$$

$$\langle e_y^2 - e_z^2| = [0, 0, 0, 1, 1, -1, -1], \quad m_6 = \langle e_y^2 - e_z^2|\mathbf{u}\rangle. \quad (8.35)$$

où λ est un paramètre non nul que l'on choisit généralement égal à 1. On obtient par conséquent pour matrice \mathbf{M} la matrice :

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & -\lambda \\ -6 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 2 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (8.36)$$

Initialiser u

Calculer le terme source F

Calculer le vecteur de terme source \mathbf{F}

Calculer \mathbf{M} , \mathbf{M}^{-1} , \mathbf{S} et \mathbf{F}_{mo}

Tant que $\text{Tol} > 10^{-3}$ faire

- Transformer en espace des moments : $\mathbf{m}^{(k)} = \mathbf{M}\mathbf{u}^{(k)}$
- Ajouter le terme source (Strang splitting) : $\mathbf{m}^{(k)} \leftarrow \mathbf{m}^{(k)} + \Delta t \mathbf{F}_{mo}^{(k)}/2$
- Evaluer les moments
- Faire la collision (moment de relaxation) : $\mathbf{m}^{(k)} \leftarrow (\mathbf{Id} - \mathbf{S})\mathbf{m}^{(k)} + \mathbf{S}\mathbf{m}^{eq(k)}$
- Ajouter le terme source (Strang splitting) : $\mathbf{m}^{(k)} \leftarrow \mathbf{m}^{(k)} + \Delta t \mathbf{F}_{mo}^{(k)}/2$
- Transformer en l'espace initiale : $\mathbf{u}^{(k)} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{m}^{(k)}$
- Calculer des conditions aux bords : conditions d'anti-bounce-back
- Faire la propagation : $f_i^{(k+1)}(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) \leftarrow f_i^{(k+1)}(x, t)$
- Mettre à jour la distribution : $u = \sum_{i=0}^q f_i$
- Mettre à jour le terme source F
- Mettre à jour le vecteur de terme source \mathbf{F}_{mo}

Fin

Retourner u

CONSISTANCE ET STABILITÉ DE L'ALGORITHME MRT

Nous expliquons dans cette section comment choisir les différents paramètres des schémas MRT décrits ci-dessus pour gagner en précision et en stabilité. Il s'agit d'une étape cruciale qui peut prêter à confusion lorsqu'on compare les stratégies de mise en œuvre des modèles LBM. Par exemple, dans [NGK18], les auteurs ne réussissent pas à trouver les paramètres pertinents pour les schémas MRT. Comme montré dans la suite, et en ce qui concerne notre application, les schémas MRT fonctionnent beaucoup mieux que les schémas BGK lorsque les paramètres sont correctement réglés.

CONSISTANCE

Nous reprenons l'approche de [DL09] dans laquelle les auteurs expliquent comment ajuster les paramètres de relaxation dits quartiques afin d'obtenir des schémas exacts à l'ordre 4 pour le modèle thermique et les modes de relaxation diffusifs du problème de Stokes. Rappelons que les paramètres du schéma MRT D3Q7 sont α , s_1 , s_2 et s_3 et ceux du schéma MRT D3Q19 sont α , β , s_1 et s_2 . Là encore, nous retirons les barres pour simplifier les notations.

Proposition ¹⁶. *Nguyen, Tekitek, Delachartre, Berthier [15]*

Il existe des paramètres de relaxation pour lesquels les schémas de diffusion MRT D3Q7 et D3Q19 sont exacts à l'ordre 4, c'est-à-dire tels que :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathcal{K} \nabla u) = O(\Delta t^4), \quad (8.44)$$

et donc sans diffusion numérique.

Preuve. Nous renvoyons à [DL09] pour plus de détails et ne donnons que les principaux arguments de la preuve. Rappelons que λ désigne le rapport $\Delta x/\Delta t$. En utilisant les développements de Taylor, on peut montrer que :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathcal{K} \nabla u) + A \Delta t^2 + B \Delta t^3 = O(\Delta t^4), \quad (8.45)$$

avec :

$$\mathcal{K} = \frac{\lambda^2}{21} \Delta t (6 + \alpha) \left(\frac{1}{s_1} - \frac{1}{2} \right), \quad (8.46)$$

pour le schéma D3Q7 et :

$$\mathcal{K} = \frac{\lambda^2}{57} \Delta t (30 + \alpha) \left(\frac{1}{s_1} - \frac{1}{2} \right), \quad (8.47)$$

pour le schéma D3Q19. En choisissant les paramètres quartiques suivants pour le schéma D3Q7 :

$$s_2 = \left[\frac{6 + \alpha}{1 - \alpha} \left(\frac{1}{s_1} - \frac{1}{2} \right) + \frac{3\alpha + 4}{12(\alpha - 1) \left(\frac{1}{s_1} - \frac{1}{2} \right)} \right]^{-1}, \quad (8.48)$$

$$s_3 = \left[\frac{1}{6 \left(\frac{1}{s_1} - \frac{1}{2} \right)} + \frac{1}{2} \right]^{-1}, \quad (8.49)$$

on obtient $A = B = 0$ dans (8.45). De la même manière [La18], en choisissant les paramètres quartiques suivants pour le schéma D3Q19 :

$$s_1 = \frac{1}{\frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{2}}, \quad s_2 = \frac{2}{\frac{1}{\sqrt{3}} + 1}, \quad (8.50)$$

on obtient aussi $A = B = 0$ dans (8.45), ce qui termine la preuve.

Dans les expériences décrites ci-dessous, nous choisissons les paramètres de la façon suivante.

— Pour le réseau D3Q7 :

$$s_1 = 2/(1/(\sqrt{3} + 1)), \quad (8.51)$$

$$s_2 = \left[\frac{6 + \alpha}{1 - \alpha} \left(\frac{1}{s_1} - \frac{1}{2} \right) + \frac{3\alpha + 4}{12(\alpha - 1) \left(\frac{1}{s_1} - \frac{1}{2} \right)} \right]^{-1}, \quad (8.52)$$

$$s_3 = \left[\frac{1}{6 \left(\frac{1}{s_1} - \frac{1}{2} \right)} + \frac{1}{2} \right]^{-1}. \quad (8.53)$$

Le paramètre α est fixé par le coefficient de diffusion suivant (8.46).

— Pour le réseau D3Q19 :

$$s_1 = \frac{1}{\frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{2}}, \quad (8.54)$$

$$s_2 = \frac{2}{\frac{1}{\sqrt{3}} + 1}, \quad (8.55)$$

$$\beta = 0. \quad (8.56)$$

Le paramètre α est fixé par le coefficient de diffusion suivant (8.47).

STABILITÉ

Nous proposons maintenant des expériences numériques afin de démontrer la stabilité des schémas D3Q7 et D3Q19, les paramètres étant fixés comme ci-dessus. Ces expériences sont basées sur l'analyse classique de Von Neumann dans l'espace de Fourier (voir [LL00]). On cherche les solutions sous la forme d'ondes planes $f_j = \phi_j e^{i(\omega t - k \cdot x)}$, $j = 0, 1, \dots, 6$, avec un vecteur d'onde $k = (k_x, k_y, k_z)$, une densité uniforme u et éventuellement une vitesse uniforme de convection $V = (V_x, V_y, V_z)$. On suppose que les conditions aux limites sont des conditions périodiques. Considérons, pour le réseau D3Q7 :

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}^0 + \delta \mathbf{f}, \quad (8.57)$$

où $\mathbf{f}^0 = (f_0, \dots, f_7)$ représente l'état d'équilibre uniforme spécifié par la densité u (moment conservé d'ordre zero) et la vitesse vectorielle $\mathbf{V} = (V_x, V_y, V_z)$, et $\delta \mathbf{f}$ est une petite perturbation. Dans notre contexte, il n'y a pas de convection et nous pouvons donc choisir $V_x = V_y = V_z = 0$. L'insertion de l'équation (8.57) dans l'équation de Boltzmann discrète (2.3) avec l'opérateur de collision (2.12) conduit à :

$$\mathbf{f}(x, t + \Delta t) = \mathbf{G} \mathbf{f}(x, t), \quad (8.58)$$

où \mathbf{G} est la matrice d'amplification. Soit $p = e^{ik_x}$, $q = e^{ik_y}$ et $r = e^{ik_z}$, les facteurs de phase. La matrice d'amplification \mathbf{G} du schéma pour le réseau D3Q7 peut être écrite comme le produit :

$$\mathbf{G} = \mathbf{P} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{\Psi} \mathbf{M}, \quad (8.59)$$

où :

$$\mathbf{\Psi} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & s_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & s_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_3 \end{bmatrix}, \quad (8.60)$$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/p & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/q & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/r \end{bmatrix}, \quad (8.61)$$

et \mathbf{M} est la matrice de relaxation (8.36). La stabilité du schéma repose sur l'équation (8.58), et se présente donc comme un problème de valeurs propres qui nécessite par conséquent la détermination des valeurs propres de la matrice d'amplification \mathbf{G} . Ces dernières sont obtenues en résolvant numériquement l'équation de dispersion suivante [L00] :

$$Q(z) = \det(\mathbf{G} - z\mathbf{Id}) = 0, \quad (8.62)$$

où $z = e^{i\Delta t}$ est le facteur de temps. En effet pour un vecteur d'onde k donné, c'est-à-dire pour p, q et r donnés, on calcule les valeurs propres $z(k)$ qui sont les solutions de (8.62). On fait alors varier le vecteur d'onde k et on étudie le comportement des valeurs propres $z_j(k)$. En faisant varier le module du vecteur d'onde k entre 0 et π (pour des raisons de périodicité), on calcule numériquement les valeurs propres de la matrice \mathbf{G} , les racines z_j du polynôme Q , pour un jeu de paramètres donné.

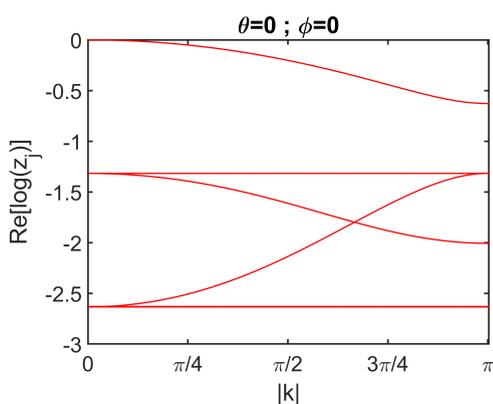


FIGURE 8.5 – (a)

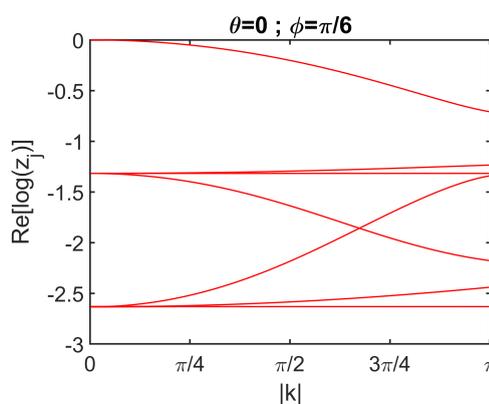


FIGURE 8.6 – (b)

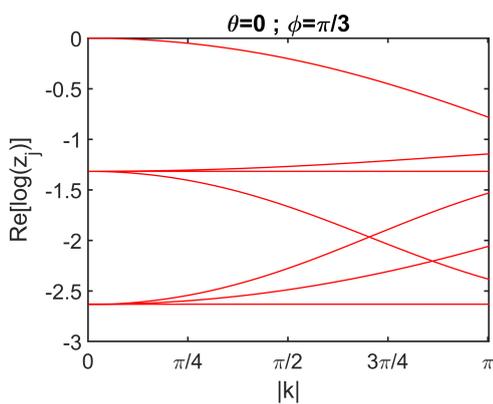


FIGURE 8.7 – (c)

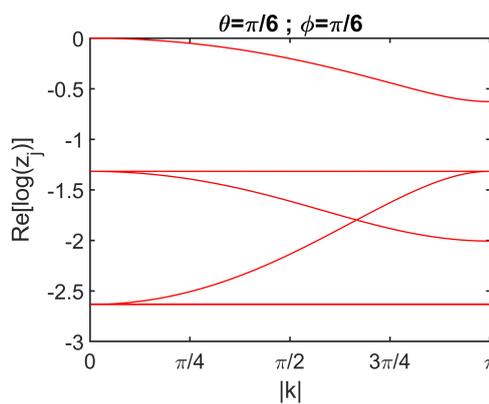


FIGURE 8.8 – (d)

FIGURE 8.9 – Valeurs propres logarithmiques $Re(\ln(z_j))$ en fonction du vecteur d'onde k pour le schéma de D3Q7. (8.5) Angle azimutal $\theta = 0$ et un angle polaire $\phi = 0$; (8.6) $\theta = 0, \phi = \pi/6$; (8.7) $\theta = 0, \phi = \pi/3$; (8.8) $\theta = \pi/6, \phi = \pi/6$.

