

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE DE MATHÉMATIQUES ET INFORMATIQUE

par Christophe PREUX

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique

**Modélisation et calcul du transfert de masse et de chaleur dans
un milieu poreux réactif en évolution structurale et
applications.**

Thèse dirigée par Pierre CHARRIER

Soutenue le 11 Décembre 2006

Après avis de :

P. DEGOND, Directeur de recherche	Université Toulouse 3	Rapporteurs
E. SONNENDRUCKER, Professeur	Université Strasbourg 1	

Devant la commission d'examen formée de :

G. L. VIGNOLES, Professeur	Université Bordeaux 1	Président
P. DEGOND, Directeur de recherche CNRS	Université Toulouse 3	Rapporteur
E. SONNENDRUCKER, Professeur	Université Strasbourg 1	Rapporteur
P. CHARRIER, Professeur	Université Bordeaux 1	Examineurs
B. DUBROCA, Expert sénior CEA	CEA-CESTA	
G. DUFFA, Directeur de recherche CEA	CEA-CESTA	
B. NKONGA, Maître de conférence	Université Bordeaux 1	

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier tout particulièrement Pierre Charrier, qui m'a dirigé pendant ces trois années de thèse. Sa grande compétence, sa rigueur mais aussi sa sympathie et ses grandes qualités humaines m'ont permis de mener à bien ce travail.

Un grand merci à Bruno Dubroca qui m'a dirigé au CESTA. Ses conseils avisés aussi bien en mathématiques, physique ou informatique m'ont permis d'avancer et d'apprendre de nombreuses choses.

Je remercie Pierre Degond et Eric Sonnendrücker d'avoir accepté de relire et d'évaluer ce travail, ainsi que de l'intérêt qu'ils ont porté à cette thèse.

Je tiens à témoigner ma sincère reconnaissance à Georges Duffa et Gérard Vignoles pour leurs grandes compétences en physique qu'ils ont bien voulu partager avec moi.

Merci à Boniface Nkonga d'avoir accepté de faire parti de mon jury de thèse.

Et enfin, merci à tous les scientifiques du MAB et du SIS qui ont toujours répondu présents à mes questions, même les plus anodines. Merci à Jean Claudel grâce à qui les logiciels de visualisation n'ont plus de secret pour moi. Merci à Thanh-Hà Nguyen-Bui pour son aide en thermo-chimie ainsi que pour sa relecture appliquée de mon mémoire. Merci à Michel Mandallena et Xavier Carlotti pour leur accueil chaleureux au sein du SIS. Grâce à toutes ces personnes, j'ai eu la chance de bénéficier de trois ans riches en enseignements scientifiques.

Finalement, je remercie la petite T'Choup pour avoir accepté de traquer la moindre faute de frappe dans ce mémoire sans, je cite, "Ne rien comprendre à ces symboles bizarroïdes" ainsi que d'avoir supporté mes coups de stress sans jamais m'en avoir tenu rigueur. Merci Ma Choupy!!!

Une pensée un peu "particulière" pour Maurice qui m'a épaulé dans toutes ces épreuves... Sympa Maurice.

Et enfin bien sûr une pensée pour toutes les personnes que j'ai rencontré pendant ces trois ans, doctorants, ingénieurs et docteurs qui m'ont supporté pendant ces années et qui m'ont fait découvrir tant de choses, de la cuisine créole à la découverte du Vovinam Viet-Vo-Dao, en passant par la découverte de toute la région, ses caves, ses plages, sa faune et sa flore (jusqu'à la cueillette des champignons). A toutes nos virées, à toutes nos sorties, Merci!!!

Table des matières

1	Introduction	9
2	Le problème physique	13
2.1	Introduction	13
2.2	Les systèmes de protection thermique	13
2.3	Les tuyères	18
2.4	La C.V.I	18
2.5	La microfluidique	19
3	Le modèle de transport	21
3.1	Introduction	21
3.2	Rappel : le Dusty-Gas Model	22
3.3	Dérivation du modèle	23
3.3.1	Introduction	23
3.3.2	Formulation adimensionnée	25
3.3.3	Le modèle asymptotique	28
3.4	Propriétés des problèmes auxiliaires	34
3.5	Propriétés du modèle	38
3.5.1	Introduction	38
3.5.2	Propriété en régime fluide : lien avec Darcy	38
3.5.3	Propriété en régime raréfié le nombre adimensionné $\frac{\tilde{D}T}{D\rho}$	39
3.5.4	Le pore fermé	42
4	Calcul numérique des coefficients de transport	45
4.1	Approximation en vitesse des problèmes auxiliaires	45
4.1.1	Méthode de Galerkin	45
4.1.2	Choix de la base	47
4.1.3	Détail du terme L : l'opérateur de collision de type BGK ou ES-BGK	49
4.1.4	Analyse des problèmes auxiliaires	50
4.1.5	Comportement asymptotique pour des petites valeurs de Knudsen, le régime de Darcy	56
4.2	Approximation en espace et résolution	59
4.2.1	Schéma pour le régime de transport	59
4.2.2	Le schéma "asymptotic preserving"	61

5	Modèle de transport dans un matériau réactif	71
5.1	Transport avec évolution structurale	71
5.1.1	La formulation adimensionnée	72
5.1.2	Le modèle asymptotique	74
5.2	Le modèle de transport en milieu réactif	78
5.3	Emboîtement de modèles	80
6	Mise en œuvre et application aux TPS	85
6.1	Introduction	85
6.2	Le code MUPPETT	85
6.2.1	Le modèle physico-chimique	86
6.2.2	Mise en œuvre informatique	89
6.2.3	Aspect physique	92
6.3	Le code HAMMLET	97
6.3.1	Introduction	97
6.3.2	Implémentation et optimisation	98
6.4	Représentation simplifiée de la géométrie et son évolution	100
7	Tests numériques et validations	107
7.1	Validation du calcul de D et \tilde{D} par HAMMLET	107
7.1.1	Le cas 1D d'écoulement entre deux plaques parallèles	107
7.1.2	Le tube à section rectangulaire	115
7.1.3	Le tube à section carré : validation du schéma "asymptotic preserving"	118
7.1.4	Écoulement dans un pore cylindrique	120
7.1.5	Mise en évidence des effets géométriques	131
7.1.6	Mise en évidence des effets tensoriels des coefficients (1)	133
7.1.7	Mise en évidence des effets tensoriels des coefficients (2)	137
7.1.8	Effets multidimensionnels (le tube sectionné)	140
7.1.9	Modélisation d'un matériau : le milieu poreux réel 3D	150
7.2	Validation du module de TPS du code de rentrée MUPPETT	154
7.2.1	Test sur le transfert de masse	154
7.2.2	Test sur la transpiration thermique	156
7.2.3	La base de donnée US 66	158
7.2.4	Test sur l'interpolation des tenseurs de transfert	159
7.2.5	Validation de la méthode implicite	162
7.2.6	Comparaison de notre modèle avec Darcy "compressible"	163
7.2.7	Test avec réaction chimique et évolution structurale	165
7.2.8	Test 2D avec réaction chimique	179
8	Conclusion et perspectives	189
	Annexe	194

A	Détail des matrices utilisées	195
A.1	Avec la base “transitionnelle” à 13 moments)	195
A.2	La base “knudsen” à 9 éléments	197
A.3	La base “complète” à 21 éléments	198
B	Détails des calculs des différentes longueurs	203
B.1	Le calcul de $\tilde{\delta}$	203
B.2	Le calcul de la perméabilité d’un microtube	204

Chapitre 1

Introduction

Les corps de rentrée, les sondes planétaires, les tuyères de moteur fusée subissent des flux thermiques extrêmement violents. Il est donc nécessaire d'utiliser sur ces engins des protections thermiques. Celles-ci sont souvent fabriquées à partir de matériaux composites dégradables qui sont les seuls à pouvoir supporter de tels flux. Sous l'effet de la chaleur, ces matériaux sont soumis à une évolution structurale et un gaz éventuellement en régime raréfié circule à l'intérieur des porosités et migre vers la paroi. La modélisation de ces phénomènes complexes est importante pour le dimensionnement des protections thermiques. Des phénomènes voisins apparaissent dans bien d'autres applications, notamment les processus de fabrication de ces matériaux tels que la C.V.I (Chemical Vapour Infiltration) où une préforme (substrat) est placée dans un environnement de gaz réactifs. Ainsi, en élevant la température, les réactions chimiques s'activent, certaines espèces chimiques se déposent sur la préforme et les porosités initialement présentes se referment. D'autres applications comme la microfluidique mettent en jeu une physique similaire, notamment le transfert de gaz dans des microcanaux.

La simulation du transport de masse et de chaleur à l'intérieur d'un matériau poreux, couplé à l'évolution structurale de celui-ci et aux réactions chimiques qui s'opèrent en son sein est un problème difficile qui met en jeu des échelles de temps et d'espace très différentes. L'objet de notre étude a consisté à proposer des modèles, à l'échelle macroscopique, capables de représenter correctement tous les processus importants.

Dans un premier temps, nous allons présenter un modèle de transfert de masse et de chaleur dans un milieu poreux pour des géométries microscopiques fixées et pour des régimes variés. Nous partirons de l'approche proposée dans ([1]) mais en se plaçant dans l'hypothèse d'un faible couplage thermique. Le système au niveau microscopique est composé d'une équation cinétique (équation de Boltzmann) décrivant le gaz couplée à une équation de conduction thermique dans le solide. Nous dériverons par une analyse asymptotique un modèle macroscopique dont les coefficients de transport effectifs sont déterminés par un problème de fermeture cinétique. Nous arriverons à deux modèles découplés : le modèle microscopique de calcul des coefficients de transport effectif et le modèle macroscopique de transport. Ce système macroscopique nécessitera une tabulation de coefficients de transport obtenue par la résolution de problèmes auxiliaires (modèle microscopique). Ce modèle microscopique sera en fait constitué de trois problèmes auxiliaires qui permettront de déterminer le coefficient de conduction thermique dans la phase solide K ,

le coefficient de diffusion de masse D et de transpiration thermique \tilde{D} , tous deux dans la phase fluide. Le problème en K ne présentant aucune difficulté de résolution, nous porterons par la suite notre attention sur les deux autres problèmes (pour D et \tilde{D}). Nous étudierons en effet ces systèmes : nous démontrerons la positivité des opérateurs et nous en définirons le noyau. Ensuite nous étudierons les propriétés du modèle complet : nous montrerons, par une analyse asymptotique, que dans la limite d'un gaz dense, notre modèle retrouve la célèbre loi de Darcy. Puis nous présenterons certaines propriétés des coefficients D et \tilde{D} : en particulier nous étudierons le comportement du rapport $\tilde{D}T/D\rho$ dans les régimes limites (raréfié et fluide). Nous passerons alors à l'étude numérique des problèmes auxiliaires.

Comme nous aurons besoin de travailler sur des géométries complexes 3D et que nous serons amenés à résoudre de nombreux problèmes auxiliaires afin d'engendrer nos tabulations, nous proposerons une technique de résolution approchée mais plus rapide. En particulier, nous mettrons en place une méthode de Galerkin pour l'approximation en vitesse. De plus nous simplifierons l'opérateur de collision présent dans les problèmes auxiliaires pour D et \tilde{D} par un opérateur linéarisé de type BGK ou ES-BGK que nous comparerons lors des tests numériques. Avec l'approximation en vitesse qui est réalisée, le système cinétique de départ va se ramener à un système hyperbolique dont nous étudierons les propriétés : nous montrerons que l'opérateur obtenu conserve la positivité des problèmes auxiliaires et nous exhiberons son noyau. De plus, nous démontrerons que ce système donne en limite fluide le système de Stokes qui par homogénéisation conduit à la loi de Darcy. Enfin, nous ferons une approximation en espace basée sur une méthode de volumes-finis d'ordre 2. Et comme on pouvait s'y attendre, le schéma ainsi obtenu, adapté au régime de transport présente des difficultés en régime dense. Nous serons donc amenés à proposer un schéma original préservant l'asymptotique, c'est-à-dire que ce schéma nous permettra d'approximer correctement le comportement de la solution en limite dense, c'est-à-dire la solution d'un système de Stokes.

L'implémentation de ce schéma, dans un code appelé HAMMLET, pour la résolution des problèmes auxiliaires sera entièrement réalisée par nos soins. Nous mettrons au point un solveur robuste (GMRes) préconditionné (type Gauss-Seidel). Nous développerons de nombreux outils numériques pour accélérer les calculs : les matrices du système ne seront pas stockées, des conditions aux limites de symétrie nous permettront de réduire la taille de la géométrie de calcul. Enfin, l'originalité de la prise en compte des conditions aux limites sur l'interface fluide-solide permettra au code de "glisser" du schéma de transport au schéma préservant l'asymptotique pour les régimes intermédiaires

Enfin, nous étendrons notre modèle à un matériau réactif en évolution structurale. Nous démontrerons que sous certaines hypothèses non réductrices, l'étude asymptotique nous amènera à considérer les mêmes problèmes aux limites. De plus le système macroscopique ne s'en trouvera que légèrement modifié. Ceci nous permettra de présenter notre approche en terme d'emboîtement de modèles.

Nous passerons alors à la mise en œuvre informatique où nous présenterons le modèle macroscopique complet. Ce modèle a été introduit dans le code MUPPETT ([2]). Nous présenterons notre contribution au développement de ce code, notamment les améliorations que nous avons

dû y apporter : l'accélération de la vitesse d'exécution et l'interpolation des coefficients de transport effectif. Nous avons ensuite participé à la validation de ce code. Puis nous définirons divers paramètres physiques grâce à des dépouillements d'expériences afin de pouvoir par la suite lancer une simulation complète. Puis nous définirons une géométrie microscopique simplifiée de calcul ainsi que son évolution structurale afin de pouvoir mener des simulation numériques toujours plus proches de la réalité physique.

Enfin, nous présenterons nos résultats numériques. Sur le modèle microscopique : nous le validerons tout d'abord sur des géométries simples par comparaison avec des résultats de la littérature obtenus par des méthodes validées mais limitées à des géométries simples. Puis nous validerons sur des pores circulaires notre modèle macroscopique par rapport à une expérience physique. Une fois validé, le modèle microscopique sera utilisé pour étudier plus finement les phénomènes de transport multidimensionnel. En particulier, notre modèle donnera des informations sur le caractère tensoriel de la transpiration thermique, ce qui est nouveau. Il permettra de mettre en évidence l'influence du régime d'écoulement sur des effets multidimensionnels du transport dans des géométries 3D ([3]). Enfin, nous utiliserons notre modèle pour calculer des coefficients de transport effectif sur une géométrie réelle. Nous passerons alors à la validation du modèle macroscopique : tout d'abord, nous validerons le modèle terme par terme puis nous proposerons des résultats mettant en évidence l'intérêt du modèle, notamment le fait qu'il fournit une meilleure prédiction du transport en régime transitionnel et a fortiori en régime raréfié que la loi de Darcy. Enfin, nous rajouterons une évolution structurale simplifiée mais définie par une réaction chimique traduisant le phénomène physique principal de pyrolyse et nous présenterons des résultats numériques 1D puis 2D obtenus par notre approche dans sa globalité.

Ce mémoire est articulé comme suit : au chapitre deux, nous présenterons le problème physique et ses applications. Puis, au chapitre trois, nous nous intéresserons au modèle de transport et à sa dérivation mathématique pour aboutir au système macroscopique de transfert de masse et de chaleur. Au chapitre quatre, nous présenterons les différentes approximations numériques qui sont faites afin de simplifier ou accélérer la détermination des coefficients de transport effectifs. Au chapitre cinq, nous généraliserons notre modèle en y incluant l'évolution structurale, tout d'abord prédéfinie, puis déterminée par les réactions chimiques à l'intérieur du matériau. Au chapitre six, nous présenterons comment cette méthode est mise en œuvre informatiquement ainsi que la détermination des différents paramètres physiques nécessaires pour simuler le comportement d'un matériau de protection thermique lors d'une rentrée. Enfin dans le dernier chapitre, nous présenterons les divers validations et tests numériques réalisés tout d'abord sur le code de calcul des coefficients de transport effectifs, puis sur le système macroscopique complet.

Certaines parties de ces travaux ont fait l'objet de publications. L'obtention du modèle macroscopique ainsi que sa résolution, notamment le passage du cinétique à l'hyperbolique a fait l'objet d'un article accepté pour publication ([4]). Les premiers résultats numériques ont été présentés à différentes conférences internationales : [5], [6]. Enfin, concernant l'étude des phénomènes multidimensionnels de transport, ceci a fait l'objet d'un article soumis [3]. Enfin, les premiers résultats concernant l'extension du modèle à un matériau en évolution structurale de par les réactions chimiques qui s'y opèrent a été publié dans [7].

Chapitre 2

Le problème physique

2.1 Introduction

Nous nous intéressons ici aux transferts de masse et de chaleur dans les matériaux composites poreux réactifs, comportant une résine thermo-pyrolisable. Ces matériaux sont soumis à une évolution structurale et un gaz, éventuellement en régime raréfié, peut circuler à l'intérieur. De nombreuses applications physiques qui nécessitent une bonne compréhension de ces phénomènes se retrouvent dans beaucoup de domaines industriels. Entre autres, nous pouvons citer :

- Les systèmes de protection thermique de corps de rentrée ou de tuyères de moteurs fusée, qui feront l'objet d'un paragraphe de ce chapitre. On trouve ces systèmes de protection thermique ("TPS", thermal protection system en anglais) sur des corps de rentrée civils, comme les sondes d'exploration planétaire, ou militaires.
- Le procédé de fabrication de matériaux par infiltration en phase vapeur (CVI, Chemical Vapour Infiltration) qui fera aussi l'objet d'un paragraphe et qui intéresse tout particulièrement le LCTS (Laboratoire des Composites Thermo-Structuraux). Ce procédé permet notamment l'élaboration de freins à disques pour avions et véhicules F1, de pièces de moteur d'avions de chasse (Rafale) (Cf [8]).
- Les écoulements à l'échelle micrométrique et submicronique, que l'on rencontre dans de nombreuses applications : procédé de refroidissement, fabrication de filtres submicroniques, super-isolants, qui ne font pas nécessairement appel à des phénomènes de réactions chimiques et d'évolution structurale, mais ont lieu à des régimes à haut nombre de Knudsen.

Nous allons par la suite présenter les phénomènes physiques mis en jeu et introduire les problèmes de modélisation qu'ils posent.

2.2 Les systèmes de protection thermique

Un système de protection thermique est un bouclier qui protège un corps de rentrée des très importants flux thermiques qui apparaissent pendant une rentrée hypersonique dans l'atmosphère d'une planète. Ces TPS constituent un point particulièrement critique pour le dimensionnement d'un engin spatial et il est impératif que les performances en soient validées par des tests et des analyses.

Pour certaines rentrées, corps militaires, retours terrestres d'échantillons (MSR, Mars Sample Return), missions joviennes (Galileo), les flux thermiques maximaux peuvent atteindre plusieurs centaines de MW/m^2 . Par exemple, lors de son retour sur Terre en janvier 2006, le bouclier de la mission Stardust, qui collecta des échantillons de poussière de comète (Wild 2) a supporté un flux thermique maximal de $12MW/m^2$. La sonde Galileo, lors de sa rentrée dans l'atmosphère jovienne a supporté un flux thermique maximal de $350MW/m^2$ ([9]). Très peu de matériaux sont à même de constituer des protections efficaces dans des conditions aussi sévères et les composites carbone-résine sont parmi les plus performants. Ce sont des matériaux très complexes qui mettent en jeu de nombreux processus physiques et chimiques.

En effet, lors d'une rentrée atmosphérique, sous l'effet de l'échauffement dû à l'écoulement externe, le matériau de TPS va se fissurer et des porosités vont s'ouvrir. Dès lors, des réactions de pyrolyse vont avoir lieu et la résine qui constitue près de la moitié en masse du matériau va pyrolyser et produire des gaz chauds (la plupart étant des hydrocarbures) qui vont migrer à travers les porosités vers l'écoulement externe et du coke (résidu de carbone) qui va se déposer dans les porosités (fig. 2.1).

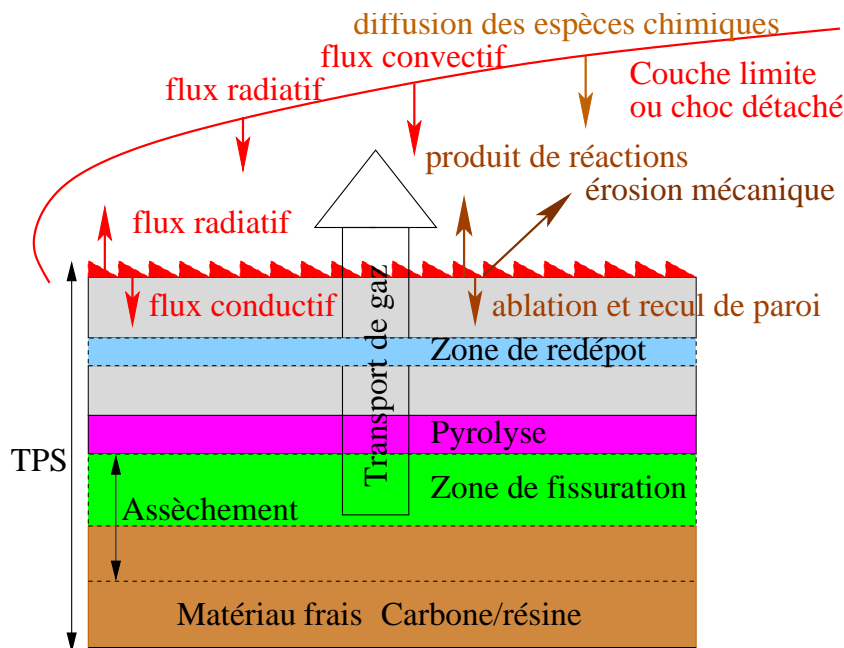


FIG. 2.1 – Mécanismes présents sur un TPS en rentrée atmosphérique.

Ces réactions de pyrolyse sont endothermiques et participent grandement à absorber l'énergie thermique. Les gaz chauds en s'écoulant vers l'extérieur contribuent également à évacuer la chaleur, mais perturbent aussi l'écoulement externe. En effet, l'injection de ces gaz dans l'écoulement externe va affecter les propriétés de la couche limite (très mince : quelques μm à quelques mm , laminaire ou turbulente) et va engendrer une réduction du flux convectif. D'autre part, ces mêmes gaz peuvent réagir chimiquement avec les gaz présents dans la couche limite, ce qui va

avoir un effet sur le flux thermique à la surface. De plus, des réactions chimiques ont lieu entre la surface du bouclier et les espèces chimiques de la couche limite, ce qui va engendrer une ablation de la surface du matériau.

Les processus décrits ci-dessus ainsi que le matériau présentent des échelles de temps et d'espace très différentes. En ce qui concerne l'espace, la taille d'un bouclier thermique est à comparer au diamètre des porosités qui varie de quelques micromètres au demi-millimètre, comme le montrent les images suivantes d'un échantillon de matériau carbone/résine chauffé à 250°C prises au microscope optique par Pascal Mosnier, doctorant au LCTS, (fig. 2.2) et (fig. 2.3).

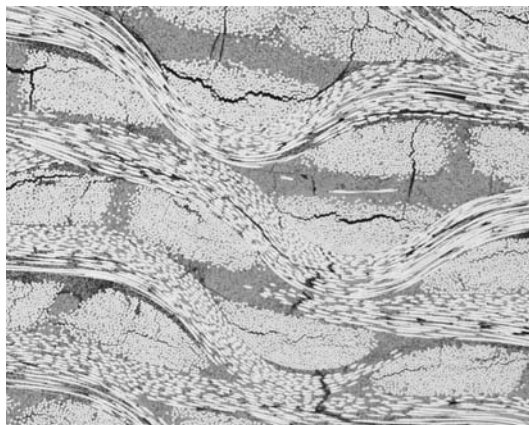


FIG. 2.2 – Matériau carbone-résine après fracturation (Source : LCTS).

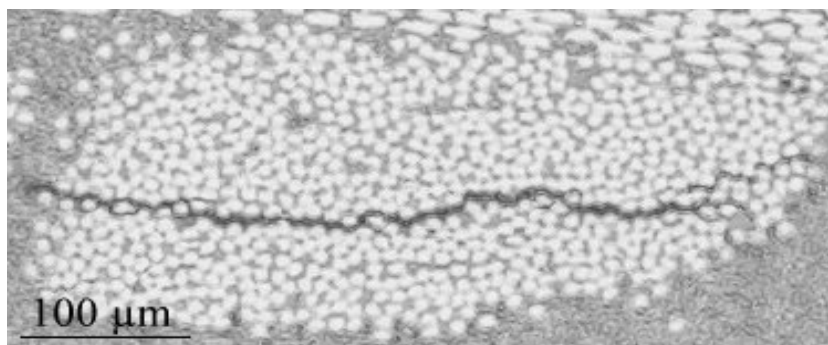


FIG. 2.3 – Fracturation au niveau d'une fibre dans un composite carbone-résine (Source : LCTS).

Les porosités nanométriques présentes dans le matériau vierge seront négligées dans le cadre de cette étude.

Par exemple, le bouclier utilisé sur le module de la sonde Galileo ¹ avait un diamètre de 1.26

¹Galileo fut lancée le 19 octobre 1989 par la navette américaine Atlantis et le 12 juillet 1995, elle a largué un module de 335 kg. Celui-ci pénétra dans l'atmosphère de Jupiter le 7 décembre pour en étudier les caractéristiques (Cf [9]).

mètre pour une épaisseur de 5.4 cm sur ses flancs et de 14.6 cm au nez. Nous sommes donc confrontés à des échelles d'espace très différentes : il nous est donc impossible de modéliser numériquement ces phénomènes à petite échelle, car si l'on essaye, il nous faudra choisir un pas $\Delta x < 10^{-6} m$ pour prendre en compte l'aspect micrométrique de la porosité. Or sur une géométrie d'un corps de rentrée comme celui du module Galileo, on arrive alors à un nombre de mailles de l'ordre de 10^{16} , ce qui est évidemment impensable à l'état actuel de la puissance de calcul des ordinateurs. Pour l'échelle de temps, il apparaît que la vitesse de l'écoulement externe est très élevée par rapport à la vitesse de transport des gaz de pyrolyse vers l'extérieur qui elle-même est très rapide par rapport à la vitesse de l'évolution structurale du matériau.

Un autre point important concerne le régime de l'écoulement des gaz dans les porosités. Lors d'une rentrée, nous passons par des régimes d'écoulement externe très différents qui correspondent à des plages de valeurs du nombre de Knudsen, qui est un nombre adimensionné qui peut être défini comme le rapport entre le libre parcours moyen des particules (lpm) et la longueur caractéristique L qui est ici la taille des pores :

$$Kn = \frac{lpm}{L}. \quad (2.1)$$

Le matériau en rentrant dans l'atmosphère, va s'échauffer, se fracturer et les porosités vont s'ouvrir, équilibrant ainsi la pression à l'intérieur des pores avec la pression de la couche limite : l'écoulement régnant à l'intérieur du matériau va donc s'équilibrer avec l'écoulement externe. Ce phénomène a en effet été mis en évidence lors d'expériences en laboratoire ([10]) comme il est montré à la figure (2.4)

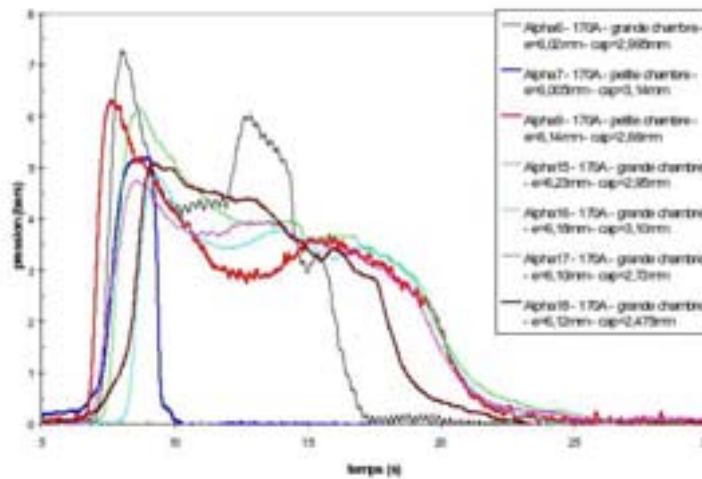


FIG. 2.4 – Pressions mesurées dans un échantillon de carbone résine en cours de pyrolyse pour une densité de flux de $8 MW/m^2$ (Source : [10]).

On remarque des montées en pression en début de chauffage puis des chutes qui sont dues à la dégradation interne de l'échantillon, c'est-à-dire à l'ouverture des porosités. Et finalement

la pression finit par s'équilibrer avec la pression atmosphérique. On peut alors supposer que le même phénomène se produit à l'intérieur du matériau d'un bouclier thermique en phase de rentrée atmosphérique.

Lors d'une trajectoire de rentrée, le libre parcours moyen au voisinage du corps varie considérablement (fig. 2.5).

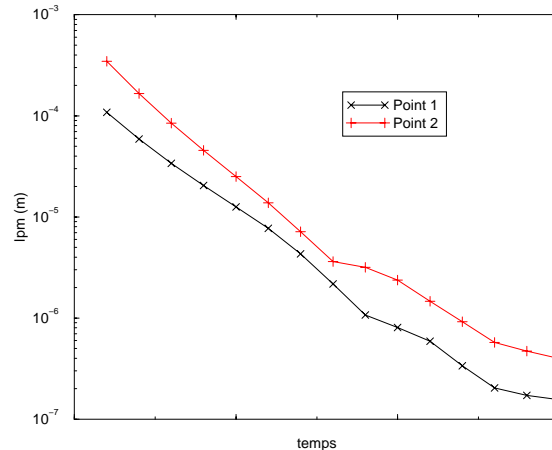


FIG. 2.5 – Evolution du libre parcours moyen au cours du temps lors d'une rentrée ([2]).

L'ouverture des porosités se fait dès le début de l'échauffement, c'est-à-dire à très haute altitude ($\sim 50 \text{ km}$) où le libre parcours moyen est d'environ $15 \mu\text{m}$. Donc à haute altitude, nous avons un écoulement raréfié au niveau des pores. Mais à plus basse altitude, nous passerons dans un régime continu.

Traditionnellement, l'activité de recherche sur les TPS est principalement expérimentale, depuis la conception du matériau jusqu'à l'essai en grandeur nature sur banc ou en vol. Dès lors, on conçoit la difficulté et le coût d'un tel essai qui réclame la préparation et la mise en œuvre d'un lanceur ainsi que des moyens importants sur le site de rentrée pour la caractérisation précise de l'atmosphère locale, la trajectographie et la télémétrie. Une des difficultés est l'instrumentation de cet essai car toute l'installation d'une mesure porte atteinte à l'intégrité de la protection thermique et comporte donc un risque de malfunction. Le besoin se fait sentir aujourd'hui d'établir des modèles élaborés, en particulier pour des missions exigeantes, afin d'optimiser les caractéristiques des engins spatiaux (on peut se souvenir de la mission Galileo qui a failli aboutir à un échec à cause du mauvais dimensionnement du bouclier) et pour diminuer les coûts de développement en diminuant le nombre d'essais ([11], [12]).

L'objectif de ce travail consiste à développer un modèle élaboré pour le transfert thermique à l'intérieur du matériau. Ce modèle simulera les phénomènes qui ont lieu dans un matériau de corps de rentrée après ouverture des porosités, il modélisera le transport de masse et de chaleur dans un milieu poreux, sur une large gamme de régimes et prendra en compte l'évolution structurale du milieu poreux.

Pour des applications de rentrée, ce modèle est destiné à être couplé avec :

- un modèle traitant des phénomènes de surface et d'ablation.
- un modèle d'écoulement externe (Navier-Stokes multi-espèces)

2.3 Les tuyères

Une tuyère est une conduite de section carrée ou circulaire placée à la sortie d'un propulseur et qui sert à transformer en énergie cinétique l'énergie des gaz de combustion. C'est le conduit terminal d'une chambre de combustion. Une tuyère de propulseur à poudre joue un double rôle : elle règle la combustion de la poudre grâce à l'aire de son col contrôlant le débit et de plus, par sa forme et les dimensions de son divergent, elle contribue à la création d'une force propulsive due à la détente plus ou moins poussée des gaz. On peut aussi lui attribuer le rôle de participer au pilotage du lanceur. On décompose généralement une tuyère en trois zones :

- le convergent ;
- la zone du col ;
- le divergent encore appelé jupe de tuyère, éventuellement équipé de volets dits volets de tuyère.

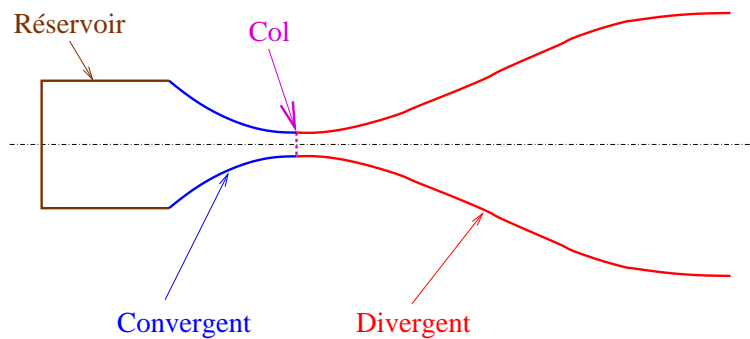


FIG. 2.6 – schéma simplifié d'une tuyère.

Du fait des températures élevées (environ 3500 K) et de l'obligation de conserver une section constante, le col de tuyère est réalisé en matériau réfractaire (graphite, carbone, tungstène). Pour les divergents, on trouve des fabrications métalliques ou en stratifiés ablatifs. Nous nous intéresserons ici au matériau utilisé pour le col de tuyère qui est en fait un matériau identique à ceux utilisés pour le TPS.

2.4 La C.V.I

La CVI (Chemical Vapour Infiltration) ([13]) est un procédé dérivé de la CVD (Chemical Vapour Deposition) ([14]), qui est très utilisée pour le dépôt de couches minces (comme par exemple, les revêtements d'outils de coupes, ou en technologie des semiconducteurs). Le principe est de placer un substrat dans un environnement de gaz réactifs, appelés précurseurs. La réaction,

qui est généralement activée en élevant la température du substrat, conduit à un dépôt solide. Lors de l'élaboration par CVI, on peut reconnaître de nombreux processus :

- 1. Le transport de gaz réactifs (précurseurs) hors de la préforme par convection et diffusion. Puis au sein de la préforme par diffusion, effusion (ou diffusion de Knudsen), et transport visqueux.
- 2. Les réactions chimiques homogènes : en effet, on remarque une décomposition des précurseurs en intermédiaires réactionnels, recombinaison, etc...
- 3. L'arrivée des intermédiaires réactionnels au contact du substrat (adsorption).
- 4. Des réactions hétérogènes proprement dites qui mènent à un dépôt solide et à des sous-produits gazeux.
- 5. Désorption des sous-produits.
- 6. L'évacuation des sous-produits par les mêmes mécanismes de transport que pour les réactifs.

A ceci vient s'ajouter l'évolution de la densité et de la morphologie du milieu : ici, contrairement aux TPS, la porosité va diminuer lors du processus. Ce phénomène d'augmentation de la densité est en général beaucoup plus lent que les autres, ce qui permet de le séparer de ceux-ci. De plus, comme pour les protections thermiques, plusieurs échelles interviennent :

- Une échelle macroscopique qui constitue le four dans son ensemble, ainsi que le milieu poreux vu de manière globale (homogène).
- Une échelle mésoscopique que représentent les détails de l'espace des pores. Les dimensions des pores sont comparables à celles des fibres, qui sont d'environ $7\mu m$.
- Une échelle microscopique qui est en fait l'échelle des molécules entre elles et avec le substrat (notion de libre parcours moyen).

Il nous faut donc distinguer dans la mesure du possible ces différentes échelles et notamment aborder toutes ces échelles à la fois. Pour la CVI, la taille des pores varie entre 1 et 10 micromètres, et le libre parcours moyen est du même ordre pour des valeurs usuelles de température (environ 1300K) et de pression (entre 1 *kPa* et 10 *kPa*).

2.5 La microfluidique

Le domaine de la microfluidique a connu un grand développement dans les années 1990. Elle met en œuvre les propriétés particulières des fluides lorsqu'ils s'écoulent dans des microsystèmes. Elle permet d'envisager le transport et la manipulation de nanolitres de fluide dans des canaux de la taille d'un cheveu. Les applications de la microfluidique se retrouvent en microbiologie en permettant par exemple de diviser une goutte de sang en un millier de micro-gouttes pour en faire mille analyses biologiques en parallèle ou encore en génie chimique, en chimie analytique ou en micromécanique. On arrive aussi à construire des micropompes sans partie mobile et à concevoir des séparateurs chimiques très efficaces en utilisant le phénomène de transpiration thermique dans des écoulements de gaz raréfiés. Ceci permet de fabriquer des laboratoires-sur-puce (en anglais *lab-on-chip*) qui sont essentiellement des réseaux de microcanaux de dimensions transverses de l'ordre de la dizaine de microns. Ceci permet de réaliser des analyses biologiques ou chimiques. Pour pouvoir réaliser certaines de ces applications, il est nécessaire de bien comprendre le processus de transport de gaz raréfiés dans des canaux très fins qui sont donc assimilables à des réseaux poreux.

Chapitre 3

Le modèle de transport

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons construire un modèle de transport de masse et de chaleur dans un milieu poreux que nous supposons non réactif et donc où il n’y aura pas d’évolution structurale du matériau. C’est-à-dire que nous nous intéressons ici au transport dans une géométrie microscopique donnée et fixe au cours du temps.

Pour dériver de tels modèles, nous partons d’une description microscopique comprenant une phase solide et une phase fluide. Par un changement d’échelle, nous arrivons à un problème macroscopique homogénéisé. Ceci est une approche classique en ce qui concerne des écoulements en milieux poreux. Beaucoup de publications provenant de recherches en mécanique des fluides ou mathématiques appliquées sont parues pour des écoulements de fluides continus, visqueux au niveau microscopique. On peut citer en particulier de nombreux articles scientifiques sur l’homogénéisation en régime fluide. Tout d’abord les travaux ([15], [16], [17]) qui étudient l’homogénéisation en milieu poreux et les travaux ([18], [19], [20]) basés sur la méthode des volumes élémentaires représentatifs. Notre travail concerne des écoulements de gaz et l’on souhaite pouvoir traiter différents régimes (du raréfié au continu) par une même approche. Il devient alors nécessaire de décrire le gaz au niveau microscopique par un modèle cinétique. Les premiers travaux sur ce sujet concernent l’ingénierie chimique et c’est donc dans cette communauté qu’ont été proposés les premiers modèles :

- le “Dusty Gas Model” (DGM) (Mason et Malinauskas, 1983 [21])
- le “Binary Friction Model “ (BFM) (Kerkhof, 1996 [22])

Ces modèles ne sont malheureusement pas issus d’une dérivation mathématique rigoureuse. Le DGM se base sur les lois de diffusion de Stefan-Maxwell en considérant qu’une des espèces gazeuses devient très grosse en taille et en poids (Dust : poussière) et modélise alors la phase solide du milieu poreux. Cette dérivation ne permet donc pas d’introduire des coefficients de transport prenant en compte de façon rigoureuse la géométrie microscopique.

L’approche que nous proposons ici reprend l’idée de décrire le gaz au niveau microscopique par un modèle cinétique (couplé avec la conduction thermique dans le solide) et de dériver un modèle limite par une analyse asymptotique. Comme nous supposons que le libre parcours moyen du gaz est du même ordre de grandeur que la taille des pores, dans ce changement d’échelle, on procède à la fois à l’homogénéisation du modèle et au passage à une description hydrodynamique du gaz. On dérive alors un modèle macroscopique par une approche formelle et rigoureuse qui

permet de déterminer des coefficients de transport qui prennent en compte à la fois la géométrie microscopique du milieu et le régime de l'écoulement. La méthode reprend la démarche proposée dans ([1]).

Le chapitre est organisé ainsi :

Dans un premier temps on présente rapidement le Dusty Gas Model (paragraphe 3.2). Puis nous nous intéresserons à la dérivation de notre modèle (paragraphe 3.3) : nous adimensionnerons nos équations en supposant que le nombre de Mach est petit, que la fréquence de collision binaire entre deux particules ν_b est du même ordre que la fréquence de collision entre les molécules de gaz et la paroi ν_w et que la conductivité thermique du gaz λ est beaucoup plus petite que la conductivité du solide λ_s . Une fois obtenu notre système macroscopique ainsi que nos systèmes auxiliaires, nous relèverons certaines propriétés de ces systèmes (paragraphe 3.4 et 3.5).

3.2 Rappel : le Dusty-Gas Model

Le DGM introduit dans [21] fournit des équations de transport moyennées par homogénéisation du milieu poreux. Il est basé sur une différence de masse pour $n + 1$ espèces. Cette approche se base sur les lois de diffusion de Stefan-Maxwell dans le cas limite où une des espèces de "gaz", la $n + 1$ ème (la poussière, en anglais the Dust) a une masse molaire très importante, une fraction molaire proche de zéro, une taille très importante et une distribution spatiale uniforme et est considérée comme immobile. Cette espèce représente la phase solide du milieu poreux. Les n premières espèces sont de véritables molécules de gaz. Ce modèle repose sur des résultats de la théorie cinétique des gaz et utilise le fait qu'en approximation du premier ordre, les flux visqueux et diffusifs sont indépendants les uns des autres.

Nous allons ici nous restreindre au cas d'une seule espèce de gaz présente.

Si l'on note ϵ la porosité du milieu, B la perméabilité intrinsèque du milieu poreux, η la viscosité, D_K le coefficient de diffusion de Knudsen et α_T celui de transpiration thermique, la vitesse intrinsèque v (vitesse de filtration) s'obtient par la formule suivante :

$$\rho v = \epsilon \rho u = -\rho \left(\frac{PB}{\eta} + D_K \right) \frac{\nabla P}{P} - \rho \alpha_T D_K \frac{\nabla T}{T}. \quad (3.1)$$

En utilisant la loi des gaz parfaits :

$$P = \rho \frac{\mathcal{R}T}{M} = \rho RT, \quad (3.2)$$

pour expliciter le gradient de pression :

$$\nabla P = \rho R \nabla T + RT \nabla \rho, \quad (3.3)$$

on obtient grâce à (3.1) la formule classique de Darcy-Klinkenberg expression pour le flux de masse :

$$\rho v = - \left[P \frac{B}{\eta} + D_K \right] \nabla \rho - \frac{\rho}{T} \left[D_K (1 + \alpha_T) + \frac{PB}{\eta} \right] \nabla T. \quad (3.4)$$

Nous pouvons donc identifier les coefficients D et \tilde{D} de la relation (3.4) :

$$D = D_K + pB_0/\eta \quad (3.5)$$

$$\tilde{D} = \frac{\rho}{T} (D + \alpha_T D_K) \quad (3.6)$$

Les coefficients du Dusty-Gas Model sont extraits de la façon suivante :

$$D_K = \lim_{P \rightarrow 0} D \quad (3.7)$$

$$B_0 = \eta \frac{\partial D}{\partial P} \quad (3.8)$$

$$\alpha_T = \left(\frac{\tilde{D}T}{\rho} - D \right) D_K^{-1} \quad (3.9)$$

$$\text{ou bien : } \alpha_T = \lim_{p \rightarrow 0} \frac{\tilde{D}T}{\rho D} - 1 \quad (3.10)$$

$$(3.11)$$

Mais une des faiblesses de la dérivation originale est qu'aucune dépendance explicite des divers coefficients concernant la poussière par rapport au nombre de molécules de celle-ci n'est donnée. Un autre point obscur est que rien n'est dit de la fraction ϕ_d de volume de poussière quand on prend la limite. Est-elle toujours constante ? La seule réponse à cette question est que ce modèle suppose implicitement que toutes les quantités, après la prise de limite, sont ramenées à une moyenne au-dessus de l'espace total. Mais en faisant ainsi, on doit faire attention de réduire progressivement la mobilité moléculaire pendant que la taille se développe ; ce point n'a jamais été mentionné dans la présentation historique du DGM. De plus, on remarque que la dérivation des coefficients ne prend pas en considération la géométrie du milieu. Celle-ci est prise en compte a posteriori en déterminant les valeurs de B et D_K identifiées à partir du milieu. Mais cela a été fait essentiellement sous des conditions isothermes et pour des géométries particulières. Pour une analyse plus complète du DGM et sa comparaison avec l'ATM, le lecteur pourra se reporter à ([3]).

3.3 Dérivation du modèle

3.3.1 Introduction

On appelle Ω un ouvert de \mathbb{R}^3 représentant le domaine géométrique occupé par le matériau poreux. Soit $\Omega_f \subset \Omega$ l'ouvert de Ω occupé par le gaz, Ω_s la partie occupée par la phase solide, et Γ l'interface entre Ω_f et Ω_s . Dans la suite nous noterons $n = n(x)$, $x \in \Gamma$ la normale à Γ au point x , sortante de Ω_s . De plus, dans ce chapitre, nous n'aurons pas d'évolution structurale et donc les ouverts Ω_f et Ω_s seront considérés comme constants.

On notera ρ_s la masse volumique du solide, C_v sa chaleur spécifique à volume constant et λ_s son coefficient de conductivité thermique. On suppose que ces quantités sont connues et constantes. On suppose de plus, que dans le solide, seul l'énergie varie et on néglige les déformations mécaniques. La seule inconnue de la phase solide est la température $T(x, t)$ définie dans Ω_s et dont l'évolution est décrite par l'équation de la chaleur :

$$\rho_s C_v \partial_t T = \text{div}(\lambda_s \nabla T). \quad (3.12)$$

On suppose que le fluide dans les pores est un fluide mono-espèce, mono-atomique et qu'il n'y a pas de réaction chimique. Comme nous considérons un gaz qui peut être raréfié dans les pores, il

peut être décrit par un modèle cinétique. Nous notons $f = f(x, t, v)$ la fonction de distribution de masse et l'évolution du gaz est donc donnée par l'équation de Boltzmann dans Ω_f :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla f = Q(f, f). \quad (3.13)$$

Et pour fermer le système, deux conditions de couplage sur l'interface Γ sont écrites : une condition de continuité des flux d'énergie et une condition de Maxwell avec un coefficient d'accommodation σ , condition qui assure un flux de masse nul à travers Γ . Sur cette condition, la maxwellienne est à la température de la paroi, ce qui traduit un équilibre thermique local. Le modèle microscopique se met donc sous la forme :

$$\rho_s C_v \partial_t T = \operatorname{div}(\lambda_s \nabla T), \quad \text{dans } \Omega_s, \quad (3.14)$$

$$\partial_t f + v \cdot \nabla f = Q(f, f), \quad \text{dans } \Omega_f, \quad (3.15)$$

$$f(x, v, t) = \sigma \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f dw M(T) \quad (3.16)$$

$$+ (1 - \sigma) f(x, v - 2v \cdot nn) \quad \text{sur } \Gamma \text{ pour } v \cdot n > 0, \quad (3.17)$$

$$\lambda_s \nabla T \cdot n = - \int \frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f(x, v, t) dv, \quad \text{sur } \Gamma. \quad (3.18)$$

Ce modèle est le même que dans [1] mais avec une condition de Maxwell un peu plus générale (dans [1], $\sigma = 1$).

L'opérateur de collision Q est défini par :

$$Q(f, f)(v) = \int_{\mathbb{R}_w^3} \int_{S^2} [f(v')f(w') - f(v)f(w)] b(v - w, \omega) d\omega dw, \quad (3.19)$$

où $v' = v - (v - w) \cdot \omega \omega$, $w' = w + (v - w) \cdot \omega \omega$ et où le noyau $b(z, \omega) = |z| \Sigma(|z|, \cos(z, \omega))$ dépend du potentiel d'interaction entre les molécules qui est considéré et de la section efficace Σ donnée par (voir [23]) :

$$\Sigma(z, \cos \theta) = r^2 \cos \theta, \quad \text{pour un potentiel de type "hard sphere",}$$

$$\Sigma(z, \cos \theta) = r^2 |z|^{\kappa-1} \cos \theta, \quad \kappa \in [0, 1[, \quad \text{pour un potentiel de type "hard sphere" variable.}$$

Dans tous les cas, le terme de collision satisfait les propriétés fondamentales suivantes (lois de conservation et H-théorème) :

$$\forall f \geq 0, \quad \int_{\mathbb{R}_v^3} Q(f, f) \psi(v) dv = 0, \Leftrightarrow \psi(v) = a + b \cdot v + c |v|^2, \quad (3.20)$$

$$\int_{\mathbb{R}_v^3} Q(f, f) \ln(f) dv \leq 0, \quad (3.21)$$

$$\int_{\mathbb{R}_v^3} Q(f, f) \ln(f) dv = 0 \Rightarrow Q(f, f) = 0. \quad (3.22)$$

Les quantités macroscopiques (densité, moment, énergie totale) sont définies par

$$\rho = \langle f \rangle, \quad \rho u = \langle f v \rangle, \quad E = \langle \frac{1}{2} |v|^2 \rangle, \quad (3.23)$$

où $\langle \psi \rangle = \int_{\mathbf{R}^3} \psi(v) dv$.

$M(v, T)$ est la maxwellienne définie par :

$$M(v, T) = \frac{1}{2\pi(RT)^2} e^{\left(-\frac{|v|^2}{2RT}\right)}.$$

Avec cette définition, on a

$$\int_{v.n>0} v.n M(v, T) dv = 1$$

Nous nous plaçons sous certaines hypothèses concernant les différentes échelles du problème ainsi que le régime considéré pour adimensionner notre système :

Hypothèse 1 : la fréquence ν_b des collisions binaires entre molécules et la fréquence ν_w des collisions entre les molécules de gaz et la paroi sont du même ordre, ce qui signifie que notre approche se place en régime transitionnel.

Hypothèse 2 : la conductivité thermique du gaz est beaucoup plus petite que la conductivité du solide, c'est ce que nous qualifierions de régime de faible couplage thermique ([24], [1]).

Hypothèse 3 : la vitesse du fluide est faible par rapport à la vitesse du son, i. e. le nombre de Mach petit : $M \approx \epsilon$.

3.3.2 Formulation adimensionnée

Introduction

Nous allons alors adimensionner le système par un petit paramètre ϵ représentant le rapport entre le diamètre d'un pore et une longueur caractéristique de la structure.

On considère des écoulements où le libre parcours moyen des particules est du même ordre de grandeur que la taille des pores et où la conductivité thermique du gaz est négligeable devant celle du solide. Dans la suite, q^* représente la valeur de référence de la quantité q , et \tilde{q} représente la valeur adimensionnée associée. Nous introduisons $f_* = \rho^*/a_*^3$ où ρ_* est la densité de référence et $a_* = \sqrt{\gamma RT_*}$ est la vitesse du son associée à la température de référence T_* . Soit $t_* = L_*/u_*$ où L_* est la longueur caractéristique de la structure macroscopique et τ_* est le temps caractéristique de relaxation de l'état de référence défini par la pression P_* et par la viscosité μ_* par la relation $\mu_* = P_* \tau_*$ ¹. On peut remarquer que μ_* , τ_* ainsi que toutes les quantités qui dépendent de μ_* dépendent aussi du potentiel d'interaction utilisé dans l'opérateur de collision. Mais dans la plage de température correspondant à nos applications, l'ordre de grandeur de μ_* est le même pour de nombreux potentiels VHS. Par exemple, à $T = 3500K$, $\mu_* = 2.5$ pour le potentiel HS et $\mu_* \approx 6.5$ pour un potentiel VHS. On peut remarquer qu'il y a deux temps caractéristiques pour ce problème : $t_* = L_*/u_*$ est le temps caractéristique de convection du fluide et $t_*^a = L_*/a_*$ est

¹ $\mu_* = CT^\omega$, où $\omega = (k+1)/2$ dépend du potentiel d'interaction entre les molécules défini dans l'équation de Boltzmann. $\omega = 1/2$ correspond à un potentiel de type "hard sphere" (HS), $\omega = 1$ correspond à un potentiel de type Maxwell et $\omega \in]0, 1[$ à un potentiel de type "variable hard sphere" (VHS). Pour un gaz réel, $\omega = 0.72$ est une valeur réaliste.

le temps caractéristique de propagation des ondes acoustiques dans le fluide.

Le libre parcours moyen caractéristique des molécules de gaz est défini par $\lambda_* = a_*\tau_*$ et le nombre de Mach M_* , le nombre de Reynolds Re_* et le nombre de Knudsen Kn_* sont définis par :

$$M_* = \frac{u_*}{a_*}, \quad Re_* = \frac{\rho_* u_* L_*}{\mu_*}, \quad Kn_* = \frac{\lambda_*}{L_*}. \quad (3.24)$$

Il sera utile plus tard de remarquer que ces trois nombres sont liés par la relation due à Von Karman (avec $\gamma = 5/3$ pour nos applications)

$$Kn_* = \frac{\tau_*}{t_*^a} = \frac{\mu_* a_*}{p_* L_*} = \frac{\gamma \mu_*}{\rho_* a_* L_*} = \frac{\gamma \mu_* M_*}{\rho_* u_* L_*} = \frac{\gamma M_*}{Re_*}. \quad (3.25)$$

L'équation de Boltzmann adimensionnée

On introduit les quantités adimensionnées suivantes :

$$\tilde{f} = \frac{f}{f_*}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{t_*}, \quad \tilde{v} = \frac{v}{a_*}, \quad \tilde{\tau} = \frac{\tau}{\tau_*}, \quad \tilde{x} = \frac{x}{L_*}, \quad (3.26)$$

en partant de (3.15) et (3.26), on obtient :

$$\frac{f_*}{t_*} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \frac{f_* a_*}{L_*} \tilde{v} \cdot \nabla_{\tilde{x}} \tilde{f} = \frac{f_*}{\tau_*} \tilde{Q}(\tilde{f}, \tilde{f}), \quad (3.27)$$

or comme $\tilde{Q}(\tilde{f}, \tilde{f}) = \frac{\tau_*}{f_*} Q(f, f)$ (ce qui est immédiat pour une approximation de type BGK où $Q(f, f) = (M[f] - f)/\tau$). et donc en divisant par $f_* a_* / L_*$, on obtient :

$$M_* \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v} \cdot \nabla_{\tilde{x}} \tilde{f} = \frac{1}{Kn_*} \tilde{Q}(\tilde{f}, \tilde{f}). \quad (3.28)$$

De là nous pouvons identifier plusieurs régimes limites suivant les valeurs du nombre de Mach M_* et du nombre de Knudsen Kn_*

Dans un premier régime (le régime de diffusion), nous supposons d'après l'hypothèse 1 que nous sommes dans un régime de transition où le libre parcours moyen des particules est comparable à la taille des pores, ce qui signifie que $Kn_* \approx \epsilon$. De plus d'après l'hypothèse 3, nous supposons que $M_* \approx \epsilon$, ce qui veut dire que la vitesse du fluide est faible dans ce régime limite. Le nombre de Reynolds est alors borné par ϵ . En effectuant un "scaling" sur l'équation de Boltzmann sur un ouvert, nous obtenons un régime limite incompressible (voir [25]). Dans notre cas, le régime limite traite le transport visqueux et de Knudsen. Finalement, on écrit l'équation adimensionnée :

$$\epsilon \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{v} \cdot \nabla_{\tilde{x}} \tilde{f} = \frac{1}{\epsilon} \tilde{Q}(\tilde{f}, \tilde{f}). \quad (3.29)$$

Ce régime correspond à la majeure partie des applications auxquelles nous nous intéressons.

D'autres régimes peuvent être considérés. Par exemple, le régime hydrodynamique correspond à $Kn_* \approx \epsilon$ et $M_* \approx O(1)$. Donc $Kn \rightarrow \infty$, et on tend vers un écoulement non visqueux. Un autre exemple est le cas où le gaz peut être considéré comme continu au niveau des pores, ce qui peut être modélisé par $Kn_* \approx \epsilon^p$, $p > 1$.

L'équation de la chaleur adimensionnée

On introduit les quantités adimensionnées suivantes :

$$\tilde{\rho}_s = \frac{\rho_s}{\rho_{s*}}, \quad \tilde{C}_{v_s} = \frac{C_{v_s}}{C_{v_{s*}}}, \quad \tilde{T} = \frac{T}{T_*}, \quad \tilde{\lambda}_s = \frac{\lambda_s}{\lambda_{s*}}, \quad (3.30)$$

où T_* est la température de référence et où $\rho_{s*}C_{v_{s*}}$ sera précisé un peu plus tard.

On part de l'équation de la chaleur sous sa forme dimensionnée (3.14) et en utilisant les quantités adimensionnées (3.26) et (3.30), on obtient alors :

$$\frac{\rho_{s*}C_{v_{s*}}L_*u_*}{\lambda_{s*}}\partial_{\tilde{t}}(\tilde{\rho}_s\tilde{C}_{v_s}\tilde{T}) = \text{div}(\tilde{\lambda}_s\nabla_{\tilde{x}}\tilde{T}), \quad (3.31)$$

en utilisant le fait que $\frac{C_{p*}}{C_{v*}} = \gamma$ et en introduisant λ_* à partir de la définition du nombre de Prandtl $Pr = \frac{C_{p*}\mu_*}{\lambda_*}$, on arrive à :

$$A = \frac{\rho_{s*}C_{v_{s*}}L_*u_*}{\lambda_{s*}} = \frac{\rho_{s*}C_{v_{s*}}\lambda_*}{\rho_*C_{v_*}\lambda_{s*}} \frac{RePr}{\gamma}. \quad (3.32)$$

Le nombre de Reynolds et le nombre de Prandtl sont alors bornés par rapport à ϵ . De plus d'après l'hypothèse 2 on peut supposer que $\frac{\lambda_*}{\lambda_{s*}} \approx \epsilon$ et comme $\frac{\rho_{s*}C_{v_{s*}}}{\rho_*C_{v_*}} \approx \frac{1}{\epsilon}$ (la masse volumique du solide étant beaucoup plus importante que la masse volumique du gaz), on peut alors dire que le nombre $\frac{\rho_{s*}C_{v_{s*}}\lambda_*}{\rho_*C_{v_*}\lambda_{s*}}$ est lui aussi borné. On peut donc définir la quantité de référence $\rho_{s*}C_{v_{s*}}$ telle que $A = 1$, et donc en conclusion, l'équation de la chaleur adimensionnée se met sous la forme :

$$\partial_{\tilde{t}}(\tilde{\rho}_s\tilde{C}_{v_s}\tilde{T}) = \text{div}(\tilde{\lambda}_s\nabla_{\tilde{x}}\tilde{T}). \quad (3.33)$$

Adimensionnement de l'équation de continuité du flux de masse à l'interface
on obtient trivialement :

$$\tilde{f}(\tilde{x}, \tilde{v}, \tilde{t}) = \sigma \int_{\tilde{w} \cdot n < 0} |\tilde{w} \cdot n| \tilde{f} d\tilde{w} \tilde{M}(\tilde{T}) + (1 - \sigma) \tilde{f}(\tilde{x}, \tilde{v} - 2\tilde{v} \cdot nn). \quad (3.34)$$

Adimensionnement de l'équation de continuité du flux d'énergie à l'interface
en utilisant les adimensionnements (3.26) et (3.30), il vient :

$$\frac{a_*^3 \rho_* L_*}{T_* \lambda_{s*}} \int \frac{1}{2} |\tilde{w}|^2 \tilde{w} \cdot n \tilde{f}(\tilde{x}, \tilde{v}, \tilde{t}) d\tilde{w} = -\tilde{\lambda}_s \nabla_{\tilde{x}} \tilde{T} \cdot n, \quad (3.35)$$

or, on remarque que :

$$\begin{aligned} \frac{a_*^3 \rho_* L_*}{T_* \lambda_{s*}} &= \frac{\rho_* u_* L_*}{\mu_*} \frac{a_*^3 \mu_*}{u_* \lambda_{s*} T_*}, \\ &= \frac{Re_*}{M_*} \frac{a_*^2 \mu_*}{\lambda_{s*} T_*}, \\ &= \frac{Re_* Pr_*}{M_*} \frac{a_*^2}{T_* C_{v_*} \gamma} \frac{\lambda_*}{\lambda_{s*}} \quad \text{car } Pr = \frac{C_{p*} \mu_*}{\lambda_*}, \\ &= \frac{Re_* Pr_*}{M_*} \frac{R}{C_{v_*}} \frac{\lambda_*}{\lambda_{s*}} \quad \text{car } a_* = \sqrt{\gamma_* RT_*}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{Re_* Pr_* R \gamma \lambda_*}{M_* C_{p_*} \lambda_{s_*}} \quad \text{car } \frac{C_{p_*}}{C_{v_*}} = \gamma, \\
&= \frac{(\gamma - 1) Re_* Pr_* \lambda_*}{M_* \lambda_{s_*}} \quad \text{car } C_{p_*} = \frac{\gamma R}{\gamma - 1},
\end{aligned} \tag{3.36}$$

on obtient donc finalement :

$$\frac{(\gamma - 1) Re_* Pr_* \lambda_*}{M_* \lambda_{s_*}} \int \frac{1}{2} |\tilde{w}|^2 \tilde{w} \cdot n \tilde{f}(\tilde{x}, \tilde{v}, \tilde{t}) d\tilde{w} = -\tilde{\lambda}_s \nabla_{\tilde{x}} \tilde{T} \cdot n. \tag{3.37}$$

On remarque que l'ordre de $\frac{(\gamma-1)Re_*Pr_*\lambda_*}{M_*\lambda_{s_*}}$ dépend seulement de $\frac{\lambda_*}{M_*\lambda_{s_*}}$ et on a supposé auparavant (hypothèse 3) que $M_* \approx \epsilon$. Or, dans le cas où on se place, c'est-à-dire sous l'hypothèse 2 (régime faiblement couplé), on a $\lambda_* \ll \lambda_{s_*}$ et donc on peut dire que $\frac{\lambda_*}{\lambda_{s_*}} \approx \epsilon$. On obtient donc finalement l'équation adimensionnée suivante :

$$\int \frac{1}{2} |\tilde{w}|^2 \tilde{w} \cdot n \tilde{f}(\tilde{x}, \tilde{v}, \tilde{t}) d\tilde{w} = -\tilde{\lambda}_s \nabla_{\tilde{x}} \tilde{T} \cdot n. \tag{3.38}$$

Le système final adimensionné

On supprime les $\tilde{}$ pour simplifier les notations et on obtient le système écrit sous forme adimensionnée :

$$\rho_s C_v \partial_t T = \text{div}(\lambda_s \nabla T), \quad \text{dans } \Omega_s, \tag{3.39}$$

$$\partial_t f + \frac{1}{\epsilon} v \cdot \nabla f = \frac{1}{\epsilon^2} Q(f, f), \quad \text{dans } \Omega_f, \tag{3.40}$$

$$f(x, v, t) = \sigma \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f dw M(T) \tag{3.41}$$

$$+ (1 - \sigma) f(x, v - 2v \cdot nn) \quad \text{sur } \Gamma \text{ pour } v \cdot n > 0, \tag{3.42}$$

$$\lambda_s \nabla T \cdot n = - \int \frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f(x, v, t) dv \quad \text{sur } \Gamma. \tag{3.43}$$

3.3.3 Le modèle asymptotique

Nous sommes face à un problème d'homogénéisation qui couple l'équation de la chaleur à une équation de type Boltzmann. L'homogénéisation de l'équation de la chaleur est un problème bien connu ([18]). L'homogénéisation de l'équation cinétique est un problème moins classique mais qui a été traité dans des conditions aux limites différentes par [15]. On remarque qu'à cause du terme $\frac{1}{\epsilon^2} Q(f, f)$ dans l'équation (3.40), on va passer dans la phase fluide d'un modèle cinétique à un modèle hydrodynamique. L'analyse asymptotique va donc mélanger un processus d'homogénéisation et un processus de limite hydrodynamique (comme dans [1]). Par rapport à [1], on détaille le régime de faible couplage thermique alors que [1] détaille un régime de fort couplage thermique.

Nous supposons que la géométrie du milieu poreux est périodique, nous allons donc utiliser les notations suivantes : soit Y la cellule élémentaire, on note $Y_f \subset Y$ la partie fluide, comme proposé sur le schéma suivant :

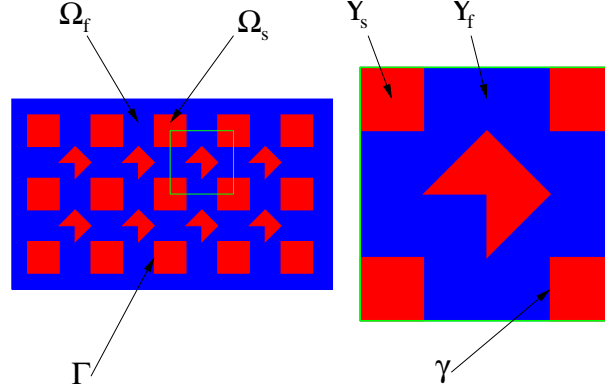


FIG. 3.1 – le matériau périodique et sa cellule élémentaire.

Le passage au macroscopique (changement d'échelle) se fait en procédant à un développement asymptotique en ϵ sur le système précédent (Cf [1], [24]). On définit deux variables :

- $x \in \Omega$ la variable “lente” (grande échelle)
- $y = x/\epsilon \in Y$ la variable “rapide” (petite échelle). Avec Y la cellule de base.

On cherche donc T^ϵ et f^ϵ sous la forme :

$$T^\epsilon(x) = T^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}) = T_0^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}) + \epsilon T_1^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}) + \dots$$

$$f^\epsilon(x, v) = f^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}, v) = f_0^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}, v) + \epsilon f_1^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}, v) + \dots$$

On remarque alors que $div_x = div_x + \frac{1}{\epsilon} div_y$. On reporte dans (3.39 - 3.40 - 3.41 - 3.43) et on identifie les termes du même ordre. La démarche est la suivante :

L'ordre principal permet de montrer que f_0 et T_0 sont des variables macroscopiques (i.e. indépendantes de y).

L'ordre 1 permet d'introduire la réponse du système microscopique aux sollicitations macroscopiques, c'est-à-dire relie T_1 et f_1 aux gradients macroscopiques $\nabla_x f_0$ et $\nabla_x T_0$.

L'ordre 2 permet de fermer le système, c'est-à-dire un système régissant les variables macroscopiques définies par l'ordre principal (T_0 et ρ_0).

A l'ordre principal

$$div_y(\lambda_s \nabla_y T_0) = 0 \quad \text{dans } Y_s, \quad (3.44)$$

$$v \cdot \nabla_y f_0 = Q(f_0, f_0) \quad \text{dans } Y_f, \quad (3.45)$$

$$f_0 = \sigma \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_0 dw M(T_0) + (1 - \sigma) f_0(x, v - 2v \cdot nn) \quad \text{sur } \gamma \text{ pour } v \cdot n > 0, \quad (3.46)$$

$$\lambda_s \nabla_y T_0 \cdot n = 0 \quad \text{sur } \gamma. \quad (3.47)$$

A l'ordre 1

$$-div_x(\lambda_s \nabla_y T_0) = div_y(\lambda_s \nabla_x T_0) + div_y(\lambda_s \nabla_y T_1), \quad (3.48)$$

$$v \cdot \nabla_x f_0 + v \cdot \nabla_y f_1 = L(f_1), \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned} f_1 &= \sigma \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_1 dw M(T_0) \\ &+ \sigma \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_0 dw \frac{\partial M(T_0)}{\partial T} T_1 \\ &+ (1 - \sigma) f_1(x, v - 2v \cdot nn), \end{aligned} \quad (3.50)$$

$$\lambda_s \nabla_x T_0 \cdot n + \lambda_s \nabla_y T_1 \cdot n = - \int \frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f_0(x, v, t) dv. \quad (3.51)$$

Où l'on a $L(f) = Q(f_0, f) + Q(f, f_0)$.