Le schéma devient instable lorsque l'une des valeurs propres de \mathbf{G} est supérieure à 1 ou de manière équivalente lorsque l'une des solutions $z_j, j = 0, 1, \dots, 6$, de l'équation de dispersion (8.62) satisfait $Re(\ln(z_j)) \geq 0$ [SC96]. Pour calculer les valeurs propres de la matrice \mathbf{G} , on a utilisé les bibliothèques numériques standard d'algèbre linéaire comme LAPACK. Les simulations illustrées à la figure 8.9 pour la segmentation de la tumeur 8.55

montrent que le schéma D3Q7 est effectivement stable. Une étude similaire peut être menée pour le réseau D3Q19. Les résultats sont présentés à la figure 8.14.

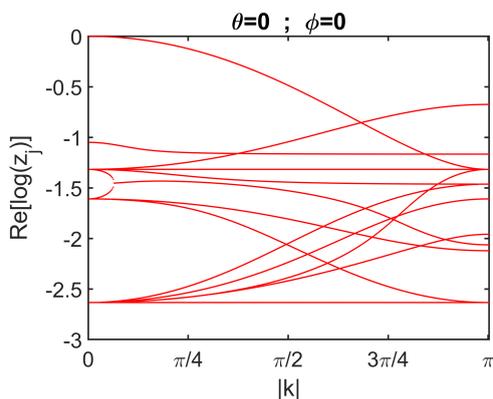


FIGURE 8.10 – (a)

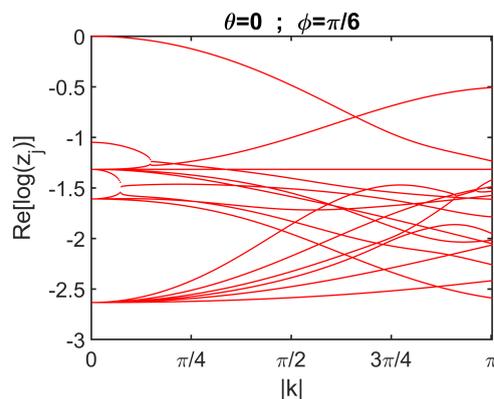


FIGURE 8.11 – (b)

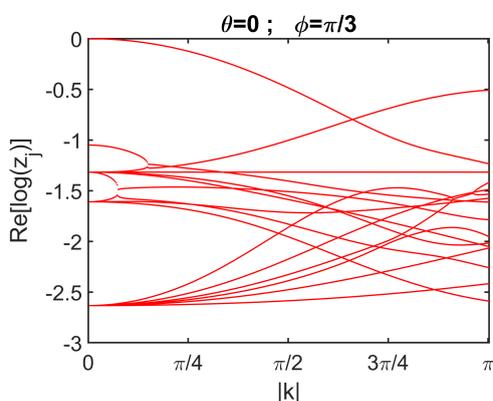


FIGURE 8.12 – (c)

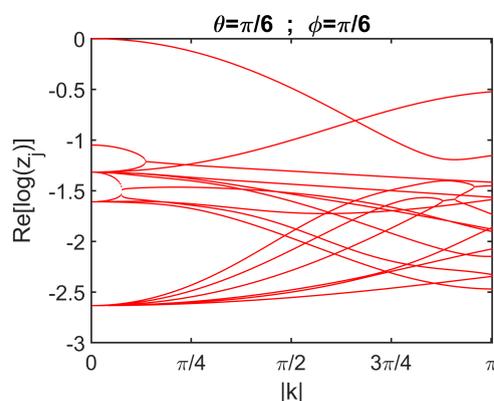


FIGURE 8.13 – (d)

FIGURE 8.14 – Valeurs propres logarithmiques $Re(\ln(z_j))$ en fonction du vecteur d'onde k pour le schéma de D3Q19. (8.10) Angle azimutal $\theta = 0$ et un angle polaire $\phi = 0$; (8.11) $\theta = 0$, $\phi = \pi/6$; (8.12) $\theta = 0$, $\phi = \pi/3$; (8.13) $\theta = \pi/6$, $\phi = \pi/6$.

Il est très important de souligner ici que ces résultats de stabilité sont dus au choix des paramètres décrits précédemment.

STABILITÉ BGK *versus* STABILITÉ MRT

Dans toute cette partie l'implémentation BGK, ou à simple temps de relaxation (SRT), que nous utilisons est tirée de [CCS14]. Nous comparons, en terme de stabilité, les schémas BGK et les schémas MRT, l'objectif étant de montrer tout l'intérêt qu'il y a à introduire des paramètres de relaxation supplémentaires pour renforcer la stabilité. Pour chaque schéma, nous calculons l'erreur relative :

$$Err = \frac{\|u^{n+1} - u^n\|_2}{\|u^n\|_2}, \quad (8.63)$$

où $u^n = u(t^n = n\delta t)$. Cette erreur relative doit diminuer au cours du temps si le schéma est numériquement stable.

Nous avons eu l'occasion de le souligner, le problème principal pour la stabilité provient du terme source. Dans l'algorithme 2, nous avons choisi d'intégrer ce terme source via un Strang splitting [HV03]. En effet, le Strang splitting traite le terme source de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^{(k)} &\leftarrow \mathbf{m}^{(k)} + \Delta t \mathbf{F}_{mo}^{(k)} / 2 \\ \mathbf{m}^{(k)} &\leftarrow (\mathbf{Id} - \hat{\mathbf{S}}) \mathbf{m}^{(k)} + \hat{\mathbf{S}} \mathbf{m}^{eq(k)} \\ \mathbf{m}^{(k)} &\leftarrow \mathbf{m}^{(k)} + \Delta t \mathbf{F}_{mo}^{(k)} / 2. \end{aligned}$$

Alternativement, on peut considérer une intégration directe :

$$\mathbf{m}^{(k)} \leftarrow (\mathbf{Id} - \hat{\mathbf{S}}) \mathbf{m}^{(k)} + \hat{\mathbf{S}} \mathbf{m}^{eq(k)} + \Delta t \mathbf{F}_{mo}^{(k)}. \quad (8.64)$$

Ceci est également valable pour l'algorithme BGK. Pour évaluer l'importance du choix de la prise en compte du terme source, nous effectuons des tests à partir de deux images. Pour l'image de synthèse, les paramètres sont fixés comme suit : $\mathcal{K} = 0.3 \times 10^{-3}$, $\mu = 0.01$, $\Delta t = 0.04$ et $\Delta t = 0.0574$. L'échelle est de $a = 4$. Pour l'image du jeu de données cliniques, les paramètres sont fixés comme suit : $\mathcal{K} = 0.5 \times 10^{-3}$, $\mu = 0.079$, $\Delta t = 0.015$ et $\Delta t = 0.0276$. L'échelle est également de $a = 4$. La figure 8.23 montre les résultats que l'on obtient en comparant des implémentations BGK et MRT à partir du réseau D3Q7.

On tire les conclusions suivantes.

- Pour le schéma BGK : l'utilisation du Strang splitting permet de meilleures performances en terme de convergence pour des petits pas de temps (voir les figures 8.15, 8.19). Cependant, en augmentant le pas de temps, on perd en stabilité (voir les figures 8.17 et 8.21). L'utilisation de l'intégration directe assure une certaine stabilité, même si la convergence n'est pas rapide. On choisira donc cette seconde solution.
- Pour le schéma MRT : les résultats montrent qu'il est préférable d'utiliser le Strang splitting.

Ces premiers tests justifient le choix fait du Strang splitting dans l'algorithme 2, d'une part, et d'autre part montrent déjà les problèmes de stabilité du schéma BGK. Les tests qui sont décrits ci-dessous confirment ce dernier point.

Pour la première comparaison, nous utilisons une image synthétique. Les paramètres sont définis comme suit : $\mathcal{K} = 0.3 \times 10^{-3}$, $\mu = 0.01$, $\Delta t = 0.04$ et $\Delta t = 0.05$. L'échelle est de $a = 4$. Les résultats des simulations sont illustrés à la figure 8.30. Dans le cas D3Q7, nous pouvons voir que le schéma BGK est beaucoup plus sensible à l'augmentation du pas de temps et devient clairement instable pour $\Delta = 0.05$, alors que le schéma MRT se comporte de la même façon. Le cas D3Q19 confirme cette observation et montre que l'instabilité du schéma BGK n'est pas causée par le choix du réseau. Nous arrivons à la même conclusion en utilisant l'image 8.62 du jeu de données cliniques. Les paramètres sont définis comme suit : $\mathcal{K} = 0.5 \times 10^{-3}$, $\mu = 0.079$, $\Delta t = 0.015$ et $\Delta t = 0.025$. L'échelle est de $a = 4$. Les résultats des simulations sont illustrés à la figure 8.35.

En conclusion, il apparaît très clairement que l'approche MRT est une bonne stratégie pour obtenir des performances pertinentes et conduit à des schémas se comportant beaucoup mieux que les schémas BGK.

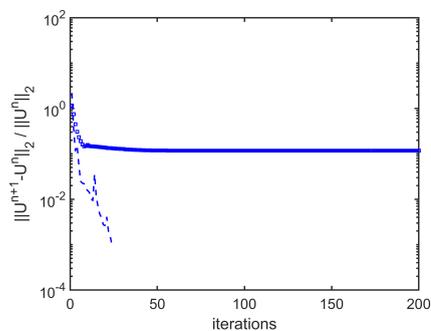


FIGURE 8.15

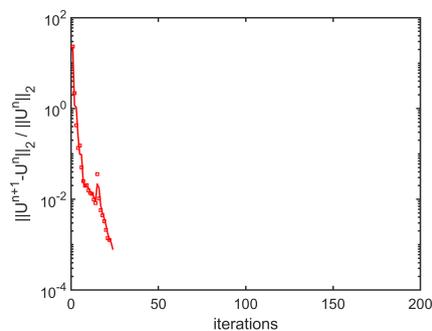


FIGURE 8.16

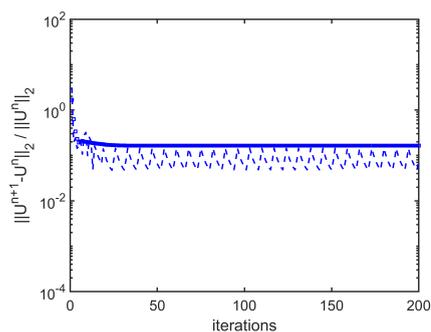


FIGURE 8.17

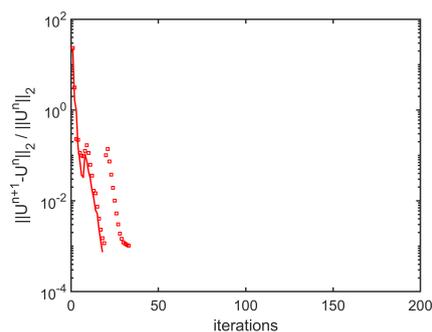


FIGURE 8.18

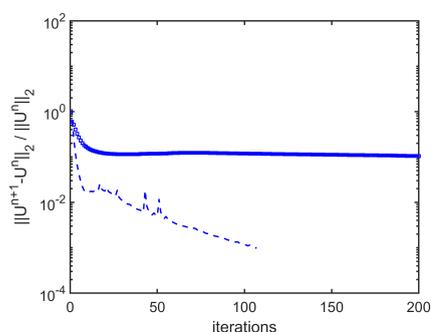


FIGURE 8.19

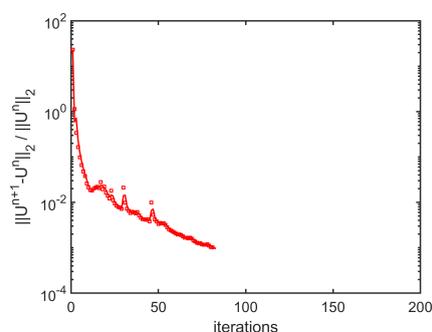


FIGURE 8.20

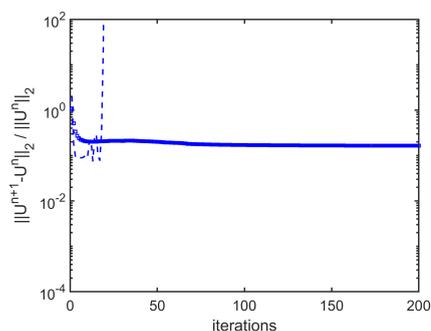


FIGURE 8.21

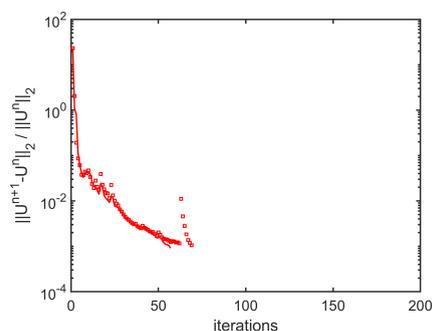


FIGURE 8.22

FIGURE 8.23 – Prise en compte du terme source, directe ou par strong splitting : comparaisons entre BGK et MRT pour le réseau D3Q7.

Schéma BGK et image de synthèse : (8.15) $\Delta t = 0.04$, (8.17) $\Delta t = 0.0574$.

Schéma BGK et image clinique : (8.19) $\Delta t = 0.015$, (8.21) $\Delta t = 0.0276$.

Ligne bleue : strong splitting. Ligne pointillée bleue : intégration directe.

Schéma MRT et image synthétique : (8.16) $\Delta t = 0.04$, (8.18) $\Delta t = 0.0574$.

Schéma MRT et image clinique : (8.20) $\Delta t = 0.015$, (8.22) $\Delta t = 0.0276$.

Ligne rouge : strong splitting. Ligne pointillée rouge : intégration directe.

RÉSULTATS NUMÉRIQUES

Tout d'abord, nous proposons des applications de l'algorithme LBM pour la segmentation sur deux types d'images synthétiques pour souligner l'importance de l'aspect multi-grille Eq. (8.23) de l'algorithme proposé. On a étudié que sur le schéma D3Q7 sachant qu'on a des résultats similaires avec le schéma D3Q19. En termes de stabilité, nous avons ensuite comparé les schémas MRT décrits ci-dessus (avec des paramètres quartiques bien choisis) avec un schéma BGK/SRT avec des images synthétiques et cliniques. Enfin, on décrit les résultats numériques obtenus sur huit images différentes fournis par un dermatologue (des données cliniques réelles). On compare ces résultats avec ceux donnés par l'algorithme AdLL level set de [SCD17]. On utilise les quatre mesures classiques suivantes pour évaluer les performances de la segmentation [Di45], [PH01] : (On note par Ω et R les volumes segmentés et de référence à comparer)

- La sensibilité S est définie par $S(\Omega, R) = |\Omega \cap R|/|R|$.
- La précision P est définie par $P(\Omega, R) = |\Omega \cap R|/|\Omega|$.
- L'indice de Dice est donné par la moyenne harmonique de S et P :

$$D(\Omega, R) = \frac{2|\Omega \cap R|}{|\Omega| + |R|}. \quad (8.65)$$

- La différence absolue moyenne (MAD) : Elle permet de déterminer si la limite du volume segmenté s'accorde bien avec la limite du volume de référence. On note que $N_{\partial\Omega}$, respectivement $N_{\partial R}$, le nombre de voxels dans la frontière $\partial\Omega$, respectivement ∂R , du segmenté, respectivement référence, volume. La MAD (symétrique) (Ω, R) est défini par :

$$\text{MAD}(\Omega, R) = \sum_{x \in \partial\Omega} \frac{d(x|R)}{2 \text{surf}(\partial\Omega)} + \sum_{x \in \partial R} \frac{d(x|\Omega)}{2 \text{surf}(\partial R)}. \quad (8.66)$$

Dans cette définition, $d(x|R) = \min_{x' \in \partial R} \|x' - x\|$ est la distance du point x à la frontière ∂R . On a la même définition de $d(x|\Omega)$ en remplaçant R par Ω . Les termes $\text{surf}(\partial R)$ et $\text{surf}(\partial\Omega)$ désignent le nombre de voxels dans les bords ∂R et $\partial\Omega$. On note ici que la MAD est mesurée en μm .

En pratique, il est utile d'ajuster le potentiel $W(u)$ (à double puits) pour améliorer la segmentation. En effet, soit W_θ le potentiel défini par $W_\theta(u) = \theta W(u)$. Un calcul simple montre que le coefficient de diffusion $\mathcal{K} = \mu \varepsilon / a^2 c_W$ de l'équation (8.23) devient $\mathcal{K} = \mu \varepsilon' / a^2 c_W$ avec $\theta \varepsilon' = \varepsilon$ et le coefficient $\mu / \varepsilon c_W$ de $W'(u)$ devient $\mu / \varepsilon' \theta c_W$. Cela signifie que l'équation (8.23) est maintenant considérée comme impliquant trois paramètres, à savoir μ , ε et θ . Le choix de μ et \mathcal{K} fixe ε et les paramètres de relaxation du schéma MRT. Dans toutes les cas tests, le pas d'espace Δx est donné par $\Delta x = 1/N$ avec $N = \max(N_x, N_y, N_z)$ où N_x , N_y et N_z le nombre de pixels dans chacune des directions de l'image. En conclusion, les paramètres (libres) qui doivent être réglés pour les différents cas tests sont : μ , \mathcal{K} , θ , le pas de temps Δt et l'échelle a .

• **Le schéma D3Q7 pour la segmentation d'images synthétiques** : On considère dans un premier lieu l'image synthétique (voir la figure 8.41). Cette image mesure $256 \times 256 \times 256$ voxels, soit environ 17 millions de voxels. On note la présence d'un bruit qui suit la distribution Rayleigh sur cette image. La segmentation est effectuée aux échelles $a = 1, 2, 3, 4, 5$. Le pas de temps Δt est égale à $\Delta t = 0,002$ pour assurer la stabilité à l'échelle initiale $a = 1$. On choisit $\mathcal{K} = 0,4 \times 10^{-3}$, $\mu = 0,02$ et $\theta = 10/a^2$.

Les résultats numériques sont présentés dans le tableau 8.1. On voit que l'indice Dice diminue légèrement lorsque l'échelle augmente. En revanche, la sensibilité augmente.

TABLE 8.1 – D3Q7 MRT : résultats de segmentation sur une image synthétique simple avec des échelles différentes où $\Delta t = 0.002$.

a	D	S	P	MAD (pixels)	Times (seconds)
1	0.950	0.906	0.999	1.283	33447
2	0.978	0.976	0.980	0.663	1271
3	0.957	0.987	0.929	1.206	173
4	0.931	0.986	0.882	1.893	152
5	0.917	0.986	0.857	2.260	84

TABLE 8.2 – D3Q7 MRT : résultats de segmentation sur une image synthétique d'une tumeur avec des échelles différentes où $\Delta t = 0.002$.

a	D	S	P	MAD (pixels)	Times (seconds)
1	0.595	0.423	1.000	7.020	6095
2	0.623	0.452	1.000	6.614	816
3	0.635	0.465	0.998	6.534	179
4	0.679	0.516	0.995	5.807	79

Cela peut s'expliquer par le fait que la dynamique du flot est moins conservatrice à des échelles plus élevées et par le grand nombre d'itérations nécessaires pour obtenir une convergence à l'échelle initiale [AD98]. Les temps de calcul d'une implémentation simple (non parallèle) montrent que la grande taille de l'image ne permet pas des segmentations raisonnables à l'échelle 1 ou 2. En travaillant à l'échelle 3, on obtient un facteur d'accélération d'environ 2000. De plus, à des échelles plus élevées, le pas temps peut être choisi bien supérieur à 0,002.

Pour le deuxième cas test, on considère une image synthétique composée $322 \times 142 \times 172$ voxels d'une tumeur avec un bruit qui suit la distribution de Rayleigh, voir Figure 8.46. Les paramètres sont $\mathcal{K} = 0,2 \times 10^{-3}$, $\mu = 0,001$, $\theta = 10/a^2$ et $\Delta t = 0,002$. Les résultats numériques sont présentés dans le tableau 8.2. Ces résultats confirment les observations faites dans le cas précédent.

A partir de maintenant on considère que les échelles $a = 3$ et $a = 4$ et on fait augmenter le pas de temps Δt . Pour les échelles $a = 1$ et $a = 2$ le schéma LBM n'est pas stable pour de Δt grands. On fixe, alors $\Delta t = 0,03$. Les résultats de la segmentation sont présentés sur la figure 8.49 et les différents indices sont donnée dans le tableau 8.3. L'augmentation du pas de temps Δt rend le flot dynamique moins conservateur et donne de bien meilleurs résultats en termes de segmentation et de temps de calcul. Par exemple, dans le cas $a = 4$ et comparé au pas de temps précédent $\Delta t = 0,002$, l'indice de Dice et la MAD sont améliorés de 31% et 63%, respectivement, et le temps de calcul lui a diminué de 73 %.