À l'ordre 2

$$\rho_s C_v \partial_t T_0 - \operatorname{div}_x (\lambda_s (\nabla_x T_0 + \nabla_y T_1)) = \operatorname{div}_y (\lambda_s (\nabla_x T_1 + \nabla_y T_2)), \quad (3.52)$$

$$\partial f_0 + v \cdot \nabla_x f_1 + v \cdot \nabla_y f_2 = L(f_2) + Q(f_1, f_1), \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} f_2 &= \sigma \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_2 dw M(T_0) \\ &+ \sigma \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_1 dw \frac{\partial M(T_0)}{\partial T} T_1 \\ &+ \sigma \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_0 dw \frac{\partial^2 M(T_0)}{\partial^2 T} T_2 \\ &+ (1 - \sigma) f_2(x, v - 2v \cdot nn), \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\lambda_s \nabla_x T_1 \cdot n + \lambda_s \nabla_y T_2 \cdot n = - \int \frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f_1(x, v, t) dv. \quad (3.55)$$

Grâce au système à l'ordre principal, on peut montrer la propriété suivante :

Proposition 1 Soient T_0 et f_0 solutions du problème (3.44 - 3.45 - 3.46 - 3.47). Alors, T_0 est indépendante de y et f_0 est une Maxwellienne indépendante de y , de vitesse nulle et de température T_0 , i.e.

$$f_0(v) = \frac{\rho_0}{(2\pi RT_0)^{3/2}} e^{-\frac{|v|^2}{2RT_0}}$$

La preuve de cette proposition est donnée dans ([1]) pour le cas fortement couplé. Elle est similaire ici pour le cas faiblement couplé.

Le développement asymptotique à l'ordre 1 met en évidence des problèmes auxiliaires, qui permettent de ramener la détermination des caractéristiques homogénéisées du matériau à un calcul indépendant.

À l'ordre 1, les équations sur T_1 et sur f_1 sont linéaires respectivement en $\nabla_x T_0$ et $\nabla_x f_0$, qui sont connus grâce à l'ordre principal. On peut donc rechercher les solutions T_1 et f_1 comme combinaisons linéaires de $\nabla_x T_0$ et $\nabla_x f_0$, i.e. sous la forme :

$$T_1 = \gamma \cdot \nabla_x T_0 \quad \text{avec } \gamma = \gamma(y), \quad (3.56)$$

$$f_1 = (\alpha \cdot \nabla_x T_0 + \beta \cdot \nabla_x \rho_0) f_0 \quad \text{avec } \alpha = \alpha(y, v) \text{ et } \beta = \beta(y, v). \quad (3.57)$$

On peut remarquer aussi que l'équation (3.48) s'écrit alors :

$$-\operatorname{div}_y (\lambda_s \nabla_y T_1) = \operatorname{div}_y (\lambda_s \nabla_x T_0).$$

On écrit alors la formule variationnelle associée à cette équation et on obtient pour toute fonction test ϕ :

$$- \int_{\Omega_s} \lambda_s \nabla_x T_0 \nabla_y \phi \, dy + \int_{\Gamma} \lambda_s \nabla_x T_0 \cdot n \phi \, d\sigma = \int_{\Omega_s} \lambda_s \nabla_y T_1 \nabla_y \phi \, dy - \int_{\Gamma} \lambda_s \nabla_y T_1 \cdot n \phi \, d\sigma, \quad (3.58)$$

or comme f_0 est paire en v , le second membre de (3.51) est nul et il vient que $\int_{\Gamma} \lambda_s \nabla_x T_0 \cdot n \phi \, d\sigma + \int_{\Gamma} \lambda_s \nabla_y T_1 \cdot n \phi \, d\sigma = 0$, et donc on a

$$- \int_{\Omega_s} \lambda_s \nabla_x T_0 \nabla_y \phi \, dy = \int_{\Omega_s} \lambda_s \nabla_y T_1 \nabla_y \phi \, dy, \quad (3.59)$$

c'est-à-dire :

$$- \sum_{k=1,3} \int_{\Omega_s} \lambda_s e^k \nabla_y \phi \, dy \, \partial_{x_k} T_0 = \sum_{k=1,3} \int_{\Omega_s} \lambda_s \nabla_y \gamma_k \nabla_y \phi \, dy \, \partial_{x_k} T_0, \quad (3.60)$$

où e^k est le $k^{\text{ième}}$ vecteur de la base canonique associée à \mathbb{R}^3

Ceci doit être vérifié quel que soit T_0 et donc quel que soit $\partial_{x_k} T_0$, c'est-à-dire que $\forall k = 1, 2, 3$, γ doit vérifier :

$$\int_{\Omega_s} \lambda_s \nabla_y \gamma_k \nabla_y \phi \, dy = - \int_{\Omega_s} \lambda_s e^k \nabla_y \phi \, dy \quad (3.61)$$

et finalement :

$$- \int_{\Gamma} \lambda_s n_k \phi \, dy = - \int_{\Omega_s} \operatorname{div}(\lambda_s \nabla_y \gamma_k) \phi \, dy + \int_{\Gamma} \lambda_s \nabla_y \gamma_k \cdot n \phi \, d\sigma. \quad (3.62)$$

Ceci nous donne alors le premier problème auxiliaire sur γ :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}_y(\lambda_s \nabla_y \gamma_i) = 0 & \text{dans } Y_s, \\ \lambda_s \nabla_y \gamma_i \cdot n = -\lambda_s n_i & \text{sur } \gamma. \end{cases}$$

Enfin, on s'intéresse maintenant aux équations (3.49) et (3.50), on utilise la propriété (3.57) et on remarque que :

$$\nabla_x f_0 = \left(-\frac{3}{2T_0} + \frac{|v|^2}{2RT_0^2}\right) f_0 \nabla_x T_0 + \frac{f_0}{\rho_0} \nabla_x \rho_0, \quad (3.63)$$

ainsi, on arrive aux deux derniers problèmes auxiliaires :

$$\begin{cases} -L(f_0 \alpha_i) + f_0 v \cdot \nabla_y \alpha_i = -f_0 v_i \left(-\frac{3}{2T_0} + \frac{|v|^2}{2RT_0^2}\right) & \text{dans } Y_f, \\ \alpha_i = \left(\frac{|v|^2}{2RT_0^2} - \frac{2}{T_0}\right) \gamma_i + \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \alpha_i M(T_0) \, dw & \text{sur } \gamma \text{ pour } v \cdot n > 0, \end{cases}$$

$$\begin{cases} -L(f_0 \beta_i) + v \cdot \nabla_y (f_0 \beta_i) = \frac{-f_0}{\rho_0} v_i & \text{dans } Y_f, \\ \beta_i = \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \beta_i M(T_0) \, dw & \text{sur } \gamma \text{ pour } v \cdot n > 0. \end{cases}$$

En conclusion, pour que T_1 vérifie (3.59) on choisit les fonctions vectorielles $\alpha(y, v) = (\alpha_i(y, v))_{i=1,3}$, $\beta(y, v) = (\beta_i(y, v))_{i=1,3}$ et $\gamma(y) = (\gamma_i(y))_{i=1,3}$ solutions des problèmes auxiliaires suivants posés dans la cellule de base Y (voir [1], [24]) :

$$(P_1) \quad \begin{cases} -\operatorname{div}_y(\lambda_s \nabla_y \gamma_i) & = 0 & \text{dans } Y_s, \\ \lambda_s \nabla_y \gamma_i \cdot n & = -\lambda_s n_i & \text{sur } \gamma, \end{cases} \quad (3.64)$$

$$(P_2) \quad \begin{cases} -L(f_0 \alpha_i) + f_0 v \cdot \nabla_y \alpha_i = -f_0 v_i \left(-\frac{3}{2T_0} + \frac{|v|^2}{2RT_0^2} \right) & \text{dans } Y_f, \\ \alpha_i = \left(\frac{|v|^2}{2RT_0^2} - \frac{2}{T_0} \right) \gamma_i + \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \alpha_i M(T_0) dw & \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0, \end{cases} \quad (3.65)$$

$$(P_3) \quad \begin{cases} -L(f_0 \beta_i) + v \cdot \nabla_y (f_0 \beta_i) = \frac{-f_0}{\rho_0} v_i & \text{dans } Y_f, \\ \beta_i = \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \beta_i M(T_0) dw & \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0. \end{cases} \quad (3.66)$$

Fermeture

En partant de l'équation (3.49), on la multiplie par $\frac{|v|^2}{2}$ et on intègre en vitesse pour obtenir :

$$\int \frac{|v|^2}{2} v \cdot \nabla_x f_0 dv + \int \frac{|v|^2}{2} v \cdot \nabla_y f_1 dv = \int \frac{|v|^2}{2} L(f_1) dv,$$

or grâce aux invariants collisionnels, on a $\int \frac{|v|^2}{2} L(f_1) dv = 0$ et comme f_0 est une maxwellienne, on a aussi $\int \frac{|v|^2}{2} v \cdot \nabla_x f_0 dv = 0$ ce qui nous amène à $\int \frac{|v|^2}{2} v \cdot \nabla_y f_1 dv = 0$ et donc :

$$\int_{Y_s} \int \operatorname{div} \left(\frac{|v|^2}{2} v \cdot \nabla_y f_1 \right) dv dy = 0. \quad (3.67)$$

En intégrant (3.55) sur Γ et grâce à l'hypothèse de périodicité du matériau, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{\gamma} \lambda_s \nabla_x T_1 \cdot n + \lambda_s \nabla_y T_2 \cdot n d\sigma &= - \int_{\gamma} \int \frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f_1(x, v, t) dv d\sigma, \\ &= - \int_{Y_f} \int \operatorname{div} \left(\frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f_1(x, v, t) \right) dv dy, \\ &= 0 \quad \text{grâce à (3.67)}. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Maintenant, nous intégrons (3.52) sur Y_s en utilisant la propriété (3.68), on obtient :

$$\left(\int_{Y_s} \rho_s C_v dy \right) \partial_t T_0 - \operatorname{div}_x \left(\int_{Y_s} (\lambda_s + \lambda_s \gamma(y)) dy \nabla_x T_0 \right) = 0. \quad (3.69)$$

On peut remarquer qu'il s'agit d'une équation de type équation de la chaleur homogénéisée.

Enfin, on intègre (3.53) par rapport à v et sur Y_s et on obtient en remarquant que $\int v \cdot n f_2 dv = 0$ (condition de flux de masse nul) :

$$\frac{1}{|Y|} \partial_t \int_{Y_f} \int f_0 dv dy + \frac{1}{|Y|} \operatorname{div}_x \int_{Y_f} \int v f_0 \alpha \nabla_x T_0 + \frac{1}{|Y|} \operatorname{div}_x \int_{Y_f} \int v f_0 \beta \nabla_x \rho_0 = 0.$$

On obtient alors :

$$\frac{|Y_f|}{|Y|} \partial_t \rho_0 + \frac{1}{|Y|} \operatorname{div}_x \int_{Y_f} v f_0 \alpha \nabla_x T_0 + \frac{1}{|Y|} \operatorname{div}_x \int_{Y_f} v f_0 \beta \nabla_x \rho_0 = 0. \quad (3.70)$$

On note :

$$\begin{aligned} D &= D(\rho_0, T_0) = \frac{\epsilon}{|Y_f|} \langle f_0 v \otimes \int_{Y_f} \beta(y, v) dy \rangle, \\ \tilde{D} &= \tilde{D}(\rho_0, T_0) = \frac{\epsilon}{|Y_f|} \langle f_0 v \otimes \int_{Y_f} \alpha(y, v) dy \rangle, \\ K &= K(\rho_0, T_0) = \frac{1-\epsilon}{|Y_s|} \int_{Y_s} \lambda_s + \lambda_s \nabla_x \gamma(y) dy, \end{aligned} \quad (3.71)$$

où $\langle f \rangle = \int_{R^3} f(v) dv$, et $\epsilon = \frac{|Y_f|}{|Y|}$ la porosité de la cellule élémentaire. On obtient la forme finale du système macroscopique en reprenant les équations (3.69) - (3.70) :

$$\epsilon \partial_t \rho_0 - \operatorname{div}_x (\tilde{D} \nabla_x T_0) - \operatorname{div}_x (D \nabla_x \rho_0) = 0, \quad (3.72)$$

$$(1 - \epsilon) \rho_s C_v \partial_t T_0 - \operatorname{div}_x (K \nabla_x T_0) = 0, \quad (3.73)$$

avec les coefficients \tilde{D}, D et K donnés par (3.71) et construits grâce aux solutions α, β, γ des problèmes auxiliaires (3.64), (3.65) et (3.66).

Le flux de masse dans ce modèle s'écrit :

$$\rho v = -D \nabla \rho + \tilde{D} \nabla T. \quad (3.74)$$

On peut alors facilement le comparer termes à termes avec la formule (3.4) du DGM.

Remarques :

- Ce système est non linéaire car les coefficients \tilde{D}, D, K dépendent de ρ et de T . Pour résoudre numériquement ce système macroscopique, il nous faut donc calculer les lois $(\rho, T) \rightarrow D(\rho, T)$ et $(\rho, T) \rightarrow \tilde{D}(\rho, T)$.

- La perméabilité, le coefficient de diffusion de Knudsen et le coefficient de diffusion thermique peuvent être extraits des coefficients D et \tilde{D} . Il est donc possible d'avoir de plus amples informations sur le caractère tensoriel des ces trois quantités pour un milieu poreux général.

- Ces lois ne peuvent pas être exprimées explicitement, D, \tilde{D} et K dépendant de ρ et T à travers les solutions des problèmes auxiliaires (3.65), (3.66) et (3.64). En pratique, on se contente d'échantillonner ces lois et de calculer D, \tilde{D} et K pour un nombre fini de valeurs choisies dans un intervalle $\rho \in [\rho_{Min}, \rho_{Max}]$ et $T \in [T_{Min}, T_{Max}]$. On choisit un pas $\Delta \rho$ et ΔT pour tabuler les coefficients et on les précalcule pour les valeurs $\rho_{Min} + i \Delta \rho$ avec $i \in [0, N]$ tel que $\rho_{Min} + N \Delta \rho = \rho_{Max}$. Et donc, si on a besoin par exemple de $D(\rho_{i+1/2}^n, T_{i+1/2}^n)$, on calculera D par interpolation de valeurs de la tabulation (Cf chapitre 6).

- Le modèle a été dérivé pour le régime transitionnel où les collisions binaires et les collisions des molécules de gaz avec la paroi ont des fréquences comparables (hypothèse 1). Il est intéressant d'analyser le comportement du modèle dans les deux régimes limites suivants :

- Si le gaz est très raréfié, les collisions binaires deviennent négligeables et seules comptent les collisions avec la paroi : c'est le régime de Knudsen. Formellement, le modèle reste inchangé.

Néanmoins dans les problèmes auxiliaires (P_2) et (P_3) le terme de collision L a disparu et les solutions peuvent être très différentes. Il faut ajouter que pour avoir une solution dans ce régime nous devons faire l'hypothèse d'horizon fini, c'est-à-dire que la géométrie poreuse ne devra pas comporter, dans aucune direction, un horizon infini, où les particules pourraient évoluer d'un bout à l'autre de la cellule sans subir de collision avec la paroi.

- Si au contraire le gaz est très dense, les collisions binaires prédominent. On montrera plus tard (Cf [24]) que l'on retrouve à la limite un régime de Darcy. Le modèle (3.72 - 3.73) reste valide, mais les problèmes auxiliaires en α et β deviennent des problèmes de Stokes. On peut s'attendre à des difficultés numériques dans la résolution de (P_2) et (P_3) au voisinage de ce régime. Nous étudierons donc par la suite un schéma permettant de pallier ces difficultés.

- On peut déjà remarquer l'intérêt du nombre adimensionné $\frac{\tilde{D}T}{D\rho}$ qui compare le temps caractéristique de la diffusion moléculaire par rapport au temps caractéristique de transpiration thermique. Ceci sera développé au paragraphe 3.5.

- On pourra remarquer aussi que ces coefficients peuvent ne dépendre que d'un paramètre que nous noterons $\hat{K}_n(\rho_0, T_0)$, ce nombre adimensionné se calcule par la formule suivante :

$$\hat{K}_n = \frac{\mu_0}{g} \sqrt{\frac{2}{RT_0}} \frac{1}{\rho_0},$$

où g est un paramètre tel que la viscosité $\mu_0 = gp_0\tau$. Et ce paramètre varie suivant la théorie choisie. Pour un opérateur de collision de type BGK ([26]), $g = 1$ et pour un opérateur de type ES-BGK ([27]), $g = \frac{1}{1-\nu}$. C'est pour cette raison que l'on préférera chercher les coefficients D , \tilde{D} et K en fonction de ρ_0 et T_0 .

3.4 Propriétés des problèmes auxiliaires

Dans ce paragraphe, nous allons démontrer certaines propriétés des systèmes auxiliaires : notamment leur positivité et nous en déduirons leurs noyaux.

Soit le problème en α :

$$\begin{cases} -L(f_0\alpha_i) + f_0v \cdot \nabla_y \alpha_i = -f_0v_i \left(-\frac{3}{2T_0} + \frac{|v|^2}{2RT_0^2} \right) & \text{dans } Y_f, \\ \alpha_i = \left(\frac{|v|^2}{2RT_0^2} - \frac{2}{T_0} \right) \gamma_i + \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \alpha_i M(T_0) dw & \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0, \\ + \text{Conditions aux limites périodiques sur } \partial Y_f \setminus \gamma. \end{cases}$$

Etudions l'opérateur qui aux fonctions α_i de y et de v telles que

$$\begin{cases} \alpha_i = \left(\frac{|v|^2}{2RT_0^2} - \frac{2}{T_0} \right) \gamma_i + \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \alpha_i M(T_0) dw & \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0, \\ + \text{Conditions aux limites périodiques sur } \partial Y_f \setminus \gamma. \end{cases}$$

associe $[-L(f_0\alpha_i) + f_0v \cdot \nabla_y \alpha_i](y, v)$.

Soit E défini par :

$$E(\alpha) = - \int_{Y_f} \langle L(\alpha f_0), \alpha \rangle dy + \int_{Y_f} \text{div}_y \langle v \alpha f_0, \alpha \rangle dy,$$

On remarque tout d'abord que si v est indépendant de y alors $v \cdot \nabla_y \alpha = \text{div}(\alpha v)$. Donc par la formule de Green, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{Y_f} \langle \text{div}_y(v \alpha f_0) \alpha \rangle dy &= - \int_{Y_f} \langle v f_0 \alpha \cdot \nabla_y \alpha \rangle dy + \int_{\partial Y_f} \langle v \cdot n \alpha^2 f_0 \rangle d\sigma(y), \\ &= - \int_{Y_f} \langle \text{div}_y(f_0 \alpha v) \alpha \rangle dy + \int_{\partial Y_f} \langle v \cdot n \alpha^2 f_0 \rangle d\sigma(y), \end{aligned} \quad (3.75)$$

et donc :

$$E(\alpha) = - \int_{Y_f} \langle L(\alpha f_0) \alpha \rangle dy - \frac{1}{2} \int_{\partial Y_f} \langle v \cdot n \alpha^2 f_0 \rangle d\sigma(y).$$

On a alors grâce à la propriété de l'opérateur de collision :

$$- \int_{Y_f} \langle L(\alpha f_0) \alpha \rangle dy \geq 0.$$

On pose alors $A = \int_{\partial Y_f} \langle v \cdot n \alpha^2 f_0 \rangle d\sigma(y)$ et grâce aux conditions aux limites périodiques sur $\partial Y_f \setminus \gamma$ on obtient $A = \int_{\gamma} \langle v \cdot n \alpha^2 f_0 \rangle d\sigma(y)$.

Soit $\Phi_0(y) = \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \alpha_i(y, w) M(T_0)(w) dw$, on réalise alors un développement de $\alpha(y, w)$ autour de $\Phi_0(y) + \gamma \left(\frac{|v|^2}{2RT_0^2} - \frac{2}{T_0} \right)$:

$$\begin{aligned} \alpha(y, v)|_{\gamma, v \cdot n > 0} &= \Phi_0 + \gamma \left(\frac{|v|^2}{2RT_0^2} - \frac{2}{T_0} \right), \\ &= \left(\Phi_0 - \frac{2\gamma}{T_0} \right) + \frac{\gamma}{2RT_0^2} |v|^2, \\ &= c_0 + c_1 |v|^2, \end{aligned} \quad (3.76)$$

$$= a(v) \quad (\text{notation}). \quad (3.77)$$

Donc

$$\begin{aligned} \alpha^2(y, v) &= [a(v) + (\alpha(y, v) - a(v))]^2, \\ &= a(v)^2 + 2(\alpha(y, v) - a(v))a(v) + (\alpha(y, v) - a(v))^2. \end{aligned} \quad (3.78)$$

Ce qui nous amène à

$$\begin{aligned} A &= \int_{\gamma} \langle v \cdot n a(v)^2 f_0 \rangle d\sigma(y), \\ &+ 2 \int_{\gamma} \langle a(v) v \cdot n (\alpha(y, v) - a(v)) f_0 \rangle d\sigma(y), \\ &+ \int_{\gamma} \langle v \cdot n (\alpha(y, v) - a(v))^2 f_0 \rangle d\sigma(y), \\ &= A_1 + A_2 + A_3. \end{aligned} \quad (3.79)$$

On étudie alors chaque terme.

Par parité, comme $a(v)$ est paire en v et $v \cdot n$ est impaire, on a

$$A_1 = \int_{\gamma} \langle v \cdot n a(v)^2 f_0 \rangle d\sigma(y) = 0.$$

D'après les conditions aux limites sur γ , on sait que $\alpha(y, v) - a(v) = 0$ pour $v \cdot n > 0$, donc on obtient

$$\begin{aligned} A_3 &= \int_{\gamma} \langle v \cdot n (\alpha(y, v) - a(v))^2 f_0 \rangle d\sigma(y), \\ &= \int_{\gamma} \int_{v \cdot n < 0} v \cdot n f_0(v) (\alpha(y, v) - a(v))^2 dv d\sigma(y), \\ &= - \int_{\gamma} \int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f_0(v) (\alpha(y, v) - a(v))^2 dv d\sigma(y), \end{aligned} \quad (3.80)$$

et enfin

$$\begin{aligned} A_2 &= 2 \int_{\gamma} \langle a(v) v \cdot n (\alpha(y, v) - a(v)) f_0 \rangle d\sigma(y), \\ &= 2 \int_{\gamma} \langle v \cdot n f_0 \alpha(y, v) a(v) \rangle d\sigma(y) \quad (\text{toujours par parité}), \\ &= 2 \int_{\gamma} c_0 \langle v \cdot n f_0 \alpha(y, v) \rangle d\sigma(y) + 2 \int_{\gamma} c_1 \langle (v \cdot n) |v|^2 f_0 \alpha(y, v) \rangle d\sigma(y). \end{aligned} \quad (3.81)$$

Or le flux de masse nul nous donne $\int_v (v \cdot n) f_0 \alpha(y, v) dv = 0$, ce qui nous amène à :

$$A_2 = 2 \int_{\gamma} c_1 \langle (v \cdot n) |v|^2 f_0 \alpha(y, v) \rangle d\sigma(y),$$

or l'équation (3.68) nous donne $\int_{\gamma} \langle (v \cdot n) |v|^2 f_1 \rangle d\sigma(y) = 0$, ce qui s'écrit aussi en utilisant le résultat (3.57) :

$$\int_{\gamma} \langle (v \cdot n) |v|^2 f_0 \alpha \rangle \nabla_x T_0 + \langle (v \cdot n) |v|^2 f_0 \beta \rangle \nabla_x \rho_0 d\sigma(y) = 0,$$

or, comme $\nabla_x T_0$ et $\nabla_x \rho_0$ sont indépendants, on en conclut que $\int_{\gamma} \langle (v \cdot n) |v|^2 f_0 \alpha \rangle = 0$, ce qui nous amène à $A_2 = 0$ et donc finalement, nous obtenons :

$$E(\alpha) = - \int_{Y_f} \langle L(\alpha f_0) \alpha \rangle dy - \frac{1}{2} \int_{\gamma} \int_{v \cdot n < 0} v \cdot n f_0(v) (\alpha(y, v) - a(v))^2 dv d\sigma(y).$$

Corollaire 1 *L'opérateur*

$$\begin{cases} -L(f_0 \cdot) + v \cdot \nabla_y (f_0 \cdot) & \text{dans } Y_f, \\ \alpha_i = \left(\frac{|v|^2}{2RT_0^2} - \frac{2}{T_0} \right) \gamma_i + \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \alpha_i M(T_0) dw & \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0, \\ + \text{Conditions aux limites périodiques sur } \partial Y_f \setminus \gamma \end{cases}$$

est positif.

En effet, d'après les propriétés de l'opérateur L ([23]), on sait que $-\langle L(\alpha f_0), \alpha \rangle \geq 0$, et le second terme est évidemment positif.

Etudions maintenant le noyau de cet opérateur. Soit $\alpha(y, v)$ tel que :

$$\begin{cases} -L(f_0 \alpha) + v \cdot \nabla_y (f_0 \alpha) = 0 & \text{dans } Y_f, \\ \alpha = \left(\frac{|v|^2}{2RT_0^2} - \frac{2}{T_0} \right) \gamma_i + \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \alpha M(T_0) dw & \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0, \\ + \text{Conditions aux limites périodiques sur } \partial Y_f \setminus \gamma \end{cases}$$

On a alors

$$- \int_{Y_f} \int_v L(f_0 \alpha) \alpha dv dy + \int_{\gamma} \int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f_0(v) (\alpha(y, v) - a(v))^2 dv dy = 0,$$

or nous avons démontré auparavant que chacun de ces termes est positif, et donc si la somme est nulle, cela signifie que chacun des termes est nul, donc :

$$- \int_{Y_f} \int_v L(f_0 \alpha) \alpha dv dy = 0 \Rightarrow \int_v L(f_0 \alpha) \alpha dv = 0.$$

Et donc on en conclut grâce aux propriétés de l'opérateur (Cf [23]) que :

$$\alpha = a_0(y) + a_1(y) \cdot v + a_2(y) |v|^2.$$

De plus :

$$\begin{aligned} & \int_{\gamma} \int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f_0(v) (\alpha(y, v) - a(v))^2 dv dy = 0 \\ \Rightarrow & \int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f_0(v) (\alpha(y, v) - a(v))^2 dv = 0 \quad \forall y \in \gamma \\ \Rightarrow & \alpha(y, v) = a(v) \quad \forall v, v \cdot n < 0, \\ \text{or} & \quad \alpha(y, v) = a(v) = c_0 + c_1 |v|^2 \quad \forall v, v \cdot n > 0, \\ \text{donc} & \quad \alpha(y, v) = a(v) \quad \forall v \quad \text{sur } \gamma. \end{aligned} \tag{3.82}$$

On en conclut donc que

$$a_2(y) = 0 \quad \text{sur } \gamma.$$

Et on a :

$$\begin{aligned} & v \cdot \nabla_y (\alpha f_0) = 0 \\ \Rightarrow & v \cdot f_0 (\nabla_y a_0(y) + \nabla_y a_1(y) \cdot v + \nabla_y a_2(y) |v|^2) = 0 \\ \Rightarrow & \nabla_y a_0(y) = 0 \quad ; \quad \nabla_y a_1(y) = 0 \quad ; \quad \nabla_y a_2(y) |v|^2 = 0, \end{aligned} \tag{3.83}$$

et donc d'après les résultats 3.4 et 3.83, on en déduit que :

$$a_2(y) = 0 \quad \text{sur } Y_f.$$

Et finalement, on en déduit le noyau de l'opérateur :

$$\alpha(y, v) = c_0 + c_1 |v|^2.$$

Corollaire 2 *Le noyau de l'opérateur*

$$\left\{ \begin{array}{ll} -L(f_0 \cdot) + v \cdot \nabla_y (f_0 \cdot) & \text{dans } Y_f, \\ \alpha_i = \left(\frac{|v|^2}{2RT_0^2} - \frac{2}{T_0} \right) \gamma_i + \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \alpha_i M(T_0) dw & \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0, \\ + \text{Conditions aux limites périodiques sur } \partial Y_f \setminus \gamma, & \end{array} \right.$$

est l'ensemble des fonctions $\alpha(y, v)$ tel que $\{\alpha(y, v) = c_0 + c_1 |v|^2, c_0 \in \mathbb{R}, c_1 \in \mathbb{R}\}$.

Remarque 1 : Par un calcul similaire on obtient les deux corollaires suivants pour le problème en β :

Corollaire 3 *L'opérateur*

$$\begin{cases} -L(f_0 \cdot) + v \cdot \nabla_y(f_0 \cdot) & \text{dans } Y_f, \\ \beta_i = \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \beta_i M(T_0) dw & \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0, \\ + \text{Conditions aux limites périodiques sur } \partial Y_f \setminus \gamma \end{cases}$$

est positif.

Corollaire 4 *Le noyau de l'opérateur*

$$\begin{cases} -L(f_0 \cdot) + v \cdot \nabla_y(f_0 \cdot) & \text{dans } Y_f, \\ \beta_i = \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \beta_i M(T_0) dw & \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0, \\ + \text{Conditions aux limites périodiques sur } \partial Y_f \setminus \gamma, \end{cases}$$

est l'ensemble des fonctions $\beta(y, v)$ constantes, i.e. tel que $\{\beta(y, v) = b_0, b_0 \in \mathbb{R}\}$.

Remarque 1 : Ces corollaires signifient que la solution des problèmes auxiliaires n'est pas unique mais est définie à une fonction près ($\alpha(y, v) = c_0 + c_1|v|^2, c_0 \in \mathbb{R}, c_1 \in \mathbb{R}$) pour α et ($\beta(y, v) = b_0, b_0 \in \mathbb{R}$) pour β . Ce qui est classique en homogénéisation. Cependant, $D = \frac{\epsilon}{|Y_f|} \langle f_0 v \otimes \int_{Y_f} \beta(y, v) dy \rangle$ et $\tilde{D} = \frac{\epsilon}{|Y_f|} \langle f_0 v \otimes \int_{Y_f} \alpha(y, v) dy \rangle$ sont définis d'une manière unique car : $\langle f_0 v \otimes \int_{Y_f} b_0 dy \rangle = 0$ et $\langle f_0 v \otimes \int_{Y_f} c_1 |v|^2 dy \rangle = 0$.

3.5 Propriétés du modèle

3.5.1 Introduction

Dans ce paragraphe, nous allons présenter un certain nombre de propriétés du modèle. Tout d'abord, nous allons faire le lien entre notre modèle et la loi de Darcy. Puis nous nous intéresserons au nombre adimensionné $\frac{\tilde{D}T}{D\rho}$ dont nous définirons en particulier ses valeurs limites. Enfin, nous montrerons un résultat sur le calcul des coefficients dans une géométrie représentant une porosité fermée.

3.5.2 Propriété en régime fluide : lien avec Darcy

D'après la formule (3.74), nous avons :

$$\rho u = -(D \nabla_x \rho + \tilde{D} \nabla_x T). \quad (3.84)$$

Or quand on se place en régime fluide, on démontre au paragraphe 4.1.5 que l'on a la relation

$$\frac{\tilde{D}T}{D\rho} = 1. \quad (3.85)$$

On peut l'écrire sous la forme

$$\tilde{D} = \frac{\rho}{T} D. \quad (3.86)$$

et en utilisant (3.86) dans l'équation (3.84), on obtient :

$$\begin{aligned} \rho u &= -(D \nabla_x \rho + \frac{\rho D}{T} \nabla_x T), \\ &= -\rho D \left(\frac{\nabla_x \rho}{\rho} + \frac{\nabla_x T}{T} \right), \\ &= -\rho D \frac{\nabla_x P}{P} = -\frac{1}{RT} D \nabla_x p. \end{aligned}$$

Ce qui nous amène à

$$u = -\frac{D}{\rho RT} \nabla_x P = -\frac{D}{P} \nabla_x P. \quad (3.87)$$

Par un calcul du coefficient D en régime de Darcy, nous pouvons montrer que nous retrouvons la célèbre loi de Darcy qui s'écrit sous la forme :

$$u = -\frac{\epsilon}{\mu} B \nabla_x P, \quad (3.88)$$

où μ est la viscosité du gaz, ϵ la porosité du milieu et B sa perméabilité. En effet, on montre, qu'en régime fluide, le calcul de D par notre modèle nous conduit à :

$$D = \frac{\epsilon P B}{\mu} \quad (3.89)$$

3.5.3 Propriété en régime raréfié le nombre adimensionné $\frac{\tilde{D}T}{D\rho}$

On s'intéresse ici au comportement de la solution dans le régime raréfié. Pour simplifier l'étude, nous allons nous limiter au calcul des coefficients D et \tilde{D} dans un pore cylindrique de section convexe. d'axe \vec{Oy}_1 , représenté par la figure 3.2

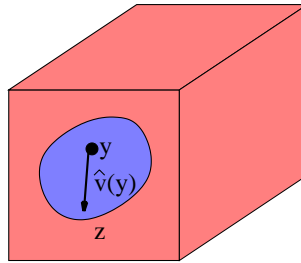


FIG. 3.2 – Pore cylindrique de section quelconque.

où y est un point de la section quelconque, v : la vitesse de la particule au point y , on pose $v = \hat{v} = (0, v_2, v_3)$, et on note $n(v)$: sa direction, et z : le point d'intersection de la particule avec la paroi, $z = z(y, n(v))$.

- Le calcul de D

Le problème auxiliaire en β_1 (le coefficient du vecteur β dans l'axe du cylindre que l'on notera désormais β pour soulager les écritures) devient

$$(ED) \begin{cases} |\hat{v}| \nabla_{n(\hat{v})} \beta = -v_1 & \text{sur } Y_f, \\ \beta(y, v) = \underbrace{\int_{w \cdot n(y) < 0} \beta(y, w) |w \cdot n| M(T_0, w) dw}_{\text{que l'on notera } \phi(y)} & \text{sur } \gamma \text{ pour } \vec{v} \cdot \vec{n} > 0. \end{cases}$$

Une solution à cette équation différentielle est $\beta(y, v) = -\frac{v_1}{|\hat{v}|} |y - z(y, n(\hat{v}))| + \phi(z)$.

Pour déterminer $\phi(z)$, on utilise la condition aux limites, en remplaçant $\beta(y, v)$ par sa valeur. Ce qui donne

$$\phi(y) = \int_{w \cdot n(y) < 0} \beta(z(y, n(\hat{w})), w) |w \cdot n| M(T_0, w) dw \quad (3.90)$$

$$- \underbrace{\int_{w \cdot n(y) < 0} \frac{w_1}{|\hat{w}|} |y - z(y, n(\hat{w}))| |w \cdot n| M(T_0, w) dw}_{\text{nulle car l'intégrale est impaire en } w_1} \quad (3.91)$$

ϕ vérifie sur γ l'équation intégrale suivante : $\phi(y) = \int_{w \cdot n(y) < 0} \phi(z) |w \cdot n| M(T_0, w) dw$, dont les seules solutions sont les solutions constantes. On prendra ici $\phi(y) = 0$. On obtient donc la solution pour le système (ED) :

$$\beta(y, v) = -\frac{v_1}{|\hat{v}|} |y - z(y, n(\hat{v}))|. \quad (3.92)$$

Et donc, pour retrouver le coefficient du tenseur de diffusion effectif, on moyenne β sur le volume fluide et l'espace des vitesses. Pour cette intégration, on passe v en représentation polaire : $\hat{v} = (0, \zeta \cos(\omega), \zeta \sin(\omega))$, ainsi

$$D_{11} = \frac{1}{|Y_f|} \int_{\Omega_f} \int_{\vec{V}} v_1 \beta_1 g_0 dV dy.$$

On peut exprimer cette intégrale comme le produit de deux intégrales dont l'une est dépendante de la géométrie du milieu et l'autre est une constante.

$$D_{11} = \underbrace{\frac{1}{(2\pi RT_0)^{\frac{3}{2}}} \int_{v_1=-\infty}^{\infty} v_1^2 e^{-\frac{v_1^2}{2RT_0}} dv_1 \int_{\zeta=0}^{\infty} e^{-\frac{\zeta^2}{2RT_0}} d\zeta}_{=I_1 \text{ indépendant de la géométrie}} \underbrace{\frac{1}{|\Omega_f|} \int_{\Omega_f} \int_{\omega=0}^{2\pi} |y - z(y, n(\omega))| d\omega dy}_{=I_2 \text{ dépendant uniquement de la géométrie}}.$$

On peut évaluer la première intégrale I_1 comme valant $\sqrt{\frac{RT_0}{8\pi}}$. La seconde intégrale représente la moyenne des cordes de la section du cylindre. Physiquement, on peut interpréter cette intégrale comme la moyenne des distances que peut effectuer une particule avant de rencontrer une paroi. Dans le cas d'une section circulaire de diamètre d , cette moyenne des cordes vaut $\frac{8d}{3}$. On trouve

ainsi le coefficient de diffusion en régime de Knudsen pur, $D_k = \sqrt{\frac{8RT_0 d^2}{9\pi}}$. Pour le régime transitionnel, ce test fonctionne aussi car la solution obtenue en régime de Knudsen est un invariant collisionnel, et donc $L(f_0\beta) = 0$.

- Le calcul de \tilde{D}

Le problème auxiliaire en α_1 (le coefficient du vecteur α dans l'axe du cylindre que l'on notera désormais α pour soulager les écritures) devient

$$(ED) \left\{ \begin{array}{l} |\hat{v}| \nabla_{n(\hat{v})} \alpha = -v_1 \left(\frac{3}{2RT_0} + \frac{v^2}{2RT_0^2} \right) \quad \text{sur } Y_f, \\ \alpha(y, v) = \underbrace{\int_{w.n(y)<0} \alpha(y, w) |w.n| M(T_0, w) dw}_{\text{que l'on notera } \phi(y)} \quad \text{sur } \gamma \text{ pour } \vec{v} \cdot \vec{n} > 0. \end{array} \right.$$

Car pour un pore cylindrique on sait que $\gamma = 0$, d'où la simplification sur la condition aux limites. On peut donc procéder comme précédemment : on connaît une solution à cette équation

différentielle qui est $\alpha(y, v) = -\frac{v_1 \left(\frac{3}{2RT_0} + \frac{v^2}{2RT_0^2} \right)}{|\hat{v}|} |y - z(y, n(\hat{v}))| + \phi(z)$.

Pour déterminer $\phi(z)$, on utilise la condition aux limites, en remplaçant $\alpha(y, v)$ par sa valeur. Ce qui donne

$$\phi(y) = \int_{w.n(y)<0} \alpha(z(y, n(\hat{w})), w) |w.n| M(T_0, w) dw \quad (3.93)$$

$$- \underbrace{\int_{w.n(y)<0} \frac{w_1 \left(\frac{3}{2RT_0} + \frac{w^2}{2RT_0^2} \right)}{|\hat{w}|} |y - z(y, n(\hat{w}))| |w.n| M(T_0, w) dw}_{\text{nulle car l'intégrale est aussi impaire en } w_1}. \quad (3.94)$$

ϕ vérifie toujours sur γ l'équation intégrale $\phi(y) = \int_{w.n(y)<0} \phi(z) |w.n| M(T_0, w) dw$, dont les seules solutions sont les solutions constantes. On prendra comme précédemment $\phi(y) = 0$. On obtient donc la solution pour le système (ED) :

$$\alpha(y, v) = -\frac{v_1}{|\hat{v}|} |y - z(y, n(\hat{v}))|. \quad (3.95)$$

Et donc, comme précédemment, nous pouvons exprimer \tilde{D}_{11} :

$$\tilde{D}_{11} = \frac{1}{|Y_f|} \int_{\Omega_f} \int_{\vec{V}} v_1 \alpha_1 g_0 dV dy.$$

Ce qui nous amène à

$$\tilde{D}_{11} = \underbrace{\frac{1}{(2\pi RT_0)^{\frac{3}{2}}} \int_{v_1=-\infty}^{\infty} \int_{\zeta=0}^{\infty} v_1^2 \left(\frac{3}{2RT_0} + \frac{v^2}{2RT_0^2} \right) e^{-\left(\frac{v_1^2}{2RT_0} - \frac{\zeta^2}{2RT_0} \right)} d\zeta}_{=I_3 \text{ indépendant de la géométrie}} \quad (3.96)$$

$$\underbrace{\frac{1}{|\Omega_f|} \int_{\Omega_f} \int_{\omega=0}^{2\pi} |y - z(y, n(\omega))| d\omega dy}_{=I_4 \text{ dépendant uniquement de la géométrie}}. \quad (3.97)$$

Le terme I_3 indépendant de la géométrie est égal à $\frac{\rho}{T} \sqrt{\frac{RT_0}{32\pi}}$. Donc si l'on s'intéresse à $\frac{D}{\tilde{D}}$, comme $I_2 = I_4$, on arrive à :

$$\begin{aligned} \frac{D}{\tilde{D}} &= \frac{I_1}{I_3}, \\ &= \frac{T}{\rho} \sqrt{\frac{RT_0}{8\pi}} \sqrt{\frac{32\pi}{RT_0}}, \\ &= \frac{T}{\rho} \sqrt{\frac{32}{8}}, \\ &= \frac{2T}{\rho} \end{aligned} \tag{3.98}$$

Ainsi on vient de démontrer qu'en régime de Knudsen, (i.e. quand $\rho \rightarrow 0$), le rapport $\frac{\tilde{D}T}{\rho D}$ est égal à $\frac{1}{2}$.

En conclusion, nous venons de montrer que pour une géométrie de pore convexe, ce rapport a une limite égale à 1/2 en régime de Knudsen et une limite égale à 1 en régime de Darcy. Nous remarquerons par la suite dans les résultats numériques, que ce rapport est *compris* en 1/2 et 1 :

$$\frac{1}{2} \leq \frac{\tilde{D}T}{\rho D} \leq 1 \tag{3.99}$$

En quelque sorte, ce rapport peut être utilisé comme un indicateur, pour connaître le régime dans lequel on se trouve.

3.5.4 Le pore fermé

Si on reprend le problème auxiliaire (3.66) en supposant que nous cherchons le coefficient de diffusion dans la direction k : direction qui est fermée aux deux extrémités.

$$-L(f_0\beta_i) + v \cdot \nabla_y(f_0\beta_i) = \frac{-f_0}{\rho_0} v_k \quad \text{dans } Y_f, \tag{3.100}$$

$$\beta_i = \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \beta_i M(T_0) dw \quad \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0. \tag{3.101}$$

Une solution de l'équation (3.100) est

$$\beta = -\frac{y_k}{\rho_0}. \tag{3.102}$$

En effet, (3.102) entraîne que $L(f_0\beta) = 0$ et on a $\nabla_y(f_0\beta) = -\frac{f_0}{\rho_0} v_k$.

De plus, on remarque que (3.102) vérifie la condition (3.101) : en effet, on obtient

$$\beta_i \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| M(T_0) dw = \beta_i, \tag{3.103}$$

car (3.102) est indépendante de v et $\int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| M(T_0) dw = 1$ par définition de $M(T_0)$. Ce qui nous amène à

$$D = -\frac{1}{|Y_f|} \int_{\Omega_f} \int_{\vec{V}} v_1 \frac{y_k}{\rho_0} g_0 dV dy,$$

Ce qui nous donne $D = 0$ puisque l'intégrale est impaire en v .

La solution en β est donc linéaire en y . Afin de bien la représenter, il nous faut donc utiliser un schéma d'ordre 2. En effet, lors de nos tests on remarque que pour un schéma d'ordre 2, $D \approx 0$ pratiquement à une précision du "zéro machine", alors qu'avec un schéma d'ordre 1, $D \approx 10^{-6}$ avec un maillage de taille standard. Pour une meilleur approximation, il nous faudrait en fait mailler extrêmement fin.

Chapitre 4

Calcul numérique des coefficients de transport

Maintenant que le modèle de transport est obtenu ainsi que les problèmes auxiliaires pour la détermination des coefficients de transfert, il nous faut établir un schéma capable d'approximer correctement les solutions de ces problèmes. Nous pouvons ici rappeler que pour avoir des tabulations de coefficients, il nous faut résoudre trois équations cinétiques pour D , trois équations cinétiques pour \tilde{D} ainsi que trois équations elliptiques pour K , et ceci pour de nombreuses valeurs de ρ et de T . Nous allons donc nous intéresser ici aux calculs numériques et aux simplifications que nous sommes amenés à faire : au paragraphe 4.1 nous proposerons une approximation en vitesse des équations cinétiques par une méthode de Galerkin qui ramènera les problèmes auxiliaires à des équations hyperboliques, ainsi qu'une approximation de l'opérateur de collision Q par un opérateur de relaxation. Enfin, nous présenterons nos travaux sur l'approximation en espace de ces problèmes auxiliaires et leur résolution par un schéma adapté au régime fluide (asymptotic preserving) (paragraphe 4.2).

4.1 Approximation en vitesse des problèmes auxiliaires

On peut remarquer que les trois tenseurs D , \tilde{D} et K ne dépendent que de ρ_0 et de T_0 . Ils sont calculés à partir des solutions β , α et γ des problèmes (P_3) , (P_2) et (P_1) . Or α et β sont solutions de problèmes cinétiques 3D en espace et 3D en vitesse, ce qui rend leur calcul extrêmement coûteux. Pour obtenir une résolution plus rapide on procède à deux simplifications :

- ★ Approximation en vitesse des équations cinétiques par une méthode de Galerkin.
- ★ Approximation de l'opérateur Q par un opérateur de relaxation de type BGK ([26]) ou ES-BGK ([27]).

4.1.1 Méthode de Galerkin

La méthode utilisée pour résoudre (P_2) et (P_3) se base sur la projection des équations cinétiques sur une base $(m_j)_{j=1,N}$ (à déterminer) par une méthode de Galerkin en v ou méthode aux moments si la base est polynômiale. Prenons par exemple le problème (P_3) . Soit

$$-L(f_0\beta_i) + v \cdot \nabla_y(f_0\beta_i) = \frac{-f_0}{\rho_0}v_i \quad \text{dans } Y_f.$$

Pour l'implémentation, nous choisissons comme inconnue :

$$\widehat{\beta}_i = \rho_0 \beta_i. \quad (4.1)$$

Donc, si on note $g_0 = \frac{f_0}{\rho_0}$, $\widehat{\beta}_i$ est solution de l'équation

$$-L(g_0 \widehat{\beta}_i) + g_0 v \cdot \nabla_y(\widehat{\beta}_i) = -g_0 v_i \text{ in } Y_f. \quad (4.2)$$

Et en utilisant l'approximation de Galerkin, on cherche $\widehat{\beta}_i$ de la forme :

$$\widehat{\beta}_i(y, v) = \sum_{j=1}^N b_i^j(y) m_j(v), \quad (4.3)$$

et on obtient :

$$\forall k \in \{1, N\} \sum_{j=1}^N \left(-b_i^j L(g_0 m_j) + g_0 m_j v \cdot \nabla_y(b_i^j) \right) = -g_0 v_i.$$

En multipliant par m_k et en intégrant en vitesse, on arrive à :

$$\forall k \in \{1, N\} \sum_{j=1}^N \left(\langle L(g_0 m_j) m_k \rangle b_i^j + \langle g_0 v m_j m_k \rangle \cdot \nabla_y(b_i^j) \right) = -\langle g_0 v_i m_k \rangle. \quad (4.4)$$

On introduit alors les notations suivantes :

$$S_{kj} = \langle L(g_0 m_j) m_k \rangle, \quad (A_p)_{kj} = \langle g_0 v_p m_j m_k \rangle, \quad g_k^i = -\langle g_0 v_i m_k \rangle, \quad (4.5)$$

(4.4) s'écrit alors sous la forme d'un système hyperbolique stationnaire et linéaire :

$$-S \vec{b}_i + \sum_{p=1}^3 A_p \partial_{y_p} \vec{b}_i = \vec{g}^i. \quad (4.6)$$

Afin d'écrire les conditions aux limites pour ce système, on part de la condition au niveau cinétique :

$$\beta_i(y, v) = \sigma \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \beta_i(w) M(T_0) dw + (1 - \sigma) \beta_i(y, v - 2v \cdot nn) \quad \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0, \quad (4.7)$$

ce qui est équivalent à

$$\begin{cases} \beta_i(y, v) = \sigma K + (1 - \sigma) \beta_i(y, v - 2v \cdot nn) & \text{sur } \gamma, \text{ pour } v \cdot n > 0, \\ \int_{w \in \mathbb{R}^3} \beta_i(y, w) w \cdot n dw = 0 & \text{sur } \gamma, \end{cases} \quad (4.8)$$

où K est déterminé par la seconde équation. La première équation est la condition de flux de masse nul, et donc cela s'écrit pour \vec{b}_i :

$$\sum_{p=1}^3 n_p A_p \vec{b}_i \cdot \vec{\theta}_{|\gamma} = 0. \quad (4.9)$$

La seconde équation donne la distribution arrivant de la paroi vers Y_f . Pour le système hyperbolique, cela consiste à imposer les invariants de Riemann entrants, ce qui s'écrit :

$$\left(\sum_{p=1}^3 n_p A_p\right)^+ \vec{b}_i|_\gamma = \left(\sum_{p=1}^3 n_p A_p\right)^+ (\sigma K \vec{\theta} + (1 - \sigma) N \vec{b}_i)|_\gamma. \quad (4.10)$$

Finalement nous obtenons :

$$\sum_{p=1}^3 n_p A_p \vec{b}_i \cdot \vec{\theta}|_\gamma = 0, \quad (4.11)$$

$$\left(\sum_{p=1}^3 n_p A_p\right)^+ \vec{b}_i|_\gamma = \left(\sum_{p=1}^3 n_p A_p\right)^+ (\sigma K \vec{\theta} + (1 - \sigma) N \vec{b}_i)|_\gamma, \quad (4.12)$$

$$\text{conditions aux limites périodiques sur } \partial Y_f \setminus \gamma. \quad (4.13)$$

où $\vec{\theta}$ est défini par $\sum_{j=1}^N \theta_j m_j(v) = 1$ et $N = \sum_{p=1}^3 n_p N_p$ est la matrice utilisée dans la transformation $m(v) \rightarrow m(v - 2(v \cdot n)n)$, et A^+ est la partie positive¹ de la matrice A .

4.1.2 Choix de la base

Dans une méthode de Galerkin, le choix de la base est crucial pour la précision. On va se baser sur des considérations physiques pour le choix de cette base.

Base adaptée au régime transitionnel

Si on se place dans un régime fortement collisionnel alors, si on écrit l'opérateur L sous la forme $L(f_0 \beta) = \frac{1}{\tau} \tilde{L}(f_0 \beta)$, le temps τ est très petit. Pour analyser le problème, on fait tendre τ vers 0 et on obtient : $\tilde{L}(f_0 \beta) = 0$. Et donc d'après l'expression de L par (4.4) on en déduit que : $\beta = \frac{1}{\rho_0} (a_0 + a_1 v + a_2 |v|^2)$.

Or d'après l'équation du problème (P_3), on cherche une base représentant β et $v\beta$ donc on choisit de définir $m = (m_i)_{i=1,13}$ comme la base suivante, orthogonalisée pour le produit scalaire :

$$(f, g)_{T_0} = \int_{v \in \mathbb{R}^3} f(v) g(v) f_0(T_0, v) dv. \quad (4.14)$$

En partant de $m_1 = 1$ et en imposant $(m_i, m_j)_{T_0} = \delta_{ij}$, on obtient :

$$\begin{aligned} m_2 &= \frac{v_1}{\sqrt{RT_0}}, & m_5 &= \frac{v_1^2 - RT_0}{\sqrt{2RT_0}}, & m_8 &= \frac{v_1 v_2}{RT_0}, & m_{11} &= \frac{|v|^2 - 5RT_0}{\sqrt{10R^3 T_0^3}} v_1, \\ m_1 &= 1, & m_3 &= \frac{v_2}{\sqrt{RT_0}}, & m_6 &= \frac{v_2^2 - RT_0}{\sqrt{2RT_0}}, & m_9 &= \frac{v_1 v_3}{RT_0}, & m_{12} &= \frac{|v|^2 - 5RT_0}{\sqrt{10R^3 T_0^3}} v_2, \\ m_4 &= \frac{v_3}{\sqrt{RT_0}}, & m_7 &= \frac{v_3^2 - RT_0}{\sqrt{2RT_0}}, & m_{10} &= \frac{v_2 v_3}{RT_0}, & m_{13} &= \frac{|v|^2 - 5RT_0}{\sqrt{10R^3 T_0^3}} v_3. \end{aligned} \quad (4.15)$$

¹i.e si $A = R\Lambda R^{-1}$ où Λ est une matrice diagonale alors $A^+ = R\Lambda^+ R^{-1}$ où Λ^+ est la matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont les éléments positifs de la matrice Λ .

On remarque que cette base s'adapte très bien au régime continu. En effet, dans ce cas, la solution appartient à l'espace vectoriel engendré par $(1, \vec{v}, |v|^2)$.

Base adaptée au régime de Knudsen pur

La base précédente ne s'adapte pas très bien au régime de Knudsen pur dans lequel l'opérateur de collision n'intervient pas. Pour déterminer le comportement de la solution dans ce régime, on se propose d'évaluer le coefficient de diffusion dans le cas d'un pore cylindrique d'axe $O\vec{y}_1$ et de section convexe, comme présenté au paragraphe 3.5.3. D'après les calculs menés dans ce paragraphe, nous savons que la solution du problème auxiliaire (3.66) en régime raréfié s'écrit :

$$\beta(y, v) = -\frac{v_1}{|\hat{v}|} |y - z(y, n(\hat{v}))|. \quad (4.16)$$

Ces calculs mettent en évidence une dépendance de la solution en $\frac{v_i}{|\hat{v}|}$ pour l'exemple du tube. Dans un cas 3D plus général, on peut supposer que la solution dépend de $\frac{v_i}{|v|} = n_i$. Donc, dans le régime de Knudsen, on suggère d'utiliser comme base :

$$m = (n_1, n_2, n_3, n_1^2, n_2^2, n_3^2, n_1n_2, n_1n_3, n_2n_3),$$

avec

$$n_1 = \cos(\theta) \sin(\phi), \quad n_2 = \cos(\theta) \cos(\phi), \quad n_3 = \sin(\theta),$$

les composantes du vecteur unitaire en coordonnées sphériques.

Base proposée pour le code

Finalement, pour avoir un code capable de traiter tous les régimes, nous allons choisir une base comprenant les 13 éléments utilisés pour le régime de collision et le régime transitionnel et les 9 éléments introduits pour le régime de Knudsen. De plus la base "transitionnelle" possède le moment $m_1 = 1$; or on sait que pour le régime de Knudsen, on a la relation suivante : $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1 = m_1$. Donc il nous faut supprimer de la nouvelle base le moments m_1 ce qui nous amène à une base à 21 éléments définie en coordonnées sphériques comme suit, en posant $q = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + v_3^2}$:

$$\begin{aligned}
m_1 &= \frac{q \cos(\theta) \cos(\phi)}{\sqrt{RT_0}}, & m_2 &= \frac{q \cos(\theta) \sin(\phi)}{\sqrt{RT_0}}, & m_3 &= \frac{q \sin(\theta)}{\sqrt{RT_0}}, \\
m_4 &= \frac{q^2 (\cos(\theta) \cos(\phi))^2 - RT_0}{\sqrt{2}RT_0}, & m_5 &= \frac{q^2 (\cos(\theta) \sin(\phi))^2 - RT_0}{\sqrt{2}RT_0}, & m_6 &= \frac{q^2 \sin(\theta)^2 - RT_0}{\sqrt{2}RT_0}, \\
m_7 &= \frac{q^2 \cos(\theta)^2 \sin(\phi) \cos(\phi)}{RT_0}, & m_8 &= \frac{q^2 \cos(\theta) \cos(\phi) \sin(\theta)}{RT_0}, & m_9 &= \frac{q^2 \cos(\theta) \sin(\phi) \sin(\theta)}{RT_0}, \\
m_{10} &= \frac{q^2 - 5RT_0}{\sqrt{10R^3T_0^3}} q \cos(\theta) \cos(\phi), & m_{11} &= \frac{q^2 - 5RT_0}{\sqrt{10R^3T_0^3}} q \cos(\theta) \sin(\phi), & m_{12} &= \frac{q^2 - 5RT_0}{\sqrt{10R^3T_0^3}} q \sin(\theta), \\
m_{13} &= \cos(\theta) \cos(\phi), & m_{14} &= \cos(\theta) \sin(\phi), & m_{15} &= \sin(\theta), \\
m_{16} &= (\cos(\theta) \cos(\phi))^2, & m_{17} &= (\cos(\theta) \sin(\phi))^2, & m_{18} &= (\sin(\theta))^2, \\
m_{19} &= (\cos(\theta))^2 \sin(\phi) \cos(\phi), & m_{20} &= \cos(\theta) \cos(\phi) \sin(\theta), & m_{21} &= \cos(\theta) \sin(\phi) \sin(\theta).
\end{aligned} \tag{4.17}$$

4.1.3 Détail du terme L : l'opérateur de collision de type BGK ou ES-BGK

Dans les problèmes auxiliaires, l'opérateur L est l'opérateur de collision de Boltzmann linéarisé défini par :

$$L(g) = Q(f_0, g) + Q(g, f_0).$$

Afin de simplifier le calcul des coefficients de transport, nous remplaçons l'opérateur de Boltzmann par un opérateur de type BGK ou ES-BGK ([26])

$$C_{BGK}(f) = \frac{1}{\tau}[M(f) - f] = \frac{1}{\tau}[M(\vec{\rho}(f)) - f], \tag{4.18}$$

où $\tau = \mu/p$ est le temps de relaxation. Dans cette relation, la viscosité $\mu = CT^\omega$, où $\omega = (\kappa+1)/2$ dépend du potentiel d'interaction entre molécules utilisé dans l'équation de Boltzmann. $\omega = 1/2$ correspond au potentiel de type "hard sphere" (HS), $\omega = 1$ au potentiel de type Maxwell et $\omega \in]0, 1[$ au potentiel de type "variable hard sphere" (VHS). Donc l'opérateur de relaxation linéarisé BGK est donné par :

$$L_{BGK}(f) = C'_{BGK}(f_0)f = \frac{1}{\tau} \left(\frac{f_0}{\rho_0} \begin{pmatrix} \frac{5RT_0 - |v|^2}{2RT_0} \\ \frac{v}{RT_0} \\ \frac{|v|^2 - 3RT_0}{3R^2T_0^2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{pmatrix} - f \right). \tag{4.19}$$

Or, il est bien connu qu'en limite fluide, l'opérateur BGK donne un mauvais nombre de Prandtl, en effet, cet opérateur conduit à $Pr = 1$, il est donc plus souvent préféré d'utiliser un opérateur de type ES-BGK ([27]) défini par :

$$C_{ES-BGK}(f) = \frac{1-\nu}{\tau}[G(f) - f], \tag{4.20}$$

où

$$G(f) = \frac{\rho}{\sqrt{\det(2\pi T)}} \exp\left(\frac{1}{2}(v-u)^T T^{-1}(v-u)\right), \quad (4.21)$$

et $T = RT(1 - \nu)Id + \nu\Theta$ et $\Theta = 2\mathcal{E} - \rho u \otimes u$.

L'opérateur linéarisé ES-BGK s'écrit alors :

$$L_{ES-BGK}(f) = C'_{ES-BGK}(f_0)f = \frac{1-\nu}{\tau} (\partial_{\vec{\rho}_{13}} G(f_0) \cdot \vec{\rho}_{13} - f), \quad (4.22)$$

où

$$\begin{aligned} \vec{\rho}_{13} &= (\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, E_{1,1}, E_{2,2}, E_{3,3}, E_{1,2}, E_{1,3}, E_{2,3}), \\ \partial_{\vec{\rho}_{13}} G(f_0) &= \left(\frac{5RT_0 - |v|^2}{2RT_0}, \frac{v_1}{RT_0}, \frac{v_2}{RT_0}, \frac{v_3}{RT_0}, \right. \\ &\quad \left. \frac{RT_0 - (1-\nu)|v|_3^2 \nu v_1^2}{3(RT_0)^2}, \frac{RT_0 - (1-\nu)|v|_3^2 \nu v_2^2}{3(RT_0)^2}, \frac{RT_0 - (1-\nu)|v|_3^2 \nu v_3^2}{3(RT_0)^2}, \right. \\ &\quad \left. \frac{2\nu v_1 v_2}{(RT_0)^2}, \frac{2\nu v_1 v_3}{(RT_0)^2}, \frac{2\nu v_2 v_3}{(RT_0)^2} \right). \end{aligned}$$

Le nombre de Prandtl associé à l'opérateur de type ES-BGK est $Pr = 1/(1-\nu)$ et pour $\nu = -1/2$ il donne le bon nombre de Prandtl c'est-à-dire $Pr = 2/3$ pour un gaz monoatomique.

Il est aussi prouvé que ces deux opérateurs C_{BGK} et C_{ES-BGK} satisfont les propriétés principales (3.20, 3.21, 3.22) de l'opérateur de Boltzmann (voir [27] pour l'opérateur de type ES-BGK). De plus, nous avons les propriétés suivantes pour les opérateurs linéarisés (voir [23])

Proposition 2 *Les opérateurs de collision linéarisés satisfont les propriétés suivantes :*

1. L est symétrique,
2. $\text{Ker}(L) = \text{Span}(1, v, |v|^2)$;
3. $\exists \delta_0 > 0, -\langle L(f_0\beta) \beta \rangle \geq \delta_0 \|(I - P_K)\beta\|^2$, où P_K est la projection sur $\text{Ker}(L)$.

4.1.4 Analyse des problèmes auxiliaires

Dans ce paragraphe, nous allons étudier les problèmes auxiliaires et nous allons prouver que les propriétés importantes des problèmes cinétiques auxiliaires sont préservées par l'approximation de Galerkin. Nous allons faire cette analyse pour le système hyperbolique dérivé sur la base à 13 éléments. Ceci pour simplifier les notations. De plus cette base suffit pour présenter l'étude asymptotique que nous montrerons plus tard.

Description et propriétés principales

Afin de clarifier les expressions issues des problèmes auxiliaires, nous introduisons certaines notations :

$$b_V = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}, \quad b_E = \begin{pmatrix} b_{E_1} \\ b_{E_2} \\ b_{E_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_4 \\ b_5 \\ b_6 \end{pmatrix}, \quad b_\tau = \begin{pmatrix} b_7 \\ b_8 \\ b_9 \end{pmatrix}, \quad b_q = \begin{pmatrix} b_{10} \\ b_{11} \\ b_{12} \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

et

$$\bar{b}_E = \frac{1}{3}(b_{E_1} + b_{E_2} + b_{E_3}) = \frac{1}{3}(b_4 + b_5 + b_6). \quad (4.24)$$

Selon (4.5), la matrice $S\vec{b}$, est donnée par :

$$(Sb)_i = 0 \quad \text{pour } i \in \{0, 3\}, \quad (4.25)$$

$$(Sb)_4 = \frac{1}{\tau}(\bar{b}_E - b_{E_1}), \quad (4.26)$$

$$(Sb)_5 = \frac{1}{\tau}(\bar{b}_E - b_{E_2}), \quad (4.27)$$

$$(Sb)_6 = \frac{1}{\tau}(\bar{b}_E - b_{E_3}), \quad (4.28)$$

$$(Sb)_j = -\frac{1}{\tau}b_j \quad \text{pour } j \in \{7, 12\}. \quad (4.29)$$

Donc, nous avons

Proposition 3 *La matrice S est symétrique et*

$$-S\vec{b}.\vec{b} \geq \frac{1}{\tau} \|(I - P_{K_S})\vec{b}\|^2, \quad (4.30)$$

$$Ker S = \{(b_0, b_1, b_2, b_3, \bar{b}_E, \bar{b}_E, \bar{b}_E, 0, 0, 0, 0, 0)\}. \quad (4.31)$$

Démonstration : A partir des relations ci-dessus, il est clair que $\vec{b} \in Ker S$ est équivalent à :

$$b_{E_1} = b_{E_2} = b_{E_3} = \frac{1}{3}\bar{b}_E ; \quad b_7 = b_8 = b_9 = b_{10} = b_{11} = b_{12} = 0, \quad (4.32)$$

ce qui veut dire que :

$$Ker S = \{(b_0, b_1, b_2, b_3, \bar{b}_E, \bar{b}_E, \bar{b}_E, 0, 0, 0, 0, 0)\}.$$

Nous remarquerons aussi que $\vec{b} \in Ker S$ si et seulement si $\beta = \vec{b}.\vec{m}(v) = b_0 + b_V.v + \bar{b}_E|v|^2 \in Ker L$. De plus (4.5) nous amène à :

$$S\vec{b}.\vec{b} = \sum_{i,j=1}^{13} S_{ij}b_i b_j = \sum_{i,j=1}^{13} \langle L(g_0 m_j) b_i, m_j b_j \rangle, \quad (4.33)$$

$$= -\langle L(g_0 \beta), \beta \rangle, \quad (4.34)$$

et en accord avec les propriétés de l'opérateur de L nous en concluons que (quelle que soit la base utilisée dans l'approximation de Galerkin) : $-S\vec{b}.\vec{b} \geq 0$. Plus précisément, en utilisant l'expression de S obtenue en utilisant la base aux 13 moments, il vient :

$$-S\vec{b}.\vec{b} \geq 1/\tau \|(I - P_{K_S})\vec{b}\|^2. \quad \square$$

Maintenant, nous allons exprimer l'opérateur différentiel du système hyperbolique (4.6) :

$$\sum_{p=1}^3 A_p \partial_{y_p} \vec{b} = \mathcal{L} \vec{b} = \sqrt{RT_0} \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{L}_{0,V} & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{L}_{V,0} & 0 & \mathcal{L}_{V,E} & \mathcal{L}_{V,\tau} & 0 \\ 0 & \mathcal{L}_{E,V} & 0 & 0 & \mathcal{L}_{E,q} \\ 0 & \mathcal{L}_{\tau,V} & 0 & 0 & \mathcal{L}_{\tau,q} \\ 0 & 0 & \mathcal{L}_{q,E} & \mathcal{L}_{q,\tau} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_V \\ b_E \\ b_\tau \\ b_q \end{pmatrix},$$

où

$$\mathcal{L}_{0,V} = (\partial_1, \partial_2, \partial_3), \quad (4.35)$$

$$\mathcal{L}_{V,0} = \begin{pmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{L}_{V,E} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} \partial_1 & 0 & 0 \\ 0 & \partial_2 & 0 \\ 0 & 0 & \partial_3 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{L}_{V,\tau} = \begin{pmatrix} 0 & \partial_3 & \partial_2 \\ \partial_3 & 0 & \partial_1 \\ \partial_2 & \partial_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.36)$$

$$\mathcal{L}_{E,V} = \mathcal{L}_{V,E}; \quad \mathcal{L}_{E,q} = \frac{\sqrt{5}}{5} \begin{pmatrix} 3\partial_1 & \partial_2 & \partial_3 \\ \partial_1 & 3\partial_2 & \partial_3 \\ \partial_1 & \partial_2 & 3\partial_3 \end{pmatrix}, \quad (4.37)$$

$$\mathcal{L}_{\tau,V} = \mathcal{L}_{V,\tau}, \quad \mathcal{L}_{\tau,q} = \frac{\sqrt{10}}{5} \begin{pmatrix} 0 & \partial_3 & \partial_2 \\ \partial_3 & 0 & \partial_1 \\ \partial_2 & \partial_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.38)$$

$$\mathcal{L}_{q,E} = (\mathcal{L}_{E,q})^T, \quad \mathcal{L}_{q,\tau} = \mathcal{L}_{\tau,q}. \quad (4.39)$$

Le second membre s'écrit :

$$g^l = \sqrt{RT_0}(0, \delta_{l1}, \delta_{l2}, \delta_{l3}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0).$$

Or la quantité $\sqrt{RT_0}$ est en facteur du premier membre, nous pouvons donc simplifier le système (4.6) par cette quantité. Ceci modifie les facteurs de relaxation dans la matrice S qui devient $\rho_0 \sqrt{RT_0}/\mu$ à la place de $1/\tau$. Ceci sera donc simplifié dans toute la suite.