• **Les schéma D3Q7 et D3Q19 pour la segmentation d'images cliniques réelles :** On teste ici le schéma MRT proposé sur huit images cliniques (voir Figure 8.62). Rappelons que ces images ont été choisies pour être représentatives de la diversité des cas cliniques et ont été segmentées manuellement par un dermatologue. Pour chacune des images 3D, 150 contours de vérité terrain sont dessinés dans les plans (x, z) - (z est l'axe vertical) de manière à obtenir un volume 3D par interpolation. Près de 50 valeurs d'intensité I sont conservées et la zone de gel (zone noire au-dessus de l'épiderme) est retirée avant que la segmentation tumorale ne soit effectuée. L'ensemble du processus

TABLE 8.3 – D3Q7 MRT : résultats de segmentation sur une image synthétique d'une tumeur avec les échelles $a = 3$ and $a = 4$. Le pas de temps $\Delta t = 0.03$.

a	D	S	P	MAD (pixels)	Times (seconds)
3	0.902	0.854	0.956	1.844	56
4	0.887	0.868	0.908	2.146	21

Algorithm	D	S	P	MAD (pixels)
ADLL	0.755 ± 0.086	0.647 ± 0.134	0.934 ± 0.065	344 ± 106
MRT D3Q7	0.857 ± 0.052	0.859 ± 0.073	0.862 ± 0.082	202 ± 78
MRT D3Q19	0.858 ± 0.048	0.849 ± 0.064	0.873 ± 0.068	199 ± 68

TABLE 8.4 – Comparaisons entre AdLL [SCD17], LBM MRT D3Q7 et LBM MRT D3Q19.

est décrit dans la figure 8.63 et les résultats de la segmentation avec le schéma LBM MRT D3Q7 sont représentés sur la figure 8.62. L'objectif principal de cette section est de comparer notre algorithme MRT LBM pour la segmentation à l'algorithme dit "Adaptive Log-Likelihood" (AdLL) [SCD17] basé sur une approche level set. On montre alors que notre nouvelle approche est pertinente pour étudier le problème de la sous-estimation du volume segmenté. On note que les deux méthodes partagent le même terme d'attache aux données. Ainsi les différences entre les deux méthodes sont due au terme de régularisation et à l'implémentation. Le tableau 8.4 montre les différents indicateurs de performance (avec pour une échelle est $a = 4$).

On note que les paramètres sont choisis de manière adaptative afin de maximiser l'indice de Dice pour chaque tumeur (image). Ils sont choisis comme suit :

- AdLL : $\mu_{AdLL} \in [0.001, 0.01]$, $\Delta t \in [0.8, 2]$, $T \in [2, 10]$.
- MRT-D3Q7 : $\mathcal{K} \in [0.27 \times 10^{-3}, 1 \times 10^{-3}]$, $\mu_{D3Q7} \in [0.0132, 0.113]$, $\Delta t \in [0.01, 0.025]$ et $\theta \in [0.01, 3]$.
- MRT-D3Q19 : $\mathcal{K} \in [0.3 \times 10^{-3}, 2 \times 10^{-3}]$, $\mu_{D3Q19} \in [0.01, 0.16]$, $\Delta t \in [0.01, 0.04]$ et $\theta \in [0.0056, 1.5]$.

On s'attend que l'algorithme AdLL donne la meilleure précision P . Rappelons que la précision mesure le fait que le volume segmenté fait bien partie de la tumeur. Cependant ce volume segmenté est trop petit, cela est confirmé en regardant la sensibilité et la MA. En effet la sensibilité mesure le fait que la tumeur entière a été segmentée. La MAD mesure la distance moyenne à la limite de la tumeur. Quantitativement, la sensibilité de l'algorithme AdLL est inférieure d'environ 25 %. En conséquence, l'indice de Dice est également plus bas, d'environ 14 %. Cela signifie que l'algorithme MRT LBM donne des résultats meilleures en ce qui concerne la capacité à segmenter l'ensemble de la tumeur. De plus, notre algorithme donne une MAD environ 42 % supérieur à celle de l'algorithme AdLL. Ceci est donc une amélioration très significative des performances concernant la détection de la frontière de la tumeur. Une présentation compacte de ces résultats est donnée dans la figure 8.67, qui donne la sensibilité en fonction de la performance pour les algorithmes AdLL, MRT LBM D3Q7 et D3Q19. La figure 8.68 donne des coupes de segmentations obtenues par les différentes méthodes.

Remarque On constate que les algorithmes MRT LBM D3Q7 et MRT LBM D3Q19

donnent les mêmes résultats mais avec des temps de calcul très différents. On préférera donc le schéma D3Q7.

CONCLUSION

On a proposé une implémentation de la méthode LBM à temps de relaxation multiples pour la segmentation. Comme nous l'avons vérifié à l'aide de tests numériques sur des images synthétiques et sur notre jeu de données cliniques, une telle implémentation est nécessaire puisque les schémas à simple temps de relaxation ne sont pas suffisamment stables pour prendre en charge le terme source de notre équation de diffusion non linéaire. Grâce à un bon choix des paramètres de relaxation supplémentaires que fournit l'approche MRT, nous avons obtenu des schémas exacts à l'ordre 4, sans diffusion numérique, dont la stabilité a été vérifiée par une analyse de Von Neumann. Enfin les instabilités numériques proviennent du terme source F qui contient en particulier les informations du terme d'attache aux données. En l'absence de tels termes source, les schémas LBM MRT sont très stables. Par ailleurs, les temps de calcul obtenus pour les algorithmes LBM-MRT restent longs. Ceci provient du fait que les estimations statistiques pour le calcul de log-vraisemblance sont globales, prenant en compte toutes les intensités de voxels dans la région d'intérêt ainsi que dans la région de fond. Cette étape empêche une implémentation parallèle complète, ce qui est un des avantages majeurs des méthodes lattice Boltzmann.

Ce travail a donné lieu à la publication [15] (voir annexe).

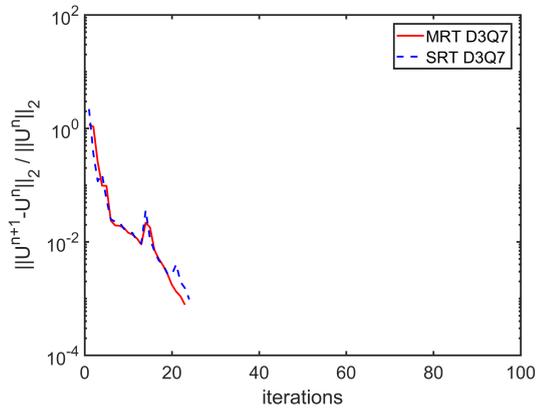


FIGURE 8.24

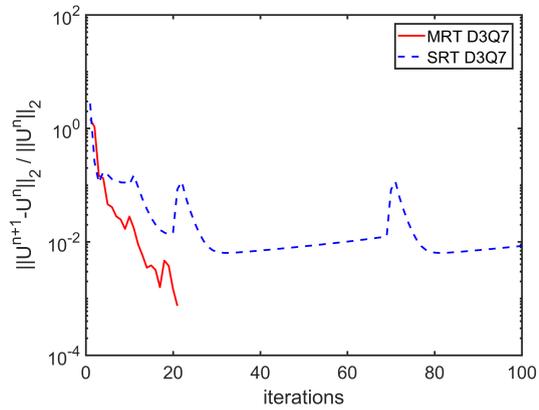


FIGURE 8.25

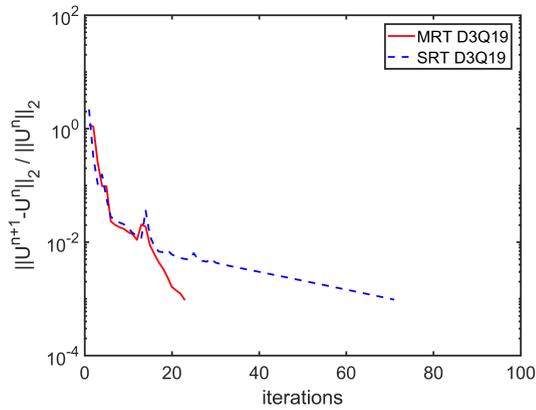


FIGURE 8.26

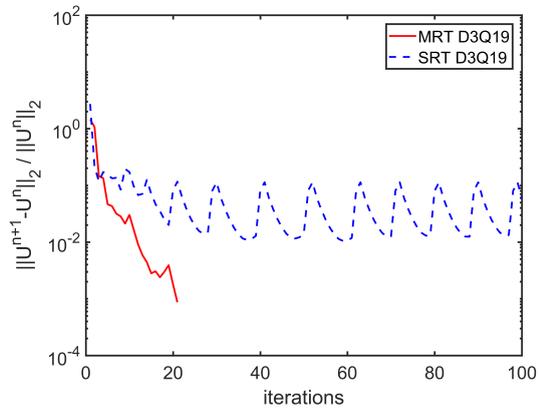


FIGURE 8.27

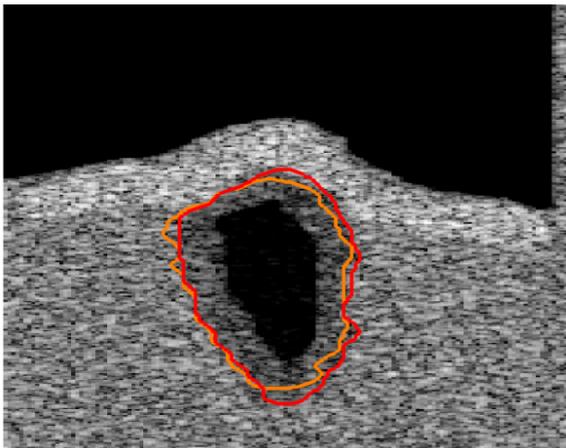


FIGURE 8.28

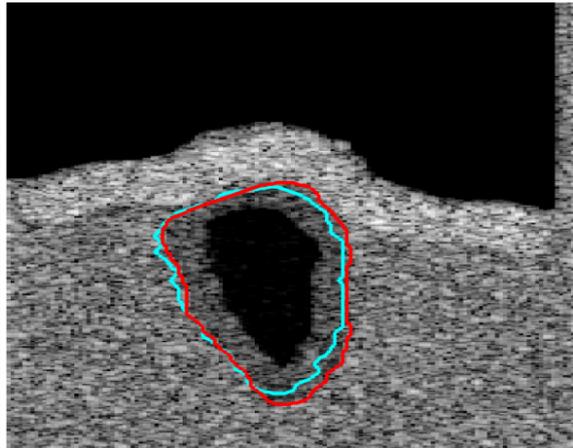


FIGURE 8.29

FIGURE 8.30 – Comparaison de stabilité entre BGK (SRT) et MRT : image synthétique.
 Réseau D3Q7 : (8.24) pas de temps $\Delta t = 0.04$, (8.25) pas de temps $\Delta t = 0.05$.
 Réseau D3Q19 : (8.26) pas de temps $\Delta t = 0.04$, (8.27) pas de temps $\Delta t = 0.05$.
 Coupe de la segmentation par l'algorithme MRT LBM : (8.28) $\Delta t = 0.04$, (8.29) $\Delta t = 0.05$.
 Le contour de référence est en rouge.