De plus pour écrire les conditions aux limites (4.11 - 4.12), nous avons besoin de préciser ce qu'est la matrice $R(n)$. Tout d'abord, nous pouvons remarquer que l'application $\beta \rightarrow \mathcal{R}(n)[\beta]$ définie par

$$\mathcal{R}(n)[\beta](v) = \beta(v - 2v \cdot nn),$$

est une application idempotente et que l'application

$$\mathcal{R}(n) \text{ Span}\{m_j(v), 0 \leq j \leq 12\} \subset \text{Span}\{m_j(v), 0 \leq j \leq 12\}.$$

Donc la matrice $R(n)$ est définie par :

$$\sum_{j=1}^N b_j m_j(v - 2v \cdot nn) = \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N R(n)_{pq} b_q m_p(v), \quad (4.40)$$

et donc nous obtenons les propriétés suivantes :

Lemme 1 *La matrice $R(n)$ définie par (4.40) satisfait :*

- Si \vec{b} est un vecteur propre de la matrice $A(n)$ associé à la valeur propre λ , alors $R(n)\vec{b}$ est un vecteur propre de la matrice $A(n)$ associé à la valeur propre $-\lambda$.

-

$$R(n)^2 = I, \quad (4.41)$$

$$R(n)A(n)^+R(n) = -A(n)^-, \quad (4.42)$$

et donc

$$R(n)A(n)^-R(n) = -A(n)^+, \quad \text{et } R(n)A(n)R(n) = -A(n).$$

Idée de la preuve : pour plus de clarté, nous montrons la preuve pour $n = e^1$ de telle sorte que $A(n) = A_1$. La première partie du lemme est obtenue grâce à des considérations de parité. Et en conséquence, nous avons $R(n)Ker(A(n)) \subset Ker(A(n))$. La deuxième partie est obtenue en écrivant le vecteur \vec{b} sur la base des vecteurs propres A_1 , et en utilisant les propriétés prouvées dans la première partie. \square

Lemme 2 si on a, $\forall y \in \Gamma_Y$,

$$\vec{c}(y) = K(y)\vec{\theta}, \quad (4.43)$$

$$\vec{b}(y) = (b_0(y), b_V(y), \bar{b}_E(y), \bar{b}_E(y), \bar{b}_E(y), 0, 0, 0, 0, 0, 0), \quad (4.44)$$

$$0 = A_1(\vec{b}(y) - \vec{c}(y)).(\vec{b}(y) - \vec{c}(y)), \quad (4.45)$$

alors

$$b(y) = K(y)\vec{\theta}, \quad \forall y \in \Gamma_Y.$$

Démonstration : Nous avons

$$\text{Ker } A_1 = \text{Span} \begin{matrix} \vec{k}^1 = (0 & 0 & \frac{-\sqrt{10}}{5} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0) \\ \vec{k}^2 = (0 & 0 & 0 & \frac{-\sqrt{10}}{5} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1) \\ \vec{k}^3 = (\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0) \\ \vec{k}^4 = (\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & -1 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0) \\ \vec{k}^5 = (0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0) \end{matrix}.$$

Or à partir de (4.45), $\vec{b}(y) - \vec{c}(y) \in \text{Ker } A_1$, $\forall y \in \Gamma_Y$. Donc

$$\vec{b}(y) - \vec{c}(y) = \sum_{q=1}^5 \xi_q \vec{k}^q. \quad (4.46)$$

En utilisant les définitions de $\vec{b}(y)$, de $\vec{c}(y)$ et de \vec{k}^q , $q = 1, 2, 5$, nous obtenons :

$$\xi_q = 0, \quad \text{pour } q = 1, 2, 5. \quad (4.47)$$

Et donc (4.46) s'écrit

$$\vec{b}(y) - \vec{c}(y) = \xi_3 \vec{k}^3 + \xi_4 \vec{k}^4,$$

or

$$b_0(y) - K(y) = \sqrt{2}(\xi_3 + \xi_5), \quad (4.48)$$

$$\bar{b}_E(y) = -(\xi_3 + \xi_5), \quad (4.49)$$

$$\bar{b}_E(y) = \xi_3, \quad (4.50)$$

$$\bar{b}_E(y) = \xi_4. \quad (4.51)$$

Des trois dernières relations, nous en déduisons que

$$\bar{b}_E(y) = \xi_3 = \xi_4 = 0,$$

ce qui implique que $\xi_q = 0$, $1 \leq q \leq 5$, et finalement, nous avons

$$\forall y \in \Gamma_Y, \vec{b}(y) = \vec{c}(y) = K(y)\vec{\theta},$$

ce qui termine la démonstration. \square

Proposition 4 Soit \vec{b} qui satisfait les conditions aux limites (4.11 - 4.12 - 4.13) et soit

$$E(\vec{b}) = \int_{Y_f} \left(-S\vec{b}(y) \cdot b(y) + \sum_{p=1}^3 A_p \partial_{y_p} \vec{b}(y) \cdot \vec{b}(y) \right) dy.$$

Alors

1. $\forall \vec{b}, E(\vec{b}) \geq 0$,
2. $E(b) = 0 \Leftrightarrow \vec{b}(y) = (b_0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T$, où b_0 est une constante indépendante de y .

Démonstration : Nous multiplions (4.6) par \vec{b} et nous intégrons sur Y_f . Nous obtenons alors

$$E(\vec{b}) = - \int_{Y_f} S\vec{b}(y) \cdot \vec{b}(y) dy + \int_{Y_f} \sum_{p=1}^3 A_p \partial_{y_p} \vec{b}(y) \cdot \vec{b}(y) dy, \quad (4.52)$$

$$= - \int_{Y_f} S\vec{b}(y) \cdot \vec{b}(y) dy - \frac{1}{2} \int_{\Gamma_Y} A(n) \vec{b}(y) \cdot \vec{b}(y) dy, \quad (4.53)$$

où nous avons appliqué les conditions de périodicité sur $\partial Y_f \setminus \Gamma_Y$. Et de (4.30) il vient :

$$- \int_{Y_f} S\vec{b}(y) \cdot \vec{b}(y) dy \geq \frac{1}{\tau} \int_{Y_f} \|(I - P_{K_S})\vec{b}(y)\|^2 dy > 0. \quad (4.54)$$

Considérons maintenant le second membre $-\frac{1}{2} \int_{\Gamma_Y} A(n) \vec{b}(y) \cdot \vec{b}(y) dy$. Pour $y \in \Gamma_Y$ nous avons

$$\vec{b}(y) = K(y)\vec{\theta} + (\vec{b}(y) - K(y)\vec{\theta}) = c(y) + (\vec{b}(y) - c(y)).$$

En utilisant cette relation dans le second membre de (4.53), nous obtenons :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \int_{\Gamma_Y} A(n) \vec{b}(y) \cdot \vec{b}(y) dy &= -\frac{1}{2} \left(- \int_{\Gamma_Y} A(n) \vec{c}(y) \cdot \vec{c}(y) dy + 2 \int_{\Gamma_Y} A(n) \vec{c}(y) \cdot \vec{b}(y) dy \right. \\ &\quad \left. + \int_{\Gamma_Y} A(n) (\vec{b}(y) - \vec{c}(y)) \cdot (\vec{b}(y) - \vec{c}(y)) dy \right). \end{aligned}$$

Or à partir de (4.11) nous avons $A(n) \vec{b}(y) \cdot \vec{c}(y) = 0$ sur Γ_Y , et donc $A(n) \vec{c}(y) \cdot \vec{c}(y) = 0$. Ainsi en utilisant la seconde relation sur le bord (4.12) ainsi que le lemme 1, nous avons :

$$\int_{\Gamma_Y} A(n)^+ (\vec{b} - \vec{c}) \cdot (\vec{b} - \vec{c}) dy = -(1 - \sigma)^2 \int_{\Gamma_Y} A(n)^- (\vec{b} - \vec{c}) \cdot (\vec{b} - \vec{c}) dy,$$

et donc

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \int_{\Gamma_Y} A(n) (\vec{b} - \vec{c}) \cdot (\vec{b} - \vec{c}) dy &= -\frac{(1 - (1 - \sigma)^2)}{2} \int_{\Gamma_Y} A(n)^- (\vec{b} - \vec{c}) \cdot (\vec{b} - \vec{c}) dy, \\ &\geq 0, \end{aligned}$$

ce qui prouve la première partie de la proposition.

Nous supposons maintenant $E(\vec{b}) = 0$. D'après les calculs, ceci implique que :

$$\int_{Y_f} S \vec{b}(y) \cdot \vec{b}(y) dy = 0, \quad \int_{\Gamma_Y} A(n)^- (\vec{b}(y) - \vec{c}(y)) \cdot (\vec{b}(y) - \vec{c}(y)) dy = 0.$$

La première relation nous donne donc

$$\vec{b}(y) = (b_0(y), b_V(y), \bar{b}_E(y), \bar{b}_E(y), \bar{b}_E(y), 0, 0, 0, 0, 0, 0), \quad (4.55)$$

et la seconde relation nous amène à $A(n)^- (\vec{b}(y) - \vec{c}(y)) \cdot (\vec{b}(y) - \vec{c}(y)) = 0, \forall y \in \Gamma_Y$. Or nous avons $A(n)^+ (\vec{b}(y) - \vec{c}(y)) \cdot (\vec{b}(y) - \vec{c}(y)) = 0, \forall y \in \Gamma_Y$, nous arrivons à

$$A(n) (\vec{b}(y) - \vec{c}(y)) \cdot (\vec{b}(y) - \vec{c}(y)) = 0, \forall y \in \Gamma_Y, \quad (4.56)$$

or $\vec{b}(y)$ satisfait (4.55 - 4.56), et donc grâce au lemme (2) il vient $\vec{b}(y) = \vec{c}(y)$, sur Γ_Y , ce qui implique que $b_V(y) = 0, \bar{b}_E(y) = 0$, sur Γ_Y . Or nous savons que $\partial_{y_i} b_0(y) = 0$, et $\sqrt{2} \partial_{y_i} b_i(y) = 0, 1 \leq i \leq 3$, et donc $b_V(y) = 0$, sur Y_f . Finalement, à partir des dernières composantes du système (4.6), nous pouvons conclure que

$$\frac{\sqrt{5}}{5} \partial_{y_j} \bar{b}_E(y) = 0, (j \neq i) \text{ sur } Y_f,$$

et donc

$$b_0(y) = b_0, \quad \bar{b}_E(y) = 0, \text{ sur } Y_f,$$

ce qui démontre la seconde partie de la proposition. \square

Remarque : La dernière proposition implique que la solution du problème auxiliaire hyperbolique n'est pas unique et est définie à une constante additive près $\vec{b} = (b_0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T$. Néanmoins, comme il est classique en homogénéisation, les coefficients effectifs D and \tilde{D} sont définis de manière unique car $\int_{Y_f} \vec{b} < v_i f_0(v) > dy = 0!$

4.1.5 Comportement asymptotique pour des petites valeurs de Knudsen, le régime de Darcy

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe précédent, en régime collisionnel, la solution $\hat{\beta}$ du problème auxiliaire répond à

$$\hat{\beta}_l \approx a_0 + a_1 v + a_2 |v|^2,$$

et cette propriété a été utilisée pour définir une base correcte pour notre approximation de Galerkin. Des résultats plus précis peuvent être obtenus si l'on considère le régime fluide comme $\rho \rightarrow +\infty$. Dans ([1]-[24]) une analyse asymptotique des problèmes auxiliaires montre que dans le régime de Darcy ces problèmes auxiliaires tendent à devenir des problèmes de Stokes et nous retrouvons alors à l'échelle macroscopique la très connue loi de Darcy. Ce résultat peut être vu comme une extension aux milieux poreux de l'analyse de la limite fluide de l'équation de Boltzmann linéarisée donnée dans ([28]). Il est très important ici de montrer que la limite asymptotique est préservée dans les problèmes auxiliaires.

Considérons le problème auxiliaire (4.6 - 4.11 - 4.12 - 4.13) dérivé à partir de la base à 13 éléments. Nous pouvons alors écrire (4.6) sous la forme

$$-\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu \varepsilon} \hat{S} \vec{b} + \sum_{p=1,3} A_p \partial_{y_p} \vec{b} = \vec{g}^l, \quad (4.57)$$

où par soucis de clarté, nous avons supprimé l'indice l pour \vec{b} , et on a

$$\hat{S} = \mu / (\rho_0 \sqrt{RT_0}) S, \quad (4.58)$$

et

$$\varepsilon = \frac{1}{\rho_0}.$$

Afin de faire l'étude asymptotique du système hyperbolique quand $\varepsilon \rightarrow 0$ nous cherchons la solution du système sous la forme :

$$\vec{b} = \frac{\vec{b}^{(-1)}}{\varepsilon} + \vec{b}^{(0)} + \varepsilon \vec{b}^{(1)} + \dots \quad (4.59)$$

En insérant (4.59) dans (4.57), on obtient pour chaque ordre en ε
A l'ordre principal

$$-\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu} \hat{S} \vec{b}^{(-1)} = 0, \quad (4.60)$$

et donc

$$\vec{b}^{(-1)} = (b_0^{(-1)}, b_V^{(-1)}, \bar{b}_E^{(-1)}, \bar{b}_E^{(-1)}, \bar{b}_E^{(-1)}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0). \quad (4.61)$$

En utilisant ce résultat pour la condition à la limite (4.11 - 4.12) et en utilisant les propriétés de la matrice $R(n)$, on arrive à

$$b_V|_{\gamma}^{(-1)} = 0 \quad \text{et} \quad b_E|_{\gamma}^{(-1)} = 0. \quad (4.62)$$

A l'ordre +1

$$-\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu} \hat{S} \vec{b}^{(0)} + \sum_{p=1,3} A_p \partial_{y_p} \vec{b}^{(-1)} = 0. \quad (4.63)$$

Or

$$\hat{S} \vec{b}^{(0)} \cdot \vec{d} = 0, \forall \vec{d} \in \text{Ker } S,$$

l'alternative de Fredholm nous amène à

$$\sum_{p=1,3} A_p \partial_{y_p} \vec{b}^{(-1)} \cdot \vec{d} = 0, \quad \forall \vec{d} \in \text{Ker } S,$$

ce qui peut s'écrire (en notant $\vec{e} = (1, 1, 1)$) :

$$\text{div}_y \vec{b}_V^{(-1)} = 0, \quad (4.64)$$

$$\nabla_y b_0^{(-1)} + \sqrt{2} \nabla_y \bar{b}_E^{(-1)} = 0, \quad (4.65)$$

$$b_E^{(0)} = \bar{b}_E^{(0)} \vec{e} - \frac{\sqrt{2}\mu}{\sqrt{RT_0}} \sum_{i=1}^3 \partial_{y_i} b_i e^i \quad (4.66)$$

$$\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu} b_q^{(0)} = -\sqrt{5} \nabla_y \bar{b}_E^{(-1)}, \quad (4.67)$$

$$\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu} b_\tau^{(0)} = \mathcal{L}_{\tau,V} \vec{b}_V^{(-1)}. \quad (4.68)$$

A l'ordre +2

$$-\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu} \hat{S} \vec{b}^{(1)} + \sum_{p=1,3} A_p \partial_{y_p} \vec{b}^{(0)} = g, \quad (4.69)$$

ce qui donne, grâce à l'alternative de Fredholm

$$\text{div}_y \vec{b}_V^{(0)} = 0, \quad (4.70)$$

$$\nabla_y b_0^{(0)} + \sqrt{2} \sum_{i=1}^3 \partial_{y_i} b_{E_i}^{(0)} e^i + \mathcal{L}_{V,\tau} b_\tau^{(0)} = g_V^l. \quad (4.71)$$

En utilisant (4.66) et (4.68) dans (4.71) il vient

$$\nabla_y b_0^{(0)} + \sqrt{2} \nabla_y \bar{b}_E^{(0)} - \frac{2\mu}{\sqrt{RT_0}} \begin{pmatrix} \partial_{y_1}^2 b_{V_1}^{(-1)} \\ \partial_{y_2}^2 b_{V_2}^{(-1)} \\ \partial_{y_3}^2 b_{V_3}^{(-1)} \end{pmatrix} - \frac{\mu}{\sqrt{RT_0}} \mathcal{L}_{V,\tau} \mathcal{L}_{\tau,V} b_V^{(-1)} = g_V^l. \quad (4.72)$$

Et si l'on note

$$\pi = (b_0 + \sqrt{2} \bar{b}_E), \quad (4.73)$$

et d'après la définition de $\mathcal{L}_{V,\tau}$ et de $\mathcal{L}_{\tau,V}$, ainsi que de la relation (4.64) on obtient

$$-\frac{\mu}{\sqrt{RT_0}} \Delta_y b_V^{(-1)} + \nabla_y \pi^{(0)} = e^l, \quad (4.74)$$

$$\operatorname{div}_y b_V^{(-1)} = 0, \quad (4.75)$$

$$b_V^{(-1)}|_{\Gamma} = 0, \quad (4.76)$$

$$\text{conditions aux limites périodiques sur } \partial Y - \Gamma_Y. \quad (4.77)$$

Ce qui prouve que $b_V^{(-1)}$ est une solution de l'équation de Stokes sur Y_f .

La même analyse peut être faite sur le système hyperbolique associé à l'inconnue α_l . Dans ce cas on cherche une solution de la forme

$$\vec{a} = \frac{\vec{a}^{(-1)}}{\varepsilon} + \vec{a}^{(0)} + \varepsilon \vec{a}^{(1)} + \dots,$$

et $\vec{a}^{(-1)}$ est alors aussi une solution de l'équation de Stokes mais avec un second membre égal à e^l/T_0 . Donc on en déduit que les vecteurs $b_V^{(-1)}$ et $a_V^{(-1)}$ sont proportionnels. En tenant compte de $\beta_l = \hat{\beta}_l/\rho_0$, on peut conclure que

$$\frac{\tilde{D}_{ij} T}{D_{ij} \rho} = 1.$$

Ceci signifie que ce ratio (qui est indépendant de i, j) définit un nombre adimensionné qui est le ratio entre la diffusion de masse et la transpiration thermique.

$$\tilde{D} = \frac{\rho}{T} D. \quad (4.78)$$

Or dans le ATM, la vitesse macroscopique du fluide est donnée par l'équation (3.74) que nous rappelons :

$$\rho u = -(D \nabla_x \rho + \tilde{D} \nabla_x T), \quad (4.79)$$

et donc en utilisant (4.78), il vient

$$\begin{aligned} \rho u &= -(D \nabla_x \rho + \frac{\rho D}{T} \nabla_x T), \\ &= -\rho D \left(\frac{\nabla_x \rho}{\rho} + \frac{\nabla_x T}{T} \right), \\ &= -\rho D \frac{\nabla_x p}{p} = -\frac{1}{RT} D \nabla_x p. \end{aligned}$$

De plus, comme

$$D_{ij} = -\rho \frac{1}{|Y_f|} \int_{Y_f} \vec{b}_j^i(y) dy \int_v g_0(v) v_j^2 dv,$$

on obtient

$$u = -\frac{\varepsilon}{\mu} B \nabla_x p, \quad (4.80)$$

où ϵ est la porosité et B défini par

$$B_{ij} = \int_{Y_s} b_j^i(y) dy, \quad (4.81)$$

est le *tenseur de perméabilité*. La relation (4.80) est la célèbre loi de Darcy. Et donc nous avons démontré que notre approche, construite pour le régime transitionnel, retrouve le régime de Darcy en régime fluide.

Bien sur, il n'y a aucune raison pour que la relation (4.78) soit vraie pour les autres régimes. Ceci sera illustré au chapitre 7.

4.2 Approximation en espace et résolution

4.2.1 Schéma pour le régime de transport

Il reste maintenant à déterminer une solution numérique au système hyperbolique linéaire et stationnaire (4.6 - 4.11 - 4.12 - 4.13). Pour l'approximation en espace, nous proposons d'utiliser un schéma cinétique qui peut être obtenu naturellement puisque le système (4.6 - 4.11 - 4.12 - 4.13) dérive du modèle cinétique (4.4).

Donc nous introduisons les parties cinétiques positives (et négatives) de la matrice A_p elle-même introduite dans (4.5) :

$$\begin{aligned} A_p^{(+)} &= (A_p^{(+)}_{i=1,N,j=1,N}) = (\langle g_0 m_i(v) v_p^+ m_j(v) \rangle)_{i,j}, \\ A_p^{(-)} &= (A_p^{(-)}_{i=1,N,j=1,N}) = (\langle g_0 m_i(v) v_p^- m_j(v) \rangle)_{i,j}, \end{aligned}$$

où $v^+ = \text{Max}(0, v)$ et $v^- = \text{Min}(0, v)$. On peut par ailleurs remarquer que

$$A_p = A_p^{(+)} + A_p^{(-)} = A_p^+ + A_p^-.$$

Mais, évidemment, la partie cinétique positive $A_p^{(+)}$ de A_p et la partie positive spectrale A_p^+ de A_p ne sont pas égales ! De plus, on peut montrer que même si A_p^+ peut être singulière, $A_p^{(+)}$ est toujours une matrice régulière. En effet, à partir de la définition de $A_p^{(+)}$:

$$\begin{aligned} A_p^{(+)} \vec{\xi} \cdot \vec{\xi} &= \sum_{i,j=1}^N A_{ij}^{(+)} \xi_i \xi_j \\ &= \sum_{i,j=1}^N \langle g_0 m_i(v) \xi_i v_p^+ m_j(v) \xi_j \rangle \\ &= \langle g_0 m \otimes m v_p^+ \rangle \vec{\xi} \cdot \vec{\xi} \\ &= \langle g_0 (\vec{m} \cdot \vec{\xi})^2 v_p^+ \rangle \geq 0. \end{aligned}$$

de plus

$$\begin{aligned} A_p^{(+)} \vec{\xi} \cdot \vec{\xi} = 0 &\iff \vec{m}(v) \cdot \vec{\xi} = 0 \quad \forall v \\ &\iff \vec{\xi} = 0 \quad \text{car } (m_i(v))_{i=1,N} \text{ est une base.} \end{aligned}$$

En utilisant ces notations et en remarquant que $\langle g_0 v_i m_k \rangle = A_i^T(1, 0 \dots 0)$ nous pouvons définir un schéma cinétique volumes finis du premier ordre "upwind". Nous travaillons sur un maillage

cartésien et \mathbf{i} représente le multi-index (i, j, k) et nous introduisons les notations suivantes :

$$D_{y_1} f_{\mathbf{i}} = D_1 f_{\mathbf{i}} = \frac{f_{i+1,j,k} - f_{i-1,j,k}}{2\Delta y_1}, \quad (4.82)$$

$$D_{y_1}^+ f_{\mathbf{i}} = D_1^+ f_{\mathbf{i}} = \frac{f_{i+1,j,k} - f_{i,j,k}}{\Delta y_1}, \quad (4.83)$$

$$D_{y_1}^- f_{\mathbf{i}} = D_1^- f_{\mathbf{i}} = \frac{f_{i,j,k} - f_{i-1,j,k}}{\Delta y_1}, \quad (4.84)$$

$$(4.85)$$

Alors le schéma cinétique s'écrit :

$$-\frac{\rho_0 \sqrt{RT_0}}{\mu} \hat{S} \vec{b}_{\mathbf{i}} + \sum_{p=1}^3 (A_p^{(+)} D_p^- \vec{b}_{\mathbf{i}} + A_p^{(-)} D_p^+ \vec{b}_{\mathbf{i}}) = g_{\mathbf{i}}, \quad (4.86)$$

où \hat{S} est défini par (4.58) et le second membre est $g_{\mathbf{i}}^l = \langle g_0(v) m_i(v) v_l \rangle = A_l(1, 0, \dots)^T$.

Malheureusement, ce schéma d'ordre 1 n'est pas assez précis pour nos applications, nous allons donc construire un schéma d'ordre 2 par une extension de type MUSCL. De plus, comme le problème est linéaire, il n'est pas judicieux d'introduire des limiteurs de pentes. Ceci nous amène alors à choisir le schéma centré :

$$-\frac{\rho_0 \sqrt{RT_0}}{\mu} \hat{S} \vec{b}_{\mathbf{i}} + \sum_{p=1}^3 A_p D_p \vec{b}_{\mathbf{i}} = g_{\mathbf{i}}. \quad (4.87)$$

Mais ce schéma conduit à des instabilités numériques qui sont dues à un certain découplage entre indices pairs et impairs. Pour pallier ses instabilités, il nous suffit de modifier le traitement des conditions aux limites en utilisant les deux mailles les plus proches du bord. On traite donc correctement les conditions aux limites grâce aux mailles fictives. Comme nous travaillons sur un maillage régulier constitué de mailles rectangles et que le traitement des conditions aux limites est essentiellement unidimensionnel, il peut être illustré juste pour la direction 1. On peut interpréter le schéma centré (4.87) comme un MUSCL avec des limiteurs de pentes linéaires. Donc, l'extension à l'ordre 2 peut être vu comme :

$$\begin{aligned} (A_1 \vec{b})_{i+\frac{1}{2},j,k} &= A_1 \frac{\vec{b}_{i,j,k} + \vec{b}_{i+1,j,k}}{2} \\ &= A_1^{(+)} \frac{\vec{b}_{i,j,k} + \vec{b}_{i+1,j,k}}{2} + A_1^{(-)} \frac{\vec{b}_{i,j,k} + \vec{b}_{i+1,j,k}}{2} \\ &= A_1^{(+)} (\vec{b}_{i,j,k} + \frac{1}{2}(\vec{b}_{i+1,j,k} - \vec{b}_{i,j,k})) + A_1^{(-)} (\vec{b}_{i+1,j,k} - \frac{1}{2}(\vec{b}_{i+1,j,k} - \vec{b}_{i,j,k})) \end{aligned}$$

Puis sur les bords, il faut dégénérer le schéma à l'ordre 1 donc nous supprimons tout simplement les pentes. Si on note $i = 0$ la maille fictive, le demi-flux entrant est $A_1^{(+)} \vec{b}_0$ et cette valeur n'est pas modifiée. Et de même de l'autre côté, le demi-flux sortant $A_1^{(-)} \vec{b}_1$ n'est pas modifié. La valeur de \vec{b}_0 est la même quel que soit l'ordre du schéma et est dérivée à partir du niveau cinétique du problème. Nous écrivons juste que la distribution dans la maille fictive est proportionnelle à une

maxwellienne ($\beta = k * g_0$ au niveau cinétique alors que $\vec{b}_0 = k(1, 0, \dots)^T$ au niveau hyperbolique) et la constante k est obtenue en écrivant que le flux de masse doit être nul sur le bord.

$$\begin{aligned} A_1^{(+)} b_0 + A_1^{(-)} b_1 &= 0, \\ k A_1^{(+)} \theta \cdot \theta + A_1^{(-)} b_1 \cdot \theta &= 0. \end{aligned}$$

On obtient alors :

$$k = - \frac{A(n)^{(-)} \vec{b}_1 \cdot \vec{\theta}}{A(n)^{(+)} \vec{\theta} \cdot \vec{\theta}}. \quad (4.88)$$

Cette approximation en espace nous amène à un système algébrique linéaire qui est résolu en utilisant un solveur itératif pour des matrices non symétriques : le GMRES (Generalized Minimum RESidual) qui pour plus de rapidité sera préconditionné par une méthode de Gauss-Seidel (Cf [29]).

4.2.2 Le schéma “asymptotic preserving”

Dans le paragraphe précédent, nous avons proposé une approche numérique pour résoudre les problèmes auxiliaires basés sur une approximation de Galerkin pour les variables en vitesse. De plus, nous proposons une méthode capable de prendre en compte aussi bien le régime raréfié que le régime collisionnel à l’intérieur des pores. Néanmoins, nous pouvons nous attendre à des difficultés numériques en régime fluide, c’est-à-dire pour de fortes densités (ou un petit nombre de Knudsen) comme il est classique sur les modèles cinétiques. En effet, nous avons montré dans le paragraphe précédent, que le problème hyperbolique dégénère en régime fluide en un système de Stokes qui est elliptique. En ce qui concerne les approximations numériques de modèles cinétiques, il est bien connu que les schémas adaptés au régime de transport, n’ont pas, en général, le bon comportement asymptotique en limite fluide, et donc nous avons à modifier le schéma que nous avons proposé pour qu’il soit consistant et qu’il donne une approximation précise du système asymptotique dans cette limite. Dans notre contexte, cela signifie que si nous étudions la limite asymptotique de ce schéma pour un pas d’espace fixe ($\Delta y_i, i = 1, 2, 3$) et pour $Kn \rightarrow 0$ nous voulons trouver une approximation consistante du problème de Stokes. Mais comme nous pouvons le prévoir, ceci n’est pas le cas pour ce schéma et donc nous devons le modifier en limite fluide pour obtenir ce bon comportement.

L’obtention du schéma “asymptotic preserving”

Nous notons alors

$$\text{Div}_h^\pm = \sum_{k=1}^3 D_{y_k}^\pm, \quad (4.89)$$

$$\nabla_h^+ = (D_1^+, D_2^+, D_3^+)^T. \quad (4.90)$$

En introduisant $\vec{b}^* = \rho^* \vec{b}$, où ρ^* est la densité de référence et $\varepsilon = \rho^* / \rho_0$, le schéma numérique introduit pour le régime de transport s’écrit :

$$-\frac{\sqrt{RT_0}}{\varepsilon \mu} \hat{S} \vec{b}^*_i + \frac{1}{\rho^*} \sum_{p=1}^3 A_p D_{y_p} \vec{b}^*_i = g_i. \quad (4.91)$$

Enfin, pour avoir la bonne limite asymptotique quand $\varepsilon \rightarrow 0$, nous modifions le schéma comme suit :

$$-\frac{\sqrt{RT_0}}{\varepsilon\mu}\hat{S}\vec{b}_i^* + \varepsilon^2 \sum_{p=1}^3 A_p D_{y_p} \vec{b}_i^* + (1 - \varepsilon^2) \sum_{p=1}^3 A_p \tilde{D}_{y_p} \vec{b}_i^* = g_i. \quad (4.92)$$

Nous sommes face à un schéma hybride, c'est-à-dire que pour $\varepsilon \sim 1$ (i.e. en régime transitionnel) (4.92) se ramène au schéma proposé précédemment, mais pour $\varepsilon \sim 0$ (i.e. en régime fluide) (4.92) se ramène à un schéma adapté à ce régime. Il nous reste à définir \tilde{D}_{y_p} et ε .

En effet, ε doit être compris entre 0 et 1 quel que soit le régime. On prendra dans le code :

$$\varepsilon = \text{Min}(Kn_{\Delta x_i}, 1),$$

où $Kn_{\Delta x_i}$ est un nombre de Knudsen défini par la longueur Δx_i choisie intelligemment.

$$Kn_{\Delta x_i} = \frac{\sqrt{RT_0} * \tau}{\Delta x_i}$$

D'après l'analyse asymptotique au paragraphe (4.1.5), en particulier en ce qui concerne le résultat (4.61), en régime de Darcy, la solution s'exprime sur les 7 premiers moments. On se contente donc d'étudier le comportement asymptotique du nouveau schéma (4.92) sur les 10 premiers moments, c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} \vec{b} &= (b_0, b_V, b_E, b_\tau), \\ &= (b_0, b_1, b_2, b_3, b_{E_1}, b_{E_2}, b_{E_3}, b_{\tau_{23}}, b_{\tau_{13}}, b_{\tau_{12}}). \end{aligned}$$

On définit \tilde{D}_{y_p} par

$$\tilde{D}_{y_1} = (D_1^+, D_1^-, D_1^+, D_1^+, D_1^+, D_1^+, D_1^+, D_1, D_1^-, D_1^-), \quad (4.93)$$

$$\tilde{D}_{y_2} = (D_2^+, D_2^+, D_2^-, D_2^+, D_2^+, D_2^+, D_2^+, D_2^-, D_2, D_2^-), \quad (4.94)$$

$$\tilde{D}_{y_3} = (D_3^+, D_3^+, D_3^+, D_3^-, D_3^+, D_3^+, D_3^+, D_3^-, D_3^-, D_3). \quad (4.95)$$

Où D_i^+ et D_i^- sont définis par les formules (4.83) et (4.84).

Nous traitons différemment les composantes du vecteur \vec{b} car on souhaite avoir des dérivées spatiales correctement calculées. Ce choix sera expliqué plus tard, en faisant référence à un schéma correct pour approcher l'équation de Stokes, en particulier, le schéma MAC ([30]).

Pour l'étude asymptotique, quand $\varepsilon \rightarrow 0$ nous cherchons b_i^* sous la forme $b_i^* = \frac{1}{\varepsilon} b_i^{*(-1)} + b_i^{*(0)} + \varepsilon b_i^{*(1)} + \dots$. En introduisant cette formule dans (4.92) et en étudiant chaque ordre en ε , on obtient :

A l'ordre principal

$$\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu} \hat{S} b_i^{*(-1)} = 0,$$

et donc, comme précédemment sur le schéma classique :

$$b_i^{*(-1)} = (b_0^{*(-1)}, b_1^{*(-1)}, b_2^{*(-1)}, b_3^{*(-1)}, b_{E_1}^{*(-1)}, b_{E_2}^{*(-1)}, b_{E_3}^{*(-1)}, 0, 0, 0). \quad (4.96)$$

A l'ordre +1

$$-\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu} \hat{S} b_i^{*(0)} + \frac{1}{\rho^*} \sum_{p=1}^3 A_p \tilde{D}_{y_p} b_i^{*(-1)} = 0. \quad (4.97)$$

Et d'après l'alternative de Fredholm, ce système admet une solution sous la condition nécessaire et suffisante :

$$\left(\sum_{p=1}^3 A_p \tilde{D}_{y_p} \vec{b}_{\mathbf{i}}^{*(-1)}, d \right) = 0, \quad \forall \vec{d} \in \text{Ker } \hat{S},$$

ce qui s'écrit aussi :

$$\text{Div}_h^- b_V^{*(-1)} = 0, \quad (4.98)$$

$$\nabla_h^+ b_{0\mathbf{i}}^{*(-1)} + \sqrt{2} \nabla_h^+ b_{E\mathbf{i}}^{*(-1)} = 0, \quad (4.99)$$

$$b_{E\mathbf{i}}^{*(0)} = \bar{b}_{E\mathbf{i}}^{*(0)} \hat{e} - \sqrt{2} \nabla_h^- b_{V\mathbf{i}}^{*(-1)}, \quad (4.100)$$

$$\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu} b_{\tau}^{*(0)} = -\frac{1}{\rho^*} \tilde{\mathcal{L}}_{\tau,V} b_{V\mathbf{i}}^{*(-1)}, \quad (4.101)$$

où $\tilde{\mathcal{L}}_{\tau,V}$ est l'approximation de l'opérateur $\mathcal{L}_{\tau,V}$ (voir 4.38) en utilisant les dérivées décentrées définies précédemment par (4.93 - 4.94 - 4.95) :

$$\tilde{\mathcal{L}}_{V,\tau} = \begin{pmatrix} 0 & D_3^- & D_2^- \\ D_3^- & 0 & D_1^- \\ D_2^- & D_1^- & 0 \end{pmatrix}.$$

A l'ordre +2

$$-\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu} \hat{S} \vec{b}_{\mathbf{i}}^{*(1)} + \frac{1}{\rho^*} \sum_{p=1}^3 A_p \tilde{D}_{y_p} \vec{b}_{\mathbf{i}}^{*(0)} = g^i. \quad (4.102)$$

Comme précédemment, l'alternative de Fredholm nous amène à la condition :

$$\left(\sum_{p=1}^3 A_p \tilde{D}_{y_p} \vec{b}_{\mathbf{i}}^{*(0)} - g_{\mathbf{i}}, \vec{d} \right) = 0, \quad \forall \vec{d} \in \text{Ker } \hat{S},$$

qui s'écrit aussi :

$$\text{Div}_h^- b_V^{*(0)} = 0, \quad (4.103)$$

$$\nabla_h^+ b_{0\mathbf{i}}^{*(0)} + \sqrt{2} \nabla_h^+ b_{E\mathbf{i}}^{*(0)} + \mathcal{L}_{V,\tau}^+ b_{\tau\mathbf{i}}^{*(0)} = g_{\mathbf{i}}^i, \quad (4.104)$$

$$b_{E\mathbf{i}}^{*(1)} = \bar{b}_{E\mathbf{i}}^{*(1)} \hat{e} - \sqrt{2} \nabla_h^- b_{V\mathbf{i}}^{*(0)}, \quad (4.105)$$

$$\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu} b_{\tau}^{*(1)} = -\frac{1}{\rho^*} \tilde{\mathcal{L}}_{\tau,V} b_{V\mathbf{i}}^{*(0)}. \quad (4.106)$$

Et donc en utilisant (4.98) et en (4.100) et (4.101) dans l'équation (4.104) précédente et en notant

$$\pi = (b_0^* + \sqrt{2} \bar{b}_E^*),$$

on obtient

$$-\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu \rho^*} \text{Div}_h^+ \nabla_h^- b_{V\mathbf{i}}^{*(-1)} + \nabla_h^+ \pi_{\mathbf{i}}^{(0)} = g_{\mathbf{i}}, \quad (4.107)$$

$$\text{Div}_h^- b_{V\mathbf{i}}^{*(-1)} = 0. \quad (4.108)$$

La dernière étape est de vérifier que ce schéma écrit pour $\vec{b} = \vec{b}^*/\rho^*$ est consistant avec l'équation de Stokes (4.74-4.75). Tout d'abord, on peut remarquer que grâce à la définition de \tilde{D} et de D^+ et D^- , $\text{Div}_h^+ \nabla_h^-$ nous donne le schéma d'approximation classique à 7 points de l'opérateur de Laplace dans \mathbb{R}^3 . De plus si $b_{V_i}^{(-1)}$ est interprété comme défini sur un maillage décalé, i.e.

$$b_{V_i}^{(-1)} = (b_{1_{i+1/2,j,k}}^{(-1)}, b_{2_{i,j+1/2,k}}^{(-1)}, b_{3_{i,j,k+1/2}}^{(-1)}),$$

alors on obtient

$$\begin{aligned} \text{Div}_h^- b_{V_i}^{(-1)} &= (b_{1_{i+1/2,j,k}}^{(-1)} - b_{1_{i-1/2,j,k}}^{(-1)})/\Delta y_1 + (b_{2_{i,j+1/2,k}}^{(-1)} - b_{2_{i,j-1/2,k}}^{(-1)})/\Delta y_2 \\ &+ (b_{3_{i,j,k+1/2}}^{(-1)} - b_{3_{i,j,k-1/2}}^{(-1)})/\Delta y_3. \end{aligned}$$

En effet, si l'on interprète la localisation des différentes composantes de b comme sur la figure 4.1, ceci nous donne pour le système (4.107 - 4.108) le schéma suivant :

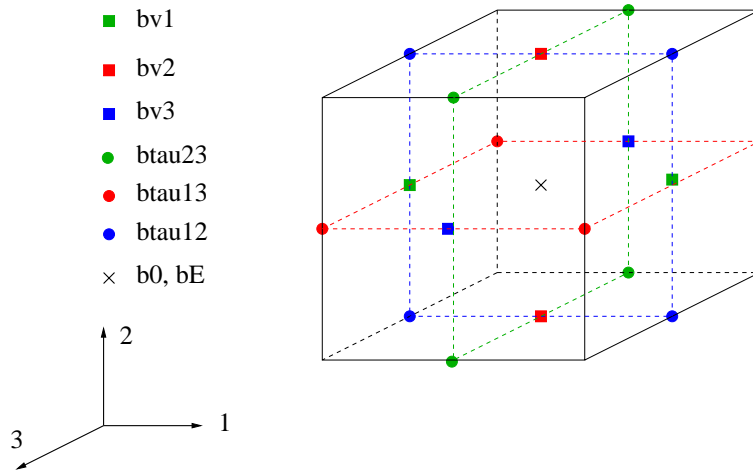


FIG. 4.1 – Schéma du maillage MAC.

$$\begin{aligned} & - \frac{\sqrt{RT_0}}{\mu\rho^*} \left(\frac{b_{1_{i+3/2,j,k}}^{(-1)} - 2b_{1_{i+1/2,j,k}}^{(-1)} + b_{1_{i-1/2,j,k}}^{(-1)}}{\Delta y_1} + \right. \\ & \quad \left. \frac{b_{1_{i+1/2,j+1,k}}^{(-1)} - 2b_{1_{i+1/2,j,k}}^{(-1)} + b_{1_{i+1/2,j-1,k}}^{(-1)}}{\Delta y_2} + \right. \\ & \quad \left. \frac{b_{1_{i+1/2,j,k+1}}^{(-1)} - 2b_{1_{i+1/2,j,k}}^{(-1)} + b_{1_{i+1/2,j,k-1}}^{(-1)}}{\Delta y_3} \right) + \frac{\pi_{i+1,j,k}^{(0)} - \pi_{i,j,k}^{(0)}}{\Delta y_1} = g_{i+1/2,j,k}^1, \quad (4.109) \\ & - \frac{\sqrt{RT_0}}{\mu\rho^*} \left(\frac{b_{2_{i+1,j+1/2,k}}^{(-1)} - 2b_{2_{i,j+1/2,k}}^{(-1)} + b_{2_{i-1,j+1/2,k}}^{(-1)}}{\Delta y_1} + \right. \\ & \quad \left. \frac{b_{2_{i,j+3/2,k}}^{(-1)} - 2b_{2_{i,j+1/2,k}}^{(-1)} + b_{2_{i,j-1/2,k}}^{(-1)}}{\Delta y_2} + \right. \end{aligned}$$

$$\frac{b_{2,i,j+1/2,k+1}^{(-1)} - 2b_{2,i,j+1/2,k}^{(-1)} + b_{2,i,j+1/2,k-1}^{(-1)}}{\Delta y_3} + \frac{\pi_{i,j+1,k}^{(0)} - \pi_{i,j,k}^{(0)}}{\Delta y_2} = g_{i,j+1/2,k}^2, \quad (4.110)$$

$$-\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu\rho^*} \left(\frac{b_{3,i+1,j,k+1/2}^{(-1)} - 2b_{3,i,j,k+1/2}^{(-1)} + b_{3,i-1,j,k+1/2}^{(-1)}}{\Delta y_1} + \frac{b_{3,i,j+1,k+1/2}^{(-1)} - 2b_{3,i,j,k+1/2}^{(-1)} + b_{3,i,j-1,k+1/2}^{(-1)}}{\Delta y_2} \right) +$$

$$\frac{b_{3,i,j,k+3/2}^{(-1)} - 2b_{3,i,j,k+1/2}^{(-1)} + b_{3,i,j,k-1/2}^{(-1)}}{\Delta y_3} + \frac{\pi_{i,j,k+1}^{(0)} - \pi_{i,j,k}^{(0)}}{\Delta y_3} = g_{i,j,k+1/2}^3, \quad (4.111)$$

$$\frac{b_{1,i+1/2,j,k}^{(-1)} - b_{1,i-1/2,j,k}^{(-1)}}{\Delta y_1} + \frac{b_{2,i,j+1/2,k}^{(-1)} - b_{2,i,j-1/2,k}^{(-1)}}{\Delta y_2} + \frac{b_{3,i,j,k+1/2}^{(-1)} - b_{3,i,j,k-1/2}^{(-1)}}{\Delta y_3} = 0, \quad (4.112)$$

ce qui est en fait le schéma MAC classique ([30]) pour l'équation de Stokes.

Donc grâce à la formulation de \tilde{D}_{y_p} (4.93, 4.94, 4.95), on a prouvé que la limite asymptotique du schéma (4.92) est une approximation consistante des équations de Stokes dans l'ouvert de Y_f .

Le schéma implémenté dans le code en variables dimensionnées s'écrit :

$$-\frac{\sqrt{RT_0}}{\mu} S\vec{b}_i + \varepsilon^2 \sum_{p=1}^3 A_p D_{y_p} \vec{b}_i + (1 - \varepsilon^2) \sum_{p=1}^3 A_p \tilde{D}_{y_p} \vec{b}_i = g_i. \quad (4.113)$$

Avec $\varepsilon = \text{Min}(Kn_{\Delta x_i}, 1)$, où $Kn_{\Delta x_i} = \frac{\tau\sqrt{RT_0}}{\Delta x_i}$. On détaille alors le schéma (4.113) pour $\varepsilon = 0$ sur la grille initiale avec des indices entiers (schéma IE) et sur la grille avec indices décalés (schéma ID) :

Le schéma avec indice entier pour $\varepsilon = 0$: Schéma IE

$$\begin{aligned} & \frac{b_{i,j,k}^{V1} - b_{i-1,j,k}^{V1}}{\Delta x} + \frac{b_{i,j,k}^{V2} - b_{i,j-1,k}^{V2}}{\Delta y} + \frac{b_{i,j,k}^{V3} - b_{i,j,k-1}^{V3}}{\Delta z} = 0, \\ & \frac{b_{i+1,j,k}^0 - b_{i,j,k}^0}{\Delta x} + \sqrt{2} \frac{b_{i+1,j,k}^{E1} - b_{i,j,k}^{E1}}{\Delta x} + \frac{b_{i,j,k}^{\tau 12} - b_{i,j-1,k}^{\tau 12}}{\Delta y} + \frac{b_{i,j,k}^{\tau 13} - b_{i,j,k-1}^{\tau 13}}{\Delta z} = g_1, \\ & \frac{b_{i,j+1,k}^0 - b_{i,j,k}^0}{\Delta y} + \sqrt{2} \frac{b_{i,j+1,k}^{E2} - b_{i,j,k}^{E2}}{\Delta y} + \frac{b_{i,j,k}^{\tau 12} - b_{i-1,j,k}^{\tau 12}}{\Delta x} + \frac{b_{i,j,k}^{\tau 23} - b_{i,j,k-1}^{\tau 23}}{\Delta z} = g_2, \\ & \frac{b_{i,j,k+1}^0 - b_{i,j,k}^0}{\Delta z} + \sqrt{2} \frac{b_{i,j,k+1}^{E3} - b_{i,j,k}^{E3}}{\Delta z} + \frac{b_{i,j,k}^{\tau 13} - b_{i-1,j,k}^{\tau 13}}{\Delta x} + \frac{b_{i,j,k}^{\tau 23} - b_{i,j-1,k}^{\tau 23}}{\Delta y} = g_3, \\ & \sqrt{2} \frac{b_{i,j,k}^{V1} - b_{i-1,j,k}^{V1}}{\Delta x} = -\frac{1}{\tau} (b_{i,j,k}^{E1} - \bar{b}_{i,j,k}^E), \\ & \sqrt{2} \frac{b_{i,j,k}^{V2} - b_{i,j-1,k}^{V2}}{\Delta y} = -\frac{1}{\tau} (b_{i,j,k}^{E2} - \bar{b}_{i,j,k}^E), \\ & \sqrt{2} \frac{b_{i,j,k}^{V3} - b_{i,j,k-1}^{V3}}{\Delta z} = -\frac{1}{\tau} (b_{i,j,k}^{E3} - \bar{b}_{i,j,k}^E), \\ & \frac{b_{i+1,j,k}^{V2} - b_{i,j,k}^{V2}}{\Delta x} + \frac{b_{i,j+1,k}^{V1} - b_{i,j,k}^{V1}}{\Delta y} = -\frac{1}{\tau} b_{i,j,k}^{\tau 12}, \\ & \frac{b_{i+1,j,k}^{V3} - b_{i,j,k}^{V3}}{\Delta x} + \frac{b_{i,j,k+1}^{V1} - b_{i,j,k}^{V1}}{\Delta z} = -\frac{1}{\tau} b_{i,j,k}^{\tau 13}, \\ & \frac{b_{i,j+1,k}^{V3} - b_{i,j,k}^{V3}}{\Delta y} + \frac{b_{i,j,k+1}^{V2} - b_{i,j,k}^{V2}}{\Delta z} = -\frac{1}{\tau} b_{i,j,k}^{\tau 23}. \end{aligned} \quad (4.114)$$

Le schéma sur grille décalée pour $\varepsilon = 0$ Schéma ID

$$\begin{aligned}
& \frac{b_{i+1/2,j,k}^{V1} - b_{i-1/2,j,k}^{V1}}{\Delta x} + \frac{b_{i,j+1/2,k}^{V2} - b_{i,j-1/2,k}^{V2}}{\Delta y} + \frac{b_{i,j,k+1/2}^{V3} - b_{i,j,k-1/2}^{V3}}{\Delta z} = 0, \\
& \frac{b_{i+1,j,k}^0 - b_{i,j,k}^0}{\Delta x} + \sqrt{2} \frac{b_{i+1,j,k}^{E1} - b_{i,j,k}^{E1}}{\Delta x} + \frac{b_{i+1/2,j+1/2,k}^{\tau 12} - b_{i+1/2,j-1/2,k}^{\tau 12}}{\Delta y} + \frac{b_{i+1/2,j,k+1/2}^{\tau 13} - b_{i+1/2,j,k-1/2}^{\tau 13}}{\Delta z} = g_1, \\
& \frac{b_{i,j+1,k}^0 - b_{i,j,k}^0}{\Delta y} + \sqrt{2} \frac{b_{i,j+1,k}^{E2} - b_{i,j,k}^{E2}}{\Delta y} + \frac{b_{i+1/2,j+1/2,k}^{\tau 12} - b_{i-1/2,j-1/2,k}^{\tau 12}}{\Delta x} + \frac{b_{i,j+1/2,k+1/2}^{\tau 23} - b_{i,j+1/2,k-1/2}^{\tau 23}}{\Delta z} = g_2, \\
& \frac{b_{i,j,k+1}^0 - b_{i,j,k}^0}{\Delta z} + \sqrt{2} \frac{b_{i,j,k+1}^{E3} - b_{i,j,k}^{E3}}{\Delta z} + \frac{b_{i+1/2,j,k+1/2}^{\tau 13} - b_{i-1/2,j,k+1/2}^{\tau 13}}{\Delta x} + \frac{b_{i,j+1/2,k+1/2}^{\tau 23} - b_{i,j-1/2,k+1/2}^{\tau 23}}{\Delta y} = g_3, \\
& \sqrt{2} \frac{b_{i+1/2,j,k}^{V1} - b_{i-1/2,j,k}^{V1}}{\Delta x} = -\frac{1}{\tau} (b_{i,j,k}^{E1} - \bar{b}_{i,j,k}^E), \\
& \sqrt{2} \frac{b_{i,j+1/2,k}^{V2} - b_{i,j-1/2,k}^{V2}}{\Delta y} = -\frac{1}{\tau} (b_{i,j,k}^{E2} - \bar{b}_{i,j,k}^E), \\
& \sqrt{2} \frac{b_{i,j,k+1/2}^{V3} - b_{i,j,k-1/2}^{V3}}{\Delta z} = -\frac{1}{\tau} (b_{i,j,k}^{E3} - \bar{b}_{i,j,k}^E), \\
& \frac{b_{i+1,j+1/2,k}^{V2} - b_{i,j+1/2,k}^{V2}}{\Delta x} + \frac{b_{i+1/2,j+1,k}^{V1} - b_{i+1/2,j,k}^{V1}}{\Delta y} = -\frac{1}{\tau} b_{i+1/2,j+1/2,k}^{\tau 12}, \\
& \frac{b_{i+1,j,k+1/2}^{V3} - b_{i,j,k+1/2}^{V3}}{\Delta x} + \frac{b_{i+1/2,j+1/2,k+1}^{V1} - b_{i+1/2,j,k}^{V1}}{\Delta z} = -\frac{1}{\tau} b_{i+1/2,j,k+1/2}^{\tau 13}, \\
& \frac{b_{i,j+1,k+1/2}^{V3} - b_{i,j,k+1/2}^{V3}}{\Delta y} + \frac{b_{i,j+1/2,k+1}^{V2} - b_{i,j+1/2,k}^{V2}}{\Delta z} = -\frac{1}{\tau} b_{i,j+1/2,k+1/2}^{\tau 23}. \tag{4.115}
\end{aligned}$$

Le traitement des conditions aux limites

On vient de voir que (4.107 - 4.108) peut être considéré comme une approximation consistante des équations de Stokes, quitte à supposer que les différentes composantes du vecteur b sont localisées sur des grilles décalées. Il reste maintenant à déterminer les conditions aux limites à appliquer à la partie du schéma adaptée au régime fluide (i.e. à $(1 - \varepsilon^2) \sum_{p=1}^3 A_p \tilde{D}_{y_p} \vec{b}_i$), pour que le schéma IE donne la solution correcte du problème aux limites de Stokes. Pour cela nous traitons les différentes composantes de manières différentes.

Conditions aux limites sur b^V :

On sait d'après le système de Stokes, que le schéma doit approcher $b_{|\Gamma}^V = 0$. Ceci se traduit tout d'abord sur le schéma décalé par :

$$\begin{aligned}
b_{d_{i-1/2,j,k}}^{V1} &= 0 & ; & & b_{f_{i+1/2,j,k}}^{V1} &= 0; \\
b_{i,d_j-1/2,k}^{V2} &= 0 & ; & & b_{i,f_j+1/2,k}^{V2} &= 0; \\
b_{i,j,d_k-1/2}^{V3} &= 0 & ; & & b_{i,j,f_k+1/2}^{V3} &= 0.
\end{aligned} \tag{4.116}$$

Ce qui se traduit directement sur le schéma ID en décalant l'indice non entier :

$$\begin{aligned}
b_{d_{i-1,j,k}}^{V1} &= 0 & ; & & b_{f_{i,j,k}}^{V1} &= 0; \\
b_{i,d_j-1,k}^{V2} &= 0 & ; & & b_{i,f_j,k}^{V2} &= 0; \\
b_{i,j,d_k-1}^{V3} &= 0 & ; & & b_{i,j,f_k}^{V3} &= 0.
\end{aligned} \tag{4.117}$$

On remarque que l'on fixe les conditions aux limites sur une maille solide pour ce qui est des conditions sur $d_x - 1/2$ et sur une maille fluide pour ce qui est des conditions sur $f_x + 1/2$.

Si l'on se réfère au schéma ID, il nous reste, en ce qui concerne b^V à fixer les conditions aux limites sur :

$$\begin{aligned} b_{i+1/2, f_j+1, k}^{V1} & ; & b_{i+1/2, j, f_k+1}^{V1} \\ b_{f_i+1, j+1/2, k}^{V2} & ; & b_{i, j+1/2, f_k+1}^{V2} \\ b_{f_i+1, j, k+1/2}^{V3} & ; & b_{i, f_j+1, k+1/2}^{V3} \end{aligned} \quad (4.118)$$

Pour cette étude, nous allons d'abord nous intéresser au cas 2D. Nous allons donc nous intéresser au maillage ID 2D suivant (Cf figure 4.2) :

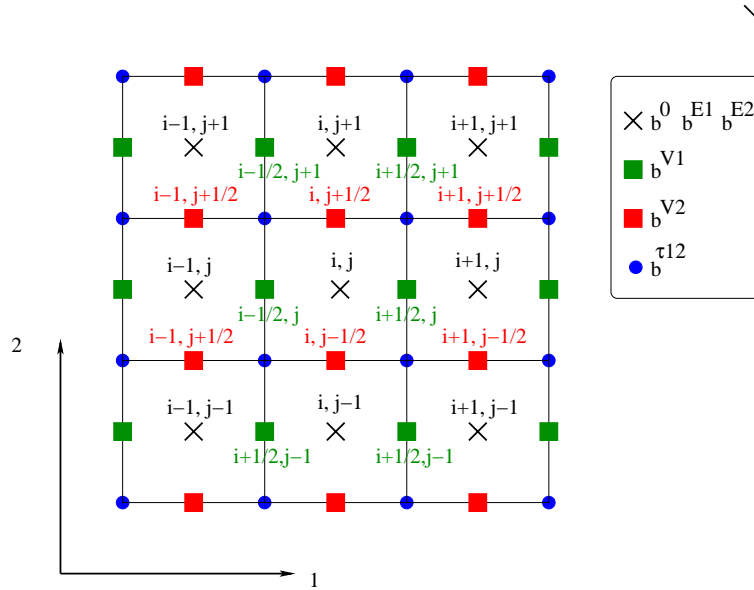


FIG. 4.2 – Schéma du maillage MAC 2D.

Nous avons donc à déterminer les conditions aux limites pour les éléments $b_{i-1/2, f_j+1}^{V1}$ et $b_{f_i+1, j+1/2}^{V2}$ du schéma ID. Et donc pour notre code, il est utile de connaître les conditions à appliquer aux éléments b_{i, f_j+1}^{V1} et $b_{f_i+1, j}^{V2}$ suivant ce qu'ils représentent sur le schéma ID. Nous allons détailler le raisonnement utilisé pour déterminer les conditions sur b_{i, f_j+1}^{V1} , la condition sur $b_{f_i+1, j}^{V2}$ suivant le même raisonnement mais en inversant les deux directions. En ce qui concerne b_{i, f_j+1}^{V1} , ce point correspond pour le schéma ID au point $b_{i+1/2, f_j+1}^{V1}$ qui peut être sur l'interface fluide solide. En effet, on sait déjà que le point $(i, f_j + 1)$ est une maille solide (sinon, il n'y aurait pas besoin d'y déterminer une condition aux limites). Reste à savoir si le point $(i + 1, f_j + 1)$ est aussi solide car :

Si $(i + 1, f_j + 1)$ est solide alors $b_{i+1/2, f_j+1}^{V1(ID)}$ est entre deux mailles solide et donc $b_{i+1/2, f_j+1}^{V1(ID)} = 0$ et donc on choisit de traduire cela sur le schéma IE par $b_{i, f_j+1}^{V1(IE)} = -b_{i+1, f_j+1}^{V1(IE)}$

Si $(i + 1, f_j + 1)$ est fluide alors $b_{i+1/2, f_j+1}^{V1(ID)}$ est situé sur une interface fluide solide et donc on doit avoir $b_{i+1/2, f_j+1}^{V1(ID)} = 0$, et comme ce point est équivalent sur le schéma IE à $b_{i, f_j+1}^{V1(IE)}$ donc

$$b_{i,f_j+1}^{V1(IE)} = 0.$$

Conditions aux limites sur b^τ : le cas 1D

Considérons une géométrie 1D comme sur le schéma suivant (4.3) :

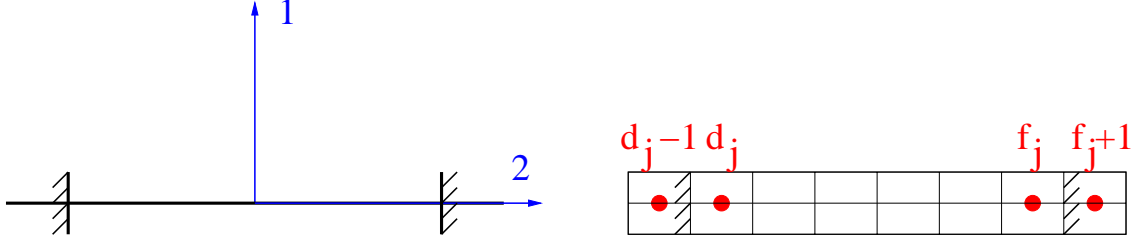


FIG. 4.3 – Schéma du cas 1D.

Nous nous intéressons à la résolution des problèmes auxiliaires dans la direction 1. Le système (4.6) se simplifie alors fortement : les dérivées suivant x et z s'annulent par condition de périodicité. On obtient alors le système simplifié suivant :

$$\partial_y b^{V2} = 0, \quad (4.119)$$

$$\partial_y b^{\tau 12} = g_1, \quad (4.120)$$

$$\partial_y b^0 + \sqrt{2} \partial_y b^{E2} = 0, \quad (4.121)$$

$$\partial_y b^{\tau 23} = 0, \quad (4.122)$$

$$\sqrt{2} \partial_y b^{V2} = \frac{1}{\tau} (b^{E2} - \bar{b}^E) \quad (4.123)$$

$$\partial_y b^{V1} = -\frac{1}{\tau} b^{\tau 12}, \quad (4.124)$$

$$\partial_y b^{V3} = -\frac{1}{\tau} b^{\tau 23}. \quad (4.125)$$

$$(4.126)$$

Des équations (4.119) et (4.123), on obtient directement que dans cette configuration 1D :

$$b^{E2} = \bar{b}^E \quad (4.127)$$

D'après les conditions aux limites, (4.119) et (4.122) nous donnent immédiatement $b^{V2} = 0$ et $b^{\tau 23} = 0$. Et donc (4.125) devient $\partial_y b^{V3} = 0$, qui nous amène, grâce aux conditions aux limites périodiques à $b^{V3} = 0$. Ceci nous donne *in fine* le système simplifié suivant :

$$\partial_y b^0 + \sqrt{2} \partial_y b^{E2} = 0, \quad (4.128)$$

$$\partial_y b^{V1} = -\frac{1}{\tau} b^{\tau 12}, \quad (4.129)$$

$$\partial_y b^{\tau 12} = g_1, \quad (4.130)$$

$$+ \text{Conditions aux limites.} \quad (4.131)$$

En régime asymptotique, dans ce cas particulier, le problème de Stokes (4.74 - 4.75 - 4.76 - 4.77) se ramène à l'équation elliptique (4.132) avec les conditions aux limites (4.133) car la pression

$\pi = b^0 + \sqrt{2}b^E$ (voir (4.73)) est constante en y :

$$-\partial_{xx}b^{V1} = \frac{1}{\tau}g_1, \quad (4.132)$$

$$b^{V1}(+1) = b^{V1}(-1) = 0. \quad (4.133)$$

Ainsi dans cette configuration 1D, on remarque que si l'on reporte (4.130) dans (4.129) on retrouve (4.132) et donc le système (4.129 - 4.130) apparaît comme une formulation mixte de l'opérateur elliptique (4.132). Maintenant, il nous faut déterminer les conditions aux limites numériques à associer à ce système (4.129 - 4.130) pour retrouver les conditions aux limites (4.133). Pour cela, on part de l'équation (4.129) qu'on intègre sur $[-1, 1]$:

$$\int_{-1}^{+1} \partial b^{V1}(y) dy = -\frac{1}{\tau} \int_{-1}^{+1} b^{\tau 12}(y) dy, \quad (4.134)$$

ce qui nous amène à :

$$b^{V1}(+1) - b^{V1}(-1) = -\frac{1}{\tau} \int_{-1}^{+1} b^{\tau 12}(y) dy, \quad (4.135)$$

et grâce à (4.133), on obtient donc finalement :

$$-\frac{1}{\tau} \int_{-1}^{+1} b^{\tau 12}(y) dy = 0, \quad (4.136)$$

condition que l'on n'a pas naturellement sur le schéma, il va donc falloir la retrouver. Donc dans cette configuration le schéma ID en régime de Darcy (pour $\varepsilon = 0$) s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{b_{j+1/2}^{\tau 12} - b_{j-1/2}^{\tau 12}}{\Delta y} &= g_1, \\ \frac{b_{j+1}^0 - b_j^0}{\Delta y} &= 0, \\ \frac{b_{j+1}^{V1} - b_j^{V1}}{\Delta y} &= -\frac{1}{\tau} b_{j+1/2}^{\tau 12}. \end{aligned} \quad (4.137)$$

Or on sait que d'après les conditions aux limites, $b_{|\Gamma}^V = 0$, de plus Γ se trouve sur des mailles à indices non entiers (Cf 4.3) et donc la condition $b_{|\Gamma}^V = 0$ devrait normalement s'écrire

$$b_{(d_j+1/2)}^{V1} = 0, \quad (4.138)$$

$$b_{(f_j-1/2)}^{V1} = 0. \quad (4.139)$$

Les parenthèses pour les indices sont là pour signaler au lecteur que ces moments, pris à ces indices, n'existent pas sur le schéma ID. Ils sont écrits pour aider au raisonnement. En effet pour obtenir ces conditions au bord, il nous faut interpoler les conditions aux limites sur les points valables.

En sommant la troisième équation du système (4.138) sur les indices j , on obtient :

$$\sum_{j=d_j}^{f_j-1} \frac{b_{j+1}^{V1} - b_j^{V1}}{\Delta y} = -\frac{1}{\tau} \sum_{j=d_j}^{f_j-1} b_{j+1/2}^{\tau 12},$$

donc on obtient

$$b_{f_j}^{V1} - b_{d_j}^{V1} = -\frac{\Delta y}{\tau} \sum_{j=d_j}^{f_j-1} b_{j+1/2}^{\tau 12}. \quad (4.140)$$

L'idée est alors de rajouter les termes qui nous intéressent dans la somme en extrapolant l'équation. Donc, en utilisant les approximations suivantes :

$$\frac{b_{(f_j+1/2)}^{V1} - b_{f_j}^{V1}}{\Delta y/2} \approx \frac{b_{f_j+1}^{V1} - b_{f_j}^{V1}}{\Delta y} = -\frac{1}{\tau} b_{f_j+1/2}^{\tau 12}$$

et

$$\frac{b_{d_j}^{V1} - b_{(d_j-1/2)}^{V1}}{\Delta y/2} \approx \frac{b_{d_j}^{V1} - b_{d_j-1}^{V1}}{\Delta y} = -\frac{1}{\tau} b_{d_j-1/2}^{\tau 12}$$

on obtient

$$(b_{(f_j+1/2)}^{V1} - b_{f_j}^{V1}) + (b_{f_j}^{V1} - b_{d_j}^{V1}) + (b_{d_j}^{V1} - b_{(d_j-1/2)}^{V1}) = -\frac{\Delta y}{\tau} \sum_{j=d_j}^{f_j-1} b_{j+1/2}^{\tau 12} - \frac{\Delta y}{\tau} b_{f_j+1/2}^{\tau 12} - \frac{\Delta y}{\tau} b_{d_j-1/2}^{\tau 12},$$

ce qui nous amène à :

$$-\frac{\Delta y}{\tau} \sum_{j=d_j}^{f_j-1} b_{j+1/2}^{\tau 12} - \frac{\Delta y}{\tau} b_{f_j+1/2}^{\tau 12} - \frac{\Delta y}{\tau} b_{d_j-1/2}^{\tau 12} = b_{(f_j+1/2)}^{V1} - b_{(d_j-1/2)}^{V1}$$

Et donc ici, d'après les conditions aux limites sur b^{V1} dans l'équation asymptotique, on sait que : $b_{(f_j+1/2)}^{V1} = b_{(d_j-1/2)}^{V1} = 0$, et donc on obtient :

$$\frac{1}{2} b_{d_j-1/2}^{\tau 12} = -\sum_{j=d_j}^{f_j-1} b_{j+1/2}^{\tau 12} - b_{f_j+1/2}^{\tau 12},$$

et en utilisant la formule (4.140), on arrive à la relation :

$$b_{d_j-1/2}^{\tau 12} = -\frac{2\tau}{\Delta y} (b_{f_j}^{V1} - b_{d_j}^{V1}) - b_{f_j+1/2}^{\tau 12},$$

ou encore en écriture en indice entier (schéma IE utilisé dans notre code HAMMLET) :

$$b_{d_j-1}^{\tau 12} = -\frac{2\tau}{\Delta y} (b_{f_j}^{V1} - b_{d_j}^{V1}) - b_{f_j}^{\tau 12} \quad (4.141)$$

L'implémentation de (4.141) sera précisée au chapitre 6 dans le paragraphe consacré à l'implémentation informatique.