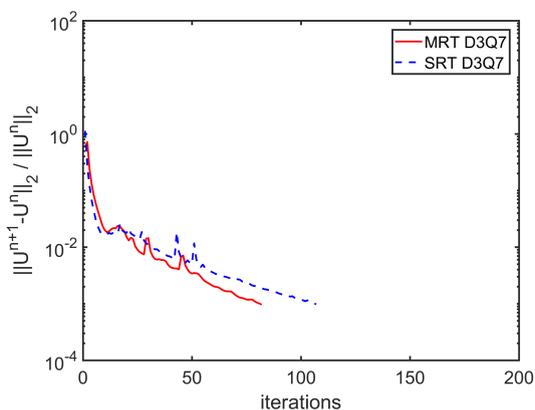


FIGURE 8.31

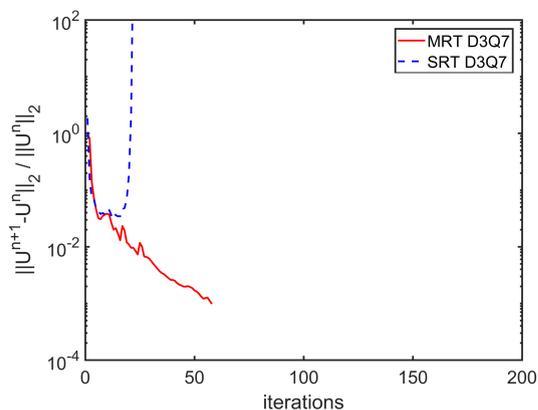


FIGURE 8.32

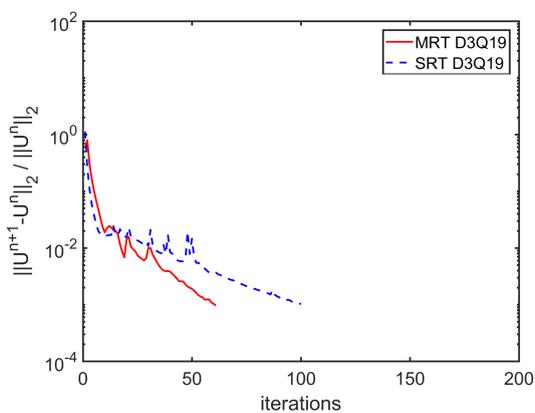


FIGURE 8.33

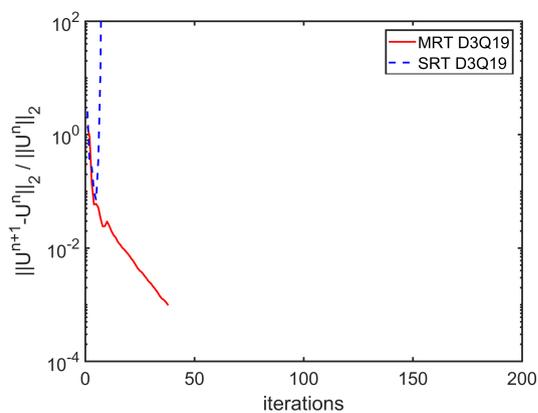


FIGURE 8.34

FIGURE 8.35 – Comparaison de stabilité entre BGK (SRT) et MRT : image clinique [8.53](#).
 Réseau D3Q7 : [\(8.31\)](#) pas de temps $\Delta t = 0.015$, [\(8.32\)](#) pas de temps $\Delta t = 0.025$.
 Réseau D3Q19 : [\(8.33\)](#) pas de temps $\Delta t = 0.015$, [\(8.34\)](#) pas de temps $\Delta t = 0.035$.

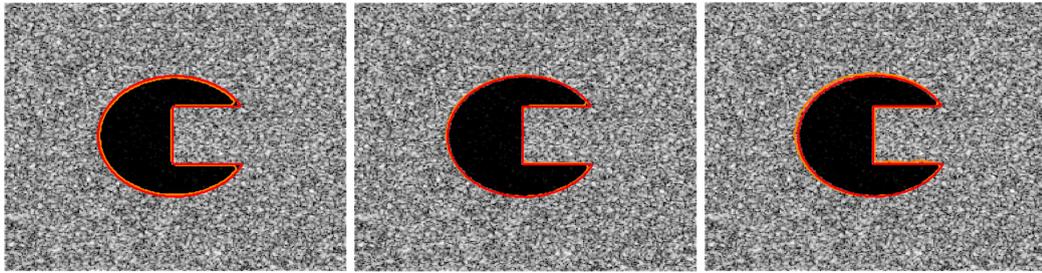


FIGURE 8.36

FIGURE 8.37

FIGURE 8.38

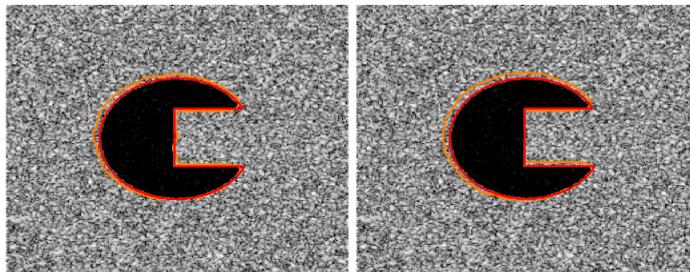


FIGURE 8.39

FIGURE 8.40

FIGURE 8.41 – Évaluation de l'algorithme LLCH-MRT (D3Q7) sur une image synthétique simple : influence de la taille de la grille. Le pas de temps est fixé à $\Delta t = 0.002$. (8.36) $a = 1$, (8.37) $a = 2$, (8.38) $a = 3$, (8.39) $a = 4$, (8.40) $d = 5$. Contour de référence en rouge.

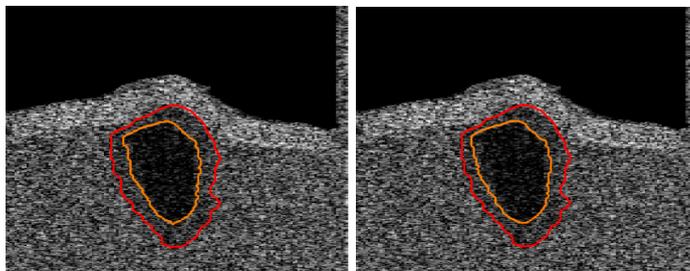


FIGURE 8.42

FIGURE 8.43

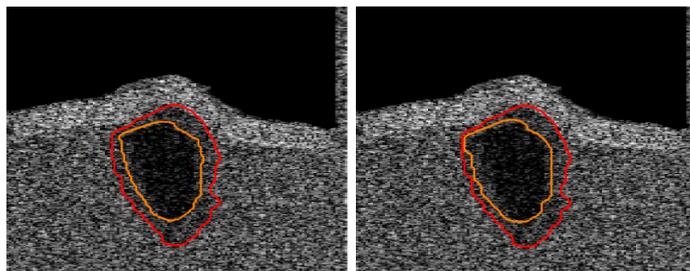


FIGURE 8.44

FIGURE 8.45

FIGURE 8.46 – Évaluation de l'algorithme LLCH-MRT (D3Q7) sur une image synthétique d'une tumeur : influence de la taille de la grille. Le pas de temps est fixé à $\Delta t = 0.002$. (8.36) $a = 1$, (8.37) $a = 2$, (8.38) $a = 3$, (8.39) $a = 4$, (8.40) $d = 5$. Contour de référence en rouge.

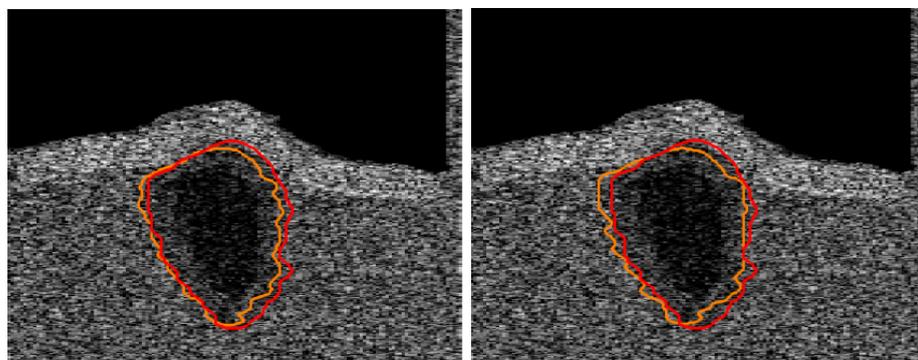


FIGURE 8.47

FIGURE 8.48

FIGURE 8.49 – Évaluation de l'algorithme LLCH-MRT (D3Q7) sur une image synthétique d'une tumeur : influence de la taille de la grille. Le pas de temps est fixé à $\Delta t = 0.03$. (8.47) $a = 3$ et (8.48) $a = 4$. Contour de référence en rouge.

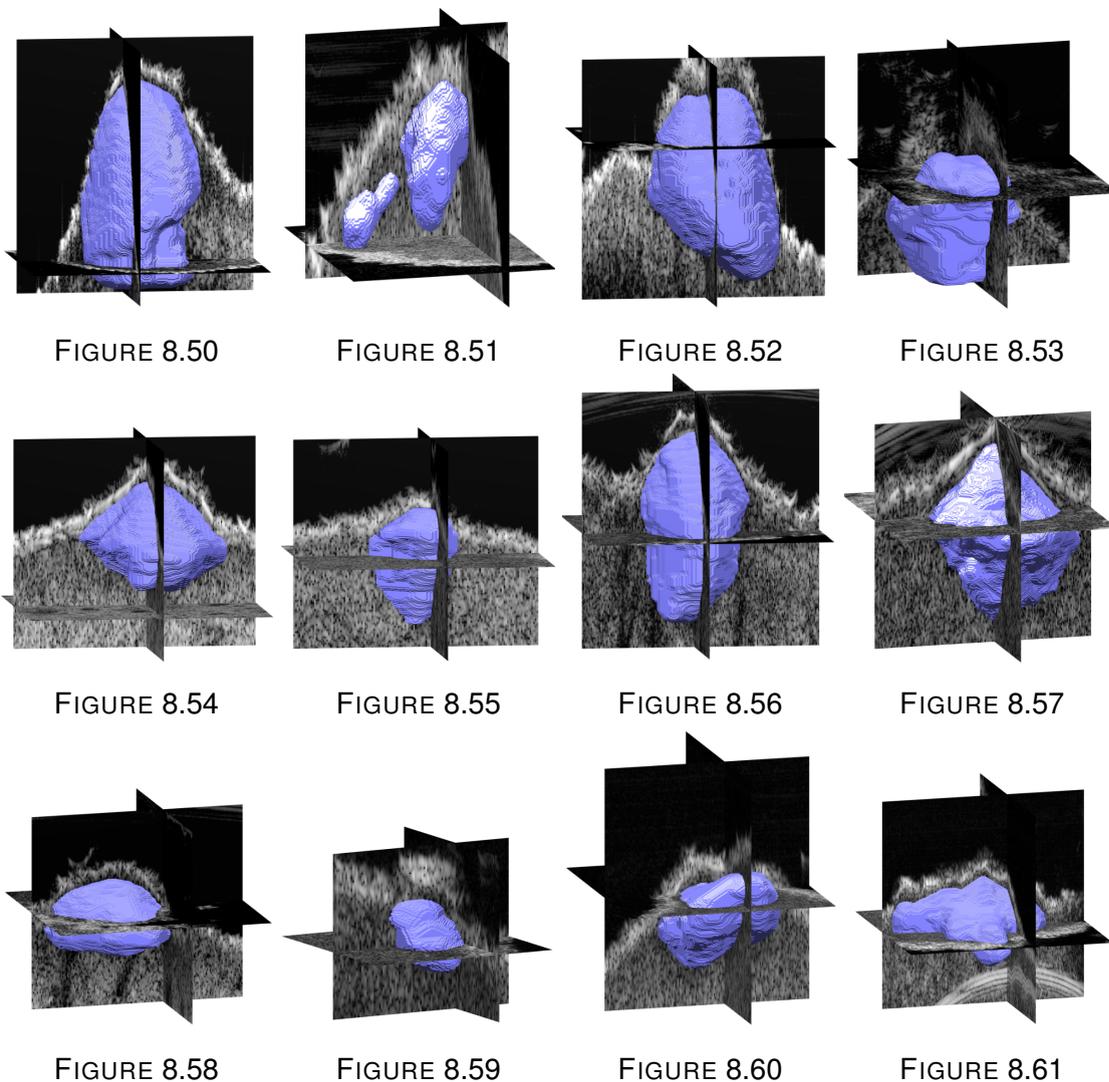


FIGURE 8.62 – Résultats de la segmentation par l'algorithme LLCH-MRT D3Q7. Images du jeu de données cliniques.