L'extension aux cas 3D

Ceci se généralise sans difficulté à des géométries telles que des tubes où cette fois-ci le problème auxiliaire est en fait 2D et en asymptotique, il se ramène encore à une équation de Laplace.

L'extension à des géométries quelconques 2D ou 3D, est plus complexe. En effet, nous sommes face à une équation de Stokes qui fait naturellement apparaître une "pression". Il faut donc, après avoir étendu les conditions aux limites sur b^V et $b^{\tau ij}$, déterminer les conditions aux limites sur b^E . Cette dernière partie demande donc un long travail et reste à l'étude.

Chapitre 5

Modèle de transport dans un matériau réactif avec évolution structurale

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté le modèle de transport pour une géométrie poreuse fixe. Maintenant, nous allons étendre notre étude à un modèle plus complexe qui prend en compte l'évolution structurale d'un matériau liée à des réactions chimiques en phase hétérogène. Dans un souci de clarté, nous allons présenter ce modèle en plusieurs étapes. D'abord nous allons considérer une géométrie variable, ayant une évolution structurale supposée connue et respectant la condition de périodicité. Puis nous considérerons le cas où cette évolution est due à des réactions chimiques que nous introduisons dans le modèle macroscopique puisqu'en général, les taux de réactions sont des données macroscopiques. Enfin, nous couplons l'évolution structurale avec les réactions chimiques, ce qui nous amène à considérer une évolution structurale inconnue et mais toujours périodique. Dans un dernier temps nous verrons comment étendre le modèle à une géométrie en évolution mais non périodique.

5.1 Transport avec évolution structurale

Nous reprenons le système (3.14 - 3.15 - 3.16 - 3.18) où les équations sont maintenant définies sur des phases fluide et solide dépendant du temps $\Omega_f(t)$ et $\Omega_s(t)$ qui sont supposées connues. Nous fixons le coefficient d'accommodation σ à 1 (condition de réflexion purement diffuse) afin de simplifier la présentation de la dérivation. Comme l'interface $\Gamma(t)$ entre la phase solide et la phase gazeuse est mobile, les conditions de flux de masse et d'énergie sur cette interface prennent une forme différente qui fait intervenir σ_p la vitesse normale d'évolution de cette interface. Dans cette première étape, cette vitesse est supposée donnée. Nous allons ici différencier la masse volumique intrinsèque du solide $\check{\rho}_s$ qui est différente de la masse volumique apparente ρ_s qui évolue à cause de l'évolution structurale du matériau. De plus, nous voyons apparaître $e_s(T) = \check{\rho}_s C_v T$ qui représente l'énergie du solide. Le système s'écrit alors :

$$\check{\rho}_s C_v \partial_t T = \operatorname{div}(\lambda_s \nabla T), \quad \text{dans } \Omega_s(t), \quad (5.1)$$

$$\partial_t f + v \cdot \nabla f = Q(f, f), \quad \text{dans } \Omega_f(t), \quad (5.2)$$

$$f(x, v, t) = k M_{\sigma_p}(T) \quad \text{sur } \Gamma(t) \text{ pour } v \cdot n > 0, \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} \lambda_s \nabla_x T \cdot n + e_s(T) \sigma_p &= - \int \frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f(x, v, t) dv \\ &+ \left(\int \frac{1}{2} |v|^2 f(x, v, t) dv \right) \sigma_p \quad \text{sur } \Gamma(t). \end{aligned} \quad (5.4)$$

En ce qui concerne l'équation (5.3), il nous faut définir k . Dans le chapitre 3, celui-ci venait de la condition de flux de masse nul à la paroi et nous donnait $k = \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f dw$. On considère maintenant le terme de recul de paroi et on obtient :

$$\begin{cases} \int_v v \cdot n f(x, v, t) dv - \sigma_p \int_v f(x, v, t) dv = 0, \\ f(x, v, t)|_{v \cdot n > 0} = k M_{\sigma_p}(T), \end{cases} \quad (5.5)$$

où $M_{\sigma_p}(T)$ est une maxwellienne de vitesse $\sigma_p \vec{n}$. De plus celle-ci est choisie de telle sorte que

$$\int_{v \cdot n > 0} v \cdot n M_{\sigma_p}(T) dv = 1. \quad (5.6)$$

On écrit alors :

$$\int_{v \cdot n > 0} v \cdot n f dv - \sigma_p \int_{v \cdot n > 0} f dv = \int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f dv + \sigma_p \int_{v \cdot n < 0} f dv. \quad (5.7)$$

Et donc grâce à la deuxième équation du système (5.5), (5.7) devient :

$$k \int_{v \cdot n > 0} v \cdot n M_{\sigma_p}(T) dv - k \sigma_p \int_{v \cdot n > 0} M_{\sigma_p}(T) dv = \int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f dv + \sigma_p \int_{v \cdot n < 0} f dv, \quad (5.8)$$

et en utilisant la propriété (5.6), on obtient :

$$k(1 - \sigma_p \int_{v \cdot n > 0} M_{\sigma_p}(T) dv) = \int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f dv + \sigma_p \int_{v \cdot n < 0} f dv. \quad (5.9)$$

On en déduit la valeur de k pour le modèle avec évolution structurale :

$$k = \frac{1}{1 - \sigma_p \int_{v \cdot n > 0} M_{\sigma_p}(T) dv} \left(\int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f dv + \sigma_p \int_{v \cdot n < 0} f dv \right). \quad (5.10)$$

L'équation (5.3) devient alors

$$f(x, v, t) = \frac{1}{1 - \sigma_p \int_{v \cdot n > 0} M_{\sigma_p}(T) dv} \left(\int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f dv + \sigma_p \int_{v \cdot n < 0} f dv \right) M_{\sigma_p}(T). \quad (5.11)$$

5.1.1 La formulation adimensionnée

Nous allons donc reprendre les formules d'adimensionnement (3.26) et définir la quantité adimensionnée suivante :

$$\tilde{\sigma}_p = \frac{\sigma_p}{\sigma_p^*}. \quad (5.12)$$

Nous allons nous placer dans un régime particulier pour l'adimensionnement et supposer que l'on a pour les différentes vitesses intrinsèques :

$$\sigma_p^* \ll u^* \ll a^*, \quad (5.13)$$

et donc on peut supposer que le rapport des vitesses est égal à ϵ :

$$\epsilon = \frac{\sigma_p^*}{u^*} = \frac{u^*}{a^*}. \quad (5.14)$$

Adimensionnement de l'équation de continuité des flux de masse à l'interface

M_{σ_p} n'étant plus homogène à une fonction de distribution à cause de sa normalisation (5.6), nous allons définir la quantité adimensionnée suivante :

$$\tilde{M}_{\sigma_p} = \frac{M_{\sigma_p}}{\frac{f^*}{\rho^* a^*}}. \quad (5.15)$$

On obtient alors

$$f^* \tilde{f} = \frac{\tilde{M}_{\sigma_p}(T) f^*}{\rho^* a^* (1 - \sigma_p^* \tilde{\sigma}_p \frac{a^{*2} f^*}{\rho^*} \int_{\tilde{v} \cdot n > 0} \tilde{M}_{\sigma_p}(T) d\tilde{v})} \left(a^{*4} f^* \int_{\tilde{v} \cdot n < 0} |\tilde{v} \cdot n| \tilde{f} d\tilde{v} + \sigma_p^* f^* a^{*3} \left(\int_{\tilde{v} \cdot n < 0} \tilde{f} d\tilde{v} \right) \tilde{\sigma}_p \right). \quad (5.16)$$

De plus, on peut noter qu'en adimensionnant (5.6) on obtient $\frac{f^* a^{*4}}{\rho a^*} = 1$, et donc :

$$\tilde{f} = \frac{\tilde{M}_{\sigma_p}(T)}{1 - \sigma_p^* \tilde{\sigma}_p \frac{a^{*2} f^*}{\rho^*} \int_{\tilde{v} \cdot n > 0} \tilde{M}_{\sigma_p}(T) d\tilde{v}} \left(\int_{\tilde{v} \cdot n < 0} |\tilde{v} \cdot n| \tilde{f} d\tilde{v} + \frac{\sigma_p^*}{a^*} \left(\int_{\tilde{v} \cdot n < 0} \tilde{f} d\tilde{v} \right) \tilde{\sigma}_p \right). \quad (5.17)$$

Toujours avec la relation $\frac{f^* a^{*2}}{\rho} = \frac{1}{a^*}$ on obtient :

$$\tilde{f} = \frac{\tilde{M}_{\sigma_p}(T)}{1 - \frac{\sigma_p^*}{a^*} \tilde{\sigma}_p \int_{\tilde{v} \cdot n > 0} \tilde{M}_{\sigma_p}(T) d\tilde{v}} \left(\int_{\tilde{v} \cdot n < 0} |\tilde{v} \cdot n| \tilde{f} d\tilde{v} + \frac{\sigma_p^*}{a^*} \left(\int_{\tilde{v} \cdot n < 0} \tilde{f} d\tilde{v} \right) \tilde{\sigma}_p \right). \quad (5.18)$$

On utilise alors l'équation (5.14) qui nous amène à $\frac{\sigma_p^*}{a^*} = \epsilon^2$ et donc :

$$\tilde{f} = \frac{\tilde{M}_{\sigma_p}(T)}{1 - \epsilon^2 \tilde{\sigma}_p \int_{\tilde{v} \cdot n > 0} \tilde{M}_{\sigma_p}(T) d\tilde{v}} \left(\int_{\tilde{v} \cdot n < 0} |\tilde{v} \cdot n| \tilde{f} d\tilde{v} + \epsilon^2 \left(\int_{\tilde{v} \cdot n < 0} \tilde{f} d\tilde{v} \right) \tilde{\sigma}_p \right). \quad (5.19)$$

Au final on obtient (en supprimant les $\tilde{}$ pour plus de clarté) :

$$f = \frac{1}{1 - \epsilon^2 \sigma_p \int_{v \cdot n > 0} M_{\sigma_p}(T) dv} \left(\int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f dv + \sigma_p \epsilon^2 \int_{v \cdot n < 0} f dv \right) M_{\sigma_p}(T). \quad (5.20)$$

Adimensionnement de l'équation de continuité des flux d'énergie à l'interface

On obtient avec (3.26 - 3.30 - 5.12) l'adimensionnement suivant :

$$\tilde{\lambda}_s \nabla_{\tilde{x}} \tilde{T} \cdot n + \frac{C_{v_s}^* \rho_s^* L^* \sigma_p^*}{\lambda_s^*} \tilde{e}_s(T) \tilde{\sigma}_p = - \frac{a^{*3} \rho^* L^*}{\lambda_s^* T^*} \int \frac{1}{2} |\tilde{v}|^2 \tilde{v} \cdot n \tilde{f} d\tilde{v} + \frac{\sigma_p^* a^{*2} L^*}{\lambda_s^* T^*} \left(\int \frac{1}{2} |\tilde{v}|^2 \tilde{v} \tilde{f} d\tilde{v} \right) \tilde{\sigma}_p. \quad (5.21)$$

Posons $B = \frac{C_{v_s}^* \rho_s^* L^* \sigma_p^*}{\lambda_s^*}$, $C = \frac{a_s^3 \rho_s^* L^*}{\lambda_s^* T^*}$, $D = \frac{\sigma_p^* a_s^2 L^*}{\lambda_s^* T^*}$ et étudions séparément chacun des coefficients.

Pour B : grâce à l'expression (3.32), telle qu'on a défini $C_{v_s}^* \rho_s^*$, on en conclut que $B = \frac{\sigma_p^*}{u^*}$ et comme on suppose une vitesse σ_p bien inférieure à u^* , on en conclut que B est de l'ordre de ϵ .

Pour C : ici, C ne dépend pas de σ_p , il suffit donc de reprendre le travail effectué au chapitre 3 : d'après la formule (3.36), on arrive à $C = \frac{(\gamma-1)Re_* Pr_*}{M_*} \frac{\lambda_*}{\lambda_{s*}}$ et donc on en conclut que C ne dépend que de $\frac{\lambda_*}{M_* \lambda_{s*}}$. Or, $M \approx \epsilon$ et comme on se place en régime faiblement couplé ($\frac{\lambda_*}{\lambda_{s*}} \approx \epsilon$), on en déduit que C est de l'ordre de 1.

Pour D : $D = \frac{\sigma_p^* a_s^2 L^*}{\lambda_s^* T^*} = B \frac{\sigma_p^*}{a^*}$. Et donc on en conclut que D est de l'ordre de ϵ^3 .

On obtient donc la formule adimensionnée suivante (où on a supprimé les \sim pour plus de clarté) :

$$\lambda_s \nabla_x T \cdot n + \epsilon e_s(T) \sigma_p = - \int \frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f(x, v, t) dv + \epsilon^3 \left(\int \frac{1}{2} |v|^2 v f(x, v, t) dv \right) \sigma_p. \quad (5.22)$$

Finalement, on obtient le modèle adimensionné suivant

$$\check{\rho}_s C_v \partial_t T = \operatorname{div}(\lambda_s \nabla T) \quad \text{dans } \Omega_s(t), \quad (5.23)$$

$$\partial_t f + \frac{1}{\epsilon} v \cdot \nabla f = \frac{1}{\epsilon^2} Q(f, f) \quad \text{dans } \Omega_f(t), \quad (5.24)$$

$$f(x, v, t) = \frac{1}{1 - \epsilon^2 \sigma_p \int_{v \cdot n > 0} M_{\sigma_p}(T) dv} \left(\int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f dv + \sigma_p \epsilon^2 \int_{v \cdot n < 0} f dv \right) M_{\sigma_p}(T) \quad (5.25)$$

$$\text{sur } \Gamma(t) \text{ pour } v \cdot n > 0, \quad (5.26)$$

$$\begin{aligned} \lambda_s \nabla_x T \cdot n + \epsilon e_s(T) \sigma_p &= - \int \frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f(x, v, t) dv \\ &+ \epsilon^3 \left(\int \frac{1}{2} |v|^2 v f(x, v, t) dv \right) \sigma_p \quad \text{sur } \Gamma(t). \end{aligned} \quad (5.27)$$

5.1.2 Le modèle asymptotique

Le passage au macroscopique (changement d'échelle) va suivre la même procédure que dans le paragraphe 3.3.3. Nous allons tout d'abord chercher T^ϵ et f^ϵ sous la forme :

$$\begin{aligned} T^\epsilon(x) &= T^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}) = T_0^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}) + \epsilon T_1^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}) + \dots \\ f^\epsilon(x, v) &= f^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}, v) = f_0^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}, v) + \epsilon f_1^\epsilon(x, y = \frac{x}{\epsilon}, v) + \dots \end{aligned}$$

Il faut noter aussi que :

$$\frac{1}{1 - \epsilon^2 \sigma_p \int_{v \cdot n > 0} M_{\sigma_p}(T) dv} = 1 + \epsilon^2 \sigma_p \int_{v \cdot n > 0} M_{\sigma_p}(T) dv + O(\epsilon^4),$$

et donc on peut écrire (5.25) sous la forme :

$$\begin{aligned} f(x, v, t) &= \left(\int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f dv + \sigma_p \epsilon^2 \int_{v \cdot n < 0} f dv \right) M_{\sigma_p}(T) \\ &+ \epsilon^2 \sigma_p \int_{v \cdot n > 0} M_{\sigma_p}(T) dv \left(\int_{v \cdot n < 0} |v \cdot n| f dv + \sigma_p \epsilon^2 \int_{v \cdot n < 0} f dv \right) M_{\sigma_p}(T) \\ &+ O(\epsilon^4). \end{aligned} \quad (5.28)$$

On identifie alors les termes de même ordre et on obtient :

A l'ordre principal :

$$\operatorname{div}_y(\lambda_s \nabla_y T_0) = 0 \quad \text{dans } Y_s(t), \quad (5.29)$$

$$v \cdot \nabla_y f_0 = Q(f_0, f_0) \quad \text{dans } Y_f(t), \quad (5.30)$$

$$f_0 = \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_0 dw M_{\sigma_p}(T_0) \quad \text{sur } \gamma(t) \text{ pour } v \cdot n > 0, \quad (5.31)$$

$$\lambda_s \nabla_y T_0 \cdot n = 0 \quad \text{sur } \gamma(t). \quad (5.32)$$

Ce qui est exactement le même système que dans (3.3.3).

A l'ordre +1 :

$$-\operatorname{div}_x(\lambda_s \nabla_y T_0) = \operatorname{div}_y(\lambda_s \nabla_x T_0) + \operatorname{div}_y(\lambda_s \nabla_y T_1), \quad (5.33)$$

$$v \cdot \nabla_x f_0 + v \cdot \nabla_y f_1 = L(f_1), \quad (5.34)$$

$$f_1 = \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_1 dw M_{\sigma_p}(T_0), \quad (5.35)$$

$$\lambda_s \nabla_x T_0 \cdot n + \lambda_s \nabla_y T_1 \cdot n = - \int \frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f_0(x, v, t) dv. \quad (5.36)$$

A l'ordre +2 :

nous notons un changement par rapport à (3.54) et (3.55) :

$$\check{\rho}_s C_v \partial_t T_0 - \operatorname{div}_x(\lambda_s (\nabla_x T_0 + \nabla_y T_1)) = \operatorname{div}_y(\lambda_s (\nabla_x T_1 + \nabla_y T_2)), \quad (5.37)$$

$$\partial f_0 + v \cdot \nabla_x f_1 + v \cdot \nabla_y f_2 = L(f_2) + Q(f_1, f_1), \quad (5.38)$$

$$\begin{aligned} f_2 = & \left(\int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_1 dw + \sigma_p \int_{w \cdot n < 0} f_0 dw \right) M_{\sigma_p}(T_0) \\ & + \left(\int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_1 dw \right) \frac{\partial M_{\sigma_p}(T_0)}{\partial T} T_1 \\ & + \left(\int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_0 dw \right) \frac{\partial^2 M_{\sigma_p}(T_0)}{\partial^2 T} T_2 \\ & + \left(\int_{w \cdot n > 0} M_{\sigma_p}(T_0) dw \right) \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| f_0 dw M_{\sigma_p}(T_0), \end{aligned} \quad (5.39)$$

$$\lambda_s \nabla_x T_1 \cdot n + \lambda_s \nabla_y T_2 \cdot n + e_s(T_0) \sigma_p = - \int \frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f_1(x, v, t) dv. \quad (5.40)$$

Grâce à l'ordre principal qui est identique à (3.48 - 3.49 - 3.50 - 3.51), on retrouve la proposition 1 et de plus à l'ordre +1, on peut toujours chercher T_1 et f_1 sous la forme :

$$T_1 = \gamma \cdot \nabla_x T_0, \quad \text{avec } \gamma = \gamma(y, t), \quad (5.41)$$

$$f_1 = (\alpha \cdot \nabla_x T_0 + \beta \cdot \nabla_x \rho_0) f_0 \quad \text{avec } \alpha = \alpha(y, v, t) \text{ et } \beta = \beta(y, v, t). \quad (5.42)$$

(5.33) s'écrit alors comme précédemment :

$$\operatorname{div}_y(\lambda_s \nabla_x T_0) - \operatorname{div}_x(\lambda_s \nabla_y T_1) = 0.$$

Et en écrivant l'écriture variationnelle et grâce à (5.36), il vient que $\int_{\Gamma(t)} \lambda_s \nabla_x T_0 \cdot n \phi \, d\sigma + \int_{\Gamma(t)} \lambda_s \nabla_y T_1 \cdot n \phi \, d\sigma = 0$ et donc on a

$$- \int_{\Omega_s(t)} \lambda_s \nabla_x T_0 \nabla_y \phi \, dy = \int_{\Omega_s(t)} \lambda_s \nabla_y T_1 \nabla_y \phi \, dy. \quad (5.43)$$

C'est-à-dire $\forall k = 1, 2, 3$, on a

$$- \int_{\Omega_s(t)} \lambda_s e^k \nabla_y \phi \, dy = \int_{\Omega_s(t)} \lambda_s \nabla_y \gamma_k \nabla_y \phi \, dy, \quad (5.44)$$

et finalement ceci nous donne alors le premier problème auxiliaire identique au modèle sans évolution structurale (3.64) sur γ :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}_y(\lambda_s \nabla_y \gamma_i) = 0 & \text{dans } Y_s(t), \\ \lambda_s \nabla_y \gamma_i \cdot n = -\lambda_s n_i & \text{sur } \gamma(t). \end{cases} \quad (5.45)$$

On s'intéresse maintenant à (5.34 - 5.35) qui sont identiques à (3.49 - 3.50). En utilisant la propriété (5.42) on arrive aux deux derniers problèmes auxiliaires toujours rigoureusement identiques aux problèmes sans évolution structurale (3.65) et (3.66) :

$$\begin{cases} -L(f_0 \alpha_i) + f_0 v \cdot \nabla_y \alpha_i = -f_0 v_i \left(-\frac{3}{2T_0} + \frac{|v|^2}{2RT_0^2} \right) & \text{dans } Y_f(t), \\ \alpha_i = \left(\frac{|v|^2}{2RT_0^2} - \frac{2}{T_0} \right) \gamma_i + \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \alpha_i M(T_0) \, dw & \text{sur } \gamma(t), \text{ pour } v \cdot n > 0, \end{cases} \quad (5.46)$$

$$\begin{cases} -L(f_0 \beta_i) + v \cdot \nabla_y (f_0 \beta_i) = \frac{-f_0}{\rho_0} v_i & \text{dans } Y_f(t), \\ \beta_i = \int_{w \cdot n < 0} |w \cdot n| \beta_i M(T_0) \, dw & \text{sur } \gamma(t), \text{ pour } v \cdot n > 0. \end{cases} \quad (5.47)$$

Fermeture

Tout d'abord, nous allons présenter une formule d'intégration par partie que nous utiliserons par la suite :

Soit une fonction $g(t, x, y)$ dérivable par rapport à t alors nous avons :

$$\partial_t \int_{Y_s(t)} g(t, x, y) \, dy = \int_{Y_s(t)} \partial_t g(t, x, y) \, dy + \sigma_p \int_{\gamma(t)} g(t, x, y) \, d\sigma(y). \quad (5.48)$$

Comme précédemment, en partant de l'équation (5.34), on la multiplie par $\frac{|v|^2}{2}$ et on intègre en vitesse pour obtenir :

$$\int \frac{|v|^2}{2} v \cdot \nabla_x f_0 \, dv + \int \frac{|v|^2}{2} v \cdot \nabla_y f_1 \, dv = \int \frac{|v|^2}{2} L(f_1) \, dv.$$

De plus, on a toujours $\int \frac{|v|^2}{2} L(f_1) \, dv = 0$ et comme f_0 est une maxwellienne, on a encore $\int \frac{|v|^2}{2} v \cdot \nabla_x f_0 \, dv = 0$ ce qui nous amène comme précédemment à $\int \frac{|v|^2}{2} v \cdot \nabla_y f_1 \, dv$ et donc :

$$\int_{Y_s(t)} \int \operatorname{div} \left(\frac{|v|^2}{2} v \cdot \nabla_y f_1 \right) \, dv \, dy = 0. \quad (5.49)$$

Comme précédemment, en intégrant (5.40) sur $\gamma(t)$ et grâce à l'hypothèse de périodicité du matériau, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{\gamma(t)} \left(\lambda_s \nabla_x T_1 \cdot n + \lambda_s \nabla_y T_2 \cdot n + e_s(T_0) \sigma_p \right) d\sigma &= - \int_{\gamma(t)} \int \frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f_1(x, v, t) dv d\sigma \\ &= - \int_{Y_f(t)} \int \operatorname{div} \left(\frac{1}{2} |v|^2 v \cdot n f_1(x, v, t) \right) dv dy \\ &= 0 \quad \text{grâce à (3.67),} \end{aligned} \quad (5.50)$$

enfin, nous intégrons (5.37) sur $Y_s(t)$ et nous utilisons la propriété (5.50) pour obtenir :

$$\left(\int_{Y_s(t)} \check{\rho}_s C_v \partial_t T_0 dy \right) - \operatorname{div}_x \left(\int_{Y_s(t)} (\lambda_s + \lambda_s \gamma(y)) dy \nabla_x T_0 \right) = - \int_{\gamma(t)} e_s(T_0) \sigma_p d\sigma. \quad (5.51)$$

Regardons plus précisément le premier terme :

$$\begin{aligned} \int_{Y_s(t)} \check{\rho}_s C_v \partial_t T_0 dy &= \check{\rho}_s C_v \left(\partial_t \int_{Y_s(t)} T_0 dy \right) - \check{\rho}_s C_v \sigma_p \int_{\gamma(t)} T_0 d\sigma, \quad \text{grâce à (5.48),} \\ &= \check{\rho}_s C_v \partial_t (|Y_s(t)| T_0) - \check{\rho}_s C_v \sigma_p \int_{\gamma(t)} T_0 d\sigma, \\ &= \check{\rho}_s C_v (\partial_t |Y_s(t)|) T_0 + \check{\rho}_s C_v |Y_s(t)| \partial_t T_0 - \sigma_p \int_{\gamma(t)} e_s(T_0) d\sigma. \end{aligned} \quad (5.52)$$

En divisant par $|Y|$ l'équation (5.55) devient :

$$\check{\rho}_s C_v \frac{|Y_s(t)|}{|Y|} \partial_t T_0 - \frac{1}{|Y|} \operatorname{div}_x \left(\int_{Y_s(t)} (\lambda_s + \lambda_s \gamma(y)) dy \nabla_x T_0 \right) = \check{\rho}_s C_v \left(\frac{\partial_t |Y_s(t)|}{|Y|} \right) T_0. \quad (5.53)$$

Et donc comme $1 - \epsilon(t) = \frac{|Y_s(t)|}{|Y|}$ on a

$$\check{\rho}_s C_v (1 - \epsilon(t)) \partial_t T_0 - \frac{1}{|Y|} \operatorname{div}_x \left(\int_{Y_s(t)} (\lambda_s + \lambda_s \gamma(y)) dy \nabla_x T_0 \right) = \check{\rho}_s C_v (\partial_t \epsilon(t)) T_0, \quad (5.54)$$

et donc finalement :

$$\check{\rho}_s C_v \partial_t [(1 - \epsilon(t)) T_0] - \frac{1}{|Y|} \operatorname{div}_x \left(\int_{Y_s(t)} (\lambda_s + \lambda_s \gamma(y)) dy \nabla_x T_0 \right) = 0, \quad (5.55)$$

On peut remarquer qu'il s'agit d'une équation de type équation de la chaleur homogénéisée.

Enfin, comme pour le modèle sans évolution (5.38) on intègre par rapport à v et sur $Y_s(t)$ et on obtient en remarquant que $\int v \cdot n f_2 dv = 0$ (condition de flux de masse nul) :

$$\frac{1}{|Y|} \int_{Y_f(t)} \int \partial_t f_0 dv dy + \frac{1}{|Y|} \operatorname{div}_x \int_{Y_f(t)} \int v f_0 \alpha \nabla_x T_0 + \frac{1}{|Y|} \operatorname{div}_x \int_{Y_f(t)} \int v f_0 \beta \nabla_x \rho_0 = 0. \quad (5.56)$$

De même que pour l'équation précédente, nous allons détailler la dérivation du premier terme de l'équation (5.56)

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|Y|} \int_{Y_f(t)} \int \partial_t f_0 \, dv \, dy &= \frac{1}{|Y|} \partial_t \left(\int_{Y_f(t)} \int f_0 \, dv \, dy \right) + \frac{\sigma_p}{|Y|} \int_{\gamma(t)} \int f_0 \, dv \, d\sigma, \quad \text{grâce à (5.48),} \\
&= \frac{1}{|Y|} \partial_t (|Y_f(t)| \rho_0) + \frac{\sigma_p}{|Y|} \int_{\gamma(t)} \rho_0 \, d\sigma, \\
&= \frac{(\partial_t |Y_f(t)|)}{|Y|} \rho_0 + \frac{|Y_f(t)|}{|Y|} \partial_t \rho_0 + \frac{\sigma_p |\gamma(t)|}{|Y|} \rho_0, \\
&= (\partial_t \epsilon(t)) \rho_0 + \epsilon(t) \partial_t \rho_0 - \partial_t (\epsilon(t)) \rho_0 \quad \text{car } \partial_t \epsilon(t) = -\frac{\sigma_p |\gamma(t)|}{|Y|}, \\
&= \partial_t (\epsilon(t) \rho_0) - \partial_t (\epsilon(t)) \rho_0. \tag{5.57}
\end{aligned}$$

On obtient donc :

$$\partial_t (\epsilon(t) \rho_0) + \frac{1}{|Y|} \operatorname{div}_x \int_{Y_f(t)} \int v f_0 \alpha \nabla_x T_0 + \frac{1}{|Y|} \operatorname{div}_x \int_{Y_f(t)} \int v f_0 \beta \nabla_x \rho_0 = -\partial_t (\epsilon(t)) \rho_0. \tag{5.58}$$

On note :

$$\begin{aligned}
D &= D(\rho_0, T_0, Y_f) = \frac{\epsilon(t)}{|Y_f|} \langle f_0 v \otimes \int_{Y_f} \beta(y, v) \, dy \rangle, \\
\tilde{D} &= \tilde{D}(\rho_0, T_0, Y_f) = \frac{\epsilon(t)}{|Y_f|} \langle f_0 v \otimes \int_{Y_f} \alpha(y, v) \, dy \rangle, \\
K &= K(\rho_0, T_0, Y_s) = \frac{1-\epsilon(t)}{|Y_s|} \int_{Y_s} \lambda_s + \lambda_s \nabla_x \gamma(y) \, dy,
\end{aligned} \tag{5.59}$$

où $\langle f \rangle = \int_{R^3} f(v) \, dv$, et $\epsilon(t) = \frac{|Y_f(t)|}{|Y|}$ la porosité de la cellule élémentaire à l'instant t . On obtient la forme finale du système macroscopique en reprenant les équations (5.58 - 5.55) :

$$\partial_t (\epsilon(t) \rho_0) - \operatorname{div}_x (\tilde{D} \nabla_x T_0) - \operatorname{div}_x (D \nabla_x \rho_0) = \partial_t (\epsilon(t)) \rho_0, \tag{5.60}$$

$$\check{\rho}_s C_v \partial_t [(1 - \epsilon(t)) T_0] - \operatorname{div}_x (K \nabla_x T_0) = 0. \tag{5.61}$$

5.2 Le modèle de transport en milieu réactif

Dans ce paragraphe, nous allons étendre notre modèle à une configuration physico-chimique plus complexe permettant de représenter un matériau dont l'évolution structurale est due à une réaction de décomposition ou bien de dépôt. Nous allons supposer que la géométrie poreuse $Y_f(t)$ précédemment supposée connue et périodique aura maintenant une évolution au cours du temps définie par des réactions chimiques hétérogènes mais toujours périodique. Ici, nous allons supposer, pour simplifier l'écriture des réactions, que le matériau vierge est soumis à une seule réaction chimique où celui-ci peut donner un gaz et un résidu. Nous allons donc rajouter dans le modèle cette réaction de volume et nous tiendrons compte de l'évolution structurale du matériau en ajoutant en particulier une équation sur la porosité.

Nous supposons alors que le matériau peut être sujet à la réaction (hétérogène) suivante :



où S_1 et S_2 sont deux phases solides et G un gaz produit par cette réaction. On est donc maintenant dans une situation où la phase solide est constituée de deux types de solide et on notera :

$$\bar{Y}_s = \bar{Y}_{s_1} \cup \bar{Y}_{s_2}, \quad (5.63)$$

où Y_{S_1} et Y_{S_2} sont des ouverts représentant les volumes occupés respectivement par les solides 1 et 2. $Y_f = \mathbb{C}_Y \bar{Y}_s$ représente l'espace occupé par le pore où circule le gaz G . Enfin, $\gamma = \partial Y_s \cap \partial Y_f$. Tous ces ensembles seront sujet à une évolution au cours du temps (i.e. $Y_s = Y_s(t)$, $Y_{s_k} = Y_{s_k}(t)$, $k = 1, 2$, $Y_f = Y_f(t)$, $\gamma = \gamma(t)$).

Enfin pour simplifier un peu le modèle, on suppose que les conductivités thermiques des solides 1 et 2 sont égales.

Nous introduisons alors les quantités macroscopiques suivantes $\dot{\Omega}_g$ et $\dot{\Omega}_{s_j}$, $j = 1, 2$ les cinétiques associées à la réaction, c'est-à-dire les taux de production ou de perte. Ces quantités sont à traiter comme des termes source. De plus, nous introduisons la densité intrinsèque du solide j que nous noterons $\check{\rho}_{s_j}$ qui est supposée constante et connue. On peut alors définir la masse volumique apparente ρ_{s_j} des solides j dans la cellule :

$$\rho_{s_j}(t) = \frac{|Y_{s_j}(t)|}{|Y|} \check{\rho}_{s_j}. \quad (5.64)$$

On pose alors $\epsilon_j(t) = |Y_{s_j}(t)|/|Y|$, la fraction volumique du solide j , ce qui nous amène à $\rho_{s_j}(t) = \epsilon_j(t) \check{\rho}_{s_j}$. La porosité ϵ de la cellule est alors donnée par la formule suivante :

$$\sum_{j=1}^2 \epsilon_j(t) + \epsilon(t) = 1. \quad (5.65)$$

On a donc :

$$|Y_{s_j}(t)| = \epsilon_j |Y| = \frac{\rho_{s_j}(t)}{\check{\rho}_{s_j}} |Y|. \quad (5.66)$$

Et on a la relation :

$$\frac{d}{dt} |Y_s(t)| = \frac{d}{dt} (|Y_{s_1}(t)| + |Y_{s_2}(t)|) = \sigma_p |\gamma(t)|. \quad (5.67)$$

Enfin, si nous introduisons l'équation (6.7) ainsi que les termes sources correspondant aux taux de production ou de perte de chaque espèce chimique, solide ou gazeuse, dans le système obtenu précédemment (5.60 - 5.61), on arrive au système suivant :

$$\partial_t (\epsilon(t) \rho_g) - \text{div}_x (\tilde{D} \nabla_x T) - \text{div}_x (D \nabla_x \rho_g) = \partial_t (\epsilon(t)) \rho_g + \dot{\Omega}_g, \quad (5.68)$$

$$\text{pour } j = 1, 2 \quad \partial_t \rho_{s_j} = \dot{\Omega}_{s_j}, \quad (5.69)$$

$$\partial_t \left(\left[\sum_{k=1}^2 C_{v_k} \epsilon_k(t) \rho_{s_k} \right] T \right) - \text{div}_x (K \nabla_x T) = 0, \quad (5.70)$$

$$\epsilon_j(t) = \frac{\rho_{s_j}(t)}{\check{\rho}_{s_j}}, \quad (5.71)$$

$$\epsilon(t) = 1 - \sum_{k=1}^2 \epsilon_k(t). \quad (5.72)$$

Si l'on suppose que les $\dot{\Omega}_{s_j}$ sont indépendants de x , ϵ est donc également indépendant de x et on reste donc dans l'hypothèse d'un matériau périodique.

Bien sûr cette hypothèse n'est pas réaliste pour les applications visées. En effet, en réalité, $\dot{\Omega}_{s_j}$ dépend en particulier de T et la température n'est en général pas indépendante de x donc la vitesse des réactions hétérogènes ne sera pas homogène dans le matériau et ρ_{s_j} va dépendre de t et x et donc ϵ aussi. On a *a priori* perdu l'hypothèse de périodicité du matériau. Cependant ce modèle peut être considéré comme valide dans les hypothèses suivantes. On suppose que la structure microscopique du matériau reste à peu près constante dans une zone assez large autour d'une cellule élémentaire pour justifier un processus d'homogénéisation "local", tout en admettant des variations "globales" importantes. C'est l'hypothèse que l'on fera dans la suite qui est illustrée par le schéma suivant :

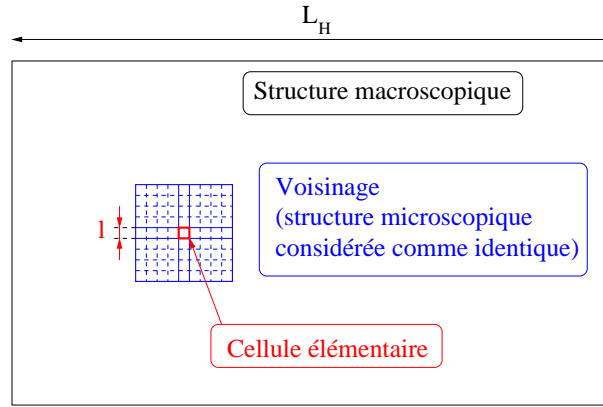


FIG. 5.1 – schéma de l'homogénéisation "locale"

Le système se met alors sous la forme suivante, où l'on peut noter la dépendance en x des différents paramètres :

$$\partial_t (\epsilon(t, x) \rho_g) - \operatorname{div}_x (\tilde{D} \nabla_x T) - \operatorname{div}_x (D \nabla_x \rho_g) = \partial_t (\epsilon(t, x)) \rho_g + \dot{\Omega}_g(T(t, x), \dots), \quad (5.73)$$

$$\text{pour } j = 1, 2 \quad \partial_t \rho_{s_j}(t, x) = \dot{\Omega}_{s_j}(T(t, x), \dots), \quad (5.74)$$

$$\partial_t \left(\left[\sum_{k=1}^2 C_{v_k} (1 - \epsilon_k(t, x)) \rho_{s_k}(t, x) \right] T \right) - \operatorname{div}_x (K \nabla_x T) = 0, \quad (5.75)$$

$$\epsilon_j(t, x) = \frac{\rho_{s_j}(t, x)}{\check{\rho}_{s_j}}, \quad (5.76)$$

$$\epsilon(t, x) = 1 - \sum_{k=1}^2 \epsilon_k(t, x). \quad (5.77)$$

5.3 Emboîtement de modèles

Comme on vient de le voir, les coefficients de transport sont maintenant définis par des lois :

$$(\rho, T, Y_f) \longrightarrow D(\rho, T, Y_f)$$

$$\begin{aligned}(\rho, T, Y_f) &\longrightarrow \tilde{D}(\rho, T, Y_f) \\(T, Y_f) &\longrightarrow K(T, Y_f)\end{aligned}\tag{5.78}$$

Où ρ et T sont des réels positifs et Y_f un ouvert de Y .

On se place maintenant dans le cas d'une évolution structurale du matériau. Ces lois ne sont pas connues explicitement, la dépendance de D , par exemple, par rapport à ρ , T et Y_f étant déterminée par la résolution d'un problème auxiliaire. Si l'on ne fait pas d'hypothèse supplémentaire, Y_f décrit un ensemble très compliqué qu'il est très difficile sinon impossible d'échantillonner. Pour surmonter cette difficulté on fait l'hypothèse suivante :

Hypothèse : *chaque cellule élémentaire va décrire au cours du processus de pyrolyse une même famille de géométries définies par une phase fluide croissante, que l'on peut paramétrer par un paramètre réel ξ tel que $Y_f = Y_f(\xi)$.*

Nous définissons alors nos $Y_f(\xi_i)$ tel que :

$$Y_f(\xi_0) \subset Y_f(\xi_1) \subset Y_f(\xi_2) \subset \dots$$

Dans ce cas, nous pouvons alors calculer dans une phase de prétraitement les valeurs de $D(Y_f(\xi_j))$ pour un nombre fini de ξ_j , et ensuite au cours de la résolution du problème de transport macroscopique, on estime $D(Y_f(t))$ par interpolation à partir des valeurs calculées lors du prétraitement. Comme la suite des Y_f est croissante, il est naturel de la paramétrer par la porosité $\epsilon = |Y_f|/|Y|$, en effet à partir des $Y_f(\xi_j)$, nous pouvons tabuler la porosité :

$$\epsilon(\xi_0) \leq \epsilon(\xi_1) \leq \epsilon(\xi_2) \leq \dots$$

ce qui nous permettra de déterminer les coefficients D , \tilde{D} et K comme illustré sur la figure suivante dans le cas d'une porosité circulaire :

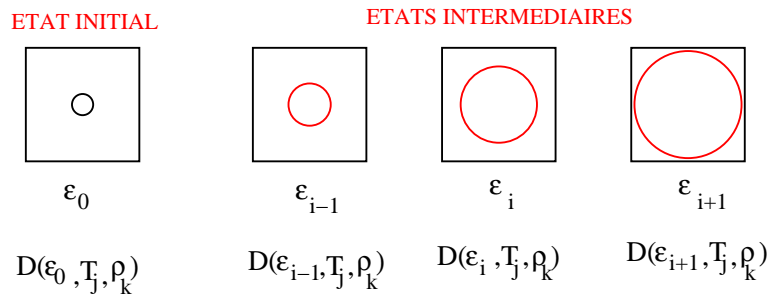


FIG. 5.2 – illustration de l'évolution structurale dans le cas d'une porosité circulaire.

Il existe au moins un cas où l'on peut justifier cette hypothèse. En effet supposons que l'évolution de $Y_f(t)$ peut être décrite par l'évolution de l'interface $\gamma(t)$ et que la vitesse normale d'évolution $W(t)$ de $\gamma(t)$ soit indépendante de la variable y , c'est-à-dire qu'elle est constante au sein d'une cellule élémentaire. En effet, on peut introduire :

$$\frac{d}{dt}\xi(t) = W(t), \quad \xi(0) = 0,\tag{5.79}$$

qui est la distance d'avancement du front à l'instant t et la fonction ϕ définie par :

$$\begin{cases} \phi > 0 & \text{dans le solide,} \\ \phi < 0 & \text{dans le fluide,} \\ \phi = 0 & \text{sur le front (à l'interface).} \end{cases}$$

ϕ est donc solution de l'équation d'Hamilton-Jacobi :

$$\partial_t \phi(t, y) + \vec{W}(t, \vec{x}) |\nabla_y \phi(t, y)| = 0,$$

où \vec{x} représente la variable spatiale microscopique et y la variable spatiale macroscopique, et $\vec{W}(t, \vec{x}) = W_n(t, \vec{x}) \vec{n}$ avec \vec{n} la normale au front.

De plus, on remarque alors immédiatement que

$$\phi(t, y) = \phi^*(\xi(t), y),$$

et donc on remarque que $\partial_t \phi = \partial_\xi \phi^* W$ et $\nabla_y \phi = \nabla_y \phi^*$ et ceci nous amène à l'équation suivante :

$$\partial_\xi \phi^* \vec{W} + \vec{W} |\nabla_y \phi^*(t, y)| = 0.$$

Et donc on obtient :

$$\partial_\xi \phi^* + |\nabla_y \phi^*(t, y)| = 0.$$

On définit alors la famille suivante :

$$\gamma(\xi) = \partial Y_f(\xi) = \{y \in Y, \phi^*(\xi, y) = 0\}.$$

Le lien entre $\gamma(y, x)$ et $\gamma(\xi)$ est alors simplement donné par

$$\gamma(x, t) = \gamma(\xi(t, x)),$$

où ξ est défini par (5.79). On remarque que la valeur de $\xi(t, x)$ dépend de la solution du problème de transport macroscopique alors que la famille $\{Y_f(\xi)\}_\xi$ est une paramétrisation intrinsèque d'évolution de la structure du matériau. Enfin, on remarque aussi qu'il existe une bijection entre ξ et la porosité ϵ . Ce paramètre ξ a la dimension d'une longueur, c'est la longueur du recul (ou de l'avancement) de l'interface $\gamma(t)$ mesurée le long de la normale.

On pourrait faire une hypothèse de même type concernant $Y_{s_1}(t)$ et $Y_{s_2}(t)$. Mais on peut remarquer que si les conductivités thermiques des matériaux S_1 et S_2 sont égales, nous n'avons pas besoin de connaître précisément $Y_{s_1}(t)$ et $Y_{s_2}(t)$ mais seulement $Y_s = Y_{s_1} \cup Y_{s_2} = Y \setminus Y_f$.

Avec cette hypothèse, relativement forte, qui stipule que chaque cellule élémentaire va décrire la même famille de géométries, on a obtenu un modèle de transport avec évolution structurale constitué de trois sous-modèles emboîtés et complètement découplés :

- le modèle de transport *macroscopique* (5.73-5.74-5.75-5.76-5.77) ;
- les problèmes auxiliaires de fermeture *microscopique/macroscopique* (5.45)-(5.46)-(5.47) ;
- le modèle d'évolution structurale *microscopique*.

On a ainsi introduit un cadre mathématique suffisamment riche et souple pour pouvoir être utilisé pour la modélisation de phénomènes complexes tels que la pyrolyse d'un matériau de protection thermique ou le procédé de C.V.I.

En pratique, les calculs s'organisent ainsi : d'abord on calcule la suite de géométries $Y_f(\xi)$ qui ne dépend a priori que du matériau. Ensuite on peut résoudre les problèmes auxiliaires sur chacune des géométries associées et ainsi calculer une table de coefficients de transport effectifs

$$\{D(Y_f(\xi_j), \rho_k, T_l), \tilde{D}(Y_f(\xi_j), \rho_k, T_l), K(Y_f(\xi_j), T_l)\}_{0 \leq j \leq J; 0 \leq k \leq K; 0 \leq l \leq L},$$

ou encore

$$\{D(\epsilon_j, \rho_k, T_l), \tilde{D}(\epsilon_j, \rho_k, T_l), K(\epsilon_j, \rho_k, T_l)\}_{0 \leq j \leq J; 0 \leq k \leq K; 0 \leq l \leq L},$$

qui sera utilisée par le modèle de transport. Enfin, on peut résoudre le problème de transport macroscopique. Cette stratégie de modélisation est représentée synthétiquement par le schéma donné à la figure (5.3) :

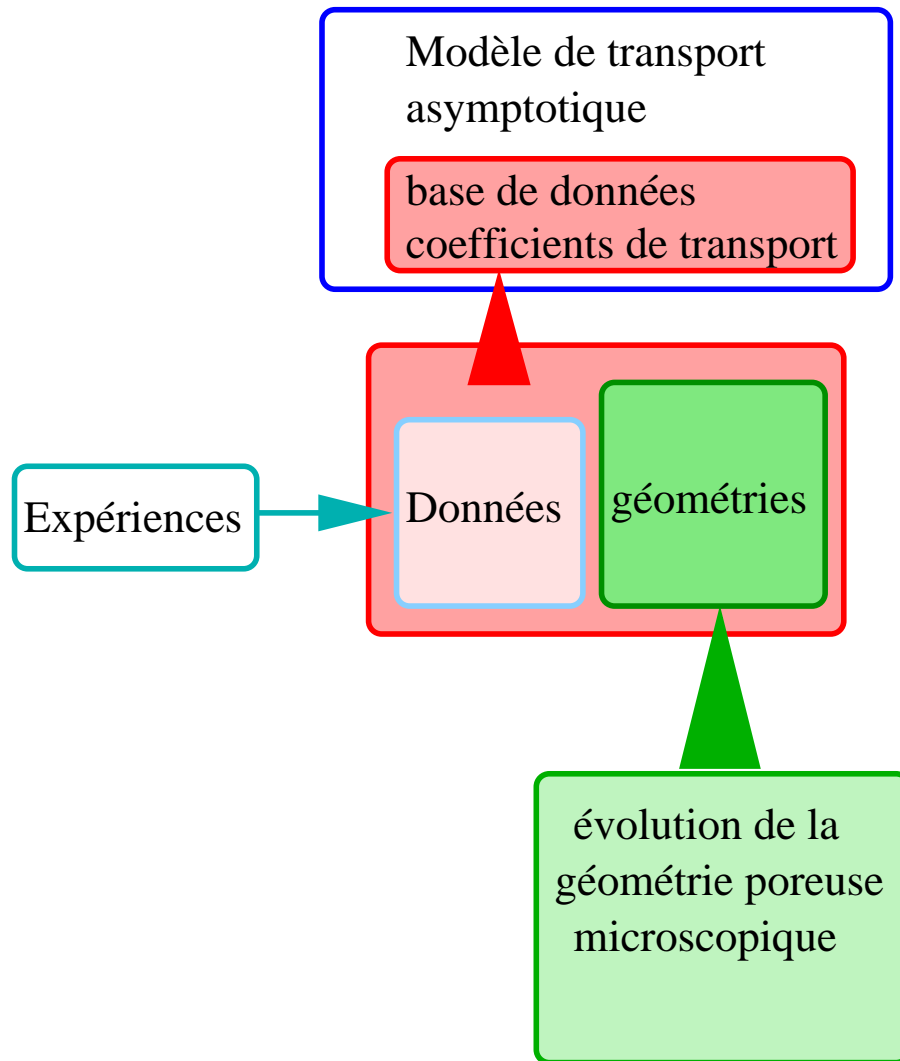


FIG. 5.3 – Stratégie de modélisation

Chapitre 6

Mise en œuvre et application aux TPS

6.1 Introduction

Ce chapitre est présenté en trois parties. La première partie concerne le code de calcul macroscopique (MUPPETT). Nous présenterons le système complet en détaillant le modèle physico-chimique complet puis nous expliquerons ce qu'il a fallu compléter et/ou améliorer dans le cadre de ce travail, notamment les diverses améliorations informatiques que nous avons été amenés à faire avant de passer à la validation. Enfin, nous regarderons l'aspect physique du modèle en définissant une loi de conductivité thermique et une loi d'enthalpie pour permettre une simulation. Dans une deuxième partie, nous nous intéresserons cette fois au code de calcul microscopique des coefficients de transport effectifs et nous présenterons les divers aspects numériques originaux afin d'accélérer le calcul. Enfin, nous présenterons une représentation simplifiée de la géométrie poreuse d'un matériau donné et de son évolution structurale permettant une simulation encore plus réaliste.

6.2 Le code MUPPETT

Afin de simuler la pyrolyse de corps de rentrée, nous avons à notre disposition un logiciel basé sur le système macroscopique présenté précédemment appelé MUPPETT, pour MultiPurpose Project for Engineering Thermal Transfer ([2]). Nous allons donc ici présenter le modèle macroscopique "industriel" prenant en compte une chimie plus complexe afin d'obtenir des simulations valables. Puis une fois défini le modèle macroscopique "complet", nous présenterons les différentes parties du code qui ont été améliorées par nos soins. En particulier l'implication du système à résoudre nécessite un adimensionnement des variables de calcul ainsi qu'un contrôle de la boucle de Newton. Et l'interpolation numérique des coefficients de transport effectif (D , \tilde{D} et K) a été rajoutée au logiciel.

6.2.1 Le modèle physico-chimique

Introduction

Dans un écoulement, la paroi des pores peut subir des modifications de structure à cause des réactions chimiques entre l'écoulement et les matériaux qui la constituent. Ces réactions chimiques sont appelées réactions en phase hétérogène par opposition à celles qui ne passent que dans le fluide qui sont appelées réactions en phase homogène.

Il existe trois types de réactions à la paroi :

- les premières limitent le rôle de la paroi au rôle de catalyseur, elles n'entraînent pas de modification de l'état de la paroi. Les espèces chimiques sont capturées par la paroi (adsorption) où elles se fixent préférentiellement sur des endroits appelés "sites". Ces sites réagissent soit entre eux, soit avec des espèces au voisinage de la paroi et donnent naissance à une nouvelle espèce qui est ensuite relâchée dans l'écoulement (désorption). (Cf [31])
- Dans le deuxième cas, par contre, les réactions de surface dégradent la paroi en injectant dans l'écoulement une partie du matériau qui la constituent. L'oxydation est la source la plus importante de ces phénomènes.
- Dans le troisième cas, sous l'influence du flux de chaleur, les réactions chimiques entraînent aussi une modification de l'état de surface par changement de phase des matériaux constituant la paroi. La sublimation du carbone en est le meilleur exemple. Contrairement aux deux premiers cas, ce phénomène ne fait pas intervenir la notion de site de paroi mais seulement la notion de masse changeant de phase. (Cf [32], [33])

Modélisation des réactions hétérogènes surfaciques

Nous allons considérer ici un écoulement constitué de n_e espèces qui peuvent interagir entre elles, avec n_{sl} sites libres différents sur la paroi. On définit un site libre comme un endroit de la paroi où une particule d'une espèce peut éventuellement venir se fixer.

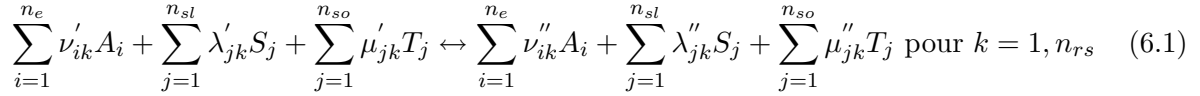
On remarque que suivant le cas, il peut exister des sites spécifiques pour chaque espèce. Dans ce cas, les autres espèces ne peuvent s'y fixer. Il peut aussi arriver qu'un site puisse accueillir une partie, voire la totalité des espèces. Ainsi, à la limite, il peut tout à fait y avoir un seul type de site libre où vont se fixer les espèces. Dans l'autre cas limite, il peut exister autant de types de sites que d'espèces, et chaque espèce ne se fixe que sur un seul type de site libre.

Un site peut donc accueillir plusieurs espèces. Une fois qu'une particule s'est fixée dessus, ce site devient un site occupé. On définit alors n_{so} le nombre de types de sites occupés. n_{so} n'est en général pas égal à n_{sl} le nombre de types de sites libres. En effet, un site libre pouvant être indifférencié, il peut donner naissance à plusieurs types de sites occupés.

L'égalité entre n_{so} et n_{sl} est possible dans le cas limite où il existe un seul type de sites libres et où chaque particule donne naissance à un site occupé du type différent suivant l'espèce auquel elle appartient. Donc, dans le cas où chaque type de sites libres permet à une seule espèce de s'y fixer, nous avons $n_{so} = n_{sl}$ car chaque type de site libre ne donne naissance qu'à un seul type de sites occupés.

Nous pouvons donc maintenant écrire le processus sous la forme d'un schéma réactionnel faisant intervenir n_{rs} réactions hétérogènes. Pour cela on définit A_i qui représente l'espèce i présente dans l'écoulement. S_j est le site libre de type j où peut se fixer une espèce sur la paroi. Et T_j est le site occupé de type j qui possède une particule à lui. Enfin, ν'_{ik} , λ'_{jk} et μ'_{jk} sont les coefficients

stœchiométriques directs relatifs à l'espèce i , au site j et à la réaction k . De même, ν''_{ik} , λ''_{jk} et μ''_{jk} sont les coefficients stœchiométriques directs relatifs à l'espèce i , au site j et à la réaction k . On peut alors écrire le schéma réactionnel :



Soit \dot{m}_i le débit surfacique d'espèces gazeuses. On a d'après ([34]) ($k = 1, n_{rs}$) :

$$\dot{m}_i = \mathcal{M}_i \sum_j (\nu''_{ij} - \nu'_{ij}) \tau_j^s \quad (6.2)$$

Avec :

$$\tau_j^s = \left[K_{f_k} \prod_{i=1}^{n_e} \left(\frac{\rho C_i}{\mathcal{M}_i} \right)^{\nu'_{ik}} \prod_{j=1}^{n_{fs}} \frac{N_j \theta_j^{\lambda'_{jk}}}{\mathcal{N}} \prod_{j=1}^{n_{os}} \frac{N_j \theta_j^{\mu'_{jk}}}{\mathcal{N}} - K_{b_k} \prod_{i=1}^{n_e} \left(\frac{\rho C_i}{\mathcal{M}_i} \right)^{\nu''_{ik}} \prod_{j=1}^{n_{fs}} \frac{N_j \theta_j^{\lambda''_{jk}}}{\mathcal{N}} \prod_{j=1}^{n_{os}} \frac{N_j \theta_j^{\mu''_{jk}}}{\mathcal{N}} \right] \quad (6.3)$$

où \mathcal{N} est le nombre d'Avogadro permettant la passage au niveau microscopique. On note θ_j le taux de couverture (probabilité d'occupation) des sites j et n_j le nombre de sites de type j par unité de surface.

On calcule les constantes de réactions K_{f_k} et K_{b_k} à partir de la température de paroi T . On utilise pour cela les formules classiques d'Arrhenius $K(T) = AT^B \exp(-C/T)$.

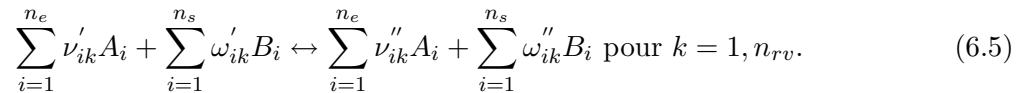
Nous pouvons écrire l'équation de conservation des sites :

$$\mathcal{M}_i \frac{d}{dt} \frac{N_i \theta_i}{\mathcal{N}} = \dot{m}_i \quad (6.4)$$

Modélisation des réactions hétérogènes volumiques

Dans ce paragraphe, nous allons considérer cette fois-ci que l'écoulement est constitué de n_e espèces qui interagissent entre elles et n_s types de matériaux différents.

On écrit alors comme précédemment le processus sous forme d'un schéma réactionnel faisant intervenir n_{rv} réactions hétérogènes. On note alors A_i l'espèce i présente dans l'écoulement et B_i le $i^{\text{ième}}$ matériau constituant le solide. Soient ν'_{ik} et ω'_{jk} les coefficients stœchiométriques directs relatifs à l'espèce ou au matériau i et à la réaction k . On définit de même ν''_{ik} et ω''_{jk} les coefficients stœchiométriques inverses relatifs à l'espèce ou au matériau i et à la réaction k . On obtient alors le schéma réactionnel suivant :



Nous introduisons alors la densité intrinsèque du solide i que nous noterons $\check{\rho}_{is}$ qui est supposée constante et connue. On peut alors définir la masse volumique ρ_{is} du solide i dans la cellule par la formule (5.64) :

$$\rho_{is} = \frac{|Y_i|}{|Y|} \check{\rho}_{is}. \quad (6.6)$$

La porosité ϵ est donnée par la formule (6.7) généralisée ici à un nombre n_s de solides :

$$\sum_{i=1}^{n_s} \epsilon_i + \epsilon = 1. \quad (6.7)$$

Enfin, au niveau macroscopique, on peut définir le bilan de masse τ_k^v dû à la réaction k (en grammes par m^3 de matériau par seconde) par la formule :

$$\tau_k^v = K_{f_k}(T) \prod_{i=1}^{n_e} (\epsilon \rho_{ig})^{\nu'_{ik}} \prod_{i=1}^{n_s} (\rho_{is})^{\omega'_{ik}} - K_{b_k}(T) \prod_{i=1}^{n_e} (\epsilon \rho_{ig})^{\nu''_{ik}} \prod_{i=1}^{n_s} (\rho_{is})^{\omega''_{ik}} \quad (6.8)$$

Et de même que précédemment pour les réactions surfaciques, les constantes de réaction $K_f(T)$ et $K_b(T)$ sont calculées à partir de la température de paroi T en utilisant les formules classiques d'Arrhénius $K(T) = AT^B \exp(-C/T)$.

Le modèle de transport macroscopique

On définit tout d'abord S_v la surface volumique du milieu et \tilde{m}_i la masse sur les sites occupés. On note $e_j(T)$ leur énergie et e_{ig} et e_{is} les énergie internes du gaz et du solide. La porosité est à l'extérieur de la dérivée en temps car la nous avons tenu compte du terme de vitesse de déplacement de l'interface entre les gaz et le solide. L'équation sur l'évolution de la porosité n'apparaît pas car la porosité ϵ se déduit facilement de l'évolution des différentes densités du solide et du gaz grâce à la formule (6.7) :

$$\begin{aligned} \epsilon \partial_t \rho_{ig} - \sum_j \operatorname{div}_x \left(\frac{m_i}{m_j} D_{ij} \nabla_x \rho_{jg} \right) - \operatorname{div}_x (\tilde{D}_i \nabla_x T) \\ - S_v \sum_{k=1}^{nrs} (\nu''_{ik} - \nu'_{ik}) \tau_k^s m_i - \sum_{k=1}^{nrv} (\nu''_{ik} - \nu'_{ik}) \tau_k^v = 0 \end{aligned} \quad (6.9)$$

$$\partial_t \rho_{is} - \sum_{k=1}^{nrv} (\omega''_{ik} - \omega'_{ik}) \tau_k^v = 0 \quad (6.10)$$

$$\text{pour } j = 1, n_{sf} \frac{\partial \theta_j}{\partial t} - \sum_{k=1}^{nrs} (\lambda''_{jk} - \lambda'_{jk}) \tau_k^s = 0 \quad (6.11)$$

$$\text{pour } j = 1, n_{so} \frac{\partial N_j}{\partial t} - \sum_{k=1}^{nrs} (\mu''_{jk} - \mu'_{jk}) \tau_k^s = 0 \quad (6.12)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\sum_i \rho_{is} e_{is}(T) \right) + \epsilon \partial_t \left(\sum_i \rho_{ig} e_{ig}(T) \right) \\ + S_v \left(\sum_j \tilde{m}_j N_j e_j(T) \right) - \sum_i \operatorname{div}_x (\tilde{K}_i \nabla_x \rho_{ig}) - \operatorname{div}_x (K \nabla_x T) = 0. \end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^{n_s} \epsilon_i + \epsilon = 1. \quad (6.13)$$

Ce système est résolu à l'aide d'un solveur de type GMRes. Nous allons maintenant présenter les particularités qu'on lui a apporté afin de le rendre plus rapide et plus robuste.

6.2.2 Mise en œuvre informatique

Maintenant que le modèle est écrit, nous allons nous intéresser à sa mise en œuvre informatique et en particulier à l'implication du système à résoudre qui nécessite un adimensionnement des variables de calcul ainsi qu'un contrôle de la boucle de Newton. Enfin, nous montrerons comment l'interpolation numérique des coefficients de transport effectif (D , \tilde{D} et K) s'effectue.

Le GMRes adimensionné

Afin d'accélérer la vitesse de calcul, il est possible d'impliciter le calcul. Cela nous permet de monter en CFL. Nous laissons par contre l'interpolation des coefficients D , \tilde{D} et K à l'instant n car pour impliciter cette partie il nous faudrait reprogrammer complètement le solveur et le gain de temps ne sera pas extraordinaire car il serait toujours nécessaire d'itérer sur les coefficients. L'implication se fait grâce à un solveur GMRes qui a nécessité un débogage.

L'implicite "brutale" ne nous permet pas de gagner du temps car dès que l'on essaye de monter en CFL (i.e. d'augmenter la valeur du pas de temps), nous sortons du domaine d'admissibilité de la méthode et le calcul diverge. Il est donc nécessaire, après cette phase de débogage du solveur de repenser celui-ci pour éviter de rendre le problème raide.

Nous allons donc procéder à une amélioration non négligeable du GMRes, inutilisable en l'état. Deux améliorations vont être menées : tout d'abord un adimensionnement des variables utilisées par le solveur, puis une méthode de contrôle du Newton pour forcer celui-ci à rester dans son bassin d'attraction.

- *L'adimensionnement*

En effet, en l'état "brut", le GMRes travaille sur les valeurs dimensionnées de U ce qui fait que lors d'une itération $U + \epsilon p$ on traite de la même manière par exemple la masse volumique du gaz (inférieure à 1000) et l'énergie interne du système qui elle, peut prendre des valeurs beaucoup plus importantes et donc nous ne pouvons donc pas prendre un pas de temps Δt plus grand qu'en explicite, sous peine de sortir du domaine d'admissibilité. Il faut donc repenser le GMRes en travaillant cette fois sur les quantités adimensionnées. On définit alors Q_{ref} qui est calculé par $Q_{ref}(i) = \max_{l,m}(U_{l,m}(i))$ puis le GMRes travaille non plus sur $U_{l,m}$ mais sur $Q_{l,m}(i) = \frac{U_{l,m}(i)}{Q_{ref}(i)}$.

- *Le contrôle du Newton*

Le solveur implicite disponible dans le code MUPPETT est composé d'une boucle de Newton appelant un GMRes. Cette boucle de Newton nécessite d'être contrôlée au niveau de l'incrément du vecteur solution (U ou Q en variable adimensionnée). L'incrément $U = U + d$ où d est le vecteur incrément calculé par le GMRes va s'écrire $U = U + \frac{1}{\theta}d$ où le paramètre θ va permettre de contrôler le calcul. Celui ci va être initialisé à 1. Mais si le vecteur d nous fournit une solution négative (i.e si $Q + \frac{1}{\theta}d < 0$) ou si on sort du domaine d'admissibilité fixé par nos soins (par un paramètre ϵ_{var}) (i.e si $\frac{1}{\theta}|d| > \epsilon_{var}(|Q(i)| + \epsilon)$) alors on diminuera la valeur de θ , par la loi puissance $\theta = 2^k$ pour laquelle on limitera les valeurs de k . le GMRes se réécrit alors :

$$Q_{ref}(i) = \max_{l,m}(U_{l,m}(i))$$

$$Q = U/Q_{ref}$$

Boucle NEWTON

$$Q_0 = Q$$

$$Q = Q * Q_{ref}$$

$$Q_0 = Q_0 * Q_{ref}$$

$$Q_{ref} = \max_{l,m}(Q_{O_{l,m}}(i))$$

$$r_0 = \tilde{F}(Q_0)$$

$$r_0 = r_0/Q_{ref}$$

$$Q = Q/Q_{ref}$$

$$Q_0 = Q_0/Q_{ref}$$

$$\beta_0 = \sqrt{(r_0, r_0)}$$

⇒ Test de sortie sur β_0

$$e_1 = \beta_0$$

$$v_1 = -r_0/\beta_0$$

Boucle KRYLOV : Pour $k = 1, \max_{krylov}$ faire

$$Nk = k$$

$$v_{k+1} = \frac{\tilde{F}(Q_0 - \epsilon v_k) - \tilde{F}(Q_0)}{\epsilon}$$

Gram-Schmidt

Pour $l = 1, k$ faire

$$\beta_l = (v_{k+1}, v_l)$$

$$v_{k+1} = v_{k+1} - \beta_l v_l$$

Fin faire

$$Norme = \sqrt{(v_{k+1}, v_k)}$$

si ($Norme \neq 0$) alors $v_{k+1} = v_{k+1}/Norme$

Pour $l = 1, k$ faire

$$h_{l,k} = \beta_l$$

Fin faire

$$h_{k+1,k} = Norme$$

Algorithme Q-R

Pour $l = 1, k - 1$ faire

$$a_1 = h_{l,k} ; a_2 = h_{l+1,k}$$

$$h_{l,k} = c_l a_1 + s_l a_2$$

$$h_{l+1,k} = -s_l a_1 + c_l a_2$$

Fin faire

$$Norme = \sqrt{h_{k,k}^2 + h_{k+1,k}^2}$$

Si ($Norme \neq 0$) alors

$$c_k = h_{k,k}/Norme$$

$$s_k = h_{k+1,k}/Norme$$

sinon

$$c_k = 0$$

$$s_k = 0$$

Fin si

$$h_{k,k} = Norme$$

$$h_{k+1,k} = 0$$

$$e_{k+1} = -s_k e_k$$

$$e_k = c_k e_k$$

⇒ Test de sortie sur e_{k+1}

Fin Boucle KRYLOV

Remontée

```

pour  $k = Nk, 1$  par pas de  $-1$  faire
   $\beta_k = e_k$ 
  pour  $l = k + 1, Nk$  faire
     $\beta_k = \beta_k - h_{k,l}e_l$ 
  Fin faire
   $\beta_k = \beta_k/h_{k,k}$ 
Fin faire
 $d = 0$ 
Pour  $k = 1, Nk$  faire
   $d = d + \beta_k u_k$ 
Fin faire
Pour  $k = 1, k_{max}$  faire
  Si  $((Q + \frac{1}{\theta}d < 0)$  ou  $(\frac{1}{\theta}|d| > \epsilon_{var}(|Q(i)| + \epsilon))$  faire
     $\theta = 2^k$ 
  Fin si
Fin faire
 $Q = Q + \frac{1}{\theta}d$ 
Fin pour Boucle NEWTON
 $U = Q * Q_{ref}$ 

```

De plus le calcul de $F(\tilde{Q})$ se fait avec des variables dimensionnées, donc la routine s'écrit :

```

routine  $F(\tilde{Q})$  sortie  $FQ$ 
 $U = Q * Q_{ref}$ 
 $FU = F(U)$ 
 $FQ = FU/Q_{ref}$ 

```

L'interpolation P1 des coefficients D \tilde{D}

Dans le code MUPPETT, les coefficients D , \tilde{D} et K dépendent de T . Pour les besoins physiques, il a fallu étendre leur dépendance à ρ et ϵ la porosité. Puis il a fallu implémenter une interpolation P1 de ces coefficients $D(T, \rho, \epsilon)$, $\tilde{D}(T, \rho, \epsilon)$ et $K(T, \epsilon)$. On cherche ici à interpoler $D(\rho, T, \epsilon)$ grâce à la tabulation fournie par le code de calcul des coefficients de transport. Nous allons utiliser une interpolation P1 sur l'espace à trois dimensions défini par le triplet (ρ, T, ϵ) . Soient $\rho_{i-1}, \rho_i, T_{i-1}, T_i, \epsilon_{i-1}, \epsilon_i$ tels que :

$$\rho \in [\rho_{i-1}, \rho_i] \quad ; \quad T \in [T_{i-1}, T_i] \quad ; \quad \epsilon \in [\epsilon_{i-1}, \epsilon_i]$$

On a donc à interpoler dans cet espace 3D un point compris dans un cube délimité par les 8 points (8 sommets du cube) $[\rho_l, T_m, \epsilon_n]$ comme le montre la figure (6.1) :

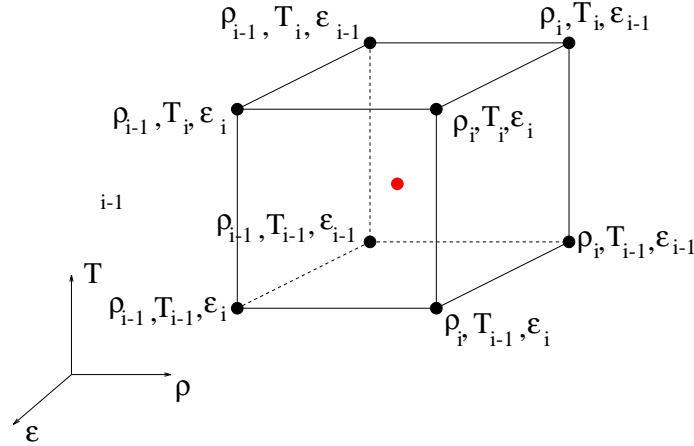


FIG. 6.1 – Illustration de l'interpolation sur 8 points.

On construit alors 8 polynômes correspondants aux 8 sommets du cube tels que :

$$\begin{aligned} P_{l,m,n}(\rho, T, \epsilon) &= D(\rho_l, T_m, \epsilon_n) && \text{au point } (\rho_l, T_m, \epsilon_n) \\ P_{l,m,n}(\rho, T, \epsilon) &= 0 && \text{sur les 7 autres sommets} \end{aligned} \quad (6.14)$$

Ce qui donne par exemple sur le sommet $(\rho_{i-1}, T_{i-1}, \epsilon_{i-1})$:

$$P_{i-1,i-1,i-1}(\rho, T, \epsilon) = \frac{(\rho - \rho_i)(T - T_i)(\epsilon - \epsilon_i)}{(\rho_{i-1} - \rho_i)(T_{i-1} - T_i)(\epsilon_{i-1} - \epsilon_i)} D(\rho_{i-1}, T_{i-1}, \epsilon_{i-1})$$

Enfin, l'interpolation est obtenue par la formule suivante :

$$D(\rho, T, \epsilon) = \sum_{l=i-1,i; m=i-1,i; n=i-1,i} P_{l,m,n}(\rho, T, \epsilon)$$

6.2.3 Aspect physique

Par rapport au chapitre 5, la situation physique réelle est bien plus complexe. Le but de ce paragraphe est de déterminer une conductivité thermique apparente et une loi d'enthalpie pour les inclure en paramètre de cas test (paragraphes 7.2.7 et 7.2.8) du logiciel MUPPETT. En effet un matériau réel est extrêmement complexe à étudier. Au minimum, il nous faut prendre en considération un matériau constitué de fibres et de résine, donnant du coke lors de sa pyrolyse. Y_{resine} et Y_{coke} les volumes occupés respectivement par la résine et le coke étant inaccessibles à l'expérience et à la modélisation, il nous faut établir un modèle de matériau ayant les propriétés thermiques moyennées sur les différents constituants (résine, fibre, coke). Ce qui nous permet d'avoir un matériau thermique très simple par rapport à la réalité. Nous appellerons ce matériau le "Matériau Test". Nous allons nous baser sur différentes expériences pour déterminer des paramètres convenables (ayant le bon ordre de grandeur).

La conductivité thermique

Le but de ce paragraphe est de calculer la conductivité apparente du matériau en cours de pyrolyse grâce à des interpolations de valeurs de conductivité provenant d'expériences. De

plus nous allons considérer un matériau constitué de fibres et de résine. Les fibres, qui, pour en simplifier l'étude, n'interviennent pas dans les réactions chimiques, jouent un rôle important dont nous tiendrons compte dans le calcul de la conductivité thermique apparente.

Nous allons tout d'abord interpoler les valeurs de conductivité thermique du coke et de la résine :

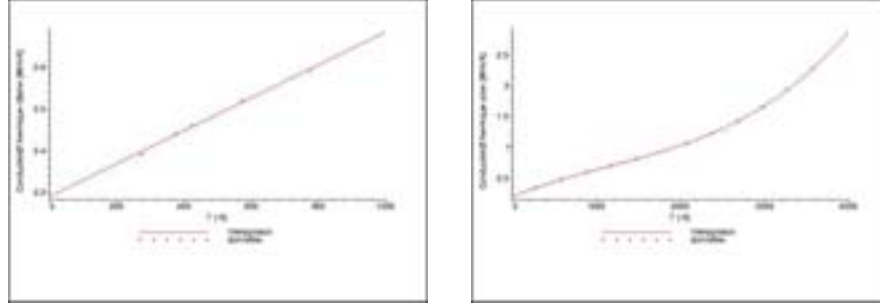


FIG. 6.2 – Evolution de la conductivité thermique de la résine (gauche) et du coke (droite) en fonction de la température dans le “Matériau Test”

Comme nous pouvons le voir sur les courbes 6.2, nous avons choisi d'interpoler ces données par des polynômes de degrés différents suivant ce qui correspond le mieux aux données, dans la plage de température intéressante pour nos calculs, ce qui nous amène à

$$\lambda_{resine} = a_{resine}^0 + a_{resine}^1 T, \quad (6.15)$$

$$\lambda_{coke} = a_{coke}^0 + a_{coke}^1 T + a_{coke}^2 T^2 + a_{coke}^3 T^3. \quad (6.16)$$

Or nous avons besoin de la conductivité équivalente du matériau constitué de la résine et du coke. Il va donc falloir prendre en compte l'avancement de la réaction que nous notons ξ . Soit la $\rho_{initial}$ la masse volumique de la résine à l'instant initial : $\rho_{initial} = 1270 \text{ kg/m}^3$. On obtient donc la formule suivante :

$$\xi(t) = 1 - \frac{\rho(t)}{\rho_{initial}},$$

et donc, on calcule alors la conductivité équivalente $\lambda_{resine+coke}$ supposée suivre une loi de mélange :

$$\lambda_{resine+coke}(T, t) = (1 - \xi(t))\lambda_{resine}(T) + \xi(t)\lambda_{coke}(T).$$

Nous interpolons maintenant les valeurs de conductivité thermique correspondant aux fibres par un polynôme de degrés 3 (voir figure 6.3) :

$$\lambda_{fibre} = a_{fibre}^0 + a_{fibre}^1 T + a_{fibre}^2 T^2 + a_{fibre}^3 T^3,$$

ce qui nous permet de calculer une conductivité thermique “série” et “parallèle” aux fibres en prenant un taux de fibre κ , ce qui nous amène aux formules suivantes :

$$\lambda_{serie} = \kappa\lambda_{fibre}(T) + (1 - \kappa)\lambda_{resine+coke}(T, t, n), \quad (6.17)$$

$$\lambda_{parallele} = \frac{\lambda_{resine+coke}(T, t)\lambda_{fibre}(T)}{\kappa\lambda_{resine+coke}(T, t) + (1 - \kappa)\lambda_{fibre}(T)}. \quad (6.18)$$

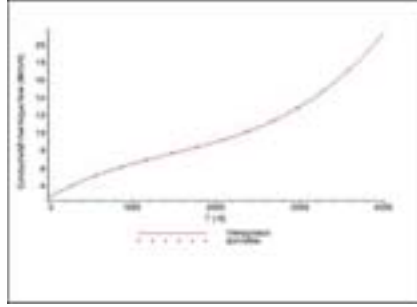


FIG. 6.3 – Evolution de la conductivité thermique des fibres en fonction de la température dans le “Matériau Test”

Or, pour avoir une approximation plus précise de la conductivité parallèle aux fibres et orthogonale aux fibres, nous devons apporter une légère corrections grâce à deux valeurs correctives ξ_{PARA} et ξ_{ORTHO} qui sont obtenues grâce à des expériences en laboratoire. Nos conductivités respectivement parallèles aux fibres et orthogonales aux fibres sont données par les formules suivantes :

$$\lambda_{PARA}(T, t) = \xi_{PARA}\lambda_{serie}(T, t) + (1 - \xi_{PARA})\lambda_{parallele}(T, t), \quad (6.19)$$

$$\lambda_{ORTHO}(T, t) = \xi_{ORTHO}\lambda_{serie}(T, t) + (1 - \xi_{ORTHO})\lambda_{parallele}(T, t). \quad (6.20)$$

On compare alors nos calculs avec des valeurs expérimentales publiée dans ([10]). Évidemment, la vitesse de chauffe, n’est pas du tout la même et il ne faut voir dans ces comparaisons qu’une vérification de l’ordre de grandeur.

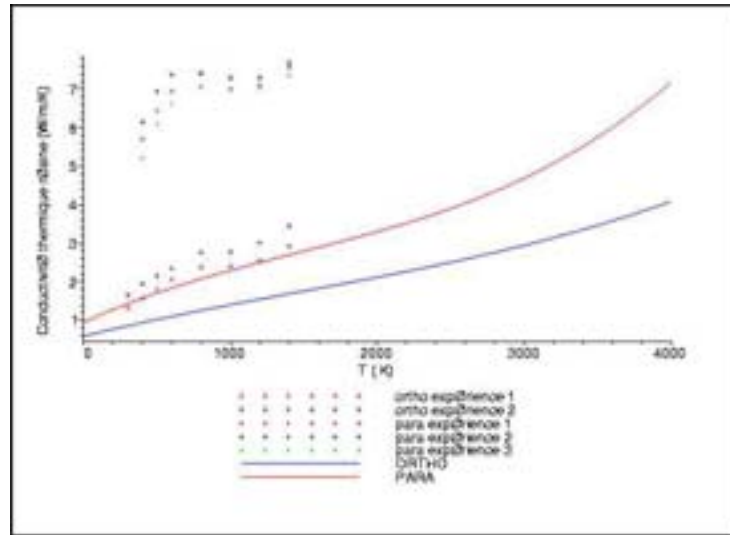


FIG. 6.4 – Comparaison de la conductivité thermique “ORTHO” et “PARA” avec des valeurs expérimentales obtenues dans ([10]).

Les vitesses de chauffe expérimentales étant bien inférieures à celle choisie pour notre calcul, on

remarque que les conductivités thermiques expérimentales montent bien plus rapidement que celles fournies par notre modèle. Par contre, les valeurs sont du même ordre de grandeur. Enfin, pour tenir compte de l'orientation des fibres, on modifie la conductivité thermique obtenue par la formule (6.21) afin d'obtenir la conductivité thermique CLINO :

$$\lambda_{CLINO}(T, t) = \lambda_{ORTHO}(T, t)\cos(\alpha)^2 + \lambda_{PARA}(T, t) * \sin(\alpha)^2, \quad (6.21)$$

ce qui nous donne la courbe suivante :

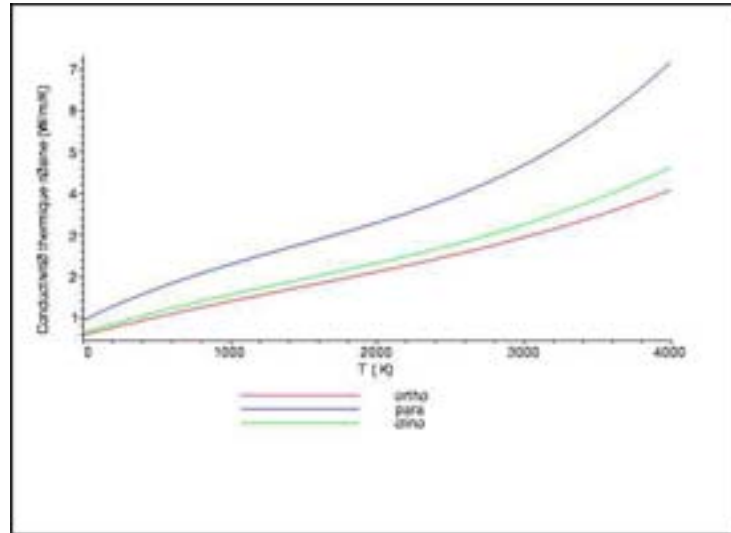


FIG. 6.5 – Courbes de conductivité thermique “ORTHO”, “PARA” et “CLINO” fournies par notre modèle.

L'enthalpie

Dans ce paragraphe nous allons nous intéresser à l'enthalpie de formation des diverses espèces chimiques. Nous procéderons comme pour la conductivité thermique, c'est-à-dire que nous allons chercher à interpoler les valeurs expérimentales de la chaleur spécifique figée à pression constante. Ces résultats ne seront pas testés dans une simulation dans le cadre de ces travaux. Ils pourront être paramétrés ultérieurement pour améliorer les résultats du code.

Pour la résine et le coke, on obtient les courbes 6.6

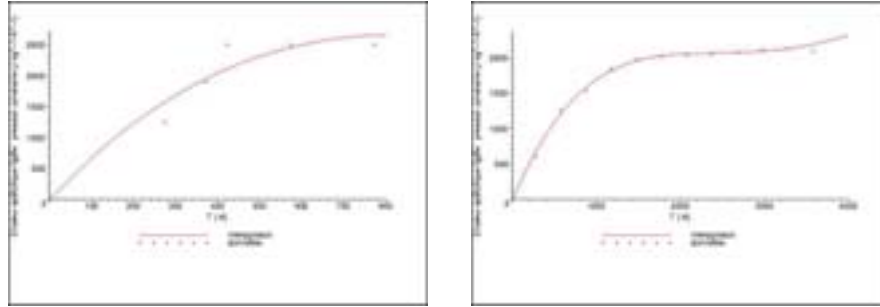


FIG. 6.6 – Evolution de la chaleur spécifique figée à pression constante de la résine (gauche) et du coke (droite) en fonction de la température.

Ce qui nous donne comme polynômes :

$$Cp_{resine} = c_{resine}^0 + c_{resine}^1 T + c_{resine}^2 T^2 + c_{resine}^3 T^3, \quad (6.22)$$

$$Cp_{coke} = c_{coke}^0 + c_{coke}^1 T + c_{coke}^2 T^2 + c_{coke}^3 T^3 + c_{coke}^4 T^4 \quad (6.23)$$

De la même manière que pour la conductivité thermique, on sait que :

$$Cp_{resine+coke}(T, t) = \xi(t)Cp_{coke}(T) + (1 - \xi(t))Cp_{resine}(T).$$

Ce qui nous amène à :

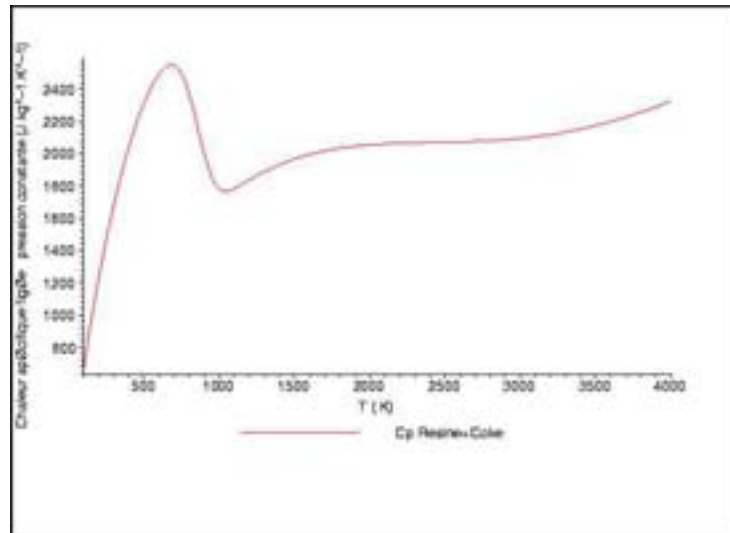


FIG. 6.7 – Evolution de la chaleur spécifique figée à pression constante de la résine+coke au cours de la pyrolyse en fonction de la température.

Puis, on cherche la chaleur spécifique figée à pression constante du matériau. Celle-ci va nous être fournie par la formule suivante, en supposant que la chaleur spécifique figée à pression constante des fibres est la même que celle du coke, tous deux constitués en majeure partie de carbone :

$$Cp_{matériau} = \frac{V_{resine+coke}}{V_{total}} Cp_{resine+coke} + \frac{V_{fibre}}{V_{total}} Cp_{fibre},$$

où $V_{resine+coke}$ est le volume occupé par la résine et le coke, V_{fibre} est le volume occupé par les fibres et V_{total} est le volume occupé par le matériau. Or :

$$\begin{aligned}\frac{V_{resine+coke}}{V_{total}} &= \frac{V_{resine}}{V_{total}} + \frac{V_{coke}}{V_{total}}, \\ &= \frac{\rho_{resine}}{\check{\rho}_{resine}} + \frac{\rho_{coke}}{\check{\rho}_{coke}}, \\ &= (1 - \xi) + \frac{\rho_{coke}}{\check{\rho}_{coke}}.\end{aligned}\quad (6.24)$$

Or, on sait que l'évolution de la masse volumique de coke est gérée par la relation suivante :

$$\partial_t \rho_{coke} = -(\omega''_{coke} - \omega'_{coke}) \partial_t \rho_{resine},$$

et donc en intégrant, on obtient

$$\begin{aligned}\rho_{resine}(t) &= (\omega''_{coke} - \omega'_{coke})(\rho_{resine}(0) - \rho_{resine}(t)), \\ &= (\omega''_{coke} - \omega'_{coke})\left(\frac{V_{resine}(0)}{V_{total}} \check{\rho}_{resine} - \rho_{resine}(t)\right), \\ &= (\omega''_{coke} - \omega'_{coke})((1 - \kappa) \check{\rho}_{resine} - \rho_{resine}(t)).\end{aligned}\quad (6.25)$$

Ce qui nous donne

$$\begin{aligned}\frac{V_{resine+coke}}{V_{total}} &= (1 - \xi) + (\omega''_{coke} - \omega'_{coke})\left(\frac{(1 - \kappa) \check{\rho}_{resine}}{\check{\rho}_{coke}} - \frac{\rho_{resine}(t)}{\check{\rho}_{coke}}\right), \\ &= (1 - \xi) + \frac{(\omega''_{coke} - \omega'_{coke})(1 - \kappa) \check{\rho}_{resine}}{\check{\rho}_{coke}} - \frac{(\omega''_{coke} - \omega'_{coke}) \rho_{resine}(t)}{\check{\rho}_{coke}}, \\ &= (1 - \xi) + \frac{(\omega''_{coke} - \omega'_{coke})(1 - \kappa) \check{\rho}_{resine}}{\check{\rho}_{coke}} - \frac{(\omega''_{coke} - \omega'_{coke})(1 - \xi) \check{\rho}_{resine}}{\check{\rho}_{coke}}, \\ &= (1 - \xi) + \frac{(\omega''_{coke} - \omega'_{coke}) \check{\rho}_{resine}}{\check{\rho}_{coke}} (\xi - \kappa).\end{aligned}\quad (6.26)$$

De plus, on a $\frac{V_{fibre}}{V_{total}} = \kappa$ donc finalement :

$$Cp_{matériau} = \left((1 - \xi) + \frac{(\omega''_{coke} - \omega'_{coke}) \check{\rho}_{resine}}{\check{\rho}_{coke}} (\xi - \kappa)\right) Cp_{resine+coke} + \kappa Cp_{fibre}.$$

6.3 Le code HAMMLET

6.3.1 Introduction

Un code de calcul des coefficients de transport, HAMMLET, a été implémenté par nos soins au laboratoire de Mathématiques Appliquées de Bordeaux (MAB) en Fortran 90. Nous présentons donc cette implémentation et en particulier les différentes optimisations que nous avons été amenés à faire. Dans un premier temps nous allons montrer la façon dont les matrices du système linéaire (4.6) ont été implémentées. Puis nous nous intéresserons à la prise en compte des conditions aux limites de transport (4.11 - 4.11) et asymptotiques (4.117 - 4.118 -

4.141). Enfin, nous présenterons la méthode numérique utilisée pour résoudre le système, et en particulier son préconditionnement. Enfin, nous montrerons qu'afin d'accélérer nos calculs nous avons implémenté des conditions aux limites de symétrie sur le bord de la cellule de calcul pour permettre de limiter la taille de la géométrie à considérer.

6.3.2 Implémentation et optimisation

Les matrices non stockées

Le système (4.6) pour ce qui est du système de transport, ou (4.113) pour ce qui est du système "asymptotic preserving" nécessite l'implémentation de produits matrice vecteur avec les matrices A_p et S . Ces matrices étant toujours les mêmes quel que soit le régime considéré (i.e. la valeur de ρ) et quelle que soit la valeur de T , celles-ci pourraient être stockées. Mais dans un souci de place mémoire et de rapidité de calcul, nous ne stockerons pas les matrices. Seul le produit matrice vecteur sera implémenté en utilisant pour cela directement les valeurs $A_{i,j}$ sans les stocker dans une structure informatique (type array) ce qui nous permet de gagner en place mais surtout en vitesse de calcul.

Prise en compte des conditions aux limites

Pour le système (4.113), il nous faut prendre en compte deux types de conditions aux limites. Les conditions de transport, qui sont des conditions de réflexion de Maxwell à la paroi (4.11 - 4.11) et les conditions aux limites pour la partie du schéma "Asymptotic Preserving" (4.117 - 4.118 - 4.141). Ces conditions seront donc prises en compte en deux fois, c'est-à-dire que lors du calcul de $\epsilon^2 \sum_{p=1}^3 A_p D_{y_p} \vec{b}_i$ nous calculerons :

$$\epsilon^2 \sum_{p=1}^3 A_p D_{y_p} \vec{b}_i^T,$$

où nous aurons pris soin de définir \vec{b}_i^T comme étant \vec{b}_i avec les conditions aux limites de réflexion de Maxwell. Et lors de la même itération, lors du calcul de $(1 - \epsilon^2) \sum_{p=1}^3 A_p \tilde{D}_{y_p} \vec{b}_i$, nous calculerons en fait :

$$(1 - \epsilon^2) \sum_{p=1}^3 A_p D_{y_p} \vec{b}_i^{AP},$$

où \vec{b}_i^{AP} sera le vecteur \vec{b}_i prenant en compte les conditions aux limites nécessaires au schéma "asymptotic preserving" (4.117 - 4.118 - 4.141).

Pour ce qui est de la condition (4.141) portant sur les b^τ , nous l'implémentons en chargeant $b_{d_j-1}^{\tau 12}$ de l'itération $n+1$ avec les valeurs de $b_{f_j}^{V1}$, $b_{d_j}^{V1}$, et $b_{f_j}^{\tau 12}$ disponibles. C'est-à-dire les valeurs calculées à l'itération n . Ce qui nous amène à considérer la formule :

$$\left(b_{d_j-1}^{\tau 12} \right)^{n+1} = - \left(\frac{2\tau}{\Delta y} (b_{f_j}^{V1} - b_{d_j}^{V1}) - b_{f_j}^{\tau 12} \right)^n \quad (6.27)$$

De cette manière, il nous est possible de prendre en compte les deux types de conditions aux limites. Ce procédé est nécessaire en particulier quand le régime tend vers un régime de Darcy sans être complètement fluide.

Préconditionneur

Le système hyperbolique symétrique (4.6) est résolu à l'aide d'une méthode GMRes (Generalized Minimum RESidual).

Pour accélérer la convergence, nous utiliserons la méthode du GMRes préconditionné à gauche (Cf. [29]). Le préconditionneur sera en fait une itération de Gauss-Seidel.

Le calcul des coefficients demande la résolution du système (4.6) que nous rappelons ici :

$$-\frac{1}{\tau}S\vec{b}_i + \sum_{p=1}^3 A_p \partial_{y_p} \vec{b}_i = \vec{g}_i. \quad (6.28)$$

Notre préconditionneur est donc basé sur une itération de Gauss-Seidel sur la matrice :

$$M_{GS} = -\frac{1}{\tau}S + \sum_{p=1}^3 A_p \partial_{y_p}. \quad (6.29)$$

Nous avons implémenté deux préconditionneurs différents basés sur la même matrice M_{GS} . En effet, nous avons à notre disposition un préconditionneur d'ordre 1, où les dérivées sont décentrées et un préconditionneur d'ordre 2, où les dérivées sont centrées. Nous étudierons sur un exemple dans le chapitre 7 l'apport de l'un et de l'autre suivant le régime considéré.

Les conditions aux limites de symétrie

Quand notre cellule élémentaire représentant notre milieu poreux présente des plans de symétrie, il est utile de pouvoir, grâce à l'implémentation de conditions aux limites adéquates, ne résoudre notre problème auxiliaire dans une seule partie de notre cellule, divisant donc le nombre de mailles par 2. Mais attention, nous ne pouvons pas appliquer de conditions aux limites de symétrie dans la direction de l'écoulement car ceci reviendrait à écrire une condition de paroi, ce qui est absurde.

D'après le modèle asymptotique et son implémentation numérique, le calcul des coefficients de transport D (et \tilde{D}) se fait par intégration en vitesse et en espace d'un vecteur $\vec{b}_{l,m,n}$ (ou $\vec{a}_{l,m,n}$) de taille N où N est le nombre de fonctions de base utilisées par la méthode de Galerkin. Et pour le coefficient K , il provient de la même manière d'un coefficient $\gamma_{l,m,n}$.

Il va donc falloir implémenter des conditions aux limites de symétrie sur les variables $\gamma_{l,m,n}$ et $\vec{b}_{l,m,n}$ (ou $\vec{a}_{l,m,n}$).

On considère une cellule élémentaire de calcul discrétisée sur 3 dimensions de $l \in [0, l_f + 1]$, $m \in [0, m_f + 1]$, $n \in [0, n_f + 1]$, où les faces d'indices 0, $l_f + 1$, $m_f + 1$ et $n_f + 1$ sont des faces composées de mailles fictives où il convient d'écrire les conditions de symétrie.

$\gamma_{l,m,n}$ étant un scalaire, on écrit simplement :

$$\begin{aligned} \gamma_{0,m,n} &= \gamma_{1,m,n} & ; & & \gamma_{l_f+1,m,n} &= \gamma_{l_f,m,n}; \\ \gamma_{l,0,n} &= \gamma_{l,1,n} & ; & & \gamma_{l,m_f+1,n} &= \gamma_{l,m_f,n}; \\ \gamma_{l,m,0} &= \gamma_{l,m,1} & ; & & \gamma_{l,m,n_f+1} &= \gamma_{l,m,n_f}. \end{aligned}$$

L'implémentation des conditions aux limites de symétrie sera la même pour le calcul de D que pour \tilde{D} . On se propose alors de présenter les calculs sur $\vec{b}_{l,m,n}$.

La condition de symétrie dépend de la parité de la vitesse en v_i , on va donc poser :

$$\begin{aligned}\vec{b}_{0,m,n} &= N_1 \vec{b}_{1,m,n} & ; & \quad \vec{b}_{l_f+1,m,n} = N_1 \vec{b}_{l_f,m,n}; \\ \vec{b}_{l,0,n} &= N_2 \vec{b}_{l,1,n} & ; & \quad \vec{b}_{l,m_f+1,n} = N_2 \vec{b}_{l,m_f,n}; \\ \vec{b}_{l,m,0} &= N_3 \vec{b}_{l,m,1} & ; & \quad \vec{b}_{l,m,n_f+1} = N_3 \vec{b}_{l,m,n_f}.\end{aligned}$$

où N_i est une matrice diagonale définie par :

$$\begin{aligned}N_i &= -1 \text{ si le moment } b_{l,m,n}^i \text{ est impair en } v_i, \\ &= 1 \text{ si le moment } b_{l,m,n}^i \text{ est pair en } v_i.\end{aligned}$$

De cette manière, il nous est possible de choisir parmi deux types de conditions aux limites à appliquer sur les bords d'une cellule élémentaire : des conditions de type périodique ou des conditions de symétrie.

Maillage adapté

L'idée suivante est de réaliser un maillage à pas variables : le maillage reste conforme mais nous avons la possibilité d'avoir des dx_i dy_i et dz_i différents.

6.4 Représentation simplifiée de la géométrie et son évolution

La représentation réaliste d'un matériau réel et de son évolution structurale est un problème très complexe qui dépasse le cadre de ce travail et des travaux sont en cours à ce sujet au LCTS. Nous allons donc proposer ici une représentation géométrique simplifiée de ce milieu très complexe qui peut être utile pour des calculs exploratoires et/ou pour valider le code. Nous nous intéressons à un composite carbone-résine constitué d'un tissu de fibres de carbone de type ex-rayonne et d'une matrice phénolique chargée (Cf [10] pp. 7,8). On modélisera celui-ci après fissuration, c'est-à-dire que nous considérerons le matériau à une température initiale suffisamment élevée pour qu'il y ait déjà à l'intérieur de celui-ci l'apparition de fissures.

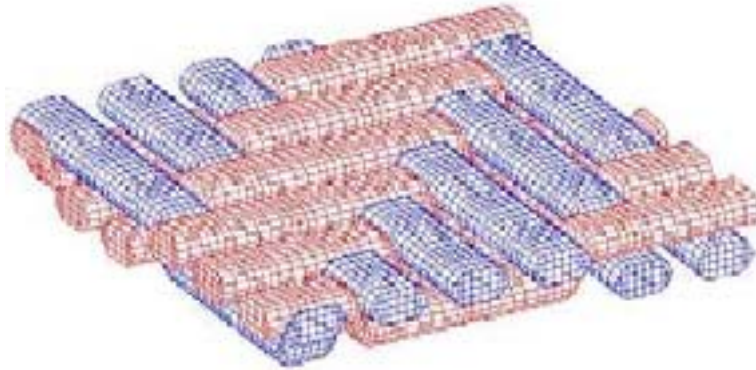


FIG. 6.8 – Tissu de fibres de type ex-rayonne.

Deux étapes seront nécessaires à cette modélisation. Dans un premier temps nous proposerons une représentation du milieu en termes de topologie des pores puis nous dimensionnerons cette

géométrie en nous recalant sur les expériences menées dans [10].

Dans ce paragraphe, nous allons proposer une géométrie modèle que nous dimensionnerons par la suite. Nous voulons prendre en compte ici deux types de porosité mises en évidence explicitement dans les travaux de Virginie Ducamp [10] : la porosité liée à la fracturation du matériau et la microporosité liée à l'apparition de microtubes.

- La fracturation

Sous l'effet de la chaleur, le matériau va se fissurer et nous allons voir apparaître des fissures de taille d'une centaine de micromètres dans les torons de fibres aux interfaces fibre-matrice, puis en s'élargissant, elles se prolongeront dans les zones de résine. En effet, d'après les clichés pris au microscope optique, pour une température de $T = 400^\circ C$ on voit ([10] p.37 2.7 a) :

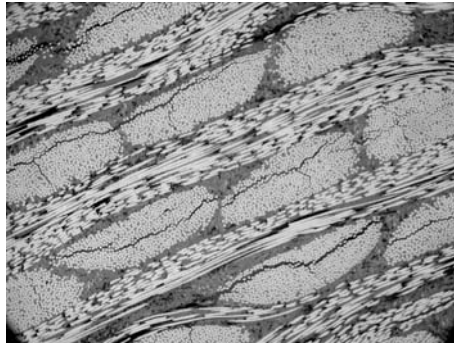


FIG. 6.9 – Cliché au microscope optique du matériau à $T = 400^\circ C$.

Grâce au cliché, on peut donc représenter le matériau fracturé comme suit :

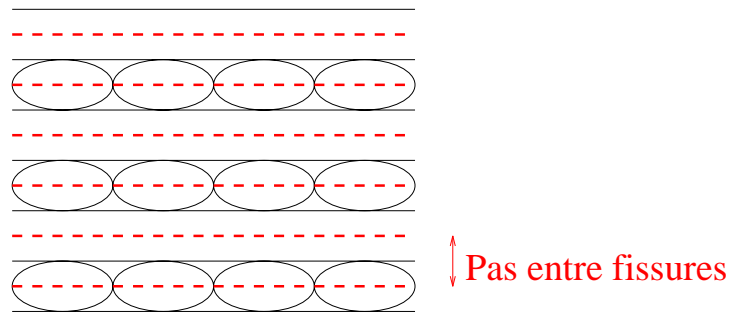


FIG. 6.10 – Le matériau à $T = 400^\circ C$.

Or les fractures (en pointillé) ne sont pas de taille identique partout. En effet, ces failles deviennent très fines quand on regarde entre deux torons (dans la résine) (Cf [10] p. 37) et donc si l'on zoome sur la figure 6.10, on arrive au schéma suivant :

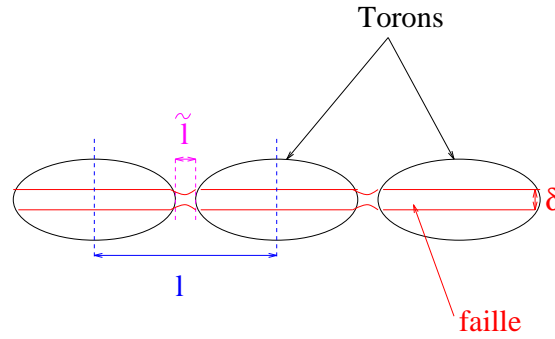
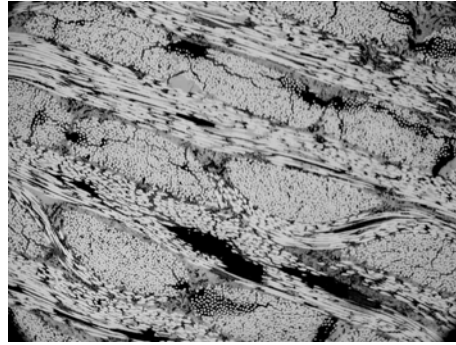


FIG. 6.11 – La faille à 400°C.

- La microporosité

Lors de la pyrolyse du matériau, on mesure par porosimétrie des microporosités qui apparaissent sous forme de microtubes reliant deux fissures et qui deviennent visibles au microscope optique sur les expériences menées dans [10] à 600°C.

FIG. 6.12 – Cliché au microscope optique du matériau à $T = 600^\circ\text{C}$.

Ces microtubes sont très nombreux et de très petite taille par rapport aux fracturations (de l'ordre du micromètre). Nous tiendrons compte de cette microporosité sur notre géométrie idéalisée en ajoutant des microtubes à nos failles. Ces microtubes seront, par choix, pris perpendiculaires aux failles. Ces microtubes se trouvent au niveau de l'interface fibre-matrice ou sont générés dans la matrice de résine lors de sa transformation en coke (Cf [10] pp. 37,38,41,42). On construit une géométrie idéalisée qui comporte une fissure de taille variable le long de la cellule pour tenir compte du rétrécissement de la faille entre deux torons. Nous plaçons aussi des microtubes perpendiculaires à cette fissure, qui seront présents dès 400°C, (mais leur taille sera négligeable en termes de porosité et de perméabilité, leur présence dès le début du processus est due au fait qu'il nous est impossible de savoir par avance à quel moment ces microtubes apparaissent). On arrive alors à une géométrie idéalisée que nous dimensionnerons correctement en nous recalant sur les mesures de porosité et de perméabilité faites dans [10] (fig. 6.13).

Remarque : cette géométrie idéalisée présente un défaut : la faille qui scinde la cellule élémentaire en deux empêche toute conduction thermique dans la direction parallèle aux tubes ($K_{dir. tubes} = 0$) dans le cas du modèle proposé, c'est-à-dire pour un faible couplage thermique.

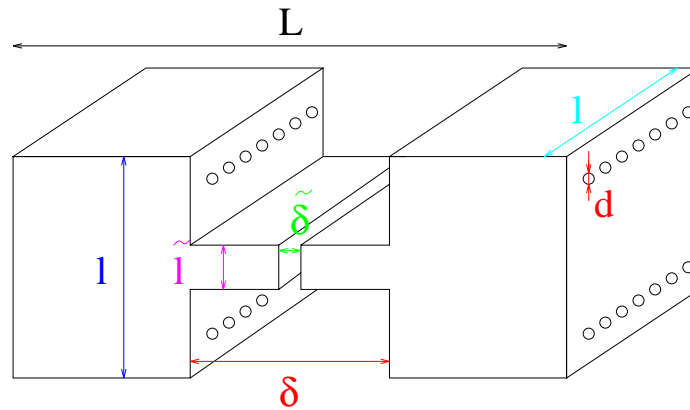


FIG. 6.13 – La géométrie idéalisée.

- Le pas entre fissures

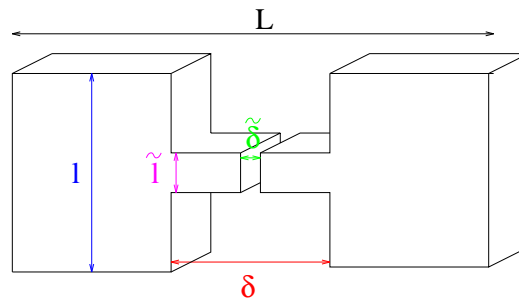
D'après les clichés ([10] p.37 2.7 a), schématisés sur la figure 6.10, on mesure un pas entre fissures noté L .

- Les mesures sur les clichés

Si l'on zoome sur la fissure (figure 6.12), on remarque que l'épaisseur de faille est bien plus petite dans la résine que dans les torons, et donc grâce aux clichés ([10] p.37), on mesure alors l , \tilde{l} ainsi que δ .

- Le modèle de faille

Afin de modéliser le matériau à 400°C , on choisit de prendre comme modèle géométrique celui représenté par la figure 6.13, mais où on néglige les microtubes qui à 400°C sont extrêmement fins :

FIG. 6.14 – Modèle de faille à 400°C .

D'après les calculs détaillés en annexe, pour déterminer la longueur $\tilde{\delta}$, on peut utiliser la formule suivante :

$$\tilde{\delta} = (12LB)^{\frac{1}{3}}. \quad (6.30)$$

Or d'après ([10] p.65), à $T = 400^\circ\text{C}$, nous avons une valeur de B qui nous amène à la valeur $\tilde{\delta}$. On peut maintenant comparer la porosité de notre matériau modèle par rapport aux mesures

réalisées sur le matériau réel. Soit ϵ la porosité, alors :

$$\begin{aligned}\epsilon &= \frac{V_{fluide}}{V_{cellule}}, \\ &= \frac{\delta(l-l) + \delta l}{Ll},\end{aligned}$$

ce qui donne avec nos mesures et nos calculs une porosité ϵ qui est comparable à la valeur retenue dans ([10] p 43) par porosimétrie au mercure.

On constate que les microtubes sont visibles sur les clichés pris à une température de $600^\circ C$ (et plus) et ils sont dans la direction supposée perpendiculaire à la faille. Le but de ce paragraphe est de déterminer le nombre n et le diamètre d de microtubes à prendre en compte. On cherche des valeurs compatibles pour un calcul, i.e. on souhaite prendre d assez grand : acceptable pour le pas de discrétisation.

Le microtube étant supposé perpendiculaire à la faille, les mesures nécessaires à notre étude seront celles faites en orientation PARA.

Ici, à $600^\circ C$, les failles sont présentes, mais nous allons prendre en compte uniquement le microtube, ce qui nous permet d'être en 2D et comme nous cherchons un ordre de grandeur, l'effet de la faille peut être négligé.

D'après les calculs menés en annexe, la perméabilité d'un microtube de diamètre d sur une cellule de section $S_{cellule}$ un carré de coté l est donné par la formule :

$$B_n(d) = \frac{n\mu\pi d^2}{4\rho RT_0 l^2} D_{hammlet}(d). \quad (6.31)$$

D'après ([10]), nous avons la valeur de la perméabilité dans l'orientation PARA et à $600^\circ C$ et nous allons chercher d et n pour obtenir une perméabilité proche de la mesure. Tout d'abord, grâce à notre code de calcul des coefficients de transfert, nous traçons $D_{hammlet}$ en fonction de d pour une température $T = 400K$ et $\rho = 100kg/m^3$ (pour bien se placer en régime fluide). Le cas est lancé en purement diffus, avec le schéma "Asymptotic Preserving", la base aux 13 moments et un maillage spatial constitué de 30 mailles sur le diamètre du microtube. Grâce à l'expression (B.15), on obtient la courbe donnée à la figure (6.15) donnant B_n en fonction de d pour différentes valeurs de n :

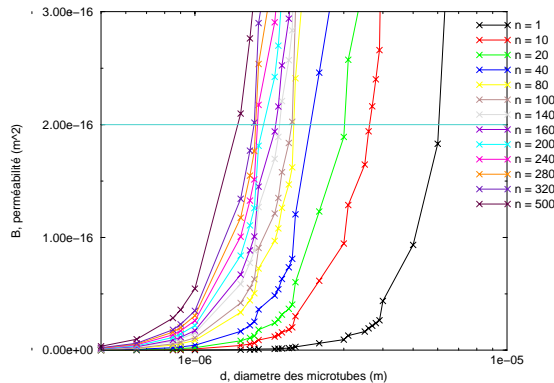


FIG. 6.15 – Perméabilité en fonction de d pour $n = 1, 10, \dots, 140, \dots, 240, \dots, 500$.

Il nous faut alors choisir un couple (n, d) qui soit un compromis entre la réalité physique (n grand et un couple qui donne une perméabilité correcte) et la difficulté numérique qui impose des diamètres de pores d suffisamment grands pour être maillés sans peine. On va donc se baser sur la formule (B.15) fournie en annexe et obtenir la formule donnant n en fonction de d pour avoir une perméabilité $B_{PARA,600^\circ C} = 2 \cdot 10^{-16} m^2$:

$$n(d) = \frac{4\rho RT_0 l^2 B_{PARA,600^\circ C}}{\mu\pi d^2 D_{code}(d)}. \quad (6.32)$$

Ce qui nous amène à la courbe suivante :

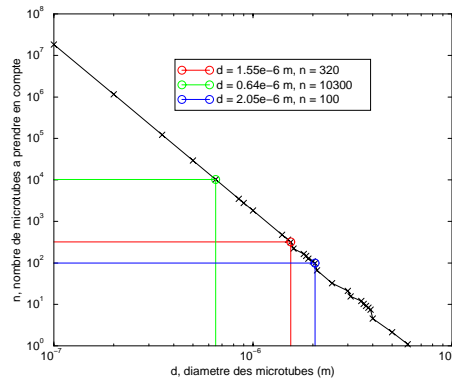


FIG. 6.16 – Nombre de microtubes en fonction de leur diamètre pour une perméabilité de $2 \cdot 10^{-16} m^2$.

On doit donc choisir un couple de points (d, n) qui appartient à cette courbe. Pour faire notre choix, nous allons d'abord étudier les microtubes à $400^\circ C$. A partir de là nous définirons le couple le mieux adapté au problème.

Dans l'orientation ORTHO (axe des faille) à $600^\circ C$, grâce à la mesure de la perméabilité et grâce à l'expression (B.6) détaillée en annexe, on en déduit une approximation de $\tilde{\delta}$ lors de l'apparition de microtubes, en supposant toujours que la faille de plus petite épaisseur est prépondérante dans la valeur de perméabilité. Il nous reste encore à déterminer \tilde{l} et δ lors de l'apparition des microtubes.

Nous allons maintenant déterminer \tilde{l} et δ lors de l'apparition des microtubes, c'est-à-dire à $T = 600^\circ C$. Ensuite nous validerons complètement la géométrie par un calcul de porosité. Soit t_0 le temps à $T = 400^\circ C$ et t_1 le temps à $T = 600^\circ C$. On utilise alors les indices $.0$ et $.1$ correspondants respectivement à $T = 400^\circ C$ (supposé faille seule) et $T = 600^\circ C$ (supposé apparition de microtubes). Si l'on suppose que l'avancement des réactions est le même en tout point de la cellule, comme le montre le schéma 2D suivant (6.17) :

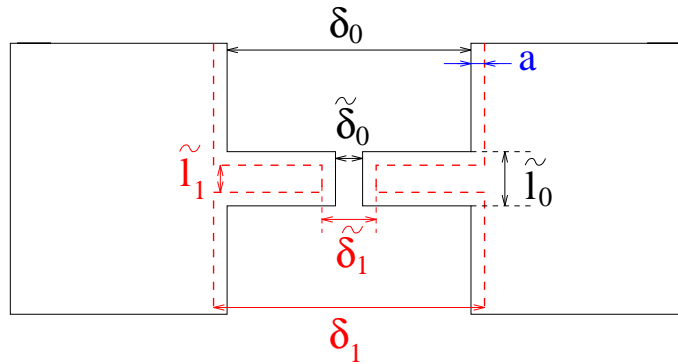


FIG. 6.17 – Avancement des réactions.

Soit a l'avancement de la réaction, alors on a $a = \frac{1}{2}(\tilde{\delta}_1 - \tilde{\delta}_0)$. Et on en déduit donc \tilde{l}_1 et δ_1 : On peut maintenant remonter à la taille des microtubes à l'instant t_0 que l'on avait en première approximation considérés comme inexistantes (car beaucoup trop petits).

Il nous faut donc trouver un couple (n_{choix}, d_{600}) qui donne une perméabilité proche de la valeur donnée dans ([10]) et dont le couple $(n_{choix}, d_{400}) = (n_{choix}, d_{600} - 2a)$ nous donne une perméabilité proche de celle fournie à $400K$ dans ([10]). Après avoir étudié la question, nous sommes arrivés à définir nombre n de microtubes à prendre en compte.

Notre géométrie est donc totalement paramétrée : toutes les longueurs caractéristiques sont calculées en adéquation avec les mesures réalisées dans [10].

Chapitre 7

Tests numériques et validations

Dans ce chapitre, nous allons présenter des résultats numériques fournis premièrement par notre code de calcul des coefficients de transport apparent, et deuxièmement par le modèle asymptotique de transport. Grâce à ces différents tests numériques nous allons pouvoir :

- valider les différents codes par rapport à des résultats numériques de référence ou des résultats expérimentaux,
- interpréter d’un point de vue physique les résultats des simulations obtenus par nos modèles.

Ce chapitre va donc s’articuler sur deux grands paragraphes. Dans un premier paragraphe, nous montrerons les résultats obtenus par le code HAMMLET : nous effectuerons des comparaisons 1D et 2D avec des résultats de la littérature afin de valider le calcul des coefficients de transport apparent. Puis nous présenterons des résultats originaux mettant en évidence l’effet tensoriel des différents phénomènes de transport, en particulier celui de la transpiration thermique, ce qui est quelque chose de nouveau.

Dans un second paragraphe, nous validerons le code MUPPETT en réalisant des tests de plus en plus complexes. Nous commencerons par un transport de masse sans chimie et sans évolution structurale pour arriver à des résultats numériques qualitatifs sur le modèle complet (i.e. avec évolution structurale et chimie).

7.1 Validation du calcul de D et \tilde{D} par HAMMLET

7.1.1 Le cas 1D d’écoulement entre deux plaques parallèles

Nous considérons une cellule élémentaire constituée de deux plaques parallèles comme le montre la figure 7.1.

En vue des conditions aux limites périodiques, cette géométrie peut être vue comme un problème purement 1D comme le montre le schéma 7.2. Et nous comparons nos résultats avec ceux donnés dans ([35]) (avec l’opérateur de collision de Boltzmann linéarisé) et dans ([36]) (avec l’opérateur BGK linéarisé) qui sont obtenus par solution directe des problèmes cinétiques auxiliaires.

Nous remarquons préalablement que ce problème 1D a un comportement singulier en régime de Knudsen. En effet, nous pouvons calculer la solution exacte du problème auxiliaire (P_3) pour $Kn \rightarrow +\infty$ qui est en $\frac{1}{v_2}$ et donc l’intégrale qui définit D diverge.

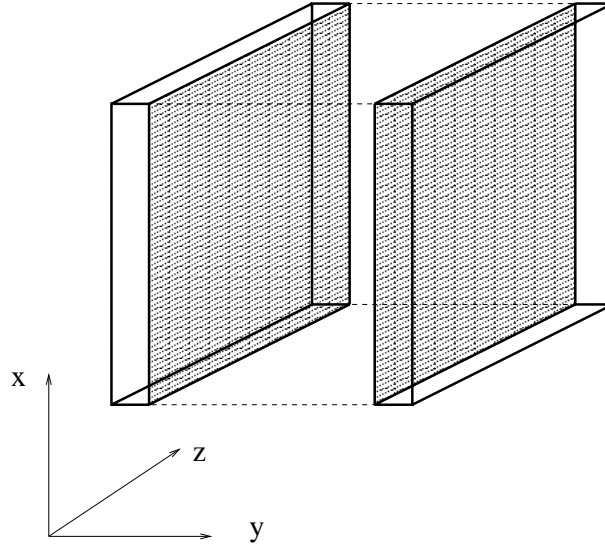


FIG. 7.1 – La cellule élémentaire constituée de deux plaques parallèles.

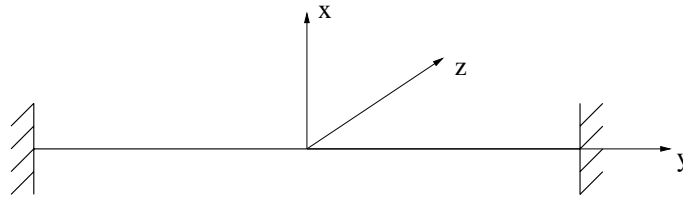


FIG. 7.2 – Deux plaques parallèles en 1D.

Nos coefficients (D, \tilde{D}) sont reliés aux coefficients (M_P, M_T) de [35] par les formules suivantes

$$D = -\sqrt{2RT_0}d^2 M_P, \quad (7.1)$$

$$\tilde{D} = \left(\frac{\rho D}{T_0} - \frac{\rho\sqrt{2RT_0}d^2}{T_0} M_T \right), \quad (7.2)$$

où d est la distance entre les deux plaques parallèles.

Les figures 7.3 et 7.4 montrent le coefficient D fonction de la masse volumique ρ pour $T = 400 \text{ K}$. Pour ρ plus grand que 10^{-6} toutes les méthodes sont en accord. On peut donc en conclure que notre approche est satisfaisante dans le régime transitionnel. La méthode de Galerkin avec la base aux 13 éléments montre un minimum sur D qui semble être très proche du minimum donné par la solution directe mais la courbe augmente trop rapidement pour de petites valeurs de ρ . La méthode de Galerkin avec la base aux 21 éléments (4.17) ne permet pas de voir un minimum. Comme l'hypothèse d'horizon fini n'est pas vérifiée, quand $Kn \rightarrow 0$ alors $D \rightarrow \infty$ et donc nous sommes face à une singularité. Ce problème est donc difficile à résoudre au voisinage du régime

raréfié. Sur cette configuration, même la base aux 21 moments n'arrive pas à traduire cette singularité. De plus, nous pouvons noter que même la résolution directe du modèle cinétique a des difficultés.

Des conclusions similaires peuvent être faites sur les courbes 7.5 et 7.7 : on a un bon accord entre la méthode de Galerkin et les méthodes directes pour des valeurs de ρ supérieures à 10^{-7}kg.m^{-3} .

Le ratio $\frac{\tilde{D}}{D\rho}$ est présenté sur les courbes 7.8 et 7.9. Comme nous l'avons remarqué sur les précédentes figures, nous avons un bon accord dans le régime transitionnel, mais la méthode de Galerkin n'est pas très précise pour de petites valeurs de ρ . Finalement, sur les courbes 7.10 et 7.11 nous pouvons voir que pour ce problème 1D, l'utilisation de l'opérateur BGK ou de l'opérateur ES-BGK semble donner de très petites différences sur les coefficients D et \tilde{D} . Pourtant ces faibles différences sont bien plus significatives sur le ratio $\frac{\tilde{D}}{D\rho}$ que nous montre la figure 7.24.

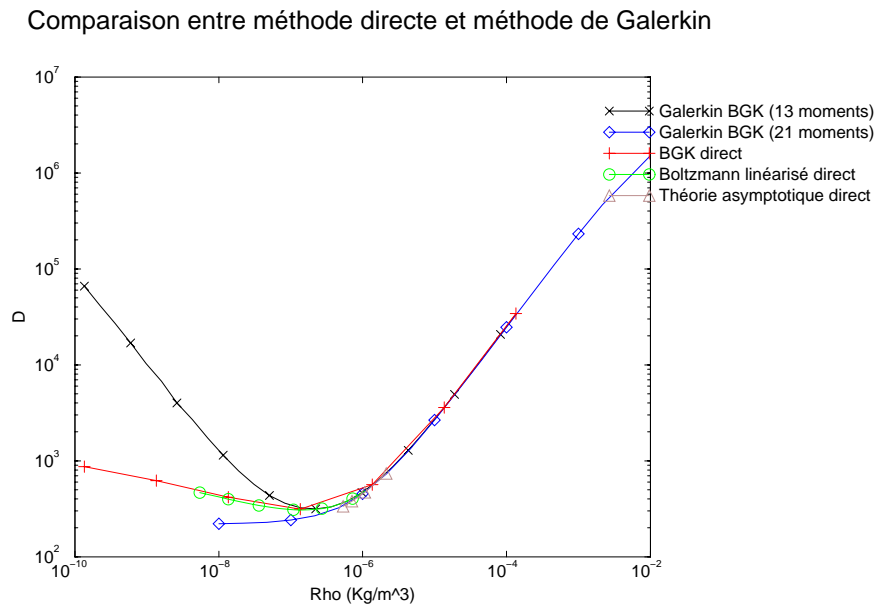
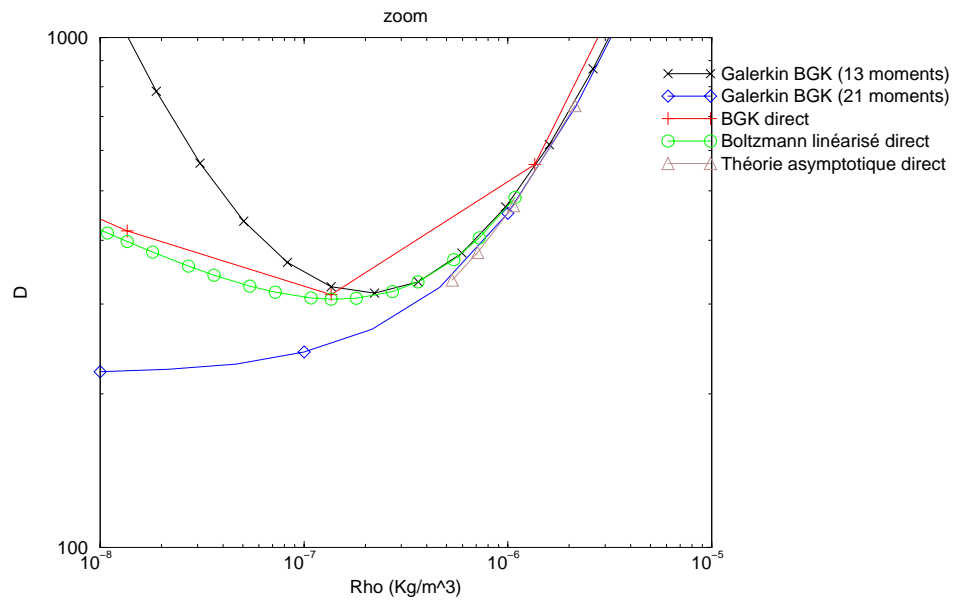
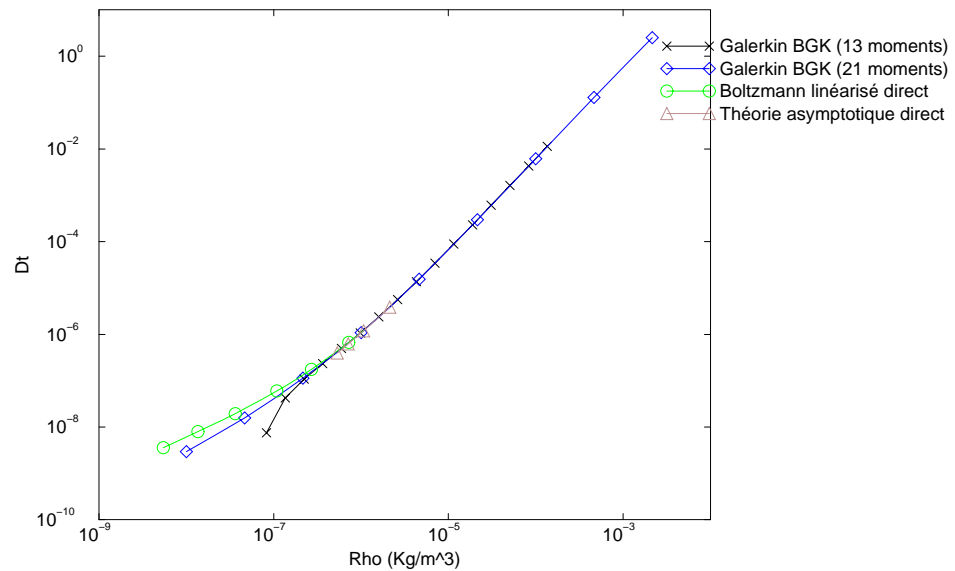


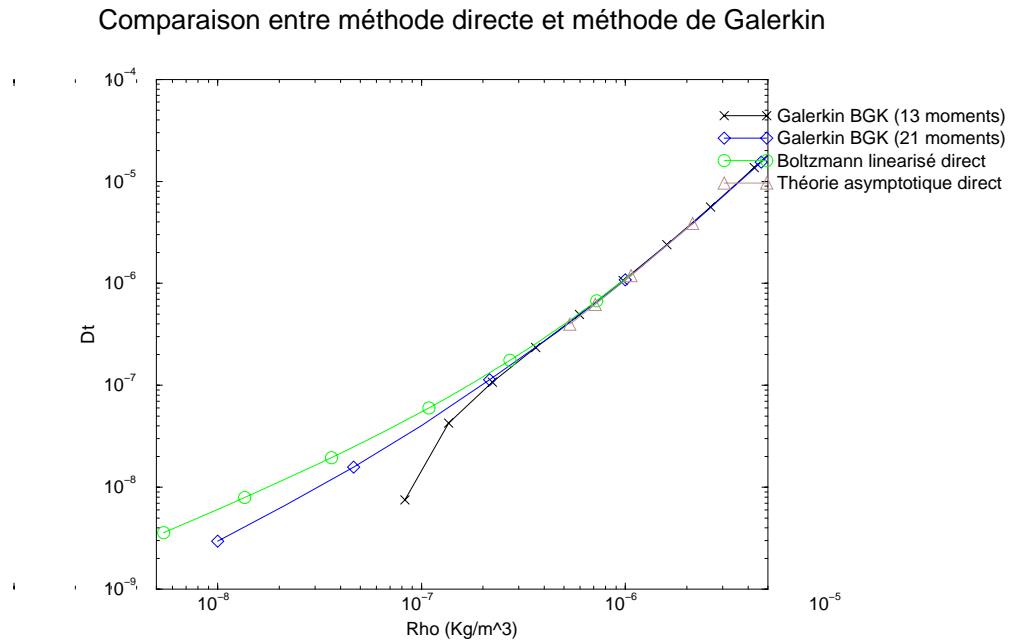
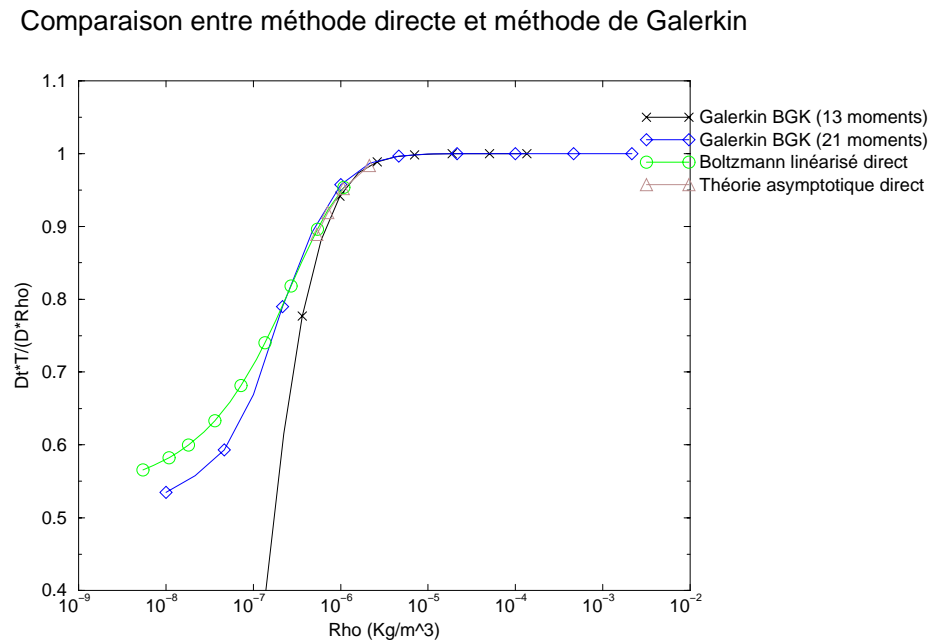
FIG. 7.3 – D : Comparaison entre méthode directe et méthode de Galerkin.

Comparaison entre méthode directe et méthode de Galerkin

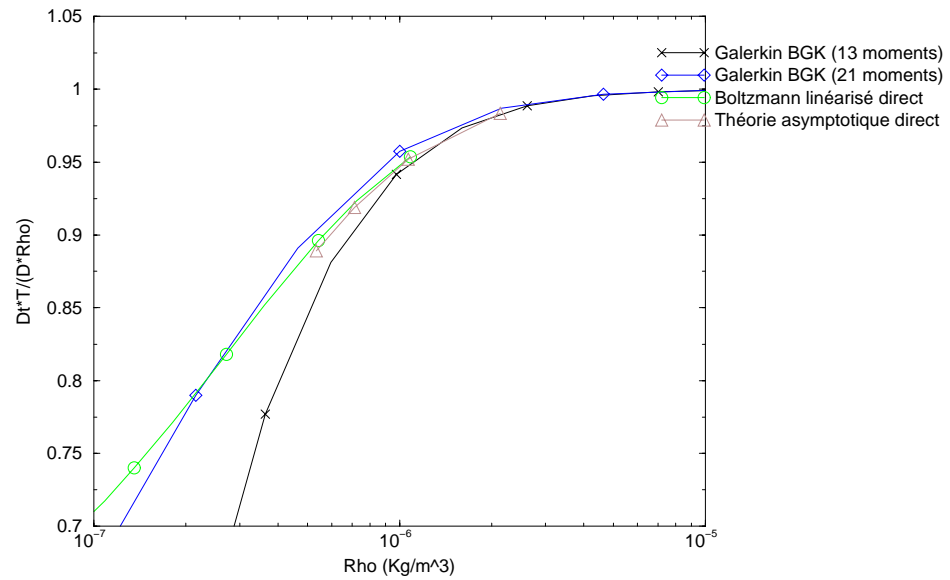
FIG. 7.4 – D : Comparaison entre méthode directe et méthode de Galerkin (Zoom).

Comparaison entre méthode directe et méthode de Galerkin

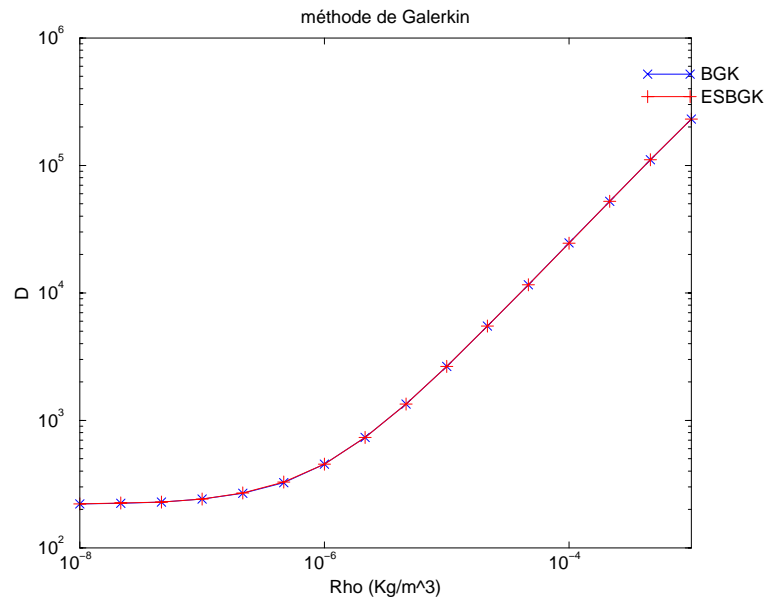
FIG. 7.5 – \tilde{D} : Comparaison entre méthode directe et méthode de Galerkin.