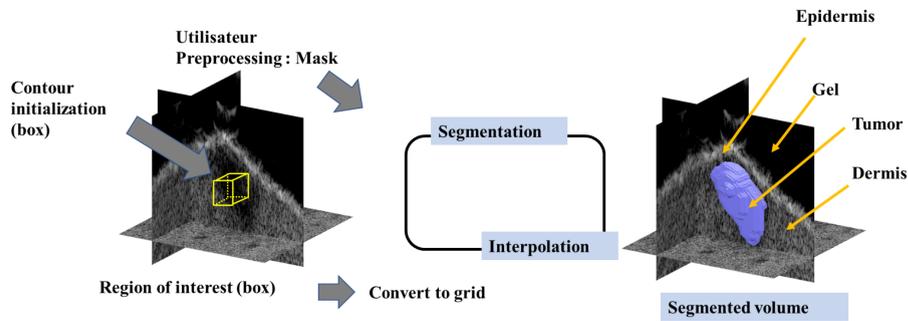


FIGURE 8.63 – MRT LBM phase-field segmentation process for clinical images.

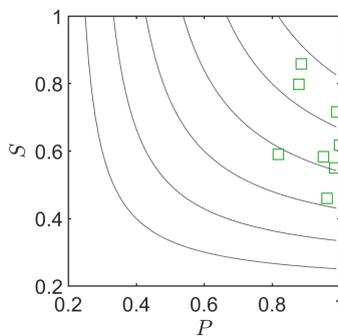


FIGURE 8.64

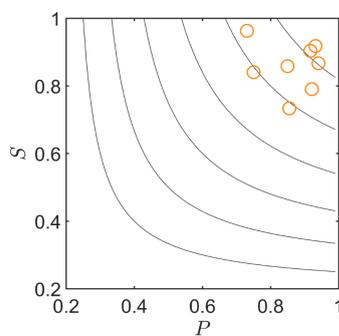


FIGURE 8.65

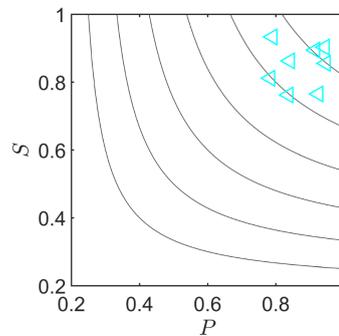


FIGURE 8.66

FIGURE 8.67 – La sensibilité S en fonction de la précision P . Pour les algorithmes : AdLL (level set) [SCD17] (8.64) . LBM MRT D3Q7 (8.65). LBM MRT D3Q19 (8.66).

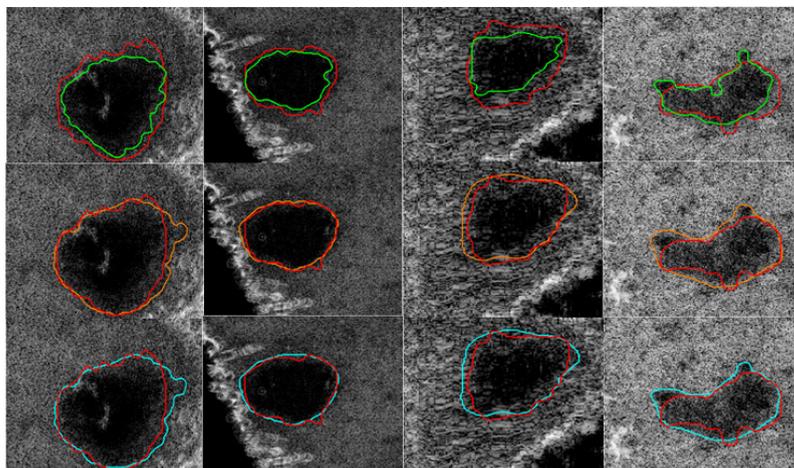


FIGURE 8.68 – Différentes coupes de segmentation sur des images cliniques (contour de référence en rouge). Première ligne : AdLL level set [SCD17]. Deuxième ligne : LBM MRT D3Q7 . Dernière ligne : LBM MRT D3Q19.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] F. Dubois, P. Lallemand, M. M. Tekitek, Using Boltzmann scheme for anisotropic diffusion problems, *Finite volumes for complex applications 5*, pp. 351–358, ISTE, London, (2008).
- [2] F. Dubois, P. Lallemand, M. M. Tekitek, Benchmark on anisotropic problems, *Finite volumes for complex applications 5*, pp. 795–800, ISTE, London, (2008).
- [3] F. Dubois, P. Lallemand, M. M. Tekitek, On a superconvergent lattice Boltzmann boundary scheme. *Comput. Math. Appl.*, vol. 59, pp. 2141–2149, (2010).
- [4] F. Dubois, P. Lallemand, M. M. Tekitek, Taylor expansion for linear lattice Boltzmann schemes with an external force, *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, vol. 99, pp : 89–107, (2014).
- [5] S. Faure, M. M. Tekitek, R. Temam, Finite volume approximation of stiff problems on two-dimensional curvilinear domain, *International Journal of Computer Mathematics* DOI :10.1080/00207160.2015.1075013, 07 (2015).
- [6] F. Dubois, P. Lallemand, M. M. Tekitek, Taylor expansion method for analyzing bounce-back boundary conditions for lattice Boltzmann method, *ESAIM : Proceeding and Surveys*, vol. 52, p. 25-46, (2015).
- [7] F. Dubois, C.-A.Lin , M. M. Tekitek, Anisotropic Thermal Lattice Boltzmann simulation of 2D natural convection in a square cavity, *Computers & Fluids*, 124. DOI :10.1016/j.compfluid.2015.10.015, 11 (2016).
- [8] F. Dubois, P. Lallemand, C. Obrecht, M. M. Tekitek, Lattice Boltzmann model approximated with finite difference expressions, *Computers & Fluids*, vol. 155, pp. 3-8, (2017).
- [9] S. Ben Chaabane, M. Hamouda, M. M. Tekitek, New Finite Volume Method for rotating channel flows involving boundary layers, *Numerische Mathematik*, doi : 10.1007/s00211-016-0857-3, (2017).
- [10] B. Boghosian, F. Dubois, B. Graille, P. Lallemand, M. M. Tekitek, Curious convergence properties of lattice Boltzmann schemes for diffusion with acoustic scaling, *Communications in Computational Physics*, Vol. 23, pp. 1263-1278, doi :10.4208/cicp.OA-2016-0257, (2018).
- [11] M.M. Tekitek, Multiple relaxation time lattice Boltzmann simulation of 2D natural convection in a square cavity for high Rayleigh numbers, *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, doi : 10.4208/aamm.2015.m1357, (2018).
- [12] B. Boghosian, F. Dubois, B. Graille, P. Lallemand, M. M. Tekitek, Unexpected convergence of lattice Boltzmann schemes, *Computers & Fluids*, Vol. 172, pp. 301-311, (2018).
- [13] F. Dubois, P. Lallemand, M. M. Tekitek, Generalized bounce back boundary condition for the nine velocities two-dimensional lattice Boltzmann scheme, *Computers & Fluids*, Vol. 193, Art. 103534, (2019).

- [14] M. Louati, M. M. Tekitek, M. S. Ghidaoui, On the dissipation mechanism of lattice Boltzmann method when modeling 1-d and 2-d water hammer flows, *Computers & Fluids*, Vol. 193, Art. 103996, (2019).
- [15] K.L. Nguyen, M. M. Tekitek, P. Delachartre, M. Berthier, Multiple Relaxation Time Lattice Boltzmann Models for Multigrid Phase-Field Segmentation of Tumors in 3D Ultrasound Images, *SIAM Journal on Imaging Sciences*, vol. 12, p. 1324-1346, (2019).
- [16] F. Dubois, P. Lallemand, M. M. Tekitek, On anti bounce back boundary condition for lattice Boltzmann schemes, *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 79, p. 555-575, (2020).

- [AFS09] Aghajani, D. M. and Farhadi, M. and Sedighi, K., Effect of heater location on heat transfer and entropy generation in the cavity using the lattice Boltzmann method, *Heat Transfer Research*, vol. 40, p. 521–536, (2009).
- [AD98] S. ICHI AMARI AND S. C. DOUGLAS, *Why natural gradient?*, In Proc. IEEE Int. Conf. Acoust., Speech, and Signal Proc. (ICASSP), Seattle, WA, USA, 4 (1998), pp. 1213–1216.
- [AK00] Ansumali S., Karlin I. V., Stabilization of the Lattice Boltzmann Method by the H Theorem, *Physical Review E*, vol. 62, p. 7999–8003, (2000).
- [AOCR12] P. Asinari, T. Ohwada, E. Chiavazzo, A.F. Di Rienzo, Link-wise artificial compressibility method, *Journal of Computational Physics*, vol. 231, p. 5109-5143, (2012).
- [ADGL14] A. Augier, F. Dubois, B. Graille and P. Lallemand, On rotational invariance of Lattice Boltzmann schemes, *Computers and Mathematics with Applications*, vol. 67, p 239-255, (2014).
- [BHT17] S. Ben Chaabane, M. Hamouda, M.M. Tekitek, New Finite Volume Method for rotating channel flows involving boundary layers, *Numerische Mathematik*, vol 136, p. 651–678, (2017).
- [BSV92] R. Benz, S. Succi, M. Vergassola, The lattice Boltzmann equation : theory and applications, *Physics Reports*, vol. 222, p. 145–197, (1992).
- [BGK54] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, M. Krook, A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review*, vol. 94, p. 511–525, (1954).
- [BYCW07] B. Boghosian, J. Yopez, P. Coveney, A. Wager, Entropic lattice Boltzmann methods, *Proceedings of The Royal Society A Mathematical Physical and Engineering Sciences*, vol. 457, p. 717-766, (2007).
- [Bo1872] L. Boltzmann, "Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen", *Wiener Berichte*, vol. 66, p. 275-370, (1872).
- [Bu16] L. Budinski, Application of the LBM with adaptive grid on water hammer simulation, *Journal of Hydroinformatics*, vol. 18, 687-701, 2016.
- [BGC98] J. M. Buick, C. A. Greated and D. M. Campbell, "Lattice BGK simulation of sound waves", *Europhysics Letters*, vol. 43, p. 235-240, 1998.
- [BFL01] M. Bouzidi, M. Firdaouss, P. Lallemand, Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries, *Physics of Fluids*, vol. 13, p. 3452–3459, (2001).
- [Br64] J.E. Broadwell, Shock Structure in a Simple Discrete Velocity Gas, *Physics of Fluids* vol. 7, p. 1243–1247, (1964).
- [CLM92] F. CATTÉ, P. L. LIONS, J. M. MOREL, AND T. COLL, *Image selective smoothing and edge detection by nonlinear diffusion*, SIAM Journal on Numerical Analysis, 29 (1992), pp. 182–193.
- [CC70] Chapman S., Cowling T.G., *Mathematical theory of non uniform gases. Kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*, 3rd ed., Cambridge university press (Cambridge), (1970).
- [CHA14] M. H. Chaudhry, *Applied Hydraulic Transients*, 3rd ed., Springer, New York, (2014).
- [Ce88] C. Cercignani, *The Boltzmann Equation and Its Applications*, Applied Mathematical Sciences, 67, Springer-Verlag, New York, (1988).