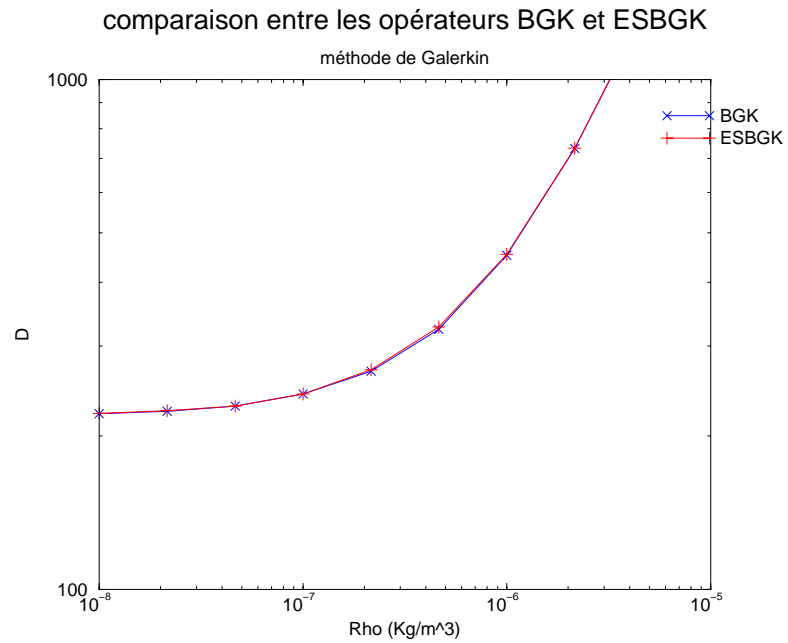
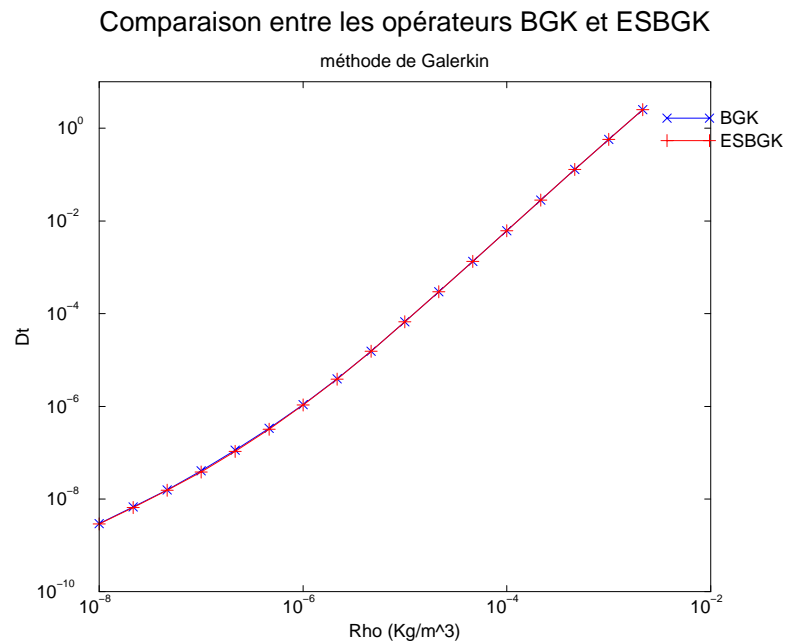
FIG. 7.6 – \tilde{D} : Comparaison entre méthode directe et méthode de Galerkin (Zoom).FIG. 7.7 – $\frac{\tilde{D}T}{D\rho}$: Comparaison entre méthode directe et méthode de Galerkin.

Comparaison entre méthode directe et méthode de Galerkin

FIG. 7.8 – $\frac{\tilde{D}T}{D\rho}$: Comparaison entre méthode directe et méthode de Galerkin (Zoom).

comparaison entre les opérateurs BGK et ESBGK

FIG. 7.9 – D : Comparaison entre les opérateurs BGK et ES-BGK.

FIG. 7.10 – D : Comparaison entre les opérateurs BGK et ES-BGK (zoom).FIG. 7.11 – \tilde{D} : Comparaison entre les opérateurs BGK et ES-BGK.

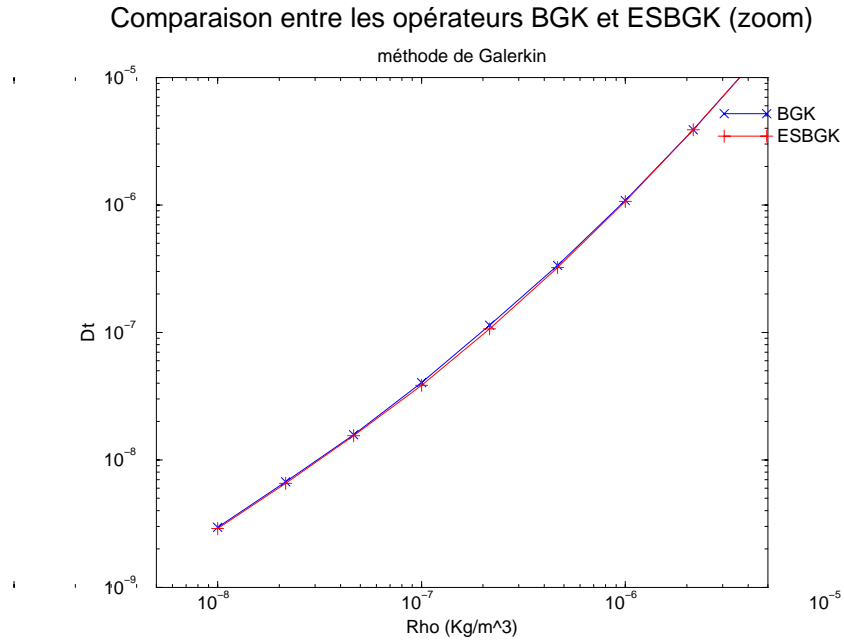


FIG. 7.12 – \tilde{D} : Comparaison entre les opérateurs BGK et ES-BGK (zoom).

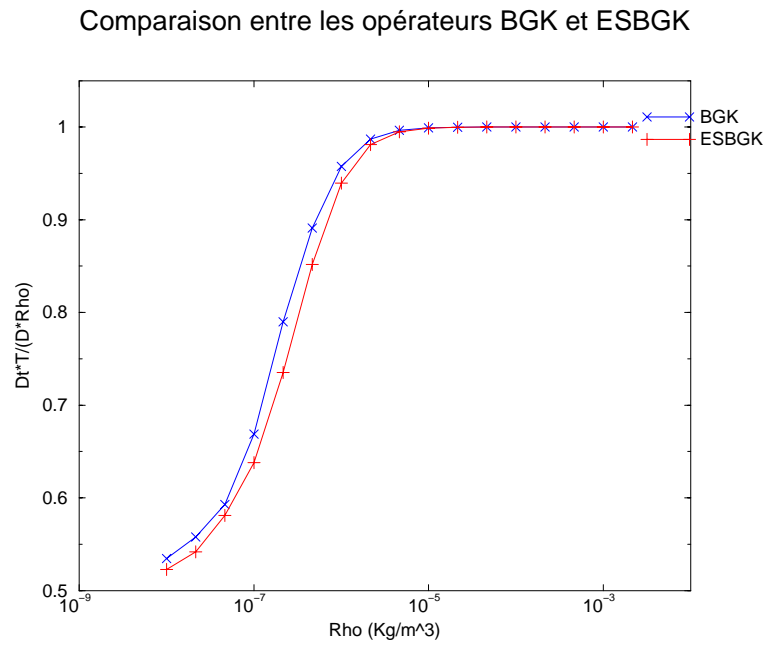


FIG. 7.13 – $\frac{\tilde{D}T}{D\rho}$: Comparaison entre les opérateurs BGK et ES-BGK.

7.1.2 Le tube à section rectangulaire

Dans ce paragraphe, nous allons calculer les coefficients D et \tilde{D} dans un pore de section rectangulaire de longueur $0.2\text{mm} \times 0.4\text{mm}$ avec 20×40 mailles. Nous allons comparer nos résultats avec les résultats de [37] calculés grâce une théorie asymptotique qui permet aux auteurs de capter le début du régime transitionnel. Nous comparons les résultats obtenus d'une part par la méthode de Galerkin avec la base à 21 éléments et les opérateurs de collision de type BGK et ES-BGK et d'autre part par une résolution directe du problème auxiliaire avec l'opérateur de collision de type BGK. Tous nos résultats seront présentés sous une température de gaz de 400K .

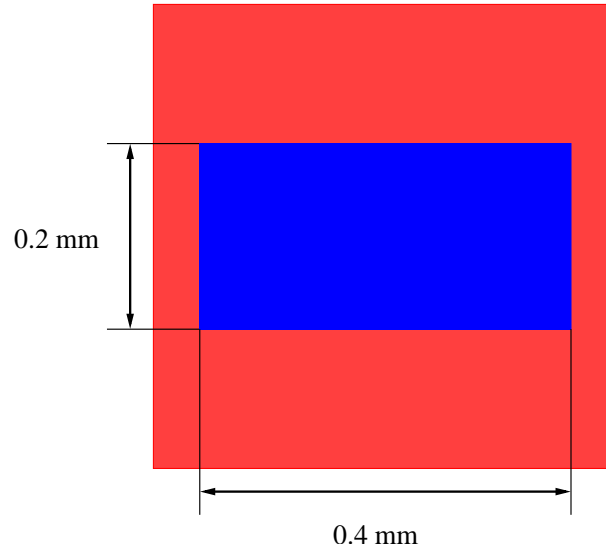


FIG. 7.14 – La géométrie du tube à section rectangulaire.

Dans [37], les résultats sont donnés sous la forme $M_P(Kn_{rect})$ et $M_T(Kn_{rect})$ qui sont respectivement le coefficient de diffusion de masse adimensionné et le coefficient de transpiration thermique adimensionné. Pour comparer nos résultats, on a besoin des formules liants Kn_{rect} à ρ et (M_p, M_T) à (D, \tilde{D}) . On a

$$\rho = \frac{2\sqrt{2}\mu}{\sqrt{\pi RT} L K n_{rect}}$$

et on a

$$D = \frac{L\sqrt{2RT}}{2} M_p$$

et

$$\tilde{D} = \frac{\rho\sqrt{2RTL}}{2T} (M_p - M_T)$$

Ce qui nous donne les comparaisons suivantes :

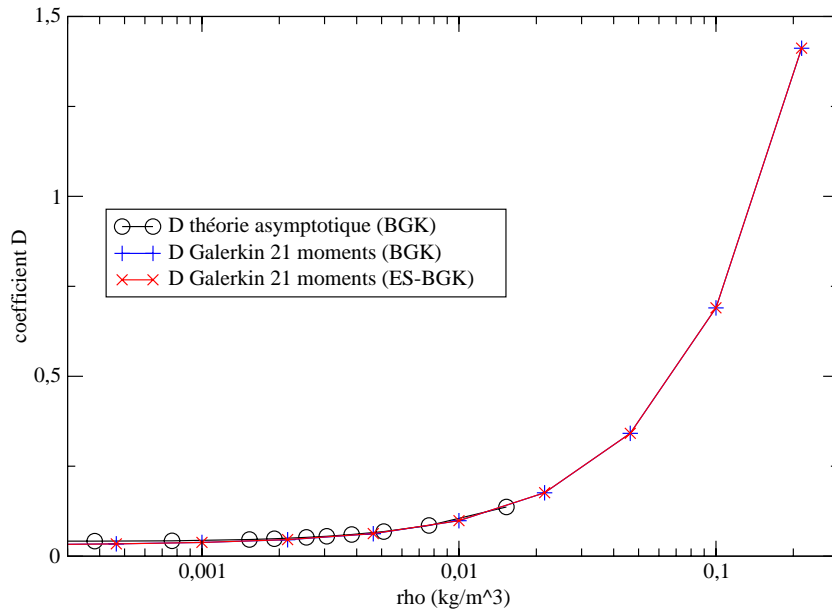


FIG. 7.15 – D : comparaison entre notre méthode et la théorie asymptotique [37].

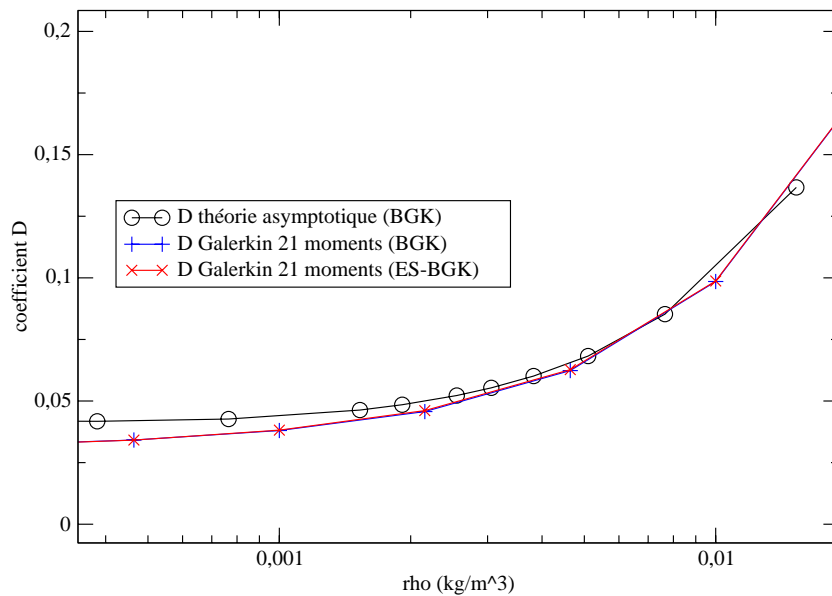
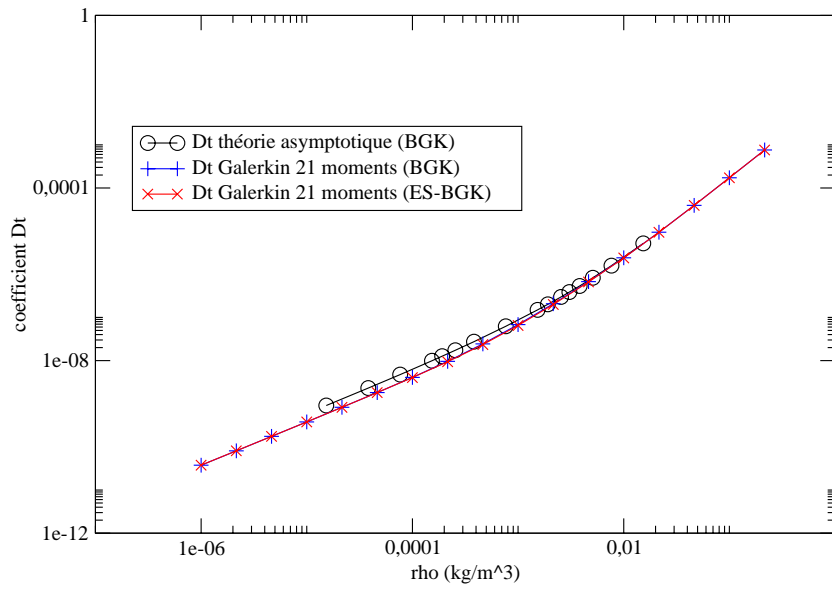
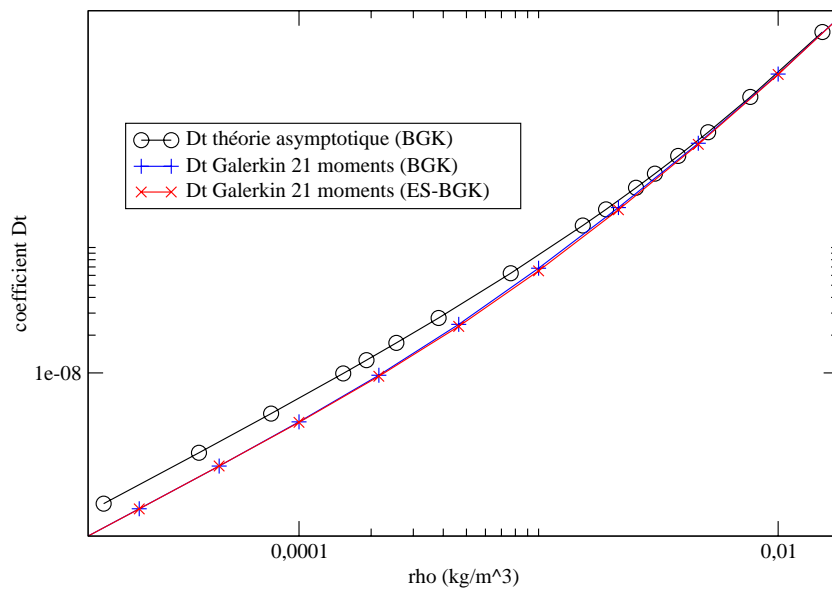


FIG. 7.16 – D : comparaison entre notre méthode et la théorie asymptotique [37] (ZOOM).

FIG. 7.17 – \tilde{D} : comparaison entre notre méthode et la théorie asymptotique [37].FIG. 7.18 – \tilde{D} : comparaison entre notre méthode et la théorie asymptotique [37] (ZOOM).

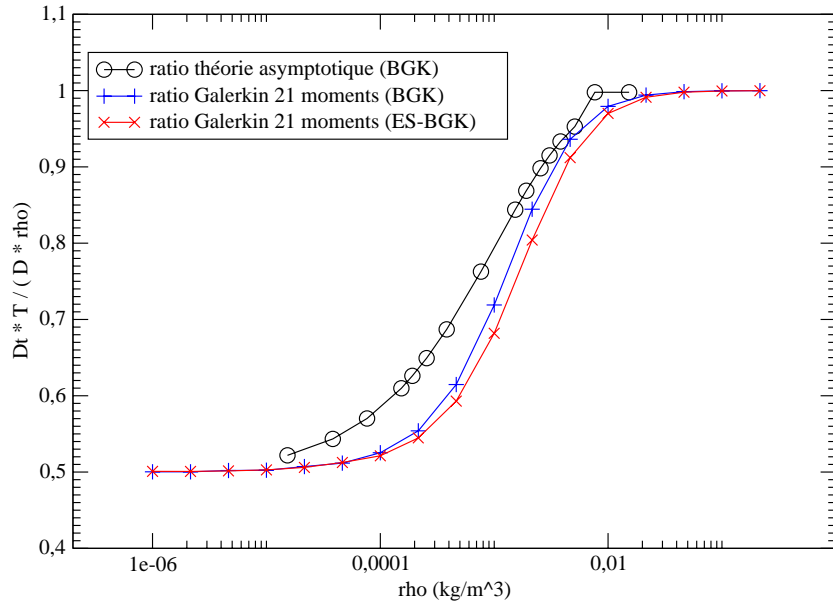


FIG. 7.19 – $\frac{\tilde{D}T}{D\rho}$: comparaison entre notre méthode et la théorie asymptotique [37].

En ce qui concerne les coefficients D et \tilde{D} , les courbes sont en parfait accord avec la théorie asymptotique pour une masse volumique $\rho < 0.005 \text{ kg.m}^{-3}$ (de l'ordre de 5-10 %). Par contre les différences sont plus importantes pour des masses volumiques plus faibles (régime de Knudsen). En ce qui concerne les différences entre les opérateurs BGK et ES-BGK, ceci est notable en particulier sur le ratio, comme pour le cas 1D des plaques parallèles.

7.1.3 Le tube à section carré : validation du schéma “asymptotic preserving”

Cet exemple illustre et valide le schéma “asymptotic preserving” sur une géométrie simple. Nous étudions la diffusion dans un tube à section carrée. Nous avons donc à résoudre un problème auxiliaire 2D sur un carré de taille $0.4 \text{ mm} \times 0.4 \text{ mm}$ avec 40×40 mailles. La figure 7.20 montre les valeurs du coefficient de diffusion en fonction de la masse volumique, calculées par le schéma de transport (+), par le schéma “asymptotic preserving” (x), et obtenues en résolvant le problème auxiliaire associé au régime de Darcy, c'est-à-dire, dans cette configuration particulière, une équation de Laplace (voir la section 4.2.2). Nous observons une très bonne concordance entre la solution donnée par le schéma “asymptotic preserving” et l'équation en régime de Darcy.

La figure (7.21) montre le nombre d'itérations nécessaires pour résoudre le problème auxiliaire respectivement avec le schéma de transport (+) et avec le schéma “asymptotic preserving” (x), en fonction de la masse volumique ρ . On remarque clairement que contrairement au schéma de transport, la vitesse de convergence du schéma “asymptotic preserving” est complètement indépendante de la valeur de ρ , ce qui montre que notre nouveau schéma est plus efficace pour de fortes valeurs de masse volumique.

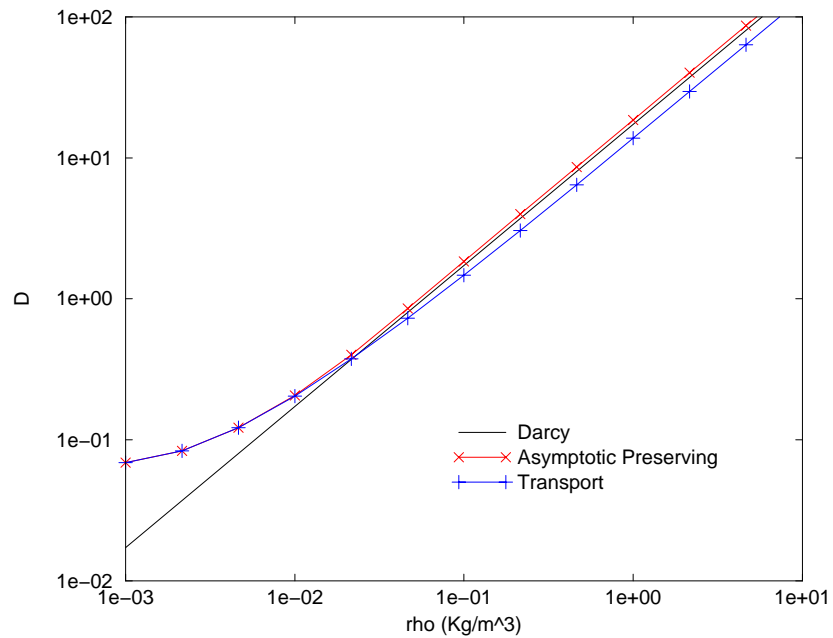


FIG. 7.20 – Coefficient D : comparaison entre le schéma de transport et le schéma asymptotic preserving.

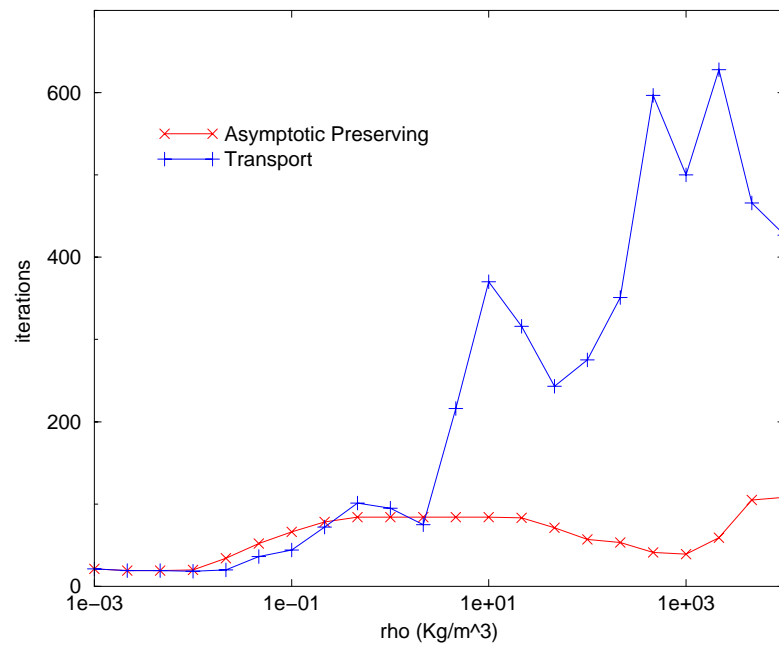


FIG. 7.21 – Nombre d'itérations : comparaison entre le schéma de transport et le schéma asymptotic preserving.

7.1.4 Ecoulement dans un pore cylindrique

Le but de cette section est dans un premier temps de valider le calcul des coefficients de transport effectifs dans un pore cylindrique qui a été beaucoup étudié dans la littérature, et pour lequel nous disposons donc de nombreux résultats pour valider notre approche. Dans un deuxième temps nous comparons les résultats obtenus avec le modèle macroscopique (3.72 - 3.73) (coefficients de transport + transfert macroscopique de masse et de chaleur) par rapport à des données expérimentales sur une même géométrie. Le diamètre de la section circulaire du pore mesure 0.2 mm . Nous allons mailler ce pore avec 30 mailles sur le diamètre. Et nous présenterons les résultats sur les coefficients pour une température de gaz de $T = 400K$.

Validation des coefficients de transport en régime de Knudsen

Dans les tests précédents, nous avons montré qu'en régime transitionnel, notre approche donne des résultats satisfaisants grâce aux comparaisons avec les calculs directs. Les résultats ne sont pas si bons en régime de Knudsen. Ceci peut être expliqué par le fait que dans la configuration précédente, le régime de Knudsen est singulier et que la base choisie (4.17) n'est pas capable de prendre en compte cette singularité. L'intérêt premier des tests numériques dans un pore cylindrique est de valider notre approche en régime de Knudsen dans une configuration non singulière. En effet, dans ce régime, nous pouvons obtenir une solution exacte du problème auxiliaire (P_3) (voir 4.16) pour un tube cylindrique, et donc la valeur exacte du coefficient de transport D_{11} qui est la valeur bien connue donnée dans ([21]) :

$$D_{Knudsen} = \frac{d}{3} \sqrt{\frac{8RT_0}{\pi}} \frac{1}{1 + \sigma \frac{\pi}{8}}$$

Donc, pour $\sigma = 1$, (réflexion diffuse), $T_0 = 400 \text{ K}$, Cette formule donne $D = 0.02198$ et notre programme donne $D = 0.02017$, ce qui est une relativement bonne approximation. Pour $\sigma < 1$ les résultats sont moins précis. Ceci peut être expliqué par le fait que la frontière γ , et en conséquence la normale n n'est pas correctement approximée à cause du maillage régulier cubique, ce qui réduit la qualité de la simulation quand on utilise une réflexion de Maxwell à la paroi avec une part de réflexion spéculaire. Les figures (7.22) et (7.23) donnent le comportement des coefficients D et \tilde{D} en fonction de la masse volumique ρ pour différentes valeurs de σ et la figure (7.24) donne la valeur du ratio $\frac{\tilde{D}T}{D\rho}$. Nous remarquons alors que la limite du ratio quand $\rho \rightarrow 0$ est $\frac{1}{2}$ et la limite quand $\rho \rightarrow +\infty$ est 1 comme le prévoit la théorie.

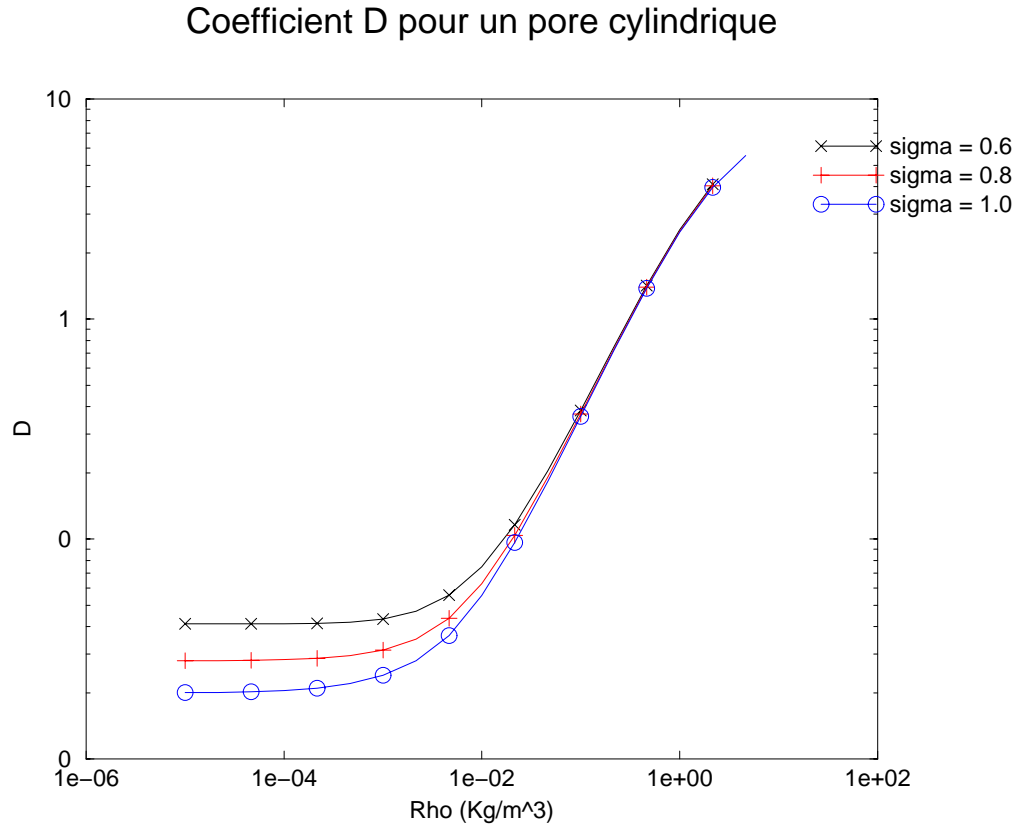


FIG. 7.22 – Coefficient D dans un pore cylindrique (opérateur BGK) pour $T = 400\text{K}$.

Nous allons maintenant comparer nos résultats avec différentes approches de la littérature. Notamment les résultats obtenus avec un modèle basé sur un opérateur de collision de type BGK ou S-modèle (qui est une variante de BGK donnant en limite fluide un bon nombre de Prandlt ([38]) ainsi que les résultats obtenus par le Dusty Gas Model, présenté au paragraphe (3.2) dont les formules sont données par :

$$D_K = \frac{1}{3} \bar{c} d_p \cdot \frac{1}{1 + \sigma \frac{\pi}{8}}, \quad (7.3)$$

$$B = \frac{d_p^2}{32}, \quad (7.4)$$

$$D = D_K + \frac{PB}{\eta}, \quad (7.5)$$

$$\tilde{D} = \frac{\rho}{T} \left(\frac{PB}{\eta} + D_K(1 + \alpha_T) \right), \quad (7.6)$$

où \bar{c} est la vitesse quadratique moyenne des particules de gaz et d_p le diamètre des pores. Nous présenterons donc ici les résultats obtenus par ces formules ainsi que ceux obtenus par le DGM dont le coefficient D_K prend en compte une correction d'ordre 2, dont l'obtention est assez complexe. Cette correction fait apparaître une certaine dépendance en pression. Pour plus

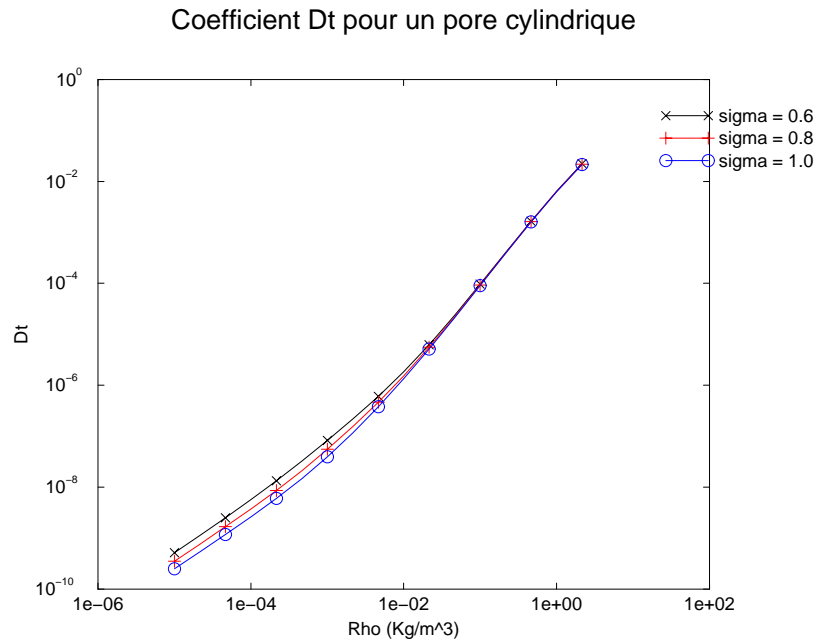


FIG. 7.23 – Coefficient \tilde{D} dans un pore cylindrique (opérateur BGK), pour $T = 400\text{K}$.

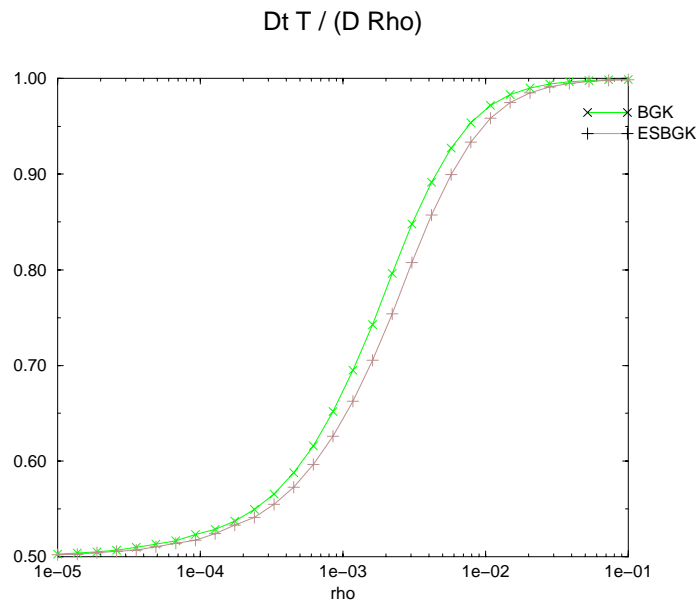


FIG. 7.24 – $\frac{\tilde{D}T}{D\rho}$ dans un pore cylindrique, comparaison entre les opérateurs BGK et ES-BGK, pour $T = 400\text{K}$.

d'informations sur cette correction, le lecteur pourra se reporter ([3]) et ([21]).

Les figures (7.25) et (7.26) représentent l'évolution des coefficients longitudinaux D et \tilde{D} en fonction du nombre de Knudsen $Kn = \frac{\eta}{\rho D_{K,ref}}$ pour le gaz argon, pour $T = 400K$ avec un coefficient d'accommodation $\sigma = 1$ (réflexion diffuse). Cette comparaison avec le DGM et les résultats de ([38]) montre que pour un coefficient d'accommodation égal à 1, toutes les approches sont en accord les unes avec les autres.

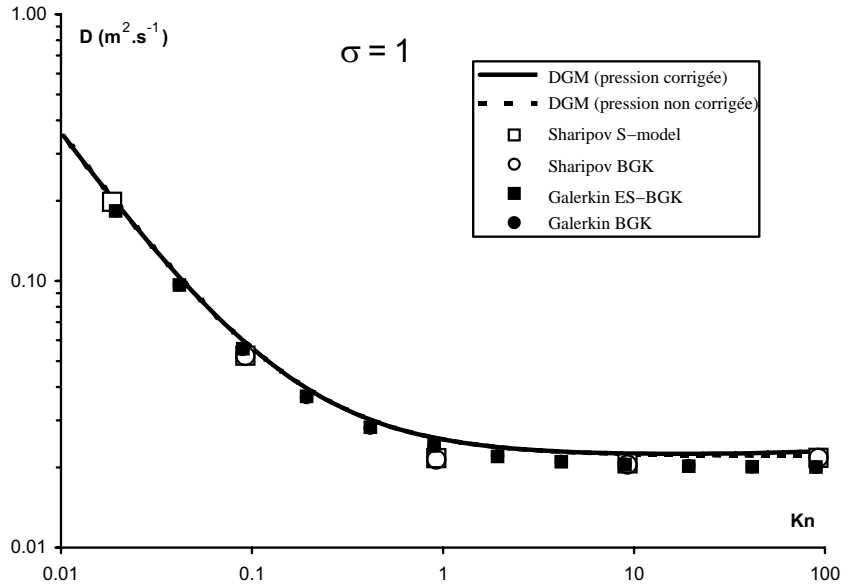


FIG. 7.25 – Coefficient D en fonction du nombre de Knudsen $Kn = \frac{\eta}{\rho D_{K,ref}}$ dans un pore cylindrique pour $T = 400K$. Le coefficient d'accommodation est égal à 1.

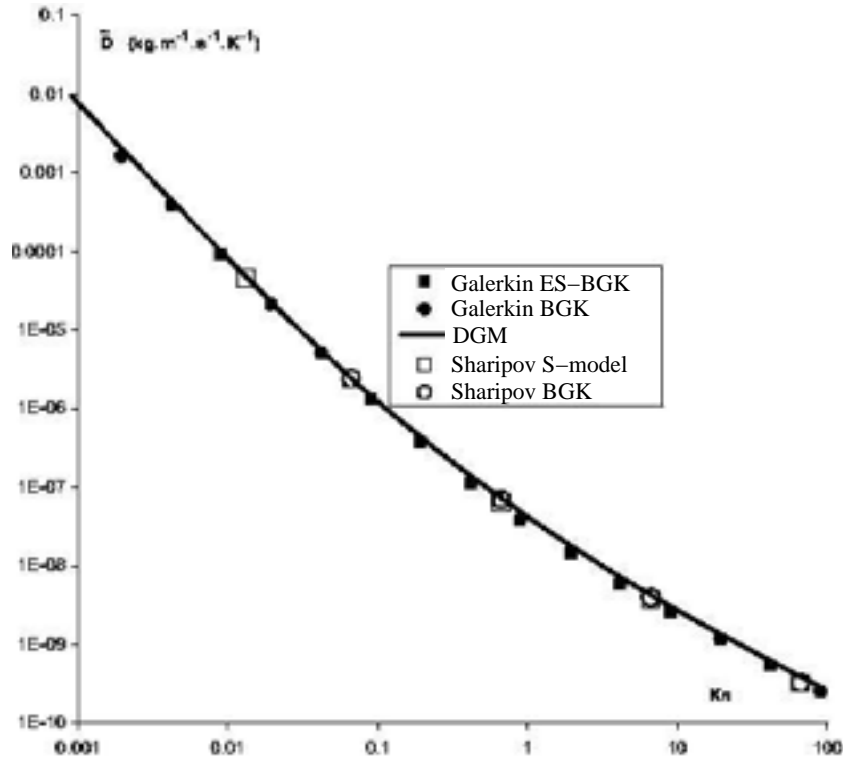


FIG. 7.26 – Coefficient \tilde{D} en fonction du nombre de Knudsen $Kn = \frac{\eta}{\rho D_{K,ref}}$ dans un pore cylindrique pour $T = 400K$. Le coefficient d'accommodation est égal à 1.

La figure (7.27) montre que le ratio $\frac{\tilde{D}T}{D\rho}$ varie entre 1/2 pour de grands nombres de Knudsen et 1 en limite continue. Des différences entre les modèles sont à noter dans le régime intermédiaire. Ils sont dus au fait que l'opérateur de collision BGK n'a pas le bon nombre de Prandlt pour un gaz et donc, il ne permet pas d'avoir une bonne approximation des coefficients, contrairement à l'opérateur de collision de type ES-BGK. D'un autre côté, le DGM semble surestimer ce ratio. Pour terminer, la figure (7.28) montre l'évolution du coefficient D par rapport à Kn/ξ pour différentes valeurs du coefficient d'accommodation. (La division par ξ permet une superposition de la prédiction en régime continu. Il est clair que le DGM présente beaucoup moins de sensibilité par rapport au coefficient d'accommodation que les autres méthodes présentées.

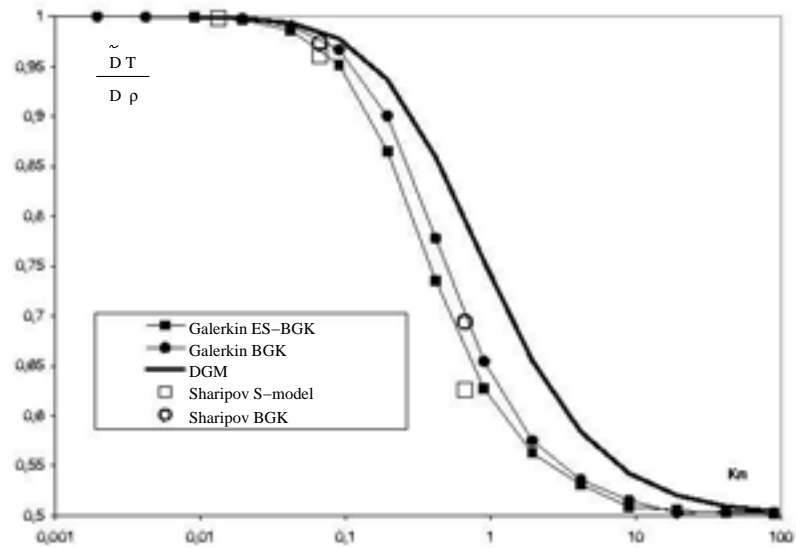


FIG. 7.27 – $\frac{\tilde{D}}{D\rho}$ en fonction du nombre de Knudsen $Kn = \frac{\eta}{\rho D_{K,ref}}$ dans un pore cylindrique pour $T = 400\text{K}$. Le coefficient d'accommodation est égal à 1.

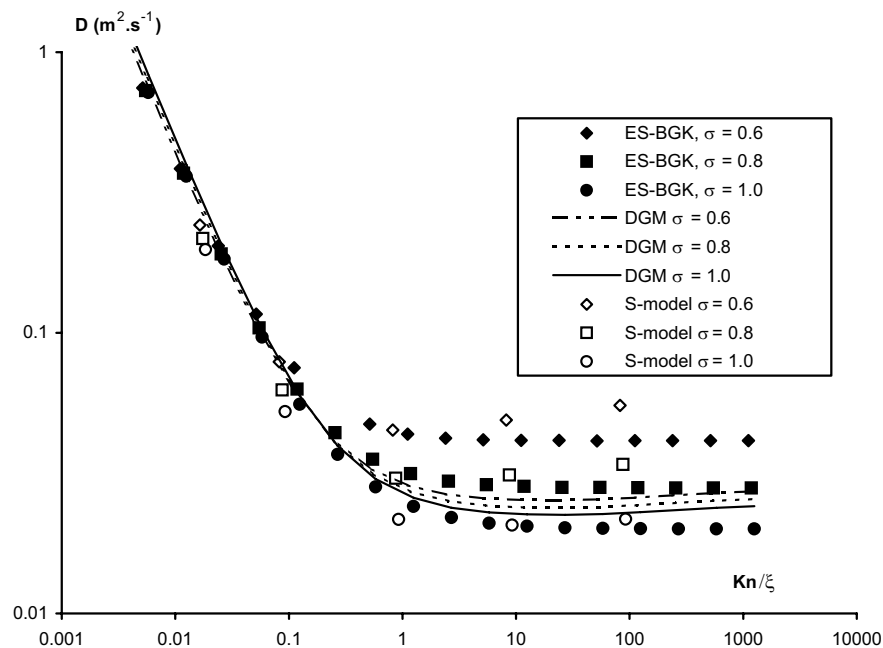


FIG. 7.28 – Coefficient D en fonction du nombre de Knudsen Kn/ξ pour $T = 400\text{K}$ dans un pore cylindrique, pour $T = 400\text{K}$, avec différentes valeurs du coefficient d'accommodation.

Pour conclure, nous pouvons affirmer que même si quelques différences subsistent, nos résultats ainsi que notre modèle peuvent être considérés comme valides en vue de ces comparaisons avec ces résultats connus sur une géométrie simple.

Fort de nos résultats sur les coefficients, nous allons visualiser le profil de vitesse créé par le gaz dans un tube de 0.2 mm de diamètre, la température du gaz est toujours de 400 K et nous montrons ces profils pour diverses valeurs de masse volumique 10^{-3} , 10^{-1} et $10\text{kg}/\text{m}^3$:

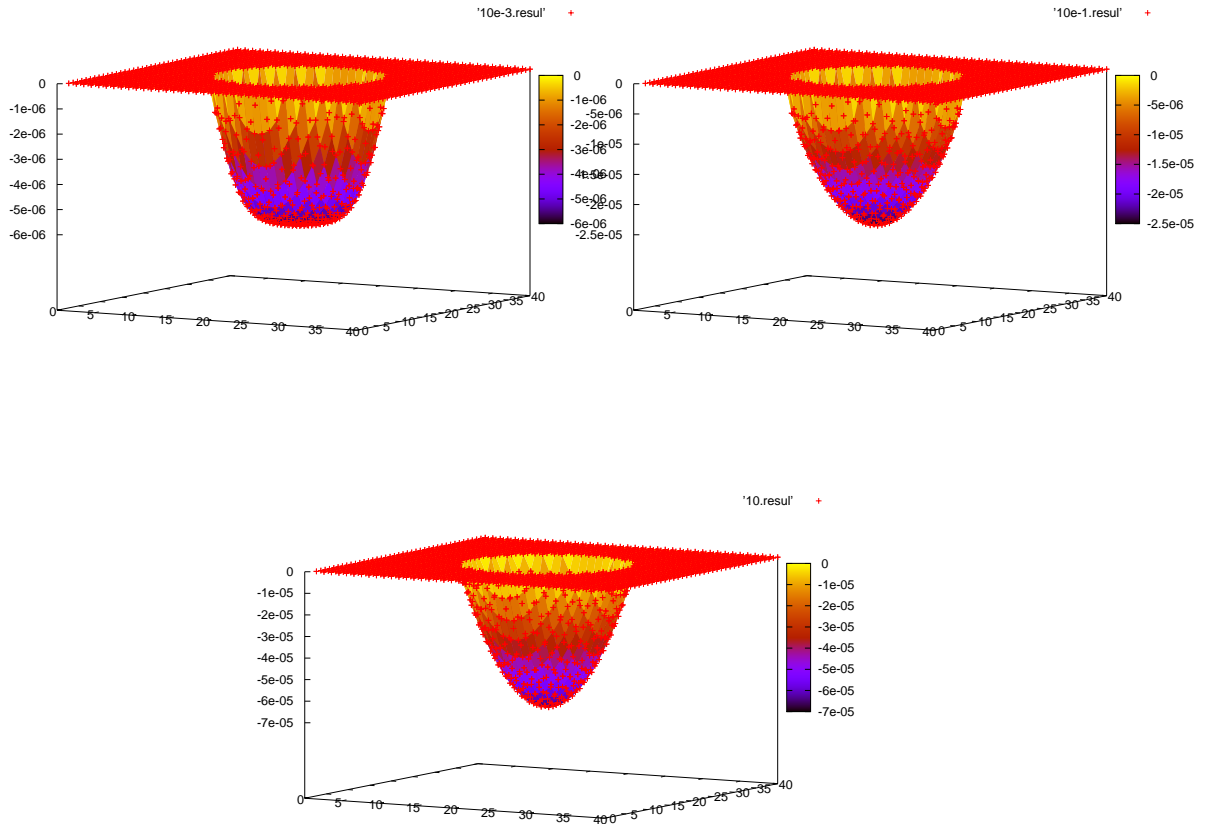


FIG. 7.29 – Profils de vitesse dans un tube de section circulaire de diamètre 0.2 mm pour des valeurs de masse volumique respectivement 10^{-3} (haut gauche), 10^{-1} (haut droit) et $10\text{kg}/\text{m}^3$ (bas)

On remarque que le profil tend vers un profil type Poiseuille quand la masse volumique augmente, c'est-à-dire quand l'on se rapproche de la limite fluide alors que l'on tend vers un profil constant avec saut à la paroi dans la couche de Knudsen quand la masse volumique diminue et que l'on tend vers le régime de Knudsen. Ceci est en parfait accord avec nos prévisions. On retrouve l'écoulement de Poiseuille et l'écoulement de Knudsen suivant le régime dans lequel on se place.

Transport de masse et de chaleur

Le test suivant nous donne des comparaisons entre notre approche et les résultats expérimentaux obtenus dans ([39]). Nous considérons comme milieu poreux un ensemble de tubes de pyrex de diamètre 0.2 mm et de 76 mm de long. Les extrémités donnent sur les chambres où la température est précisément réglée ($T_1 = 335.6K$ à l'extrémité gauche et $T_2 = 569.8K$ à l'extrémité droite), et la différence de pression entre les deux extrémités ($\Delta P = P_1 - P_2$), choisie de telle sorte que le flux de masse à travers le tube soit nul, est reporté en fonction de la pression absolue à droite (P_2). Les données expérimentales sont tirées de ([39]).

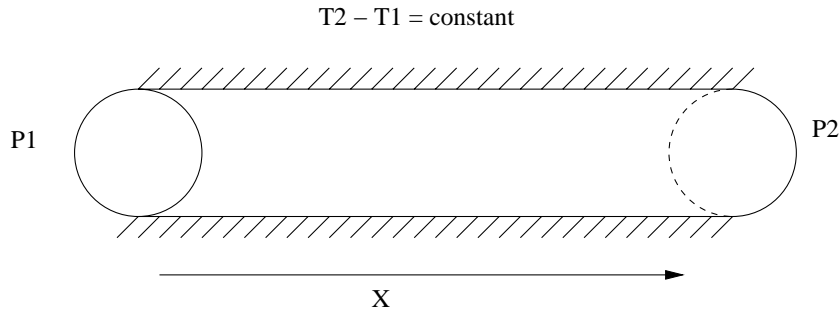


FIG. 7.30 – Le pore cylindrique.

Cette expérience est simulée en utilisant une approximation numérique du modèle de transport asymptotique où les coefficients effectifs de transport sont calculés dans une phase de preprocessing où sont résolus les problèmes auxiliaires.

Les figures 7.31 et 7.32 montrent les résultats obtenus respectivement en utilisant l'opérateur de collision de type BGK et ES-BGK pour différentes valeurs du coefficient d'accommodation (0.65 ; 0.8 ; 1). On compare donc cela au résultat de l'expérience de ([39]) et l'on remarque que le résultat obtenu pour $\sigma = 0.65$ se rapproche plus de l'expérience. De plus, l'opérateur ES-BGK semble donner un meilleur accord. La figure 7.33 reprend les résultats obtenus par les deux opérateurs de collision pour $\sigma = 0.65$: il apparaît maintenant clairement que l'opérateur ES-BGK donne de meilleurs résultats que l'opérateur BGK qui est moins précis. La valeur $\sigma = 0.65$ est une valeur un peu faible par rapport à ce que nous pouvions prévoir. Ceci est dû à l'effet des cellules cubiques, problème soulevé précédemment.

Fort de ces résultats nous avons donc raffiné le maillage de la cellule élémentaire (50 mailles fluides sur le diamètre du microtube) et la figure 7.34 nous montre l'influence du raffinement de maillage. Les différences sont assez faibles. Nos coefficients de transport calculés avec 30 mailles fluides nous permettent donc d'avoir une bonne solution approchée. Enfin, la figure 7.35 montre l'influence du coefficient d'accommodation. Nous présentons les résultats obtenus pour $\sigma = 0.65, 0.70, 0.75$: Nous pouvons remarquer que ce coefficient d'accommodation joue un grand rôle et que la solution est très sensible à ses variations. On comprend donc ici l'intérêt des différents travaux menés sur les états de surface des matériaux qui permettent de définir un coefficient d'accommodation. En conclusion, nous pouvons dire que l'accord entre les données expérimentales et les résultats numériques est très bon et que l'opérateur de collision de type ES-BGK semble être plus approprié pour ce type de simulation.

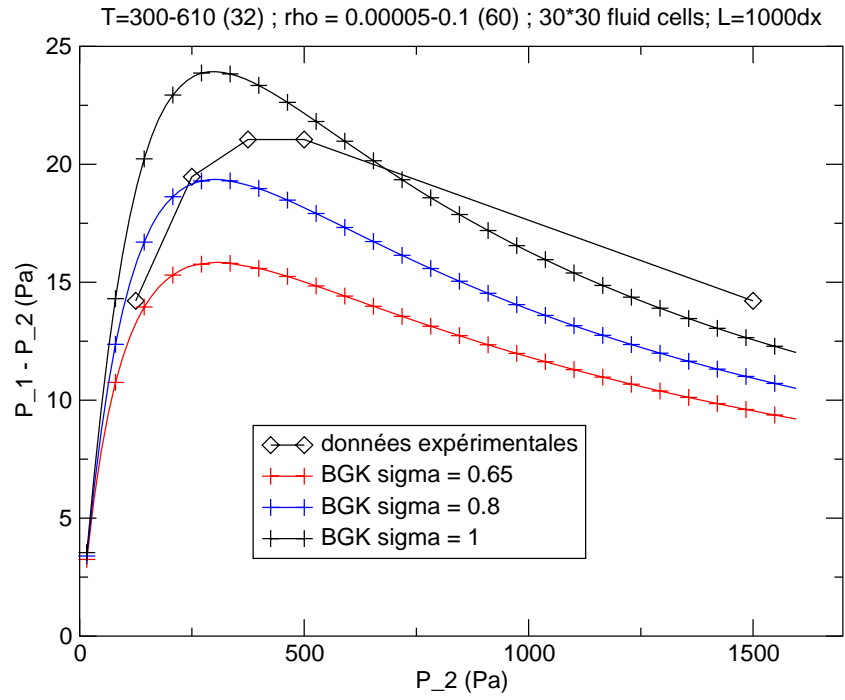


FIG. 7.31 – Comparaison avec des données expérimentales (BGK).

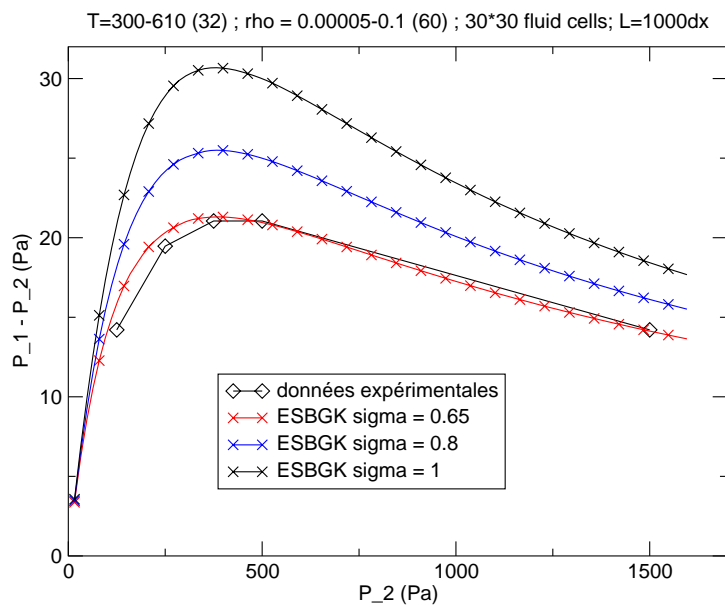
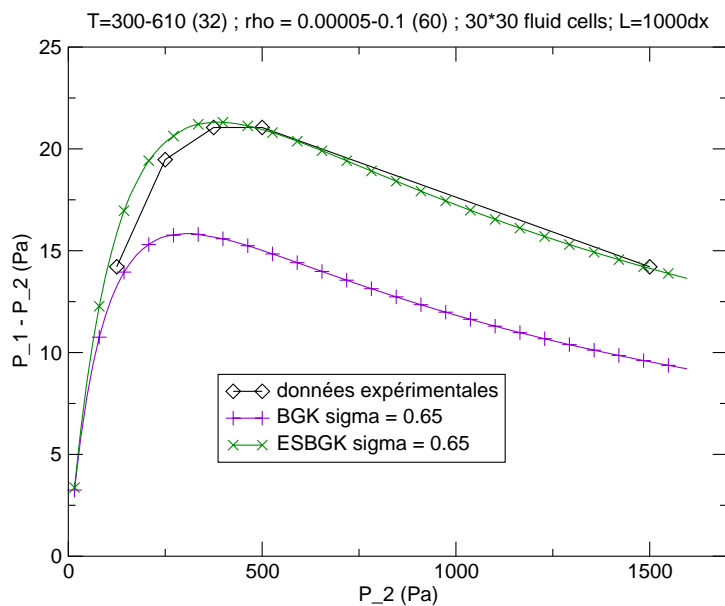


FIG. 7.32 – Comparaison avec des données expérimentales (ESBGK).

FIG. 7.33 – Comparaison avec des données expérimentales ($\sigma = 0.65$).

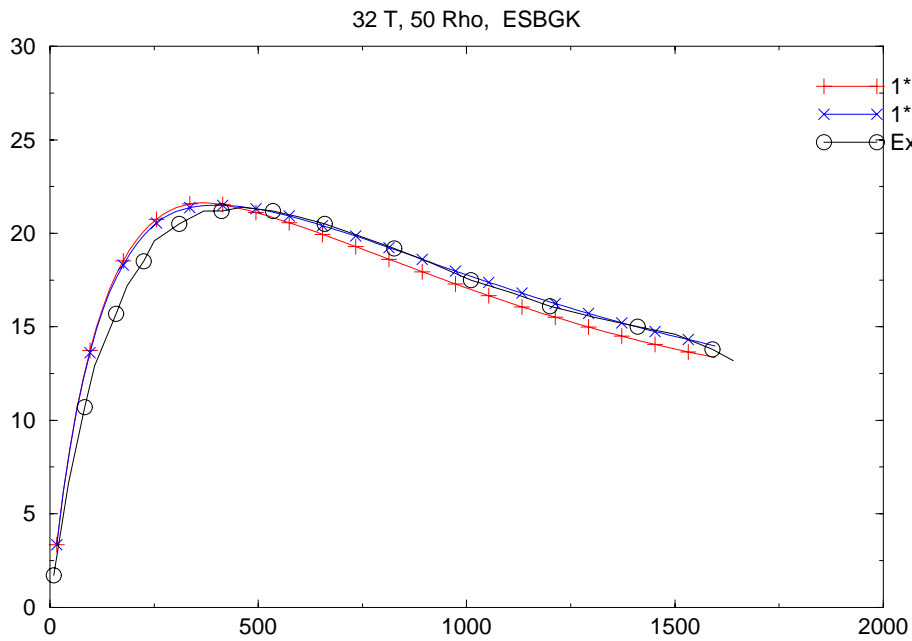


FIG. 7.34 – Comparaison avec des données expérimentales.

Le pore cylindrique

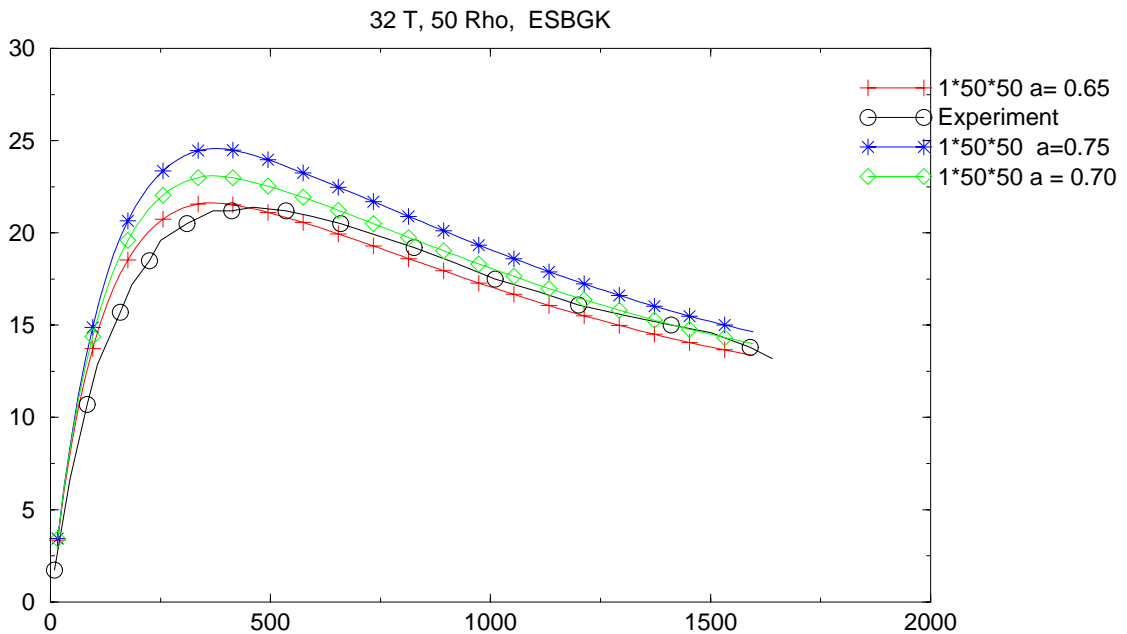


FIG. 7.35 – Influence du coefficient d'accommodation.

Ce cas test est très exigeant. Il demande une grande précision au modèle numérique dans une grande plage de régimes et les résultats obtenus par notre approche sont très encourageants.

7.1.5 Mise en évidence des effets géométriques

Dans ce test, nous voulons montrer l'influence de la géométrie sur la valeur des coefficients de transfert. Le milieu poreux est entre deux plaques horizontales, distantes de $30 \mu m$ et la cellule élémentaire est décrite par la section carrée représentée sur la figure (7.36). Nous allons calculer les coefficients D et \tilde{D} pour $T = 400K$ et $\rho = 0.01kg/m^3$ pour différentes géométries c'est-à-dire suivant un paramètre L , la longueur d'une branche de la croix ($L \in [0; 200\mu m]$). Quand nous augmentons la longueur des branches dans la direction 2, nous diminuons la longueur dans la direction 1 (Cf 7.36) afin de garder la porosité constante (ici $\varepsilon = 38.4\%$). En particulier quand $L = 200\mu m$, la géométrie ne permet plus au gaz de s'écouler dans la direction 1 et les coefficients D_{11} et \tilde{D}_{12} doivent donc s'annuler.

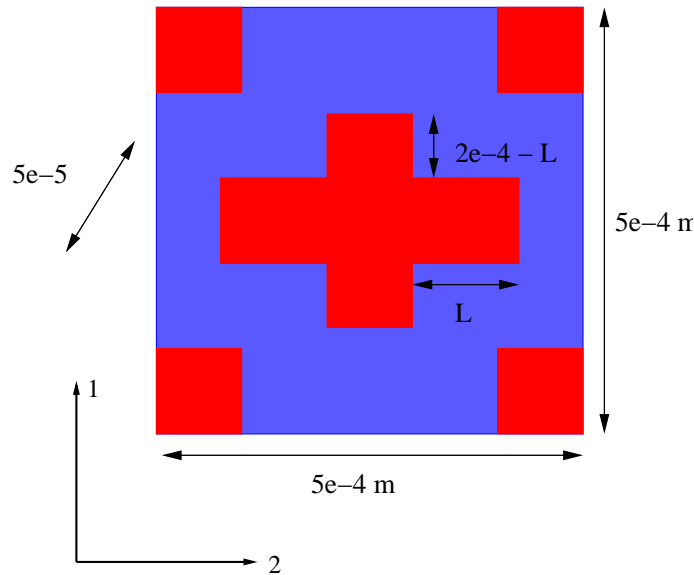
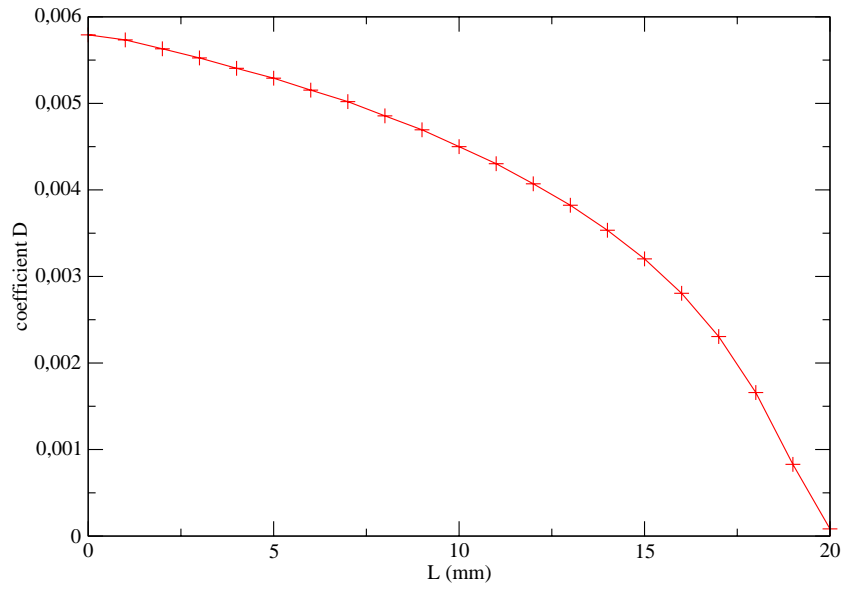
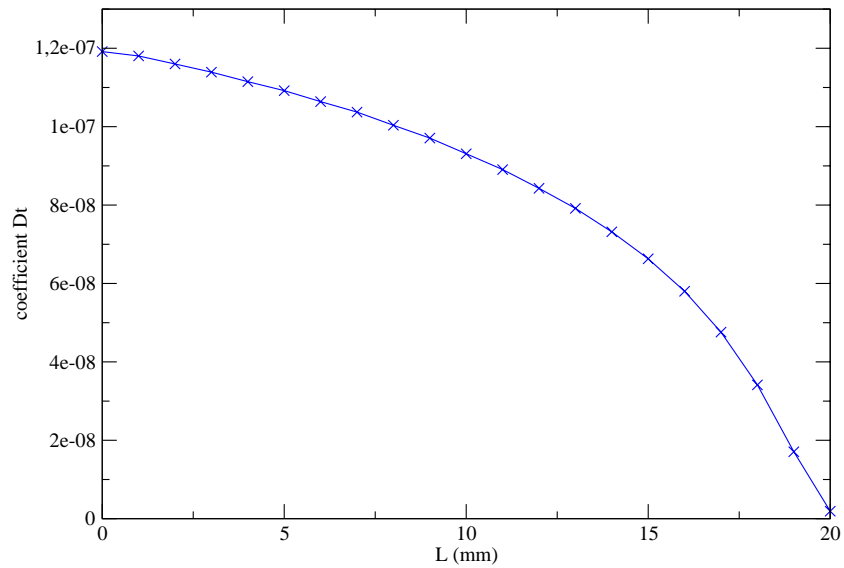


FIG. 7.36 – géométrie de la “croix”.

Les résultats sont reportés sur les figures (7.37 et 7.38)

FIG. 7.37 – Variations de D suivant la longueur L .FIG. 7.38 – Variations de \tilde{D} suivant la longueur L .

On constate que la valeur des coefficients varie fortement : plus on restreint le passage dans la direction 1, plus la valeur des coefficients diminue et s'annulent pour $L = 200\mu m$. Ceci

confirme numériquement la capacité du modèle et du code à prendre en compte la géométrie microscopique du milieu poreux dans les coefficients de transport. Cet effet ne peut être obtenu qu'en utilisant un schéma numérique d'ordre 2.

7.1.6 Mise en évidence des effets tensoriels des coefficients (1)

Le milieu poreux est entre deux plaques horizontales, distantes de 0.3 mm et la cellule élémentaire est décrite par une section rectangulaire horizontale ($1.6 \times 3.2 \text{ mm}$) représentée sur la figure (7.39) où la phase solide est représentée en rouge (gris clair) et la phase fluide en bleu (gris foncé). L'intérêt de cette géométrie est qu'elle présente des directions d'écoulement privilégiées qui ne sont pas associées aux axes de la cellule. Elle va permettre de tester la capacité de notre modèle et de notre code à les retrouver et à analyser l'influence du régime sur le caractère tensoriel des coefficients D et \tilde{D} .

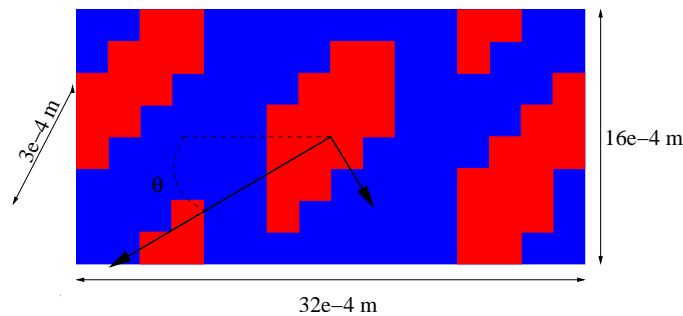


FIG. 7.39 – géométrie du milieu poreux et les directions principales du tenseur D

Les problèmes auxiliaires sont résolus en utilisant la base aux 21 éléments et le maillage spatial est constitué de mailles cubiques de côté $\Delta y = 0.2 \text{ mm}$. Les vecteurs principaux du tenseur D pour $T = 400 \text{ K}$ et $\rho = 10^{-2} \text{ kg/m}^3$ sont représentés sur la figure 7.39. Nous allons ici présenter les résultats numériques obtenus en ce qui concerne les directions principales d'écoulement, puis nous testerons sur ce cas test la méthode de préconditionnement présentée au chapitre précédent.