- [CCM92] H. Chen, S. Chen, W.H. Matthaeus, Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method, *Physical Review*, vol. 45, p. 5339–5342, (1992).
- [CD98a] S. Chen, G.D. Doolen, Lattice Boltzmann methods for fluid flows, *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 30, p. 3289–364, (1998).
- [CCS14] J. Chen, Z. Chai, B. Shi, W. Zhang, Lattice Boltzmann method for filtering and contour detection of the natural images, *Computers and Mathematics with Applications*, vol. 28, p. 257–268, (2014).
- [CLC12] B. Chen, Y. Li, and J. L. Cai, Noisy image segmentation based on nonlinear diffusion equation model, *Applied Mathematical Modeling*, vol. 36, p. 1197–1208, (2012).
- [CD98b] B. Chopard, M. Droz, *Cellular Automata Modeling of Physical Systems*, Cambridge : Cambridge University Press, (1998).
- [CL14] D. Contrino, P. Lallemand, P. Asinari, L.-S. Luo, Lattice-Boltzmann simulations of the thermally driven 2D square cavity at high Rayleigh numbers, *J. Comput. Phys.*, vol. 275, 257, (2014).
- [Co87] H. Cornille, Exact solutions of the Broadwell model in $1 + 1$ dimensions, *Journal of Physics. A. Mathematical and General*, vol. 20, p. 1973–1988, (1987).
- [CT91] T. M. COVER AND Y. A. THOMAS, *Elements of Information Theory*, John Wiley and Sons, Inc., 1991.
- [Dav83] G. De Vahl Davis, Natural convection of air in a square cavity : a bench mark numerical solution, *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, vol. 3, 249, (1983).
- [De01] P. J. Dellar, Bulk and shear viscosities in lattice Boltzmann equations, *Phys. Rev. E*, vol. 64, p. 031203, (2001).
- [De02] P. J. Dellar, Lattice Kinetic Schemes for Magnetohydrodynamics, *Journal of Computational Physics*, vol. 179, p. 95-126, (2002).
- [De13] P. J. Dellar, An interpretation and derivation of the lattice Boltzmann method using Strang splitting, *Comput. Math. Applic.*, vol. 65, p. 129-141, (2013).
- [Di45] L. R. DICE, *Measures of the amount of ecologic association between species*, *Ecology*, 26 (1945), pp. 297–302,
- [DB06] H. N. Dixit and V. Babu, Simulation of high Rayleigh number natural convection in a square cavity using the lattice Boltzmann method, *Intl. J. of Heat and Mass Transfer*, vol. 49, 727, (2006).
- [Du07] F. Dubois, Une introduction à l'équation de Boltzmann sur réseau, *ESAIM Proceeding*, vol. 28, p. 181–215, (2007).
- [Du08a] F. Dubois, Equivalent partial differential equations of a lattice Boltzmann scheme, *Computers and Mathematics with Applications*, à paraître (2008).
- [Du08b] F. Dubois, Third order equivalent equation of lattice Boltzmann scheme, *Discrete and Continuous Dynamical Systems*, 2008.
- [DDMT02] F. Dubois, E. Duceau, F. Maréchal, I. Terrasse, Lorentz Transform and Staggered Finite Differences for Advective Acoustics, *Rapport de recherche non publié*, (2002).
- [DL08] F. Dubois, P. Lallemand, On lattice Boltzmann scheme, finite volumes and boundary conditions, (2008).

- [DL09] F. Dubois, P. Lallemand, Towards higher order lattice Boltzmann schemes, *Journal of Statistical Mechanics*, P06006, (2009).
- [DL11] F. Dubois, P. Lallemand. “Quartic Parameters for Acoustic Applications of Lattice Boltzmann Scheme”, *Computers and mathematics with applications*, vol. **61**, p. 3404-3416, 2011, doi :10.1016/j.camwa.2011.01.011.
- [FH98] O. Filippova, D. Hanel, Grid Refinement for Lattice-BGK Models, *Journal of Computational Physics*, vol. 147, 219-228, (1998).
- [FHP86] Frisch U., Hasslacher B., Pomeau Y., Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation, *Physical Review Letters*, vol. 56, p. 1505–1508, (1986).
- [FT89] I. FONSECA AND L. TARTAR, *The gradient theory of phase transitions for systems with two potential wells*, Proceedings of the Royal Society of Edinburgh Section A : Mathematics, 111 (1989), pp. 89–102,
- [FdH87] Frisch U., d’Humières D., Hasslacher B., Lallemand P., Pomeau Y., Rivet J.-P., Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions, *Complex Systems*, vol. 1, p. 649–707, (1987).
- [Ga75] Gatignol R., Théorie cinétique des gaz à répartition discrète de vitesses, *Lecture Notes in Phys.*, vol. 36, Springer-Verlag, New York, (1975).
- [GSPK] Geier M., Schonherr M., Pasquali A., Krafczyk M., The cumulant lattice Boltzmann equation in three dimensions : Theory and validation, *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 70, p. 507–547, (2015).
- [Ghi04] M. S. Ghidaoui, On the fundamental equations of water hammer, *Urban Water Journal*, vol. 1, p.71–83, (2004)
- [Gi05] Ginzburg I., Generic boundary conditions for lattice Boltzmann models and their application to advection and anisotropic dispersion equations, *Advances in Water Resources*, vol. 28, p.1196–1216, 2005.
- [GA94] Ginzburg I., Adler, P., Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model, *Journal of Physics II France*, vol. 4, p. 191–214, (1994).
- [GdH96] Ginzburg I., d’Humières D., Local second order boundary methods for lattice Boltzmann models, *Journal of Statistical Physics*, vol. 84, p. 927–971, (1996).
- [GdH03] Ginzburg I., d’Humières D., Multireflection boundary conditions for lattice Boltzmann models, *Physical Review E.*, vol. 68, p. 6614–6644, (2003).
- [GdH07] Ginzburg I., d’Humières D., Lattice Boltzmann and analytical modeling of flow processes in anisotropic and heterogeneous stratified aquifers, *Advances in Water Resources*, vol. 30, p.2202–2234, 2007.
- [GVdH08] I. Ginzburg, F. Verhaeghe and D. d’Humières, Two-relaxation-time lattice Boltzmann scheme : About parametrization, velocity, pressure and mixed boundary conditions, *Communications in Computational Physics*, vol. 3, p. 519-581, (2008).
- [Gur96] M. E. GURTIN, *Generalized Ginzburg-Landau and Cahn-Hilliard equations based on a microforce balance*, *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 92 (1996), pp. 178–192.
- [HPP73] Hardy J., Pomeau Y., de Pazzis O., Time evolution of a two-dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions, *J. Mathematical Phys.*, vol. 14, p. 1746–1759, (1973).

- [HCZ99] He X., Chen S., Zhang R., A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability, *Journal of Computational Physics*, vol. 152, p. 642–663, (1999).
- [HL97] He X., Luo L.-S., A priori derivation of the lattice Boltzmann equation, *Physical Review E*, vol. 55, p. 6333–6336, (1997).
- [HJ89] Higuera F.J., Jiménez J., Boltzmann approach to lattice gas simulation, *Europhys. Lett.*, vol. 9, p. 663–668, (1989).
- [HSB89] Higuera F.J., Succi S., Benzi R., Lattice gas dynamics with enhanced collisions, *Europhys. Lett.*, vol. 9, p. 345–349, (1989).
- [HCB54] Hirschfelder J. O., Curtiss C. F., Bird R. B., *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, New York, (1945).
- [Hu96] Hu F.Q., On absorbing boundary conditions for linearized Euler equations by a perfectly matched layer, *Journal of Computational Physics*, vol. 129, p. 201–219, (1996).
- [dH92] d’Humières D., in *Rarefied Gas Dynamics : Theory and Simulations*, Prog. Astronaut. Vol. 159, edited by Shizgal B.D. and Weaver D.P. AIAA, Washington, D.C, (1992).
- [dHGM02] d’Humières D., Ginzburg I., Krafczyk M., Lallemand P., Luo L.-S., Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three-dimensions, *Philosophical Transactions of Royal Society of London A*, vol. 360, p. 437–451, (2002).
- [HV03] Hundsdorfer, W. and Verwer, J. G., *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*, Springer-Verlag, (2003).
- [JLS99] Jawerth, B. and Lin, P. and Shinzinger, E., Lattice Boltzmann models for anisotropic diffusion of images, *Journal of Mathematical Imaging and Vision*, vol. 11, p. 231–237, (1999).
- [JT09] C. Jung and R. Temam, Finite Volume Approximation of One-Dimensional Stiff Convection-Diffusion Equation, *J. Sci. Comput.*, 2009.
- [JT10] C. Jung and R. Temam, Finite Volume Approximation of Two-Dimensional Stiff Problems, *INJAM*, To appear, 2010.
- [JKL05] M. Junk, A. Klar, L.S. Luo. “Asymptotic analysis of the lattice Boltzmann equation”, *Journal of Computational Physics*, vol. **210**, p. 676-704, 2005.
- [KFY05] J. KIM, J. W. FISHER, A. YEZZI, M. CETIN, AND A. S. WILLSKY, *A nonparametric statistical method for image segmentation using information theory and curve evolution*, IEEE Transactions on Image Processing, 14 (2005), pp. 1486–1502.
- [Kr70] Kreiss H.-O., Initial boundary value problems for hyperbolic systems, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 23, p. 277–298, (1970).
- [KVR07] F. Kuznik, Vareilles J., G. Rusaouen and G. Krauss G., A double-population lattice Boltzmann method with non-uniform mesh for the simulation of natural convection in a square cavity, *International journal of heat and fluid flow*, vol. 28, 862, (2007).
- [LV01] Ladd, A. J. C., Verberg, R., Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions, *Journal of Statistical Physics*, vol. 104, p. 1191–1251, 2001.
- [La18] P. Lallemand, *Personal communication*, (2018).
- [LL00] Lallemand P., Luo L.-S., Theory of the lattice Boltzmann method : Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability, *Physical Review E*, vol. 61, p. 6546–6562, (2000).