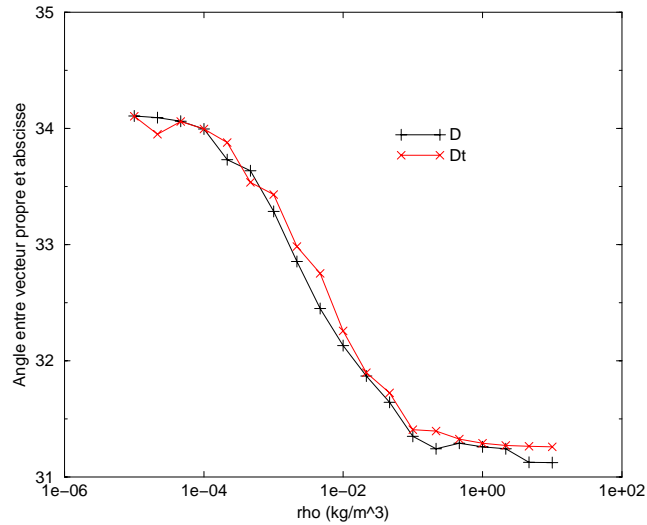
- Les directions principales d'écoulement

Sur la figure (7.39) sont représentées les directions propres (normées par les valeurs propres) du tenseur D pour une valeur de masse volumique de $\rho = 10^{-3} \text{ kg/m}^3$. Nous pouvons remarquer que les directions principales sont parallèles au canal principal du milieu poreux, faisant alors un angle $\theta = 30^\circ$ avec l'axe y_1 , ce qui prouve que notre modèle apporte à l'échelle macroscopique des informations géométriques de l'échelle microscopique. De plus, le facteur d'anisotropie (i.e. le ratio entre la plus grande et la plus petite des valeurs propres) est égal à 3.13.

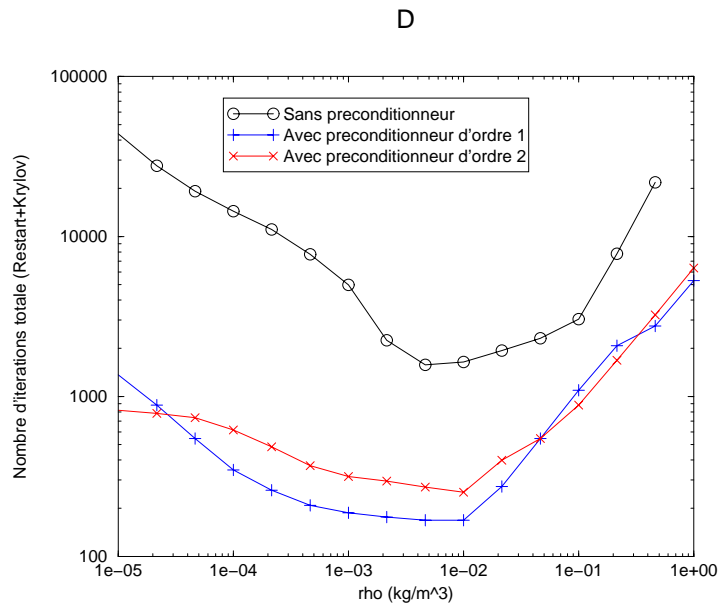
Sur la figure (7.40) est tracé l'angle θ pour les tenseurs D et \tilde{D} en fonction de ρ . Les variations de θ sont remarquables (environ 5°), et donnent l'influence du régime sur les vecteurs propres de D et \tilde{D} . De plus, nous pouvons voir que, comme prévu par la théorie, ces deux tenseurs ont les mêmes directions principales pour les petites et grandes valeurs de ρ . Mais pour des valeurs intermédiaires, ici à environ $\rho = 10^{-4} \text{ kg/m}^3$, les directions principales sont significativement différentes.

- Test sur le préconditionnement

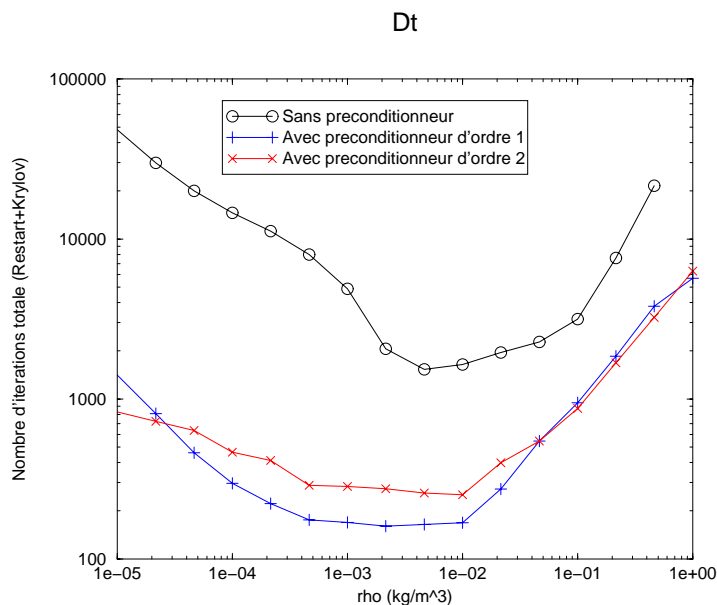
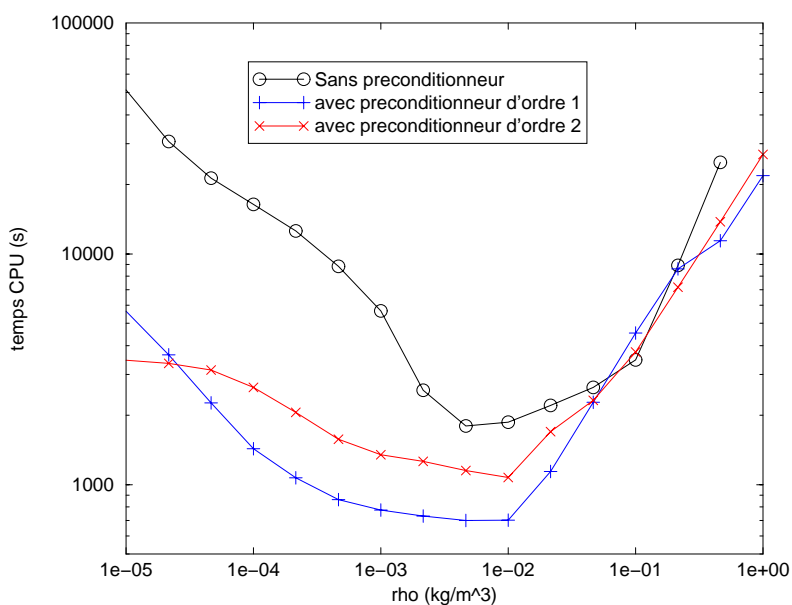
Nous allons profiter de ce cas test pour tester notre préconditionneur. Nous présentons donc

FIG. 7.40 – Variation des directions principales suivant la masse volumique ρ

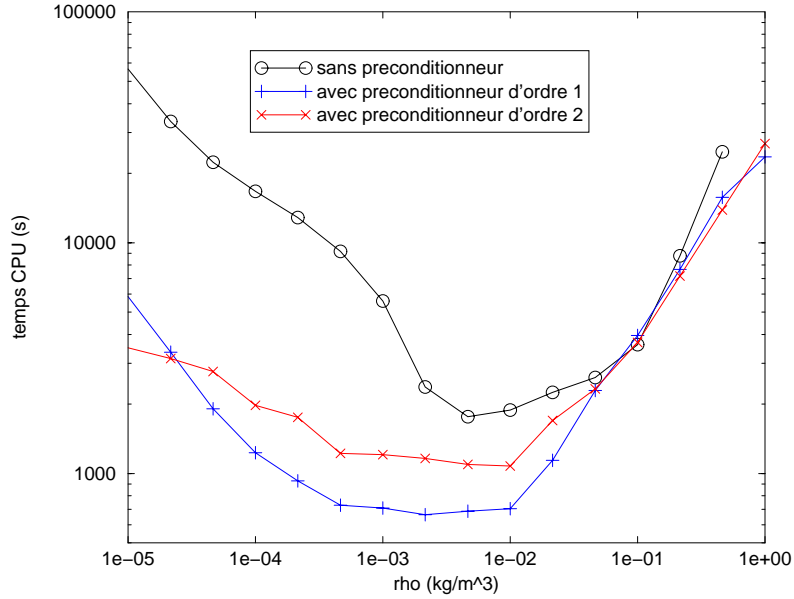
le nombre d'itérations pour le calcul de D et \tilde{D} (figures 7.41 et 7.42) ainsi que le temps CPU nécessaire au calcul (figures 7.43 et 7.44) en fonction de la masse volumique de gaz.

FIG. 7.41 – Nombre d'itérations pour le calcul de D

Ces différentes courbes montrent le même phénomène pour le coefficient D ainsi que pour \tilde{D} : Le système linéaire est résolu plus rapidement en utilisant un preconditionneur, qu'il soit d'ordre 1 ou 2. Il va sans dire que les résultats obtenus avec ou sans preconditionneur sont identiques. On peut donc valider notre preconditionneur.

FIG. 7.42 – Nombre d'itérations pour le calcul de \tilde{D} FIG. 7.43 – Temps CPU pour le calcul de D

On peut remarquer que celui-ci permet de gagner plus d'un facteur 10 pour certaines valeurs de ρ . De plus on remarque que le préconditionneur d'ordre 1 est un peu meilleur que celui d'ordre 2 pour les régimes transitionnels et de Knudsen, alors que pour le régime de Darcy, les deux ordres donnent à peu près les mêmes nombres d'itérations ; tout ceci pour les calculs de D et de

FIG. 7.44 – Temps CPU pour le calcul de \tilde{D}

\tilde{D} .

En effet, le calcul des coefficients demande la résolution du système suivant ([6] - [40] - [5]) :

$$-\frac{1}{\tau}S\vec{b}_i + \sum_{p=1}^3 A_p \partial_{y_p} \vec{b}_i = \vec{g}_i. \quad (7.7)$$

Et donc notre préconditionneur est basé sur une itération de Gauss-Seidel sur la matrice :

$$M_{GS} = -\frac{1}{\tau}S + \sum_{p=1}^3 A_p \partial_{y_p}. \quad (7.8)$$

Soit la matrice $A_D = \sum_{p=1}^3 A_p \partial_{y_p}$, on en déduit que :

- A l'ordre 1, les dérivées sont décentrées : $A_p \partial_{y_p} = A_p^+ \partial_{y_p}^+ + A_p^- \partial_{y_p}^-$, donc A_D^{ordre1} est à diagonale dominante.
- A l'ordre 2, les dérivées sont centrées (sauf pour le traitement des conditions aux limites du fluide), donc A_D^{ordre2} n'est pas à diagonale dominante.

Donc, en régime transitionnel, où τ est grand, la matrice $\frac{1}{\tau}S$ joue peu de rôle sur la diagonale de M_{GS} et donc :

en régime transitionnel, la matrice de Gauss-Seidel est à diagonale dominante à l'ordre 1 et pas à l'ordre 2. Sachant que la méthode de Gauss-Seidel nécessite une matrice à diagonale dominante, on comprend qu'en régime transitionnel l'ordre 1 pour le préconditionneur soit plus performant que l'ordre 2.

Par contre, en régime de Darcy, où $\tau \rightarrow 0$, la matrice $\frac{1}{\tau}S$ devient le terme prépondérant sur la diagonale de M_{GS} et quel que soit l'ordre M_{GS} devient à diagonale strictement dominante,

les termes dérivés deviennent négligeables sur la diagonale par rapport à $\frac{1}{\tau}$. Et donc en régime fluide, l'ordre 1 et l'ordre 2 sont aussi performants l'un que l'autre.

7.1.7 Mise en évidence des effets tensoriels des coefficients (2)

Ce milieu poreux idéalisé est une image 3D constituée de deux plaques parallèles à l'axe z entre lesquelles un obstacle en forme de "L" est situé (7.45) :

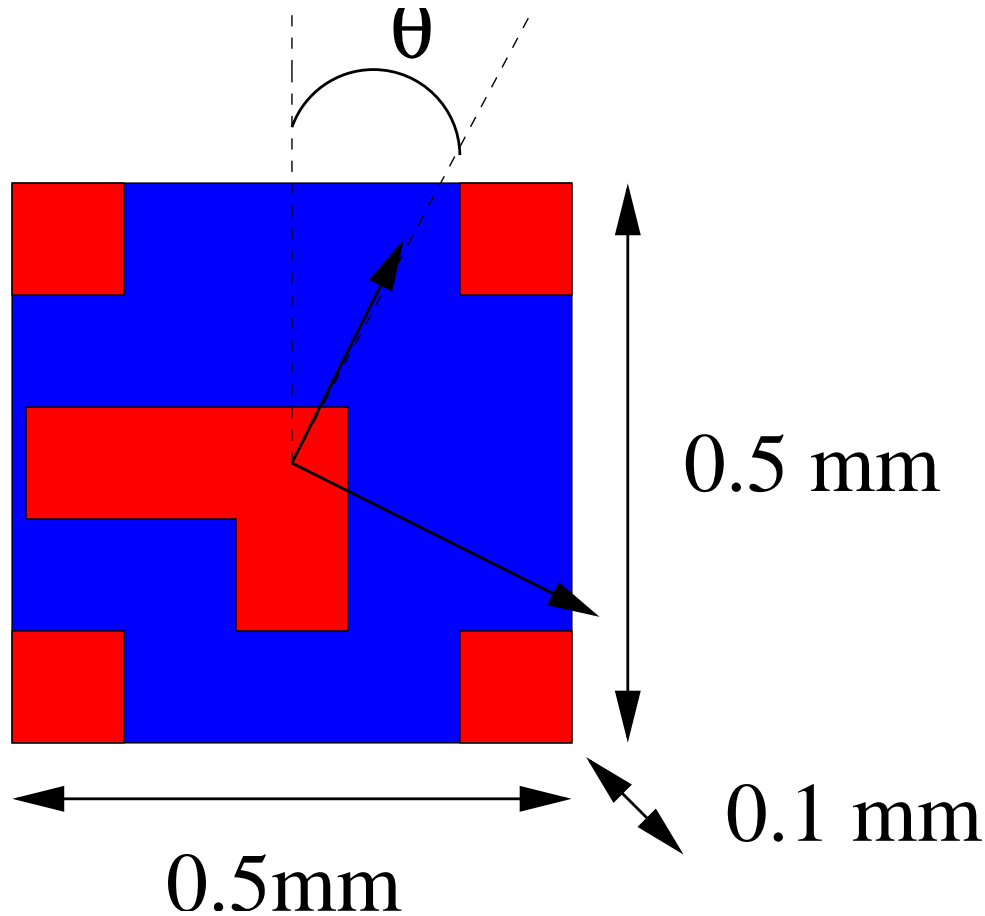


FIG. 7.45 – La géométrie de calcul.

Les conditions de périodicité sont appliquées sur les directions x et y . Le fait de bloquer le flux en z entre deux plaques fait que l'on a un horizon fini dans toutes les directions, ce qui va nous permettre de comparer nos résultats avec d'autres codes y compris en régime de Knudsen où cette condition d'horizon fini est nécessaire pour assurer l'existence des coefficients de diffusion. L'intérêt de la forme en "L" est que l'écoulement ne peut pas avoir une quelconque symétrie, et, de ce fait, les axes principaux des tenseurs effectifs D et \tilde{D} ne sont pas *a priori* les axes x et y . Nous allons présenter des résultats sur le facteur de tortuosité τ . On calcule la tortuosité par

la formule

$$\tau = \frac{D_{prev}}{D}$$

où D_{prev} est obtenu par les formules du DGM (7.3), (7.4) et (7.5) en prenant un diamètre de pore :

$$d_p = \frac{4\epsilon}{\sigma_v}$$

Où σ_v est la surface par unité de volume. Les résultats sont montrés sur la figure 7.46 :

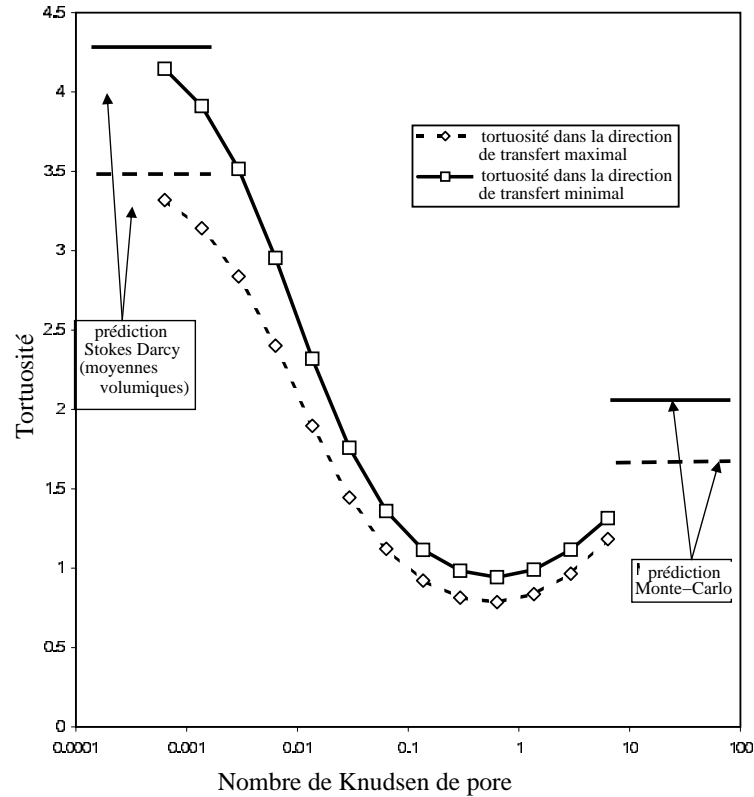


FIG. 7.46 – Evaluation de la tortuosité : comparaison avec deux autres estimations.

Nous avons comparé nos résultats avec deux autres codes : un code Monte-Carlo/Marches Aléatoires, avec une description de l'interface fluide-solide par Marching Cube simplifié ([41]) pour le régime limite de Knudsen et un solveur numérique pour la résolution du problème en régime continu 'Stokes vers Darcy' basé sur la théorie de moyennes volumiques ([42]). La comparaison est excellente en ce qui concerne le régime continu mais de moins bonne qualité pour le régime de Knudsen. Ceci indique qu'il reste encore quelques difficultés pour capter correctement le comportement en régime extrêmement raréfié par la méthode proposée dans ce travail.

L'évolution de l'anisotropie ainsi que l'orientation des deux tenseurs D et \tilde{D} sont reportées sur la figure (7.47). On remarque clairement que l'anisotropie des deux tenseurs diminue quand le régime devient raréfié. Cette diminution est plus marquée pour \tilde{D} . Ceci peut s'expliquer par le fait que le tenseur de conduction thermique K a une faible anisotropie. L'orientation des axes principaux ne varie pas de façon importante, excepté pour \tilde{D} pour un fort Knudsen. Ceci peut être interprété comme un réalignement avec le tenseur de transfert de chaleur K . Ceci confirme le fait que le paramètre α_T du Dusty-Gas Model (Cf (3.9)), doit être réécrit sous une forme tensorielle.

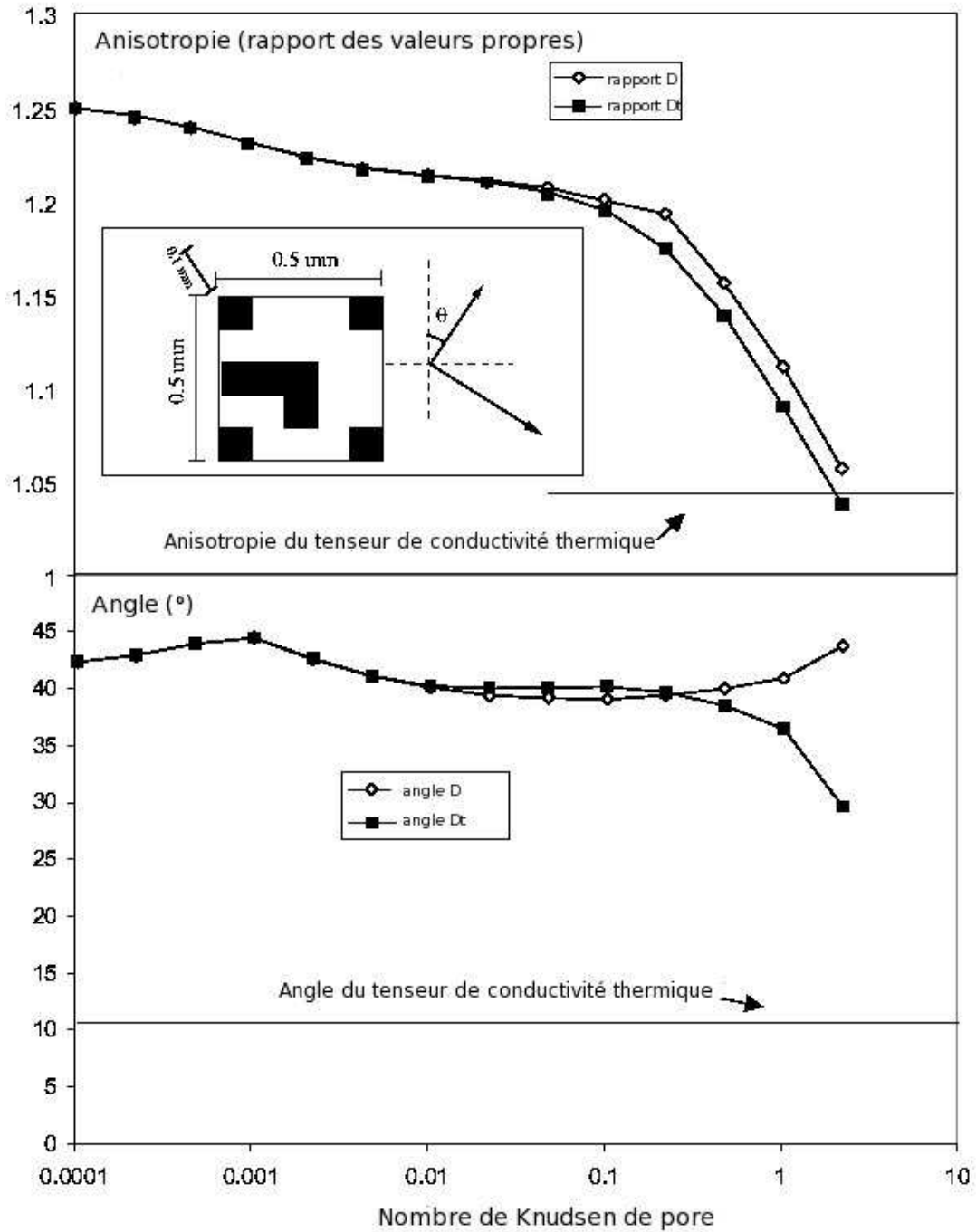


FIG. 7.47 – Angle et anisotropie calculés

7.1.8 Effets multidimensionnels (le tube sectionné)

Après avoir montré la possible séparation des directions angulaires entre les tenseurs D et \tilde{D} quand le nombre de Knudsen augmente, nous avons essayé de générer un milieu poreux où

l'anisotropie diffère significativement entre le transfert de masse et la transpiration thermique. Ce test est une répétition périodique 3D d'une cellule élémentaire de taille $10 * 10 * 8 \mu m$ maillé par $64 * 80 * 80$ mailles définie à la figure (7.48). Cela nous amène avec la base à 21 éléments à 8601600 inconnues. Nous nous intéressons à un tube de section carrée sectionné par une fissure non-plane. Le fait que la faille ne soit pas droite sert à ce que la condition d'horizon fini soit respectée, de façon à avoir un bon coefficient de diffusion de Knudsen en limite raréfié.

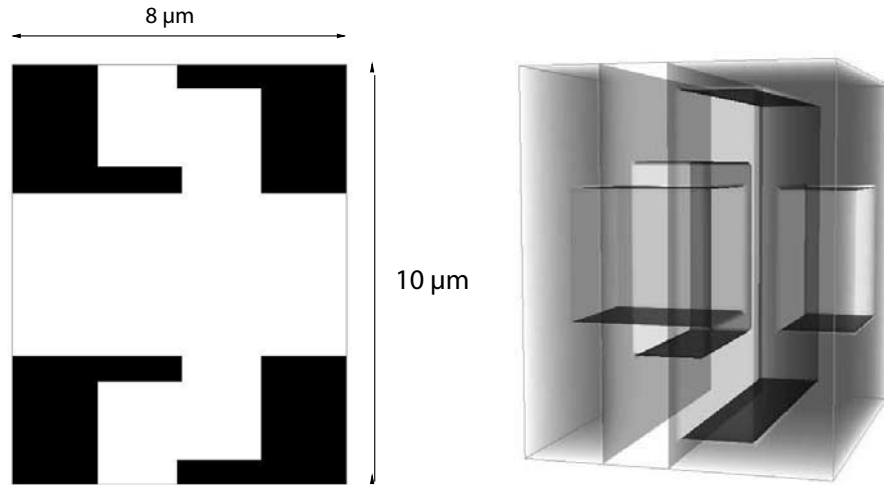


FIG. 7.48 – Le tube sectionné

La figure (7.49) montre la valeur de l'anisotropie par rapport à la densité de gaz dans le milieu : il est intéressant de remarquer que la direction de plus important transport de masse (D) est toujours du même côté, alors que la direction de plus forte transpiration thermique (\tilde{D}) s'inverse quand la densité devient plus grande. Ceci illustre bien encore une fois la dépendance géométrique du “Knudsen slip” et du “thermal creep” dans un milieu poreux général.

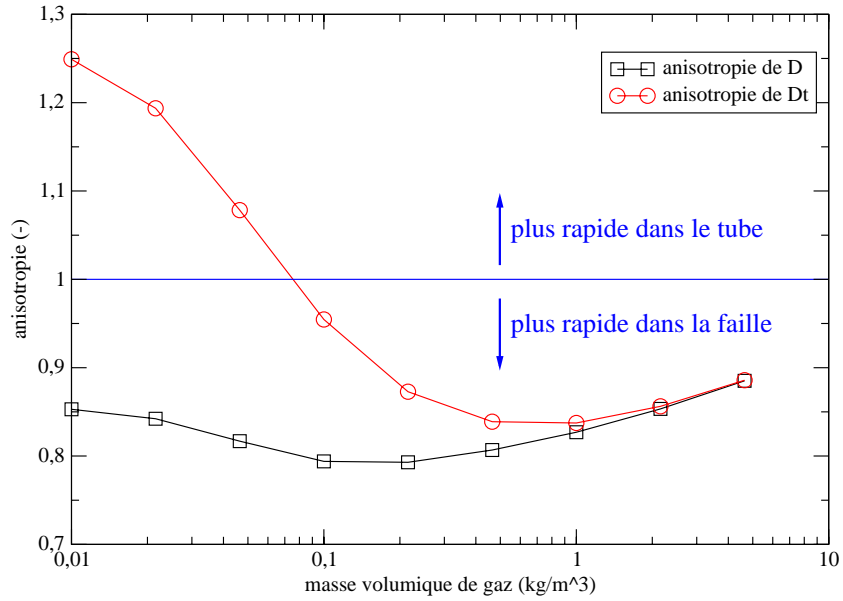
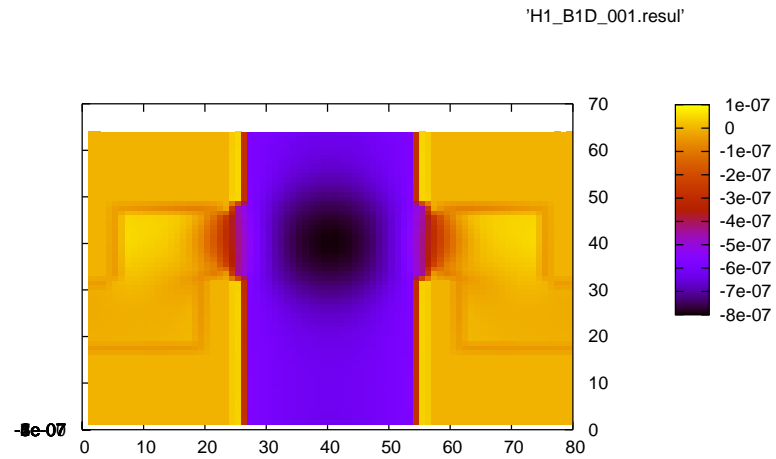
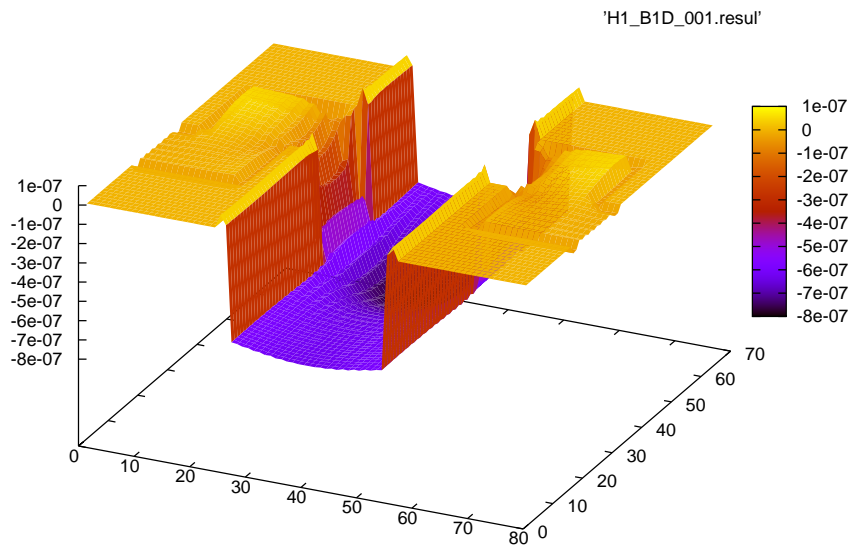
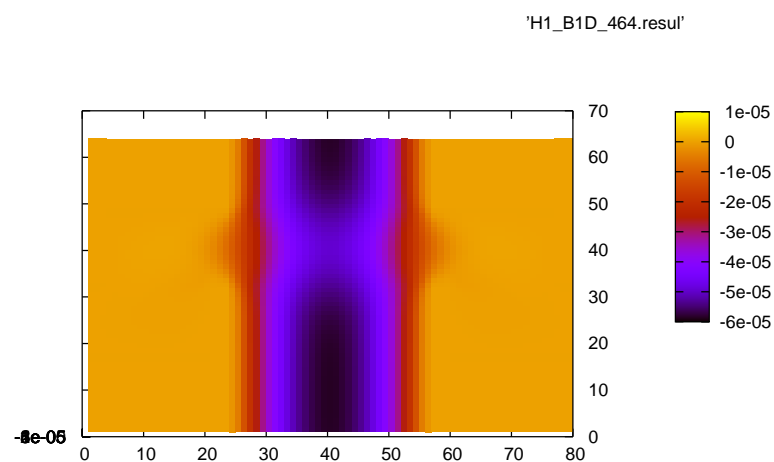
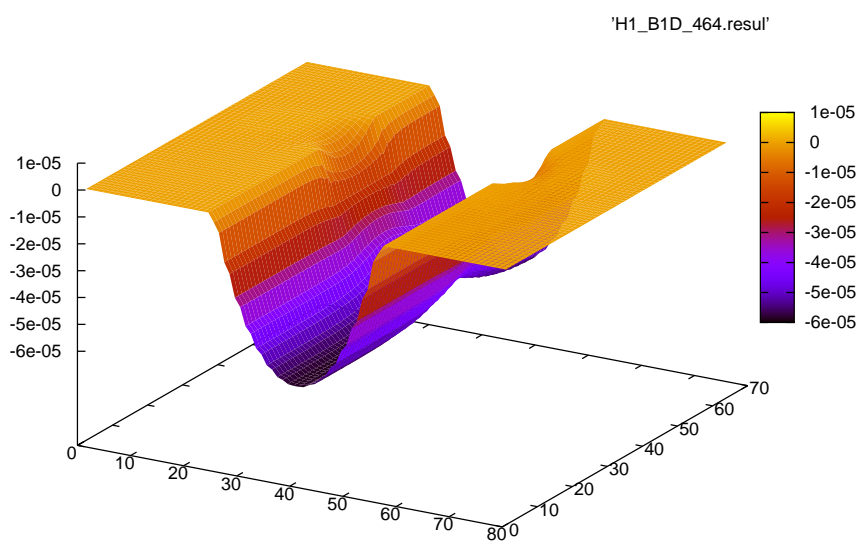
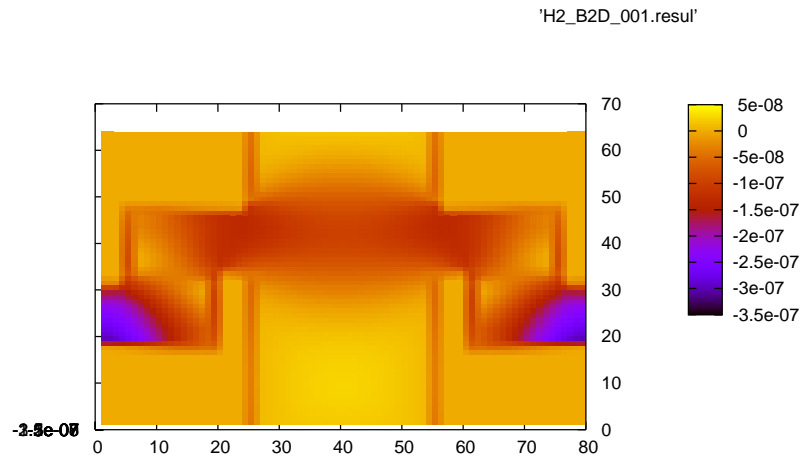
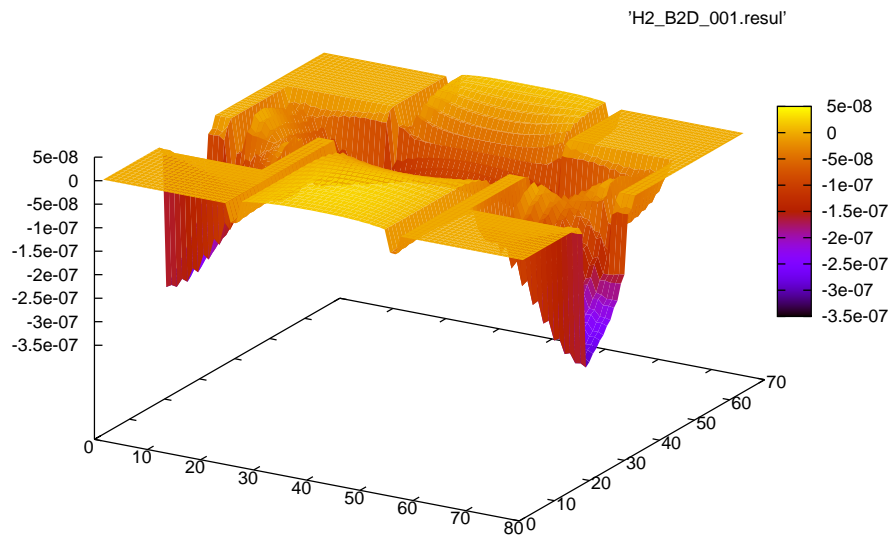


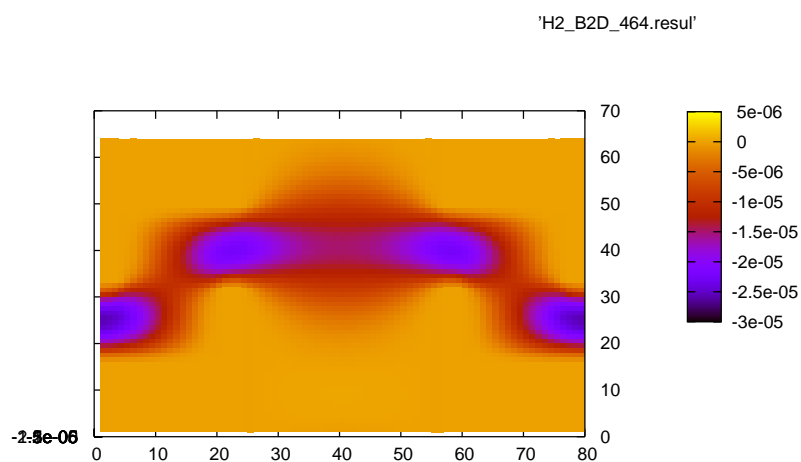
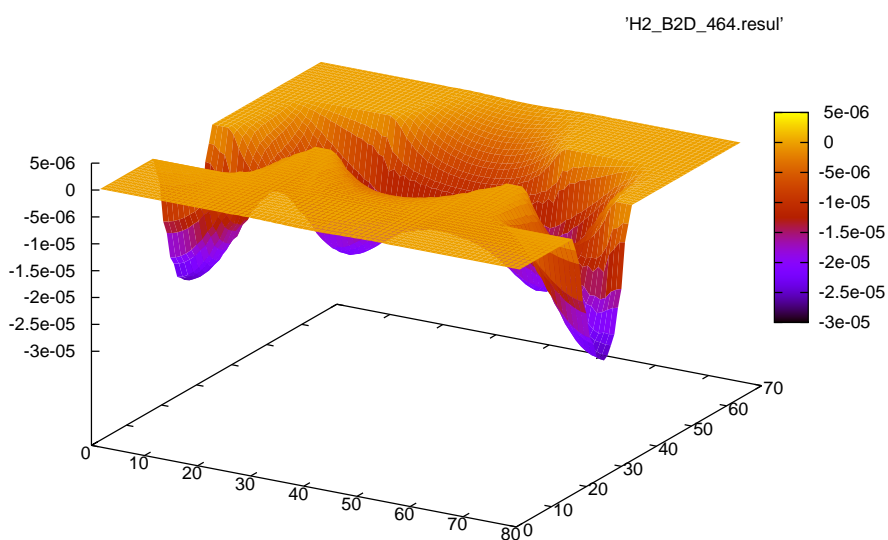
FIG. 7.49 – Anisotropie pour les composantes sur les directions principales des tenseurs D et \tilde{D} en fonction de la densité de gaz.

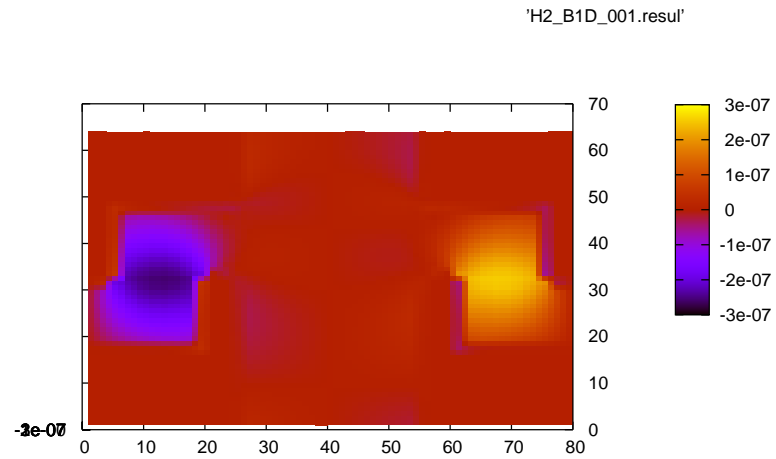
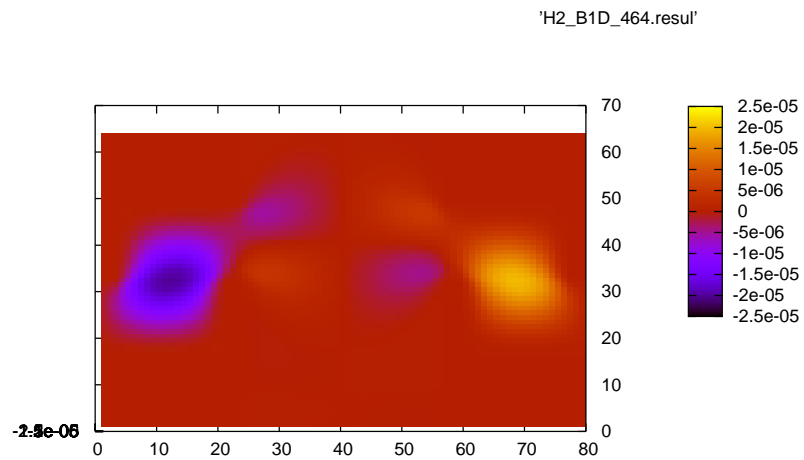
Nous pouvons maintenant visionner les vitesses d'écoulement dans le matériau, sur une coupe. Nous allons visionner les valeurs des b_V^k (calcul de D) obtenues par calcul dans la directions k pour deux valeurs de masse volumique : 0.01 kg.m^{-3} et 4.64 kg.m^{-3} . A titre purement informatif, nous montrons aussi la valeur du coefficient b_V^1 lors d'un calcul dans la direction 2. Evidemment, la vitesse est très faible et donc les visualisations ne sont pas très intéressantes.

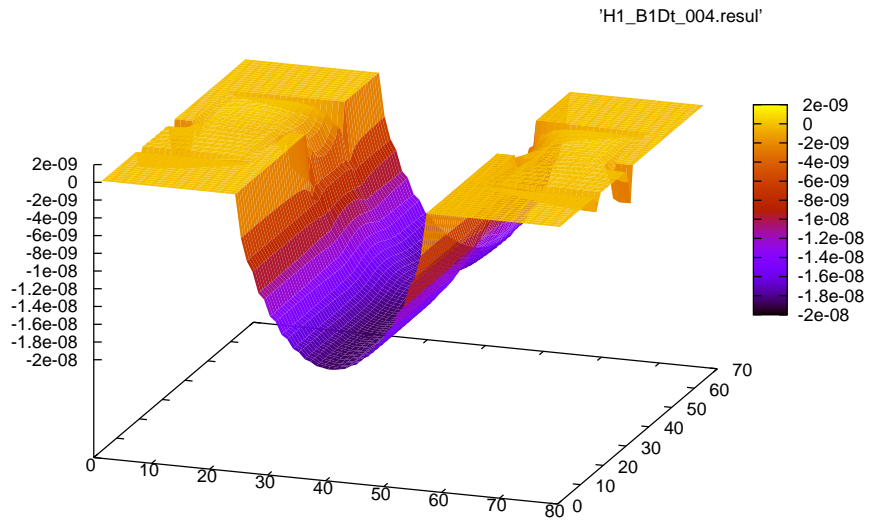
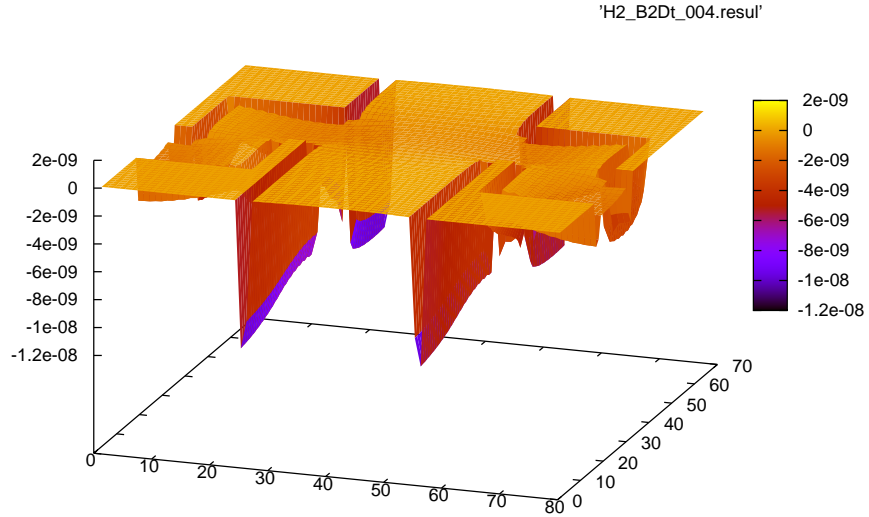
FIG. 7.50 - b_v^1 pour $\rho = 0.01 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 1FIG. 7.51 - b_v^1 pour $\rho = 0.01 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 1 (3D)

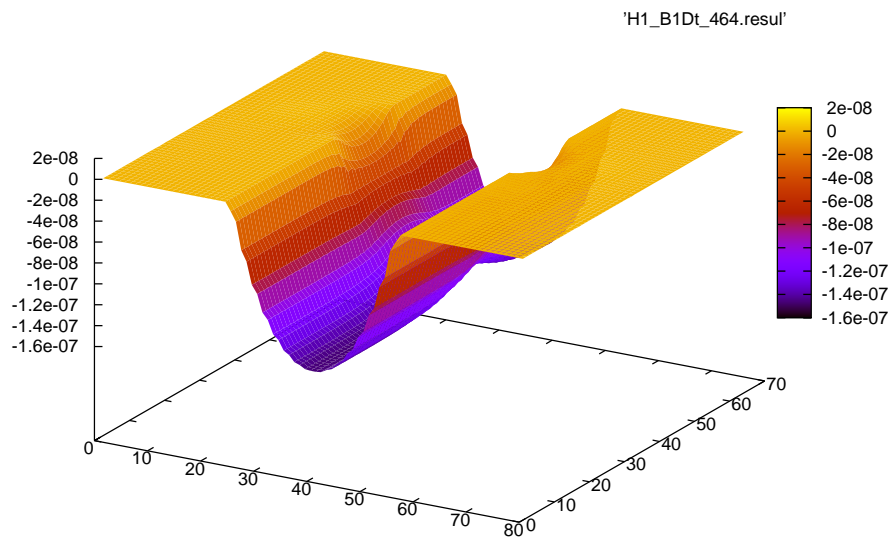
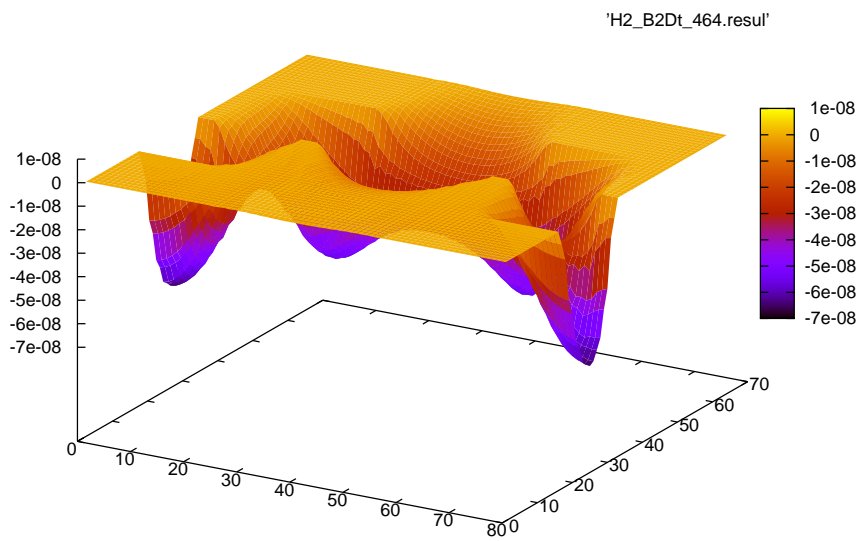
FIG. 7.52 – b_v^1 pour $\rho = 4.64 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 1FIG. 7.53 – b_v^1 pour $\rho = 4.64 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 1 (3D)

FIG. 7.54 – b_v^2 pour $\rho = 0.01 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 2FIG. 7.55 – b_v^2 pour $\rho = 0.01 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 2 (3D)

FIG. 7.56 – b_v^2 pour $\rho = 4.64 \text{kg/m}^3$ dans la direction 2FIG. 7.57 – b_v^2 pour $\rho = 4.64 \text{kg/m}^3$ dans la direction 2 (3D)

FIG. 7.58 – b_v^1 pour $\rho = 0.01 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 2FIG. 7.59 – b_v^1 pour $\rho = 4.64 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 2

FIG. 7.60 – a_v^1 pour $\rho = 0.0464 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 1FIG. 7.61 – a_v^2 pour $\rho = 0.0464 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 2

FIG. 7.62 - a_v^1 pour $\rho = 4.64 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 1FIG. 7.63 - a_v^2 pour $\rho = 4.64 \text{ kg/m}^3$ dans la direction 2

D'après les images 7.50, 7.51 et 7.52, 7.53, on peut comparer l'effet du régime sur le profil de vitesse, on reconnaît un profil de Knudsen avec saut à la paroi pour une masse volumique faible (figures 7.50 et 7.51) et un profil de Poiseuille pour un fort ρ (figures 7.52 et 7.53). De plus, si l'on regarde les échelles, nous avons un rapport 100 entre les profils de vitesse.

Dans la direction 2 (images 7.54, 7.55 et 7.56, 7.57), nous pouvons faire la même remarque. De plus, on remarque une décroissance de la vitesse au niveau des "virages" et une légère diffusion dans le tube.

Enfin, si l'on regarde les profils de vitesse b_{v1} lors d'un calcul en direction 2, on remarque que tout le gaz qui est évacué par la faille (droite) se retrouve réinjecté de l'autre côté (gauche), ce qui nous amène à considérer effectivement un coefficient D_{21} nul. Ce qu'on retrouve lors du calcul. De même le profil de Knudsen que l'on devine sur la figure 7.60 pour une faible masse volumique devient un profil de Poiseuille pour une forte valeur de ρ (figure 7.62).

7.1.9 Modélisation d'un matériau : le milieu poreux réel 3D

Nous avons testé notre code sur un milieu poreux plus réel. On considère un empilement de tissus de carbone qui constitue une préforme pour un matériau composite C/C a été scanné pour donner une micro-tomographie X synchrotron ([43]) avec une résolution de $0.7 \mu m$, ce qui nous fournit une excellente image 3D, grâce à une procédure de segmentation adéquate ([44]). La résolution a été diminuée par un facteur 2 pour avoir des temps de calcul relativement acceptables, et l'image a été périodisée. La figure (7.64) est une visualisation de ce milieu de 0.5 mm de côté et composée de $50*50*50$ pixels comme le montre la figure (7.64) :

Thu Jan 5 13:37:43 2006

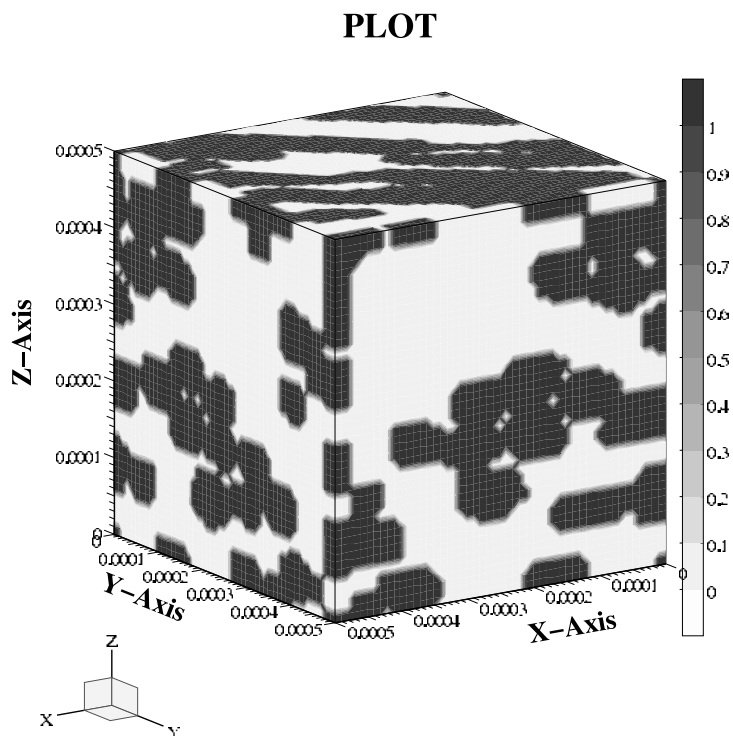


FIG. 7.64 – Visualisation 3D du milieu poreux réel.

Cette géométrie a une porosité de $\epsilon \approx 0.65$. Ce qui nous amène avec la base à 21 éléments à un système à 1 700 000 inconnues. Pour une température de $400K$ nous pouvons visualiser les valeurs des angles θ et ϕ , que fait le vecteur propre issu de la valeur propre la plus grande avec les axes. On note $D_{max} < D_{mil} < D_{mid}$ les trois valeurs propres du tenseur D (et de même pour \tilde{D})

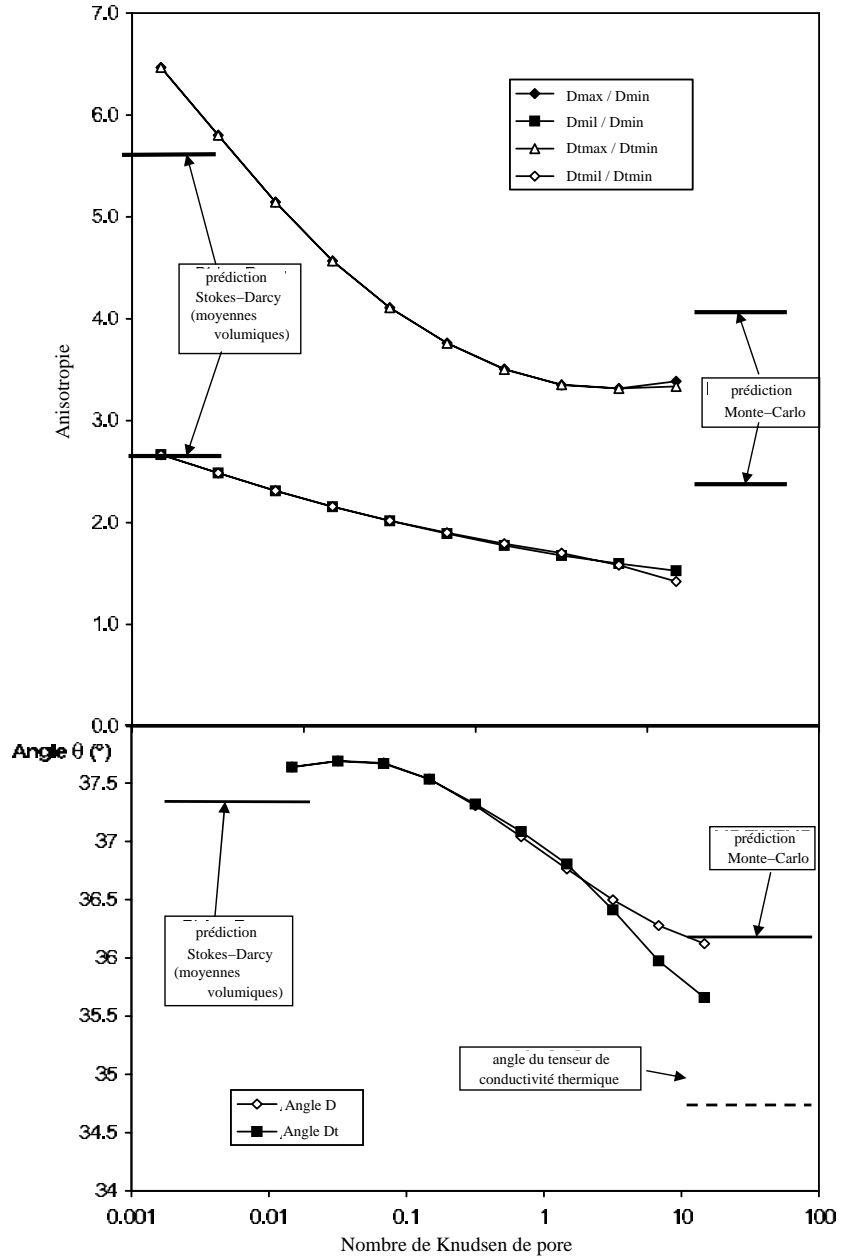


FIG. 7.65 – Anisotropie et angle.

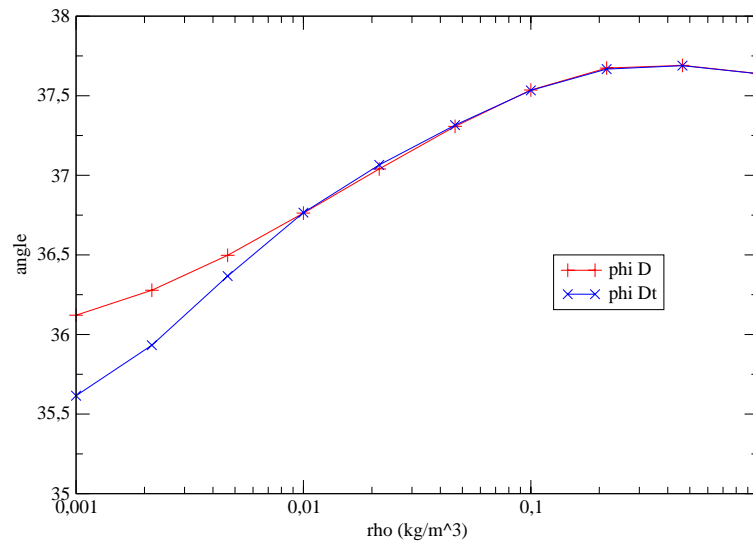


FIG. 7.66 – Les variations de l'angle ϕ issu de la plus grande valeur propre des tenseurs D et \tilde{D} en fonction de ρ .

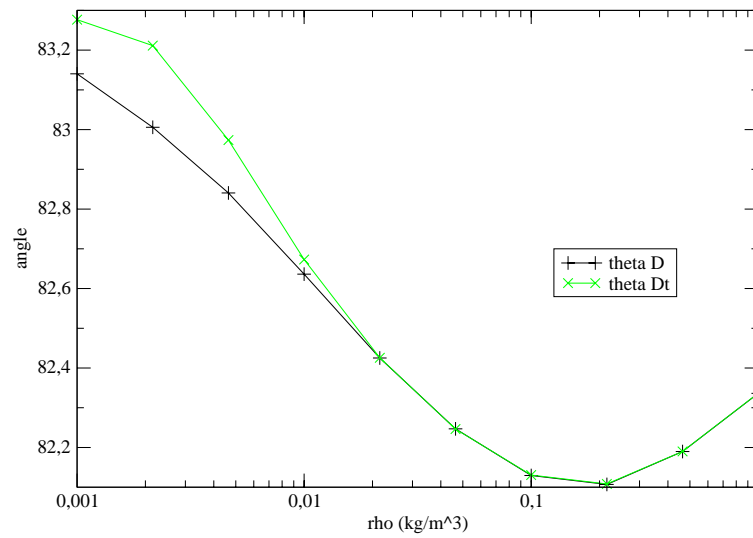


FIG. 7.67 – Les variations de l'angle θ issu de la plus grande valeur propre des tenseurs D et \tilde{D} en fonction de ρ .

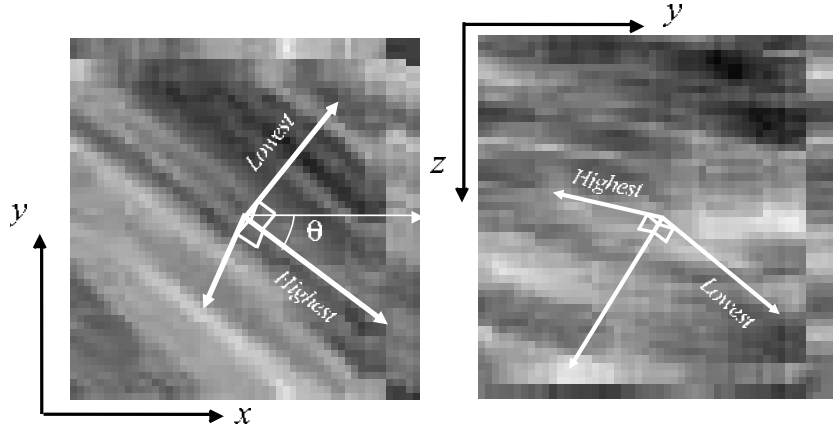


FIG. 7.68 – Visualisation des vecteurs propres

Tout d’abord, la figure 7.65 nous permet de remarquer un bon accord en limite de Knudsen avec le code Monte-Carlo/Marcheurs aléatoires et en limite fluide avec le solveur numérique “Stokes vers Darcy”. De plus, grâce aux courbes 7.66 et 7.67, on met en évidence des variations d’angle en fonction de la masse volumique et nous remarquons, comme pour le cas précédent, de légères différences d’angle entre les tenseurs D et \tilde{D} . La figure 7.68 nous montre que les vecteurs propres calculés par notre modèle sont en adéquation avec les directions privilégiées d’écoulement. Ceci montre l’importance de la prise en compte des phénomènes de transpiration thermique pour la modélisation d’écoulements de gaz raréfiés dans les milieux poreux.

7.2 Validation du module de TPS du code de rentrée MUPPETT

Nous allons ici réaliser des tests sans chimie, et sans évolution structurale, avec un seul gaz en présence. Et ceci pour valider le système macroscopique défini par (3.72 - 3.73) que nous rappelons ici :

$$\epsilon \partial_t \rho_0 - \operatorname{div}_x(\tilde{D} \nabla_x T_0) - \operatorname{div}_x(D \nabla_x \rho_0) = 0, \quad (7.9)$$

$$(1 - \epsilon) \rho_s C_v \partial_t T_0 - \operatorname{div}_x(K \nabla_x T_0) = 0, \quad (7.10)$$

7.2.1 Test sur le transfert de masse

Le gaz utilisé dans la simulation a les caractéristiques du monoxyde de carbone et le solide de la résine phénolique. Les valeurs numériques sont $P_{int} = 10000 \text{ Pa}$; $\rho_{int} = 0.11 \text{ kg/m}^3$; $T_{int} = 300 \text{ K}$.

La valeur de la chaleur spécifique figée à volume constant est fixée à $C_v = 800 \text{ J.kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$, et les coefficients $K = 0$ et $D = 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Le schéma de principe 7.69 nous montre les conditions aux limites qui sont établies sur le domaine représentant 1 cm dans l’épaisseur d’une protection thermique. Notamment, la condition de paroi située sur l’axe $x = 0$ et les conditions aux limites adiabatiques de chaque côté. En vue des températures intérieures et sur le bord, il n’y a pas de

transfert thermique ($\nabla_x T = 0$). On teste donc le terme de transport de masse ($(div)_x(D\nabla_x \rho)$). Et on décide de montrer les résultats à divers instants en ce qui concerne les variations de masse volumique dans le solide.

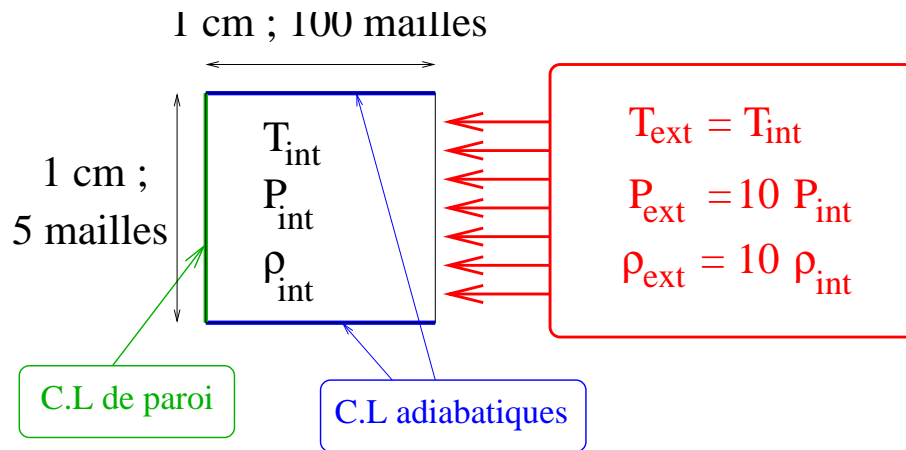


FIG. 7.69 – Schéma de principe du test.

La figure 7.70 montre la distribution de la masse volumique ρ à divers instants. Les courbes obtenues sont en adéquation avec nos prévisions. On remarque que la masse volumique augmente au cours du temps en se transportant vers le fond du domaine. La condition de paroi l'empêchant de s'échapper, la masse volumique de gaz augmente alors à l'intérieur du matériau.

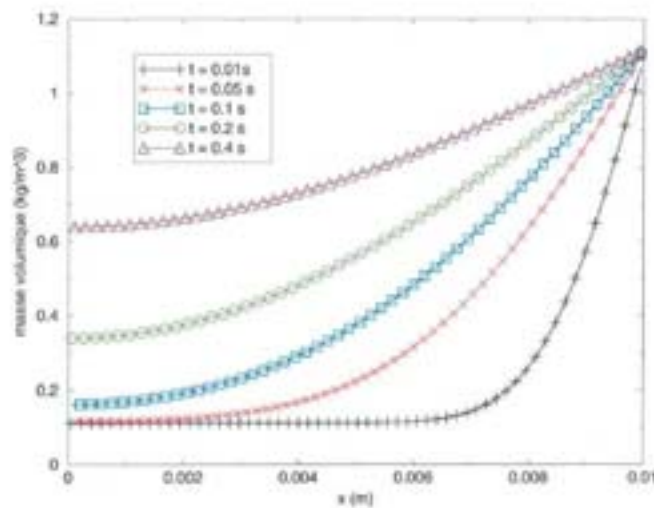


FIG. 7.70 – Evolution de la masse volumique dans la résine.

7.2.2 Test sur la transpiration thermique

Ce deuxième test est basé sur le même maillage et sur les mêmes valeurs intérieures. Les conditions aux limites adiabatiques et de paroi sont placées aux mêmes endroits que 7.69. La valeur de la chaleur spécifique figée à volume constant est fixée à $C_v = 800 J.kg^{-1}K^{-1}$, et les coefficients $K = 2$ et $\tilde{D} = 10^{-9} m^2.s^{-1}$. La différence vient des conditions aux limites $.ext$ comme le montre le schéma de principe 7.71.

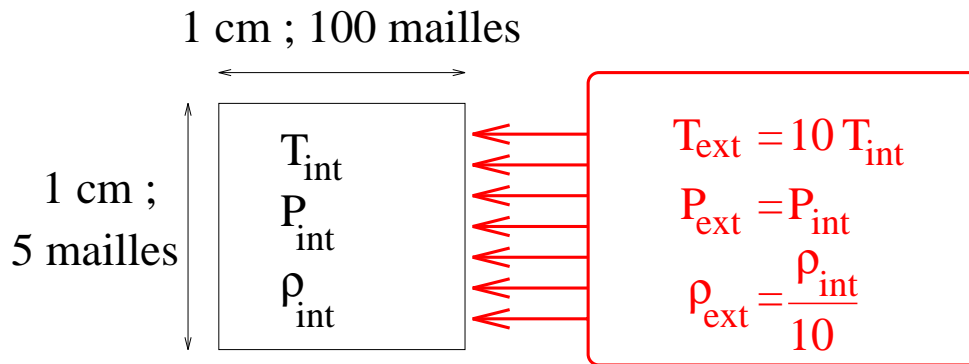


FIG. 7.71 – Schéma de principe du test.

Le gaz a toujours les caractéristiques du CO et le solide de la résine phénolique. On teste ici le terme de transpiration thermique. On présente les évolutions respectives de la pression, de la masse volumique et de la température à l'intérieur du solide.

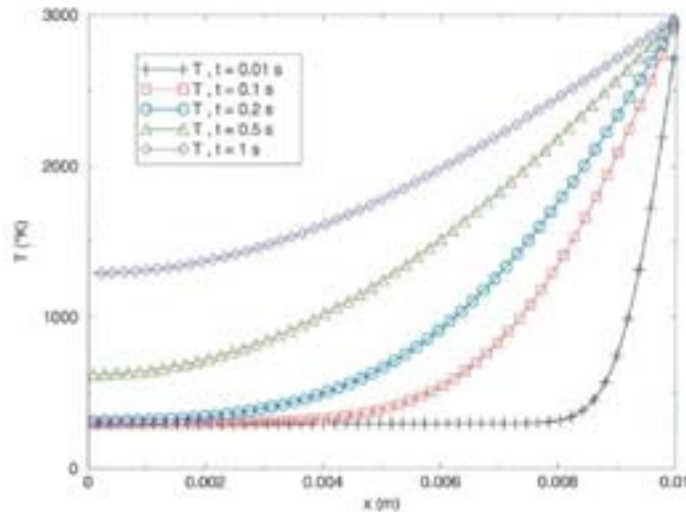


FIG. 7.72 – Evolution de la température dans la résine.