- [LYZ16] Z. LI, M. YANG, AND Y. ZHANG, *Lattice Boltzmann method simulation of 3-d natural convection with double mrt model*, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 94 (2016), pp. 222–238,
- [LLF20] L. Li, J. Lu, H. Fang, Z. Yin, T. Wang, R. Wang, X. Fan, L. Zhao, D. Tan, Y. Wan, *Lattice Boltzmann Method for Fluid-Thermal Systems : Status, Hotspots, Trends and Outlook*, *IEEE Access*, 8, pp. 27649-27675, (2020).
- [LL10] C. H. Liu, K. H. Lin, H. C. Mai and C. A. Lin, Thermal boundary conditions for thermal Lattice Boltzmann simulations, *Computers and Mathematics with applications*, vol. 59, 2178, (2010).
- [LLM02] Lockard D. P., Luo L.-S., Milder S. D., Singer B. A., Evaluation of PowerFLOW for aerodynamic applications, *Journal of Statistical Physics*, vol. 107, p. 423–478, (2002).
- [LM16] M. Louati, *In-depth study of plane wave-blockage interaction and analysis of high frequency waves behaviour in water-filled pipe systems* (Doctoral dissertation). HKUST. Available at : (<http://lbezone.ust.hk/bib/b1618552>), (2016).
- [LG17a] M. Louati, M. S. Ghidaoui, High frequency acoustic waves in pressurized fluid in a conduit. Part 1 : Dispersion behaviour, *Journal of Hydraulic Research*, accepted, (2017).
- [LG17b] M. Louati, M. S. Ghidaoui, High frequency acoustic waves in pressurized fluid in a conduit. Part 2 : Range of propagation & preliminary implications in practice, *Journal of Hydraulic Research*, accepted, (2017).
- [LG17c] M. Louati, M. S. Ghidaoui, The need of high order numerical scheme for modeling dispersive high frequency acoustic waves in water-filled pipe, *Journal of Hydraulic Research*, to be submitted, (2017).
- [MP84] N.C. Markatos, K.A. Pericleous, Laminar and turbulent natural convection in an enclosed cavity, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 27, 755, (1984).
- [MRS09] S. Marié, D. Ricot, P. Sagaut, Comparison between lattice Boltzmann method and Navier-Stokes high order schemes for computational aeroacoustics, *Journal of Computational Physics*, vol. 228, p. 1056–1070, 2009.
- [MU00] D. A. Mayne, A. Usmani and M. Crapper, h-Adaptive Finite Element Solution of Unsteady Thermally Driven Cavity Problem, *Int. Journal of Num. Methods for Heat and Fluid Flow*, vol. 10, 598, (2000).
- [MZ88] McNamara G., Zanetti, Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata, *Physical Review Letters*, vol. 61, p. 2332–2335, (1988).
- [MJA06] Mezrhab, M. and Jami, M. and Abid, C. and Bouzidi, M. and Lallemand, P., Lattice Boltzmann modeling of natural convection in an inclined square enclosure with partitions attached to its cold wall, *Int. J. Heat Fluid Flow*, vol. 27, p. 456–465, (2006).
- [MMB10] A. Mezrhab, M. A. Moussaoui, M. Jami, H. Naji, M. Bouzidi, Double MRT thermal lattice Boltzmann method for simulation convective flows, *Phys. Lett. A.*, vol. 374, 3499, (2010).
- [Na83] Nanbu K., Interrelations between various direct simulation methods for solving the Boltzmann equation, *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 52, p. 3382–3388, (1983).

- [NGK18] Nathen, P. and Gaudlitz, D. and Krause, M. J. and Adams, N. A., On the Stability and Accuracy of the BGK, MRT and RLB Boltzmann Schemes for the Simulation of Turbulent Flows, *Communications in computational physics*, vol. 2, p. 222–238, (2018).
- [NTDB19] Nguyen K.-L., Tekitek M. M., Delachartre P., Berthier M., Multiple Relaxation Time Lattice Boltzmann Models for Multigrid Phase-Field Segmentation of Tumors in 3D Ultrasound Image, *SIAM J. Imaging Sciences*, vol. 12, pp. 1324–1346, (2019).
- [OAKR14] C. Obrecht, P. Asinari, F. Kuznik and J.J. Roux, High-performance implementations and large-scale validation of the link-wise artificial compressibility method, *Journal of Computational Physics*, vol. 275, p. 143-153, 2014.
- [OA10] T. Ohwada, P. Asinari. Artificial Compressibility Method Revisited : Asymptotic Numerical Method for Incompressible Navier-Stokes Equations, *Journal of Computational Physics*, vol. 229, p. 1698-1723, 2010.
- [OAY11] T. Ohwada, P. Asinari, D. Yabusaki. Artificial Compressibility Method and Lattice Boltzmann Method : Similarities and Differences, *Computers and Mathematics With Applications*, vol. 61, p. 3461-3474, (2011).
- [Or76] Orlanski, I. A simple boundary condition for unbounded hyperbolic flows, *Journal of Computational Physics*, vol. 21, p. 251–269 (1976).
- [PLM06] Pan C., Luo L.-S., Miller C. T., An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous medium flow simulation, *Computers & Fluids. An International Journal*, vol 35, p. 898–909, (2006).
- [PC89] S. Paolucci and D. R. Chenoweth, Transition to chaos in differentially heated vertical cavity, *J. Fluid Mech.*, vol. 201, 379, (1989).
- [Pa62] E. PARZEN, *On the estimation of a probability density function and mode*, *Annals of Mathematical Statistics*, 33 (1962), pp. 1065–1076.
- [PD15] D. A. Perumal, A. K. Dass, Review on the development of lattice Boltzmann computation of macro fluid flows and heat transfer, *Alexandria Engineering Journal*, p.955–971, (2015).
- [PH01] T. PHAM-GIA, T. L. HUNG, *The mean and median absolute deviations*, *Mathematical and Computer Modelling*, 34 (2001), pp. 921–936,
- [QdHL92] Qian Y.H., d’Humières D. and Lallemand P., Lattice BGK models for Navier-Stokes equation, *Europhys. Lett.*, vol. 17, p. 479–484, (1992).
- [LeQ91] P. Le Quéré, Accurate solutions to the square differentially heated cavity at high Rayleigh number, *Comput. Fluids*, vol. 20, 19, (1991).
- [Ra04] Raabe D., Overview of the lattice Boltzmann method for nano-and micro-scale fluid dynamics in materials science and engineering. *Modeling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 12 :R13-R46, (2004).
- [RZ97] Rothmann D. H., Zaleski S., *Lattice Gas Dynamics Automata - Simple Model for Complex Hydrodynamics*, Camb. Univ. Press, ISBN : 0-521-55201- X, (1997).
- [SCD17] B. Sciolla, L. Cowell, T. Dambry, B. Guibert, P. Delachartre, Segmentation of Skin Tumors in High-Frequency 3-D Ultrasound Images, *Ultrasound in Medicine & Biology*, vol. 43, p. 227–238, (2017).
- [Su01] S. Succi, *The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond. Numerical mathematics and scientific computation*. Oxford University Press, Oxford 2001.

- [ST06] Sukop M. C., Thorne, Jr. D. T., *Lattice Boltzmann Modeling. An Introduction for Geoscientists and Engineers*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [So64] Sommerfeld A., *Lectures on Theoretical Physics*, Academic Press, New York, (1964).
- [SC96] Sterling, J. D. and Chen, S., Stability analysis of lattice Boltzmann methods, *J. Comput. Phys.*, vol. 123, p. 196–206, (1996).
- [St86] Strang G., *An introduction to applied mathematics*, Wellesley-Cambridge press, Wellesley, (1986).
- [Tor09] E. F. Toro, *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics : A practical introduction*, Springer Science & Business Media, (2009).
- [Wan17] Wang, D., Hybrid fitting energy-based fast level set model for image segmentation solving by algebraic multigrid and sparse field method, *IET Image Processing* IET Image Processing, p. 539–545, vol. 12, (2017).
- [WW13] J. Wang, D.H. Wang, P. Lallemand and L.-S. Luo, Lattice Boltzmann simulations of thermal convective flows in two dimensions. *Computers and Mathematics with Applications*, vol. 65, 262, (2013).
- [Wei99] G. W. WEI, *Generalized perona-malik equation for image restoration*, *IEEE Signal Processing Letters*, 6 (1999), pp. 165–167.
- [Wen17] Wen, J. and Jiang, J. and Yan, Z., A new lattice Boltzmann algorithm for assembling local statistical information with MR brain imaging segmentation applications, *Multidimensional Systems and Signal Processing*, vol. 28, p. 1611–1627, (2017).
- [Wo00] Wolf-Gladrow D., *Lattice gas cellular automata and lattice Boltzmann models : an introduction*. Springer 2000, Lecture notes in mathematics, 1725, ISBN 3-540-66973-6.
- [Wo86] Wolfram S., Cellular automaton fluids. I. Basic theory, *Journal of Statistical Physics*, vol. 45, p. 471–526, (1986).
- [WSS93] E. B. Wylie, V. L. Streeter and L. Suo, *Fluid transients in systems*, Prentice Hall Englewood Cliffs NJ, (1993).
- [Ye02] J. Yopez. “Quantum Lattice-Gas Model for the Burgers Equation”, *Journal of Statistical Physics*, vol. **107**, p. 203-224, 2002.
- [YM03] Yu D., Mei R., Luo L.-S., Shyy W., Viscous flow computations with the method of lattice Boltzmann equation. *Progress in Aerospace Sciences*, 39 :329-367, (2003).
- [Zh04] Zhou J. G., *Lattice Boltzmann modeling for shallow water flows*, ISBN 3-540-40746-4, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, (2004).

Résumé :

Dans ce travail on s'intéresse à la méthode de Boltzmann sur réseau (dites LBM) et à ses applications à la mécanique des fluides, la thermique, l'acoustique et le traitement d'images. Dans une première partie, une étude théorique de la méthode est donnée. En particulier un développement asymptotique, à différents ordres, à l'intérieur ou au bord du domaine d'espace, nous a permis de mieux comprendre les différents rôles des paramètres (d'équilibre et de relaxation) LBM. Certains qui vont avoir un rôle physique (ceux qui apparaissent dans les développements d'ordre deux des équations aux dérivées partielles équivalentes/macrosopiques) et d'autres paramètres qui n'ont pas d'interprétations physiques et sont purement numériques relatifs au schéma LBM à plusieurs temps de relaxation. Ces développements asymptotiques ont permis: d'analyser le schéma au bord du domaine d'espace et de fixer les paramètres LBM libres (non physiques) afin d'augmenter la précision des conditions aux limites, d'augmenter l'ordre de convergence du schéma (en volume) et d'avoir un schéma plus stable (en particulier plus stable que le schéma BGK à un seul temps de relaxation). Dans une deuxième partie, des applications de la méthode LBM pour la thermique (où la diffusion est fortement anisotrope), pour la convection naturelle dans une cavité carrée différentiellement chauffée (où des grands nombres de Rayleigh sont considérés), pour l'acoustique (où on a des ondes sonores de hautes fréquences) et pour la segmentation d'image (où on a une diffusion numérique très faibles) sont considérées. Dans ces applications on montre l'importance du choix des différents paramètres LBM, qui rend possible la bonne modélisation de ces problèmes difficiles avec la méthode LBM à plusieurs temps de relaxation.

Mots-clés : LBM, MRT, BGK, développements asymptotiques, équations équivalentes, mécanique des fluides, thermique, acoustique, coup de bélier, traitement d'images, conditions aux limites, calcul parallèle

Abstract:

This work, focus on the lattice Boltzmann method (LBM) and its applications to fluid mechanics, thermals, acoustics and image processing. In the first part, a theoretical study of the method is given. In fact, using asymptotic developments, inside or at the boundary of the physical domain, provide us a better understanding of the roles of the different LBM parameters (related to equilibrium distribution and relaxation time). Then two kinds of parameters are identified. First kind is composed by parameters which have a physical role (which appear in the developments of order two of the equivalent/macrosopic partial differential equations). Second kind is composed by parameters which have no physical interpretations and are purely numerical (specific to the Multiple Relaxation Time MRT LB schemes). These asymptotic developments made it possible to: analyze the LBM scheme on the boundary and fix the free LBM parameters (non-physical) in order to increase the precision of the boundary conditions or to increase the accuracy of the scheme (in volume) and to have a more stable scheme (in particular more stable than the BGK scheme with a single relaxation time). In the second part, applications of the LBM method for thermals (where the diffusion is strongly anisotropic), for natural convection in a differentially heated square cavity (where large Rayleigh numbers are considered), for acoustics (where we have high frequency sound waves) and for image segmentation (where we have very low digital scattering) are considered. These applications show the importance of the choice of the different LBM parameters, which makes possible the good modelings of these difficult problems using MRT LBM scheme.

Keywords: Lattice Boltzmann Method, MRT, BGK, Asymptotic Analysis, Macroscopic Equations, CFD, Thermals, Acoustics, Water Hammer, Image Processing, Boundary Conditions, Parallel Computing