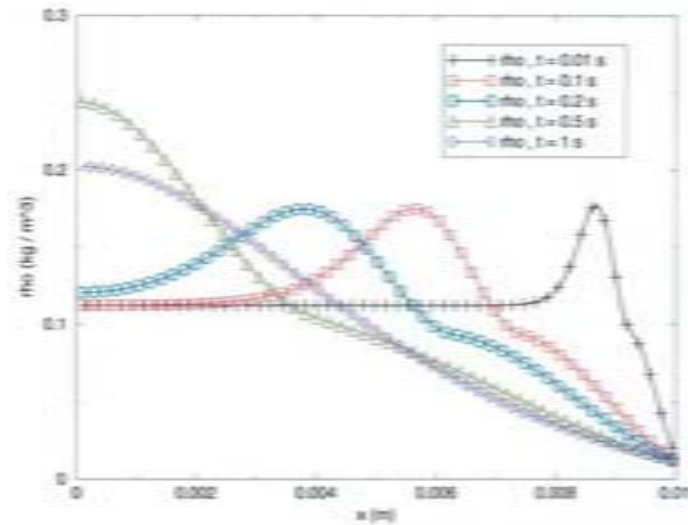


FIG. 7.73 – Evolution de la masse volumique dans la résine.

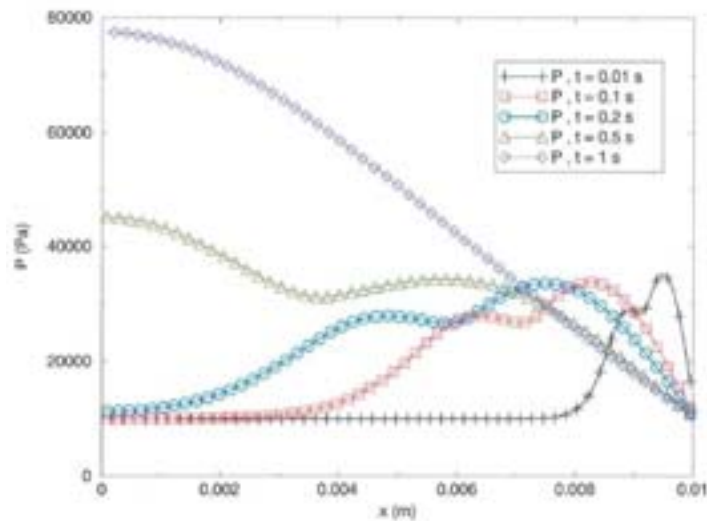


FIG. 7.74 – Evolution de la pression dans la résine.

On remarque une montée en température commençant sur le bord (voir figure 7.72). Le gaz se déplace donc vers le fond du domaine comme le montre la figure 7.73. Cette augmentation locale de la masse volumique et sa diminution en aval, provoque une augmentation de la pression visible sur la courbe 7.74.

On présente maintenant une comparaison entre l'évolution de la température calculée par le code MUPPETT et celle donnée par la solution analytique de diffusion de la température à travers un solide semi-infini :

$$T(x) = (T_{ext} - T_{int}) \operatorname{erfc}\left(\frac{x\sqrt{\rho_{resine}C_p}}{2\sqrt{\lambda t}}\right) + T_{int} \quad (7.11)$$

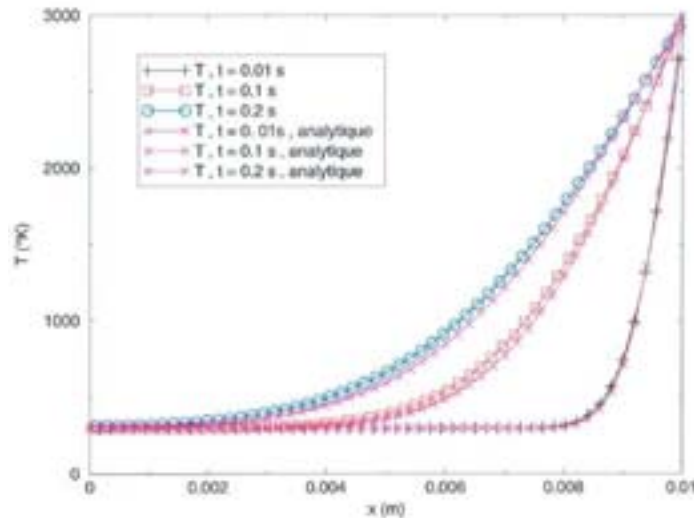


FIG. 7.75 – Comparaison avec la solution analytique.

On limite notre comparaison à des temps assez courts pour conserver l’hypothèse de milieu semi-infini. Et les légères différences viennent justement du fait que notre matériau est fini. On peut donc être très satisfait de cette comparaison qui valide le calcul du terme de transfert thermique.

Nous pouvons ici remarquer qu’au vu des conditions aux limites de ce test, nous avons $\nabla_x P = 0$, ce qui signifie que si l’on avait résolu ce problème en utilisant une loi de Darcy (équation (3.88)), nous aurions directement $u = 0$ et le gaz n’entrerait jamais en mouvement, contrairement à la réalité et contrairement à notre simulation.

7.2.3 La base de donnée US 66

Pour la suite, afin de faire des tests numériques sur des valeurs de pression, température et masse volumique plus physiques, nous allons nous baser sur la table des propriétés standard d’atmosphère ([45]). La “US Standard Atmosphere” a été écrite en 1976, elle est définie en se basant sur une température de $288.15K$ au niveau de la mer et en considérant que le 0 km

géopotential correspond à une pression de 1013.25hPa. Dans les unités S.I. elle donne :

Altitude (<i>m</i>)	température (<i>K</i>)	gravité (<i>m/s</i> ²)	pression (<i>N/m</i> ²)	densité (<i>kg/m</i> ³)	viscosité dynamique (<i>N.s/m</i> ²)	libre parcours moyen (<i>m</i>)
-1000	294.66	9.810	113900	1.347	0.1821 10 ⁻⁴	0.4400055479 10 ⁻⁷
0	288.16	9.807	10130	1.225	0.1789 10 ⁻⁴	0.4806501491 10 ⁻⁷
1000	281.66	9.804	89880	1.112	0.1758 10 ⁻⁴	0.5262955922 10 ⁻⁷
2000	275.16	9.801	79500	1.007	0.1726 10 ⁻⁴	0.5774011592 10 ⁻⁷
3000	268.67	9.797	70120	0.9093	0.1694 10 ⁻⁴	0.6348811380 10 ⁻⁷
4000	262.18	9.794	61660	0.8194	0.1661 10 ⁻⁴	0.6993220631 10 ⁻⁷
5000	255.69	9.791	54050	0.7364	0.1628 10 ⁻⁴	0.7721948703 10 ⁻⁷
6000	249.20	9.788	47220	0.6601	0.1595 10 ⁻⁴	0.8549093403 10 ⁻⁷
7000	242.71	9.785	41110	0.5900	0.1561 10 ⁻⁴	0.9484416115 10 ⁻⁷
8000	236.22	9.782	35650	0.5258	0.1527 10 ⁻⁴	0.1055477972 10 ⁻⁶
9000	229.74	9.779	30800	0.4671	0.1493 10 ⁻⁴	0.1177982227 10 ⁻⁶
10000	223.26	9.776	26500	0.4135	0.1458 10 ⁻⁴	0.1318039569 10 ⁻⁶
15000	216.66	9.761	12110	0.1948	0.1422 10 ⁻⁴	0.2771125285 10 ⁻⁶
20000	216.66	9.745	5529.	0.8891 10 ⁻¹	0.1422 10 ⁻⁴	0.6069511159 10 ⁻⁶
25000	221.56	9.730	2549.	0.4008 10 ⁻¹	0.1448 10 ⁻⁴	0.1355675486 10 ⁻⁵
30000	226.52	9.715	1197.	0.1841 10 ⁻¹	0.1475 10 ⁻⁴	0.2973462630 10 ⁻⁵
40000	250.36	9.684	287.	0.3996 10 ⁻²	0.1601 10 ⁻⁴	0.1415152507 10 ⁻⁴
50000	270.66	9.654	79.78	0.1027 10 ⁻²	0.1704 10 ⁻⁴	0.5633767700 10 ⁻⁴
60000	247.03	9.624	21.96	0.3097 10 ⁻³	0.1584 10 ⁻⁴	0.1817644845 10 ⁻³
70000	219.59	9.594	5.2	0.8283 10 ⁻⁴	0.1438 10 ⁻⁴	0.6570117858 10 ⁻³
80000	198.65	9.564	1.1	0.1846 10 ⁻⁴	0.1321 10 ⁻⁴	0.2713724500 10 ⁻²

Et le libre parcours moyen est obtenu en supposant l'air comme un gaz parfait et en utilisant donc la formule :

$$l_{pm} = \frac{\mu \sqrt{(RT)}}{P}.$$

7.2.4 Test sur l'interpolation des tenseurs de transfert

Ce test sert à vérifier si la lecture ainsi que l'interpolation des coefficients de transfert se passe correctement. Tout d'abord nous calculons une base de données de D , \tilde{D} et K pour une géométrie fixée sur une plage de ρ et de T assez grande pour être utilisable par le code macroscopique.

Le calcul des coefficients de transfert

Notre code de calcul des coefficients de transport va donc fournir avant toute chose une tabulation de coefficients sur la géométrie d'un tube circulaire infini de diamètre $10\mu m$ pour $T \in [200K; 4100K]$ par pas de 100 et $\rho \in [10^{-6}kg/m^3; 10kg/m^3]$ sur 15 points en échelle logarithmique.

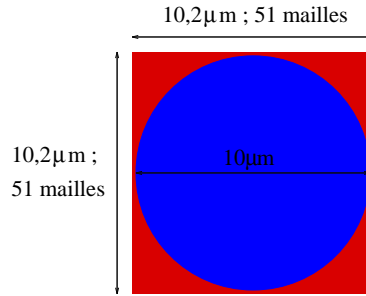


FIG. 7.76 – géométrie de calcul HAMMLET.

Le test du code MUPPETT

Une fois ces tabulations calculées, on lance un calcul avec le code de simulation MUPPETT qui simule, grâce à ces tabulations le comportement d'un matériau en résine phénolique poreux particulier, décrit sur la figure 7.77 :

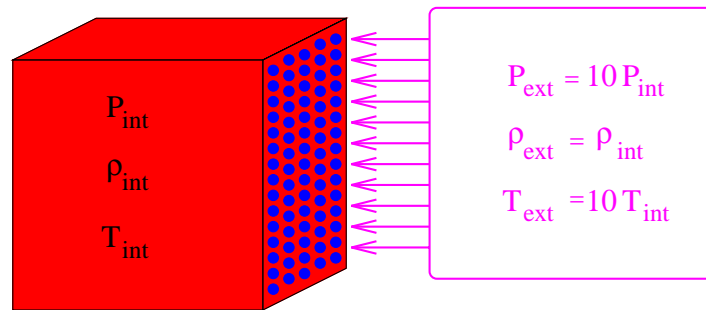


FIG. 7.77 – géométrie équivalente de calcul MUPPETT.

On fixe $P_{int} = 100 Pa$; $\rho_{int} = 0.0011 kg/m^3$; $T_{int} = 300K$ et on trace l'évolution de ces grandeurs à divers instants :

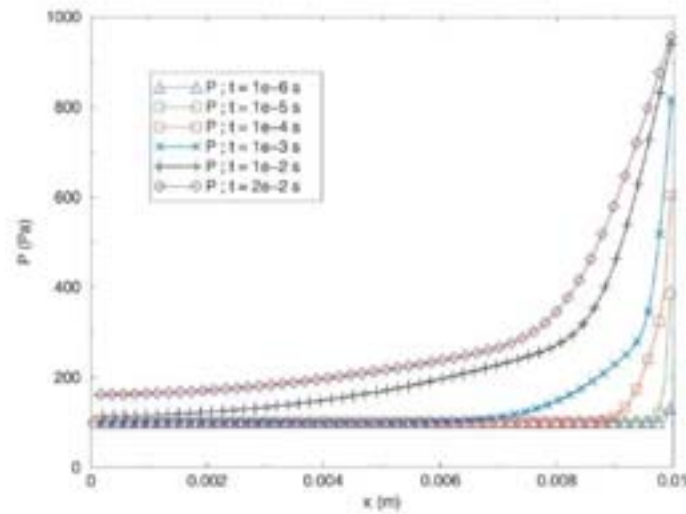


FIG. 7.78 – Evolution de la pression dans la résine.

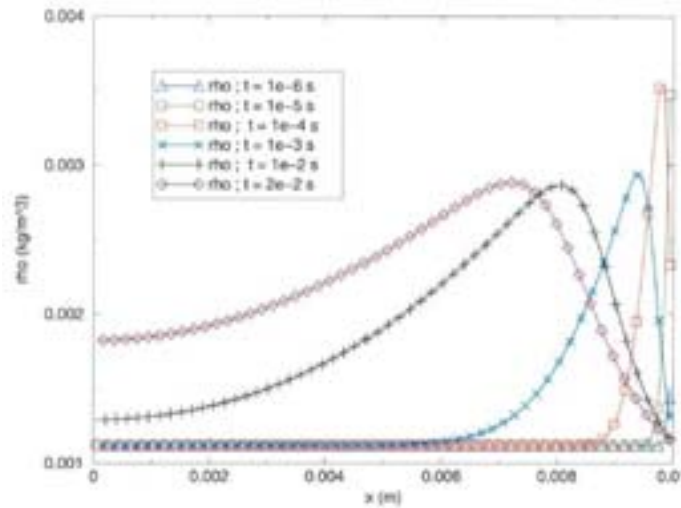


FIG. 7.79 – Evolution de la masse volumique dans la résine.

La figure 7.78 montre l'évolution de la pression à l'intérieur du matériau et la figure 7.79 montre l'évolution de la masse volumique. On peut remarquer que la courbe n'a plus du tout l'allure d'une gaussienne. En effet, si la masse volumique et la température sont fortes, le coefficient est élevé et le transport s'accélère. Si au contraire, le gaz est raréfié et que la température est faible, le coefficient est faible et limite la diffusion de masse. Enfin, la courbe 7.80 présente l'évolution de la température dans le matériau. Bien que ce soit un peu moins visible, on peut remarquer l'effet d'un coefficient \tilde{D} dépendant de ρ et de T . Les résultats sont en adéquation avec nos prévisions. On peut valider l'interpolation des coefficients D et \tilde{D} .

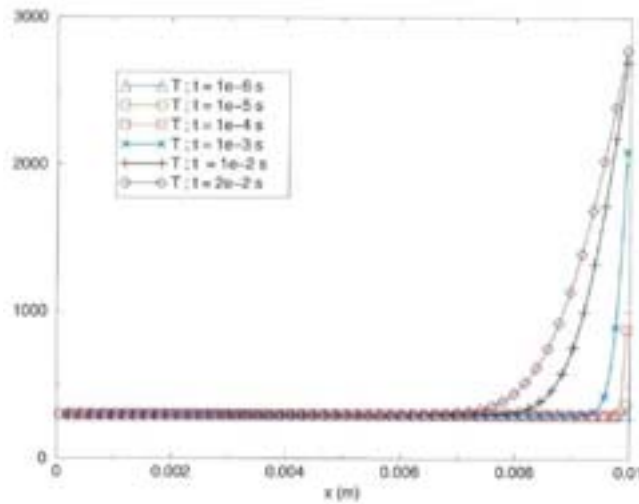


FIG. 7.80 – Evolution de la température dans la résine.

7.2.5 Validation de la méthode implicite

Nous allons ici comparer les résultats obtenus par l'explicite et l'implicite, on augmentera alors de plus en plus le pas de temps pour les deux méthodes de manière à montrer l'efficacité de notre solveur implicite. Sur l'exemple d'un matériau constitué de microtubes de diamètre $10 \mu m$, avec les coefficients D et \tilde{D} d'HAMMLET $\tilde{K} = 0$ et $K = 2$, on prend les valeurs suivantes de pression et de masse volumique $P_{int} = 100 Pa$, $\rho_{int} = 0.0011 kg/m^3$, $P_{ext} = 1000 Pa$, $\rho_{ext} = 0.0011 kg/m^3$, on obtient l'évolution de la masse volumique pour la méthode explicite et implicite pour des pas de temps de plus en plus grand illustré par la figure (7.81).

On remarque alors la parfaite concordance des deux méthodes pour des pas de temps de $10 \mu s$ et on remarque aussi que si l'on multiplie par 10 le pas de temps pour l'implicite, l'erreur relative faite avec l'explicite est minimale. De plus, si l'on continue à augmenter le pas de temps, l'implicite arrive à converger (ce qui n'était pas possible avant les modifications) et de plus, pour les pas de temps de l'ordre de la milliseconde, le processus de contrôle du Newton se met en route, permettant une convergence. On a donc validé pleinement la méthode implicite mise en œuvre.

rho a t=0.01s dans un materiau constitue de tubes capillaires de 10 micromètres

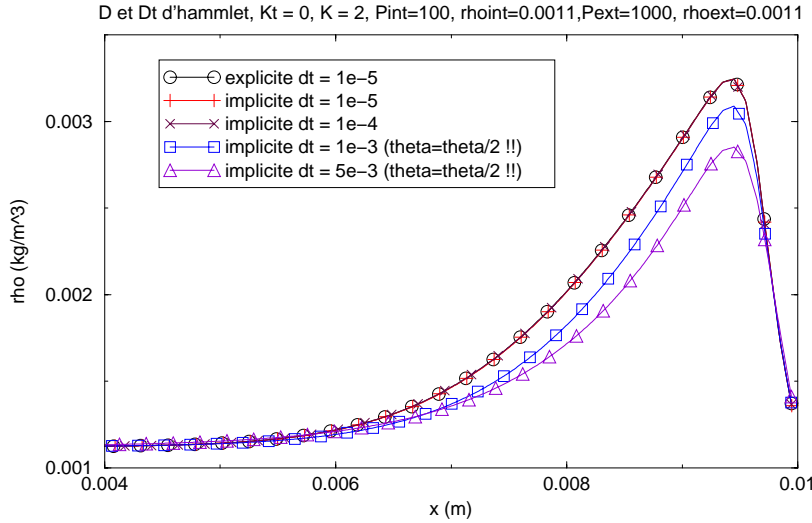


FIG. 7.81 – Comparaison explicite implicite sur l'évolution de la masse volumique.

7.2.6 Comparaison de notre modèle avec Darcy “compressible”

Cet exemple illustre l'influence de la loi de transport utilisée dans le modèle macroscopique. Nous allons comparer des résultats obtenus en utilisant les coefficients de transport calculés par notre code sur la géométrie du tube de diamètre 10 micromètres et les résultats obtenus en utilisant une loi “Darcy compressible” où le coefficient D est calculé par notre code mais où \tilde{D} est calculé de telle sorte que nous soyons en régime fluide, c'est-à-dire $\frac{\tilde{D}T}{D\rho} = 1$ ce qui nous amène à :

$$\tilde{D} = \frac{\rho D}{T}.$$

Et donc 3.74 nous amène à

$$\rho v = -D \nabla \rho + \tilde{D} \nabla T, \quad (7.12)$$

$$\rho v = -D \nabla \rho + \frac{\rho D}{T} \nabla T, \quad (7.13)$$

or si on utilise la loi des gaz parfaits $\nabla \rho = \frac{\nabla P}{RT} - \frac{\rho}{T} \nabla T$ et donc

$$\rho v = -\frac{D}{RT} \nabla P - \frac{\rho D}{T} \nabla T + \frac{\rho D}{T} \nabla T,$$

Ce qui nous amène à une vitesse :

$$v = -\frac{D}{P} \nabla P \quad (7.14)$$

La porosité est choisie comme précédemment égale à $\epsilon = 0.1375$. L'état initial du gaz dans les pores (pression, température) est donné par la table d'atmosphère standard à 40 km. On fixe des conditions initiales à la paroi identiques aux conditions à l'intérieur des pores en terme de densité mais la température est prise 5 fois plus grande.

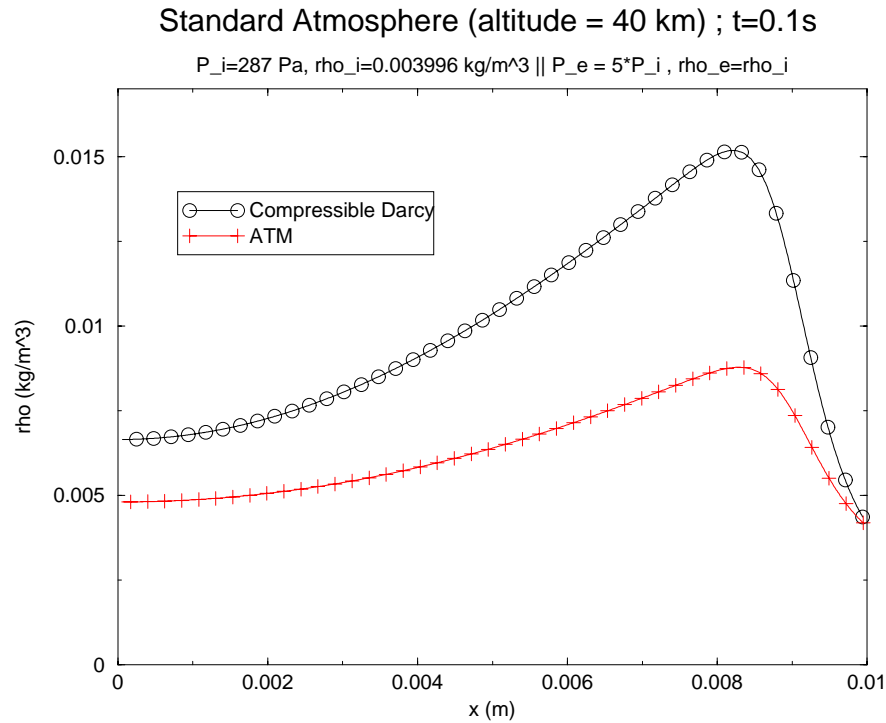


FIG. 7.82 – Comparaison entre le modèle asymptotique de transport et la loi de Darcy compressible.

La figure 7.82 montre l'évolution de la masse volumique à l'intérieur des pores du matériau après 0.1 seconde obtenue par le modèle asymptotique de transport et par la loi "Darcy compressible". La différence est remarquable : la loi de Darcy compressible surestime la masse volumique par un facteur supérieur à 2. Ceci montre que l'utilisation d'une loi de Darcy compressible dans un tel régime (40 km d'altitude) amène à de mauvais résultats de simulation.

Enfin, l'influence du régime est montrée à la figure 7.83. La température imposée à la surface du matériau est 2 fois plus grande que la température dans les pores. Les solutions données respectivement par le modèle asymptotique de transport et par la loi de Darcy compressible sont présentées pour des conditions à l'intérieur des pores correspondants à une altitude de 40 km, 30 km, 29 km et 27 km. Comme nous pouvons le prévoir, les différences entre les deux modèles, très importantes pour de hautes altitudes, (i.e. nombre de Knudsen très grand), deviennent plus petites au fur et à mesure que l'altitude diminue et les deux modèles fournissent presque la même prédiction à une altitude de 27 km.

Comparison compressible Darcy / ATM for various regimes at t= 0.1s

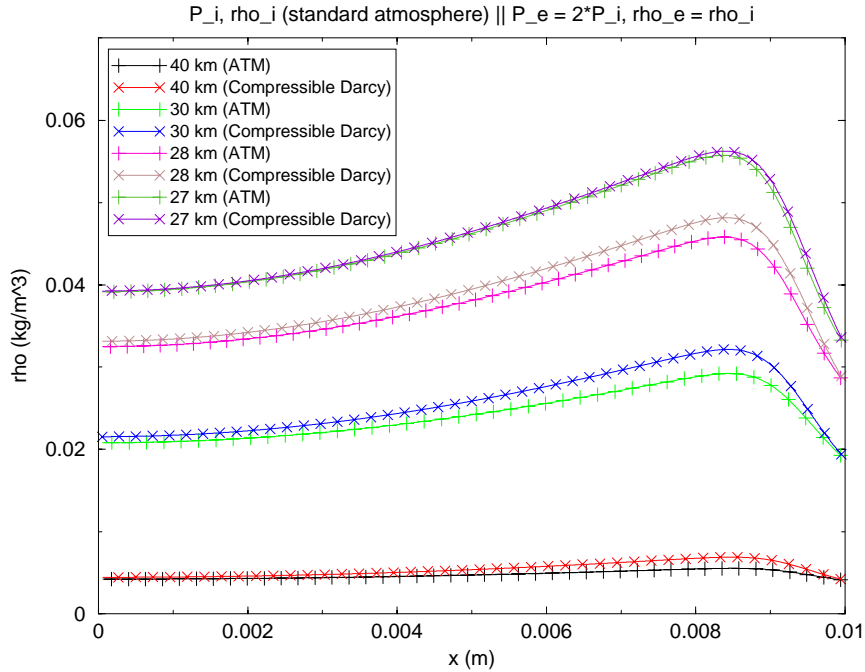


FIG. 7.83 – Comparaison entre le modèle asymptotique de transport et la loi de Darcy compressible pour divers régimes.

7.2.7 Test avec réaction chimique et évolution structurale

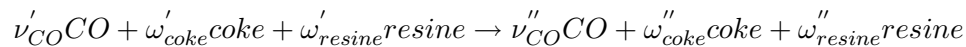
Dans ce test, nous allons introduire une réaction chimique ainsi que l'évolution structurale associée dans le modèle. Pour cela, il nous faut donc introduire une réaction chimique et les phases solides et gazeuses associées ainsi que la constante de réaction.

La réaction de “pyrolyse”

La réaction que l'on considère représente de manière très simplifiée la réaction de pyrolyse :



Cette réaction traduit le phénomène physique principal : la dégradation de la résine en coke et la création de gaz. Ici, on suppose que la seule espèce gazeuse est le monoxyde de carbone (CO) (qui est en réalité l'espèce principale à haute température). Donc, dans notre modèle, nous aurons deux solides : la résine et le coke, et un gaz : le CO. Cette réaction s'écrit avec notre formalisme :



et on prendra comme valeur pour les coefficients stœchiométriques :

$$\begin{aligned} \nu'_{CO} &= 0 & ; & \nu''_{CO} = 0.48 \\ \omega'_{coke} &= 0 & ; & \omega''_{coke} = 0.52 \\ \omega'_{resine} &= 1 & ; & \omega''_{resine} = 0 \end{aligned}$$

la constante de réaction τ^v est définie par la formule (6.8) :

$$\tau^v = K_{f_k}(T) \prod_{i=1}^{n_e} (\epsilon \rho_{ig})^{\nu'_{ik}} \prod_{i=1}^{n_s} (\rho_{is})^{\omega'_{ik}} - K_{b_k}(T) \prod_{i=1}^{n_e} (\epsilon \rho_{ig})^{\nu''_{ik}} \prod_{i=1}^{n_s} (\rho_{is})^{\omega''_{ik}} \quad (7.16)$$

$$\tau^v = K_f(T) (\epsilon \rho_{CO})^{\nu'_{CO}} \rho_{resine}^{\omega'_{resine}} \rho_{coke}^{\omega'_{coke}} - K_b(T) (\epsilon \rho_{CO})^{\nu''_{CO}} \rho_{resine}^{\omega''_{resine}} \rho_{coke}^{\omega''_{coke}}. \quad (7.17)$$

En tenant compte des valeurs des coefficients stœchiométriques, l'expression de τ^v se simplifie en :

$$\tau^v = K_f(T) \rho_{resine}^{\omega'_{resine}} - K_b(T) (\epsilon \rho_{CO})^{\nu''_{CO}} \rho_{coke}^{\omega''_{coke}}. \quad (7.18)$$

De plus nous allons considérer que la réaction est irréversible, et donc que l'on a $K_b(T) = 0$, ce qui nous amène finalement :

$$\tau = \tau^v = K_f(T) \rho_{resine}^{\omega'_{resine}}. \quad (7.19)$$

$K_f(T)$ est donné par une loi d'Arrhenius "modifiée" :

$$K_f(T) = AT^B \exp\left(-\frac{C}{T}\right) \rho_{resine}^{0.29}. \quad (7.20)$$

Le terme $\rho_{resine}^{0.29}$ est là pour tenir compte du fait que cette unique réaction représente en fait un ensemble complexe de réactions chimiques. Nous allons inclure ces données dans le modèle complet défini par (5.73 - 5.74 - 5.75 - 5.76 - 5.77). Pour compléter la mise en place du modèle complet, il nous faut un modèle d'évolution structurale microscopique. On va supposer que les pores restent cylindriques mais que leur rayon augmente au fur et à mesure que la résine est consommée. Nous allons donc précalculer grâce à HAMMLET une tabulation des coefficients $K(T, \epsilon)$, $D(\rho, T, \epsilon)$ et $\tilde{D}(\rho, T, \epsilon)$. Nous choisissons alors comme cellule élémentaire un microtube de section circulaire et de $10\mu m$ de diamètre. L'évolution structurale nous amène à précalculer les coefficients sur plusieurs géométries comme le montre le schéma de principe 5.2.

Nous réécrivons le système en le simplifiant pour ne prendre en compte que cette réaction, et on obtient :

$$\epsilon(x, t) \partial_t \rho_g - \operatorname{div}_x(D \nabla_x \rho_g) - \operatorname{div}_x(\tilde{D} \nabla_x T) \quad (7.21)$$

$$-(\nu_g'' - \nu_g') \tau = 0 \quad (7.22)$$

$$\partial_t \rho_{resine} - (\omega_{resine}'' - \omega_{resine}') \tau = 0 \quad (7.23)$$

$$\partial_t \rho_{coke} - (\omega_{coke}'' - \omega_{coke}') \tau = 0 \quad (7.24)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t (\rho_{resine} e_{resine}(T) + \rho_{coke} e_{coke}(T)) \\ & - \operatorname{div}_x(\tilde{K} \nabla_x \rho_{ig}) - \operatorname{div}_x(K \nabla_x T) = 0, \end{aligned} \quad (7.25)$$

$$\epsilon(x, t) = 1 - \sum_{k=1}^2 \epsilon_k(x, t). \quad (7.26)$$

Les conditions initiales et aux limites

L'initialisation

On initialise le matériau par la donnée d'une pression intrinsèque $P_{int}^{initiale}$ et d'une masse volumique de gaz $\rho_{COint}^{initial}$ à l'intérieur du matériau. On décide de commencer notre simulation à

une température telle que le matériau commence juste à se fissurer, nous noterons cet instant t_0 . Nous prendrons comme température $T_{int}^{initiale} = 400K$ ce qui paraît être un bon ordre de grandeur d'après les simulations. Et nous posons une porosité initiale $\epsilon^{initiale} = 0.137$. Une pression $P_{intrinsic}^{initiale} = 252Pa$ correspondant à la pression à l'instant t_0 nous donne $\rho_{COintrinsic}^{initiale} = 0.002122kg/m^3$, ce qui nous amène à prendre une pression vraie $P_{int}^{initiale} = \epsilon P_{COintrinsic}^{initiale} = 34.524Pa$ et une masse volumique vraie $\rho_{COint}^{initiale} = \epsilon \rho_{COintrinsic}^{initiale} = 0.00029077kg/m^3$. Maintenant que les conditions initiales à l'intérieur du matériau sont fixées, il reste à définir des conditions aux limites.

Les conditions aux limites

Pour définir les valeurs de pression et de masse volumique à appliquer sur un des bords du domaine de calcul qui représente la paroi du système de protection thermique, nous allons utiliser des données représentant qualitativement la rentrée atmosphérique terrestre d'une sonde de type Stardust ou FIRE II ([9], [46]). Ceci permettra de valider au moins qualitativement notre modèle sur des données représentatives.

Nous définissons une loi d'évolution en pression et en masse volumique de gaz présentée sur les courbes suivantes.

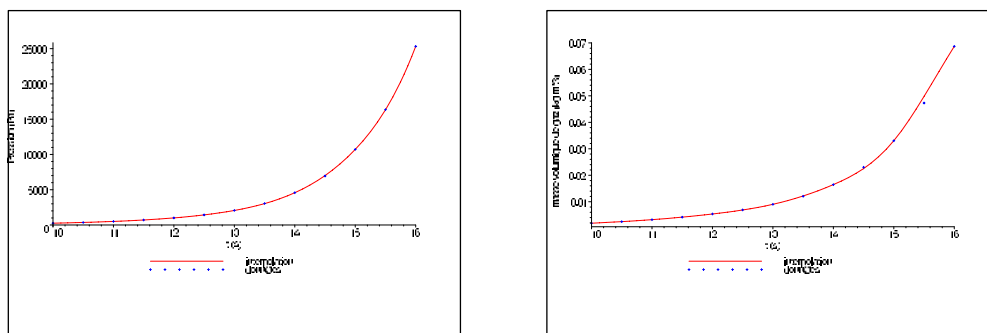


FIG. 7.84 – Evolution de la pression et de la masse volumique de gaz à la paroi (couche limite) en fonction du temps.

De plus, nous définissons un flux thermique de paroi de la même manière :

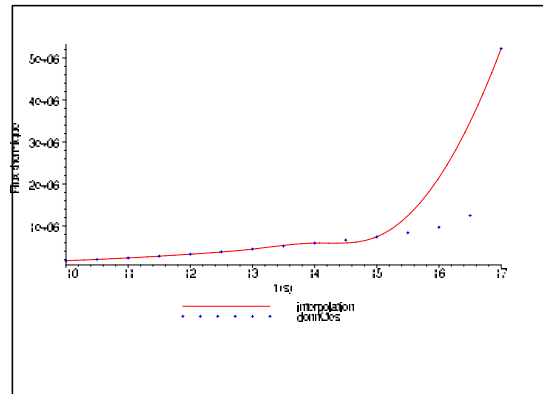


FIG. 7.85 – Evolution du flux thermique à la paroi en fonction du temps.

Ce flux thermique sera utilisé pour les conditions aux limites en ce qui concerne l'équation 7.25. Mais en l'état actuel, le code macroscopique, écrit en volumes finis ne permet pas de fixer un flux thermique à la paroi. Donc pour pallier cette lacune, nous le définissons dans le code en changeant la valeur du coefficient K à la paroi de la manière suivante.

Soit $l_f + 1$ la maille "fictive". Alors on définit $K_{l_f+1/2}$ par la formule :

$$K_{l_f+1/2} = \frac{\Delta x Q_{l_f+1}}{T_{l_f+1} - T_{l_f}}$$

Où Q_{l_f+1} est donné grâce aux conditions aux limites définies par la simulation (figure 7.85) et T_{l_f+1} est défini par une loi des gaz parfaits à partir des résultats 7.84.

Les résultats (1)

On va présenter des résultats numériques où la constante de réaction K_f est définie par $A = 1.33 \cdot 10^3 s^{-1}$; $B = 0$; $C = 8070^\circ K$ (voir (7.20)). On présente alors à la figure 7.86 l'évolution de la pression ainsi que l'évolution de la température à la figure 7.87. Les évolutions des différentes masses volumiques (gaz, résine et coke) sont représentées respectivement sur les figures 7.88, 7.89 et 7.90. Enfin, nous pouvons suivre l'évolution de la porosité à la figure 7.91

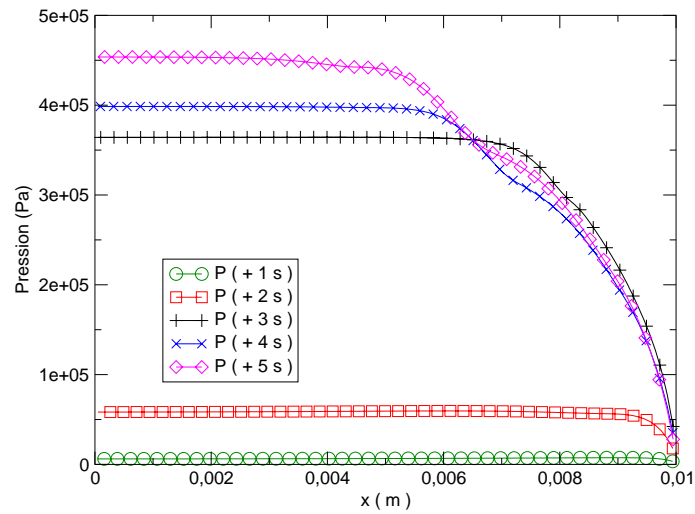


FIG. 7.86 – Evolution de la pression dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

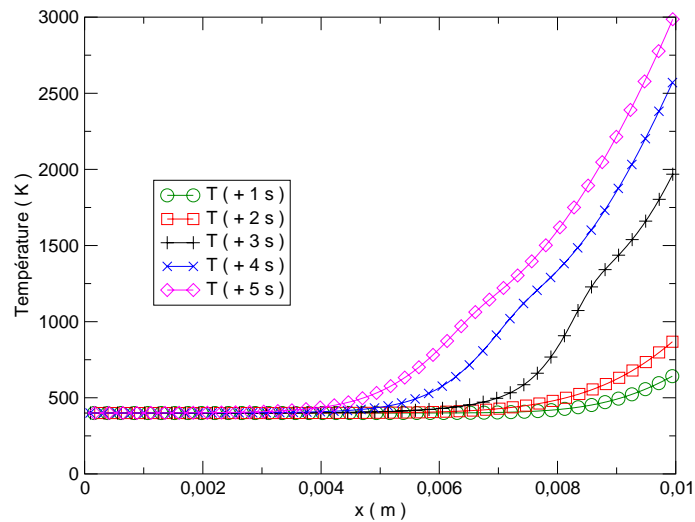


FIG. 7.87 – Evolution de la température dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

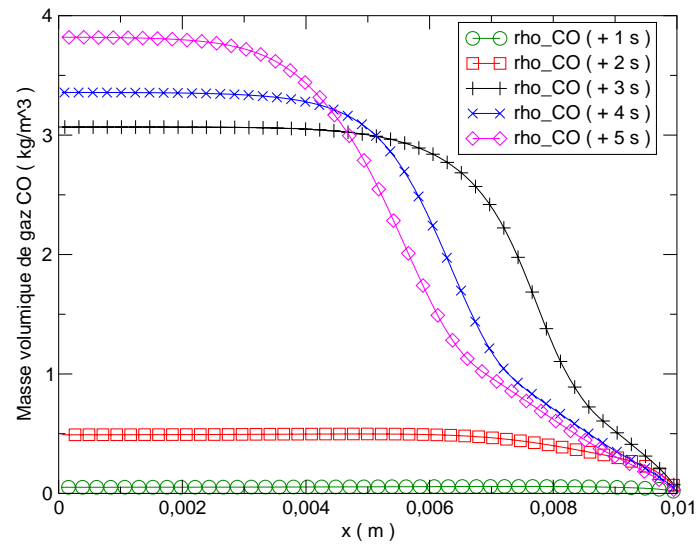


FIG. 7.88 – Evolution de la masse volumique du gaz CO dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

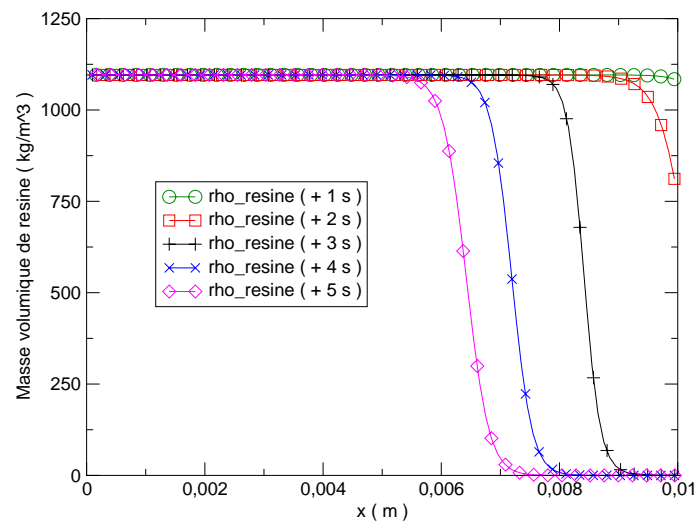


FIG. 7.89 – Evolution de la masse volumique apparente de résine dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

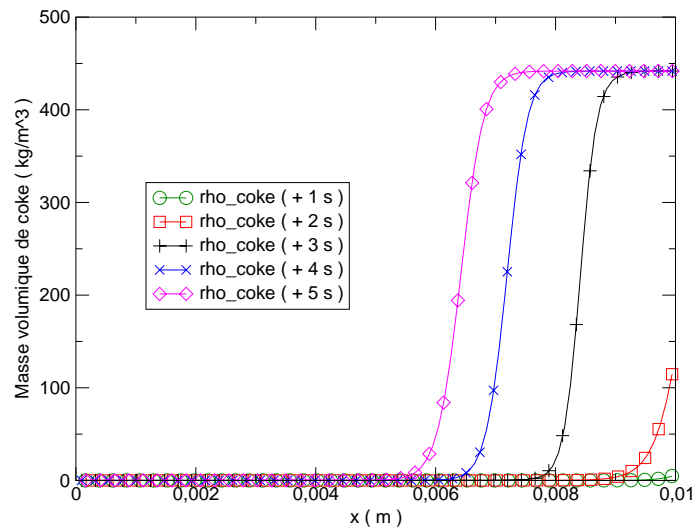


FIG. 7.90 – Evolution de la masse volumique apparente de coke dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

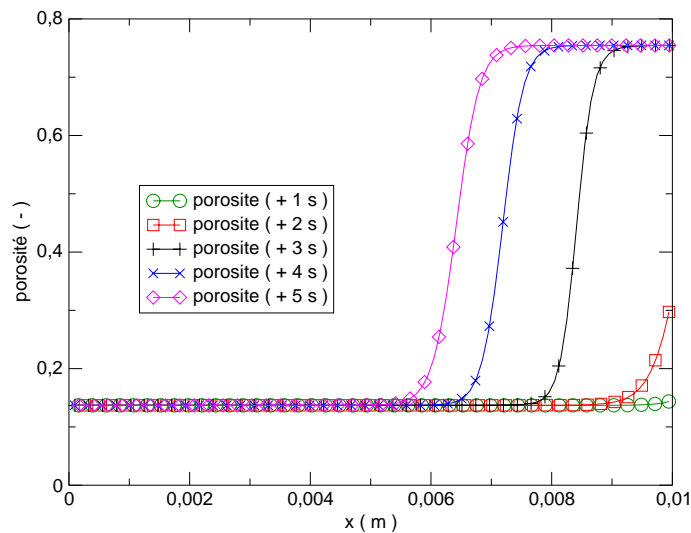


FIG. 7.91 – Evolution de la porosité dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

Suite à la montée en température appliquée au bord du domaine de calcul, qui représente la

paroi d'un système de protection thermique grâce aux conditions aux limites définies par les courbes 7.84 et 7.85, la pression dans le matériau augmente (figure 7.86) et celui-ci s'échauffe, comme le montre la figure 7.87. La réaction chimique définie par l'équation (7.15) se met en route, provoquant la consommation de la résine présente dans le matériau, elle voit donc sa masse volumique diminuer comme le montre la figure 7.89. En même temps, du coke est produit et donc sa masse volumique augmente au sein du matériau (figure 7.90). Du gaz CO est de même produit et la diffusion de masse met en mouvement ce gaz jusqu'à l'amener au fond du domaine de calcul où une condition de paroi est définie. Ce phénomène est parfaitement visible sur la figure 7.88. La résine étant consommée et la production de coke ne comblant pas le manque de matière dû à la consommation de résine, les pores du matériau s'ouvrent et la porosité augmente comme présenté à la figure 7.91.

Nous allons maintenant représenter l'évolution du rayon du microtube. On sait que pour une porosité $\epsilon_0 = 0.137$, le rayon du microtube a été choisi comme $r_0 = 5 \mu m$. On peut donc en déduire la largeur l de la cellule élémentaire dans laquelle la section du microtube est comprise par la formule :

$$\epsilon = \frac{\pi r_o^2}{l^2}. \quad (7.27)$$

Donc $l = \sqrt{\frac{\pi r_o^2}{\epsilon_0}}$ ce qui nous amène à $l \approx 23.94335 \mu m$. Grâce aux données de la courbe 7.91, et en appliquant aux valeurs de porosité la formule (7.28) :

$$r(x, t) = \frac{l^2 \epsilon(x, t)}{\pi} \quad (7.28)$$

On obtient les courbes suivantes, rapportées sur le graphe 7.92 :

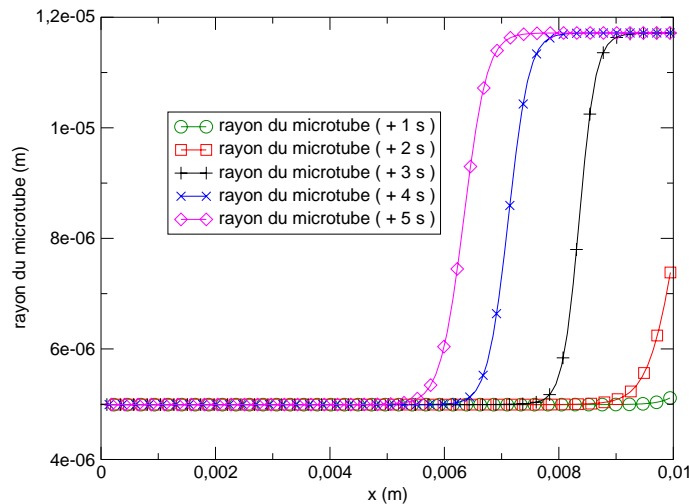


FIG. 7.92 – Evolution du rayon des microtubes dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

Enfin, si maintenant nous nous plaçons à 1.05 mm du bord, grâce aux courbes 7.92, il nous est possible de calculer la vitesse de recul de paroi à cet endroit en fonction du temps par la formule (7.29) :

$$\sigma_p = \frac{dr}{dt} \quad (7.29)$$

Cette vitesse est calculée par une méthode de différences finies, nous présenterons les résultats des trois méthodes classiques : centrées, backward, et forward :

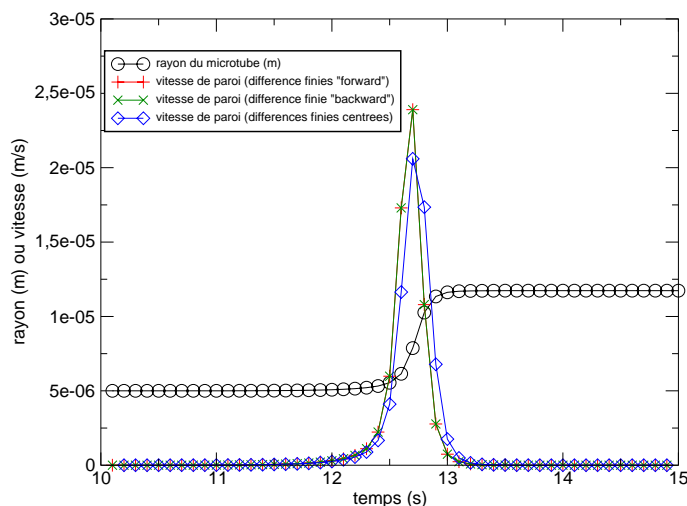


FIG. 7.93 – Evolution de la vitesse de paroi à 1.05 mm du bord en fonction du temps

Nous remarquons que pour cette simulation nous avons une valeur maximale de la vitesse de recul de paroi $\sigma_{p \text{ max}} = 25 \mu \text{ m.s}^{-1}$: ceci est bien inférieur à la vitesse d'écoulement du gaz et à la vitesse du son. L'hypothèse (5.13) qui est

$$\sigma_p^* \ll u^* \ll a^*,$$

est bien vérifiée.

Les résultats (2)

Maintenant, nous allons prendre d'autres valeurs pour la constante de réaction en divisant la valeur de A (Cf 7.20) par 10, ce qui nous donne une valeur de 133.

On présente donc les courbes d'évolution en pression et température 7.94 et 7.95. Les évolutions des différentes masses volumiques (gaz, résine coke) sont présentées respectivement aux figures 7.96, 7.97 et 7.98. Enfin, on présente l'évolution de la porosité sur la figure 7.99.

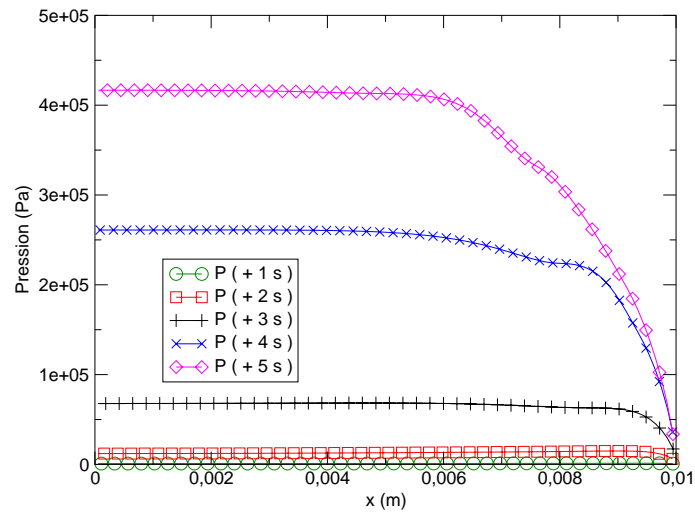


FIG. 7.94 – Evolution de la pression dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

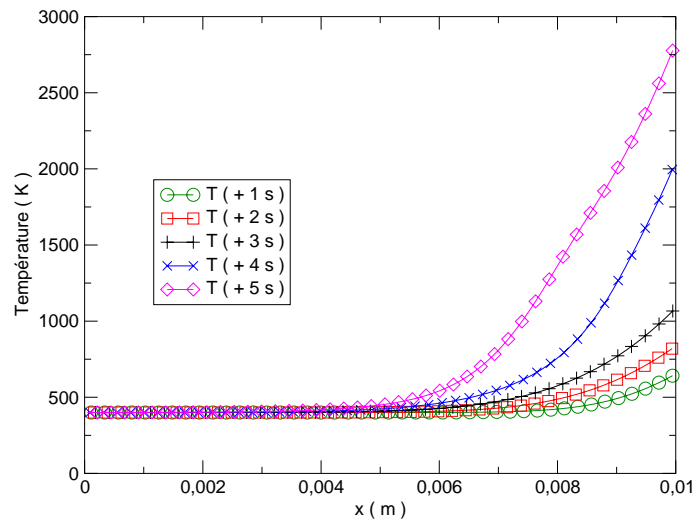


FIG. 7.95 – Evolution de la température dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

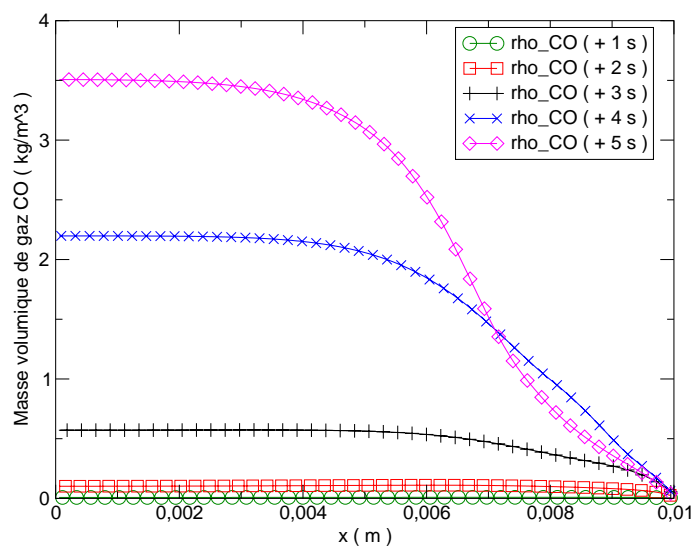


FIG. 7.96 – Evolution de la masse volumique du gaz CO dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

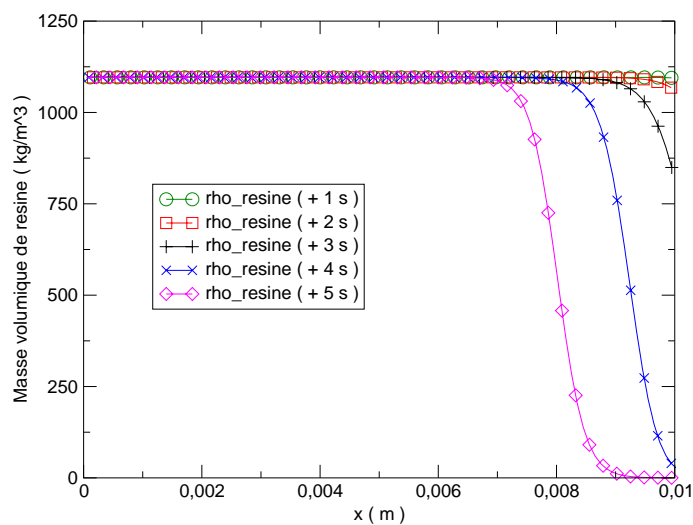


FIG. 7.97 – Evolution de la masse volumique apparente de résine dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

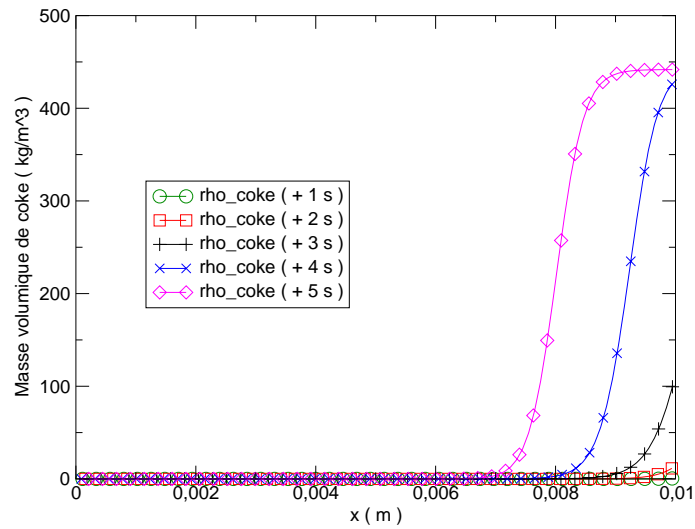


FIG. 7.98 – Evolution de la masse volumique apparente de coke dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

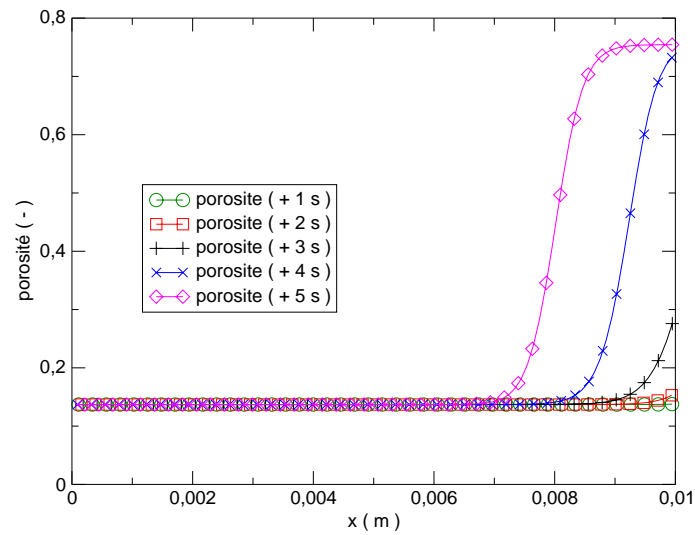


FIG. 7.99 – Evolution de la porosité dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

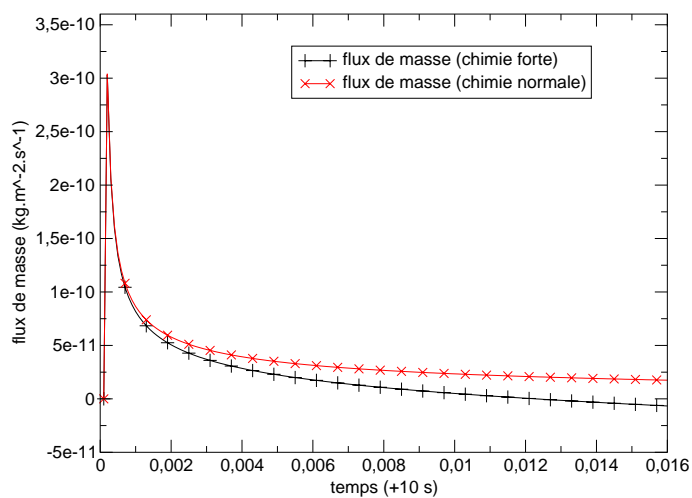


FIG. 7.100 – Evolution du flux de masse de gaz évacué à la paroi.

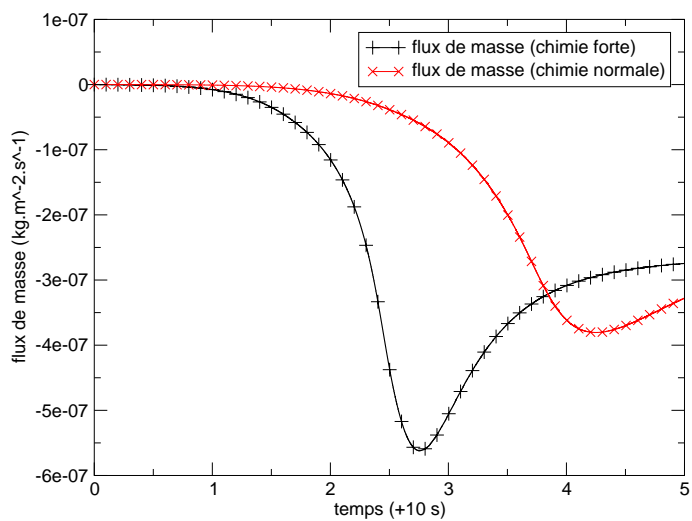


FIG. 7.101 – Evolution du flux de masse de gaz évacué à la paroi.

On remarque donc que l'avancement de la réaction dans ce cas-là est bien moins rapide que précédemment. En effet, si l'on compare les courbes de porosité 7.91 et 7.99 : bien que la valeur maximale obtenue soit la même ($\epsilon = 0.75$), on remarque que pour le premier exemple, au bout de 5 secondes, près de 3 millimètres de résine ont été complètement pyrolysés (Cf 7.89) alors que pour le second exemple, moins de 1.5 millimètre de résine a été transformé en coke (Cf 7.97). On remarque une évolution similaire pour la masse volumique de coke, en comparant le graphe 7.90 et 7.98. Ceci met en évidence l'importance du taux de réaction sur la vitesse de réaction. La connaissance du K_f pour nos applications est encore quelque chose de difficilement quantifiable précisément, de par les expériences ou par les simulations. Cette différence sur la vitesse de réaction nous amène à comparer les courbes sur les masses volumiques de gaz. Plus la réaction est rapide, plus la production de gaz est rapide et va s'accumuler au fond de notre échantillon de calcul, comme le montrent les courbes 7.88 et 7.96. De plus, ce gaz créé va s'évacuer à la paroi pour s'injecter dans la couche limite lors d'une rentrée atmosphérique, ce qui contribue à diminuer le flux thermique s'appliquant à la protection thermique. Si l'on regarde les courbes de comparaison des flux de masse $\rho_g V$ calculés sur le bord du domaine de calcul, on voit qu'au départ, le flux de masse est positif, la gaz pénètre de la couche limite dans les pores du matériau (Cf 7.100). Mais très rapidement, au bout de 2 ou 3 dixièmes de seconde suivant la valeur du K_f , ce flux devient négatif, ce qui montre que le matériau "dégaze" en évacuant le gaz en surplus dans les pores vers la couche limite, ce phénomène est d'autant plus rapide que la réaction est violente (Cf figure 7.101). Enfin, la courbe 7.103 nous permet de situer qu'au bout de 13 secondes, le front de pyrolyse est arrivé à 1.05 m m du bord de la protection. Ce qui correspond, si l'on fait le lien avec la courbe 7.95 à une température $T = 750K$.

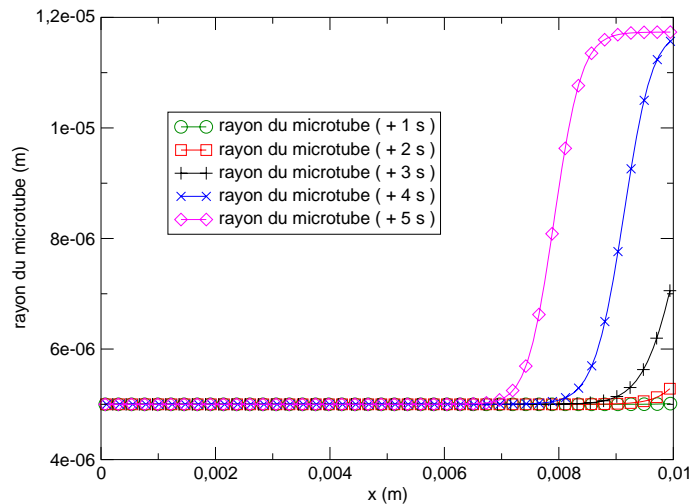


FIG. 7.102 – Evolution du rayon des microtubes dans le matériau pour différentes valeurs de temps.

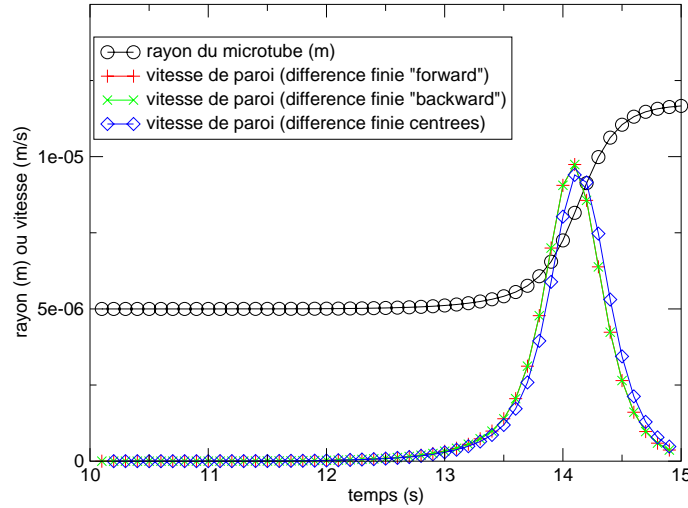


FIG. 7.103 – Evolution de la vitesse de paroi à 1.05 mm du bord en fonction du temps

7.2.8 Test 2D avec réaction chimique

Ce test a les mêmes caractéristiques que le précédent. Nous allons utiliser la réaction chimique définie au paragraphe 7.2.7. Les géométries microscopiques seront toujours des tubes. L'intérêt ici est de montrer les effets 2D du transfert de masse et de chaleur dans un matériau constitué de pores cylindriques comme précédemment, mais cette fois-ci ces tubes seront penchés d'un angle α par rapport à la normale au bord d'attaque.

Introduction : les paramètres à fournir

Nous allons ici nous intéresser à un test 2D effectué sur un domaine de matériau de 1cm de côté, qui sera maillé par 100*100 mailles. Nous voulons voir ici l'effet tensoriel des coefficients de transport sur le transport des gaz et sur la réaction chimique. Nous allons donc étudier un matériau dont les microtubes ne sont plus parallèles au sens de l'écoulement comme précédemment, mais penchés d'un angle $\alpha = 25^\circ$

Nous allons donc choisir comme coefficients :

– sur K

le tenseur K sera donc un tenseur diagonale de la forme

$$K(T, \epsilon) = \begin{pmatrix} (1 - \epsilon)\lambda_{CLINO} & 0 \\ 0 & (1 - \epsilon)\lambda_{ANTECLINO} \end{pmatrix},$$

où λ_{CLINO} est obtenu par la formule (6.21) et $\lambda_{ANTECLINO}$ par

$$\lambda_{ANTECLINO}(T, t) = \lambda_{ORTHO}(T, t)\sin(\alpha)^2 + \lambda_{PARA}(T, t) * \cos(\alpha)^2, \quad (7.30)$$

– Sur D et \tilde{D} nous choisirons de prendre

$$D = \begin{pmatrix} \cos(\alpha)^2 D_{tube} & \cos(\alpha)\sin(\alpha)D_{tube} \\ \cos(\alpha)\sin(\alpha)D_{tube} & \cos(\alpha)^2 D_{tube} \end{pmatrix},$$

Et de même pour \tilde{D} .

La réaction sera paramétrée comme pour le test 1D du paragraphe (7.2.7). Enfin, Nous allons fixer des conditions aux limites particulières afin de bien visualiser les effets 2D du matériau. Nous choisissons de fixer la masse volumique de CO identique à l'intérieur du matériau comme à l'extérieur $\rho_{int}^{initial} = \rho_{ext}^{initial} = 0.00029077kg/m^3$ mais nous allons prendre $P_{int}^{initial} = 34.524Pa$ et nous allons choisir pour P_{ext} de lui donner une forme de parabole sur le bord. C'est-à-dire :

$$P_{ext} = -\frac{8P_{int}}{9797}x^2 + \frac{8P_{int}}{97}x + \frac{8997P_{int}}{9797}$$

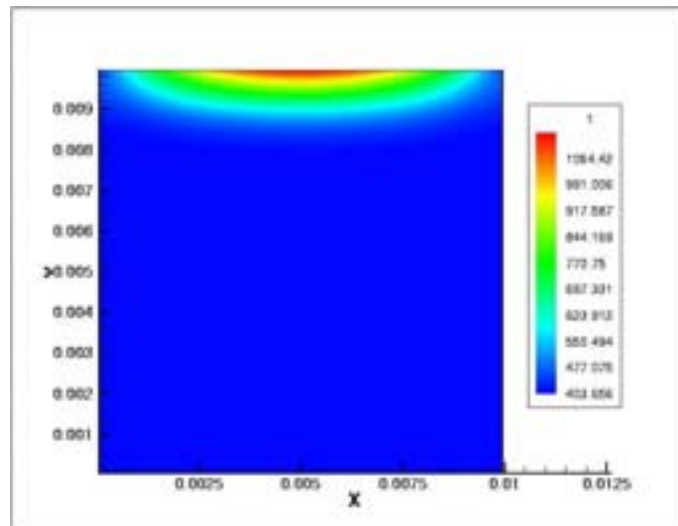
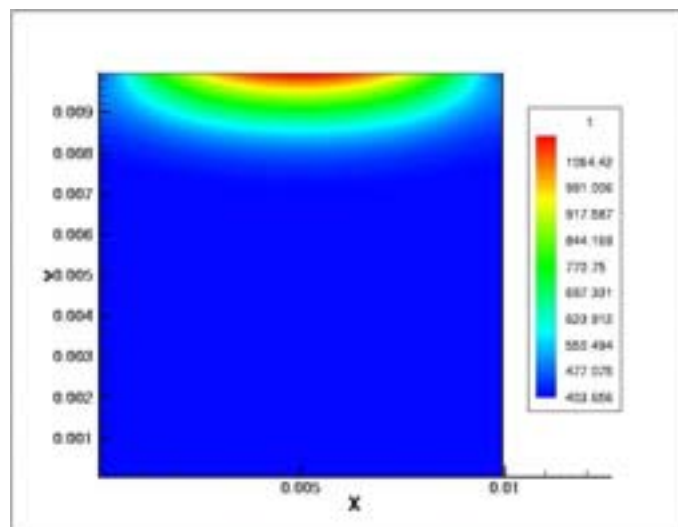
Ce qui signifie que nous chauffons le matériau sur le bord par un profil de température en parabole.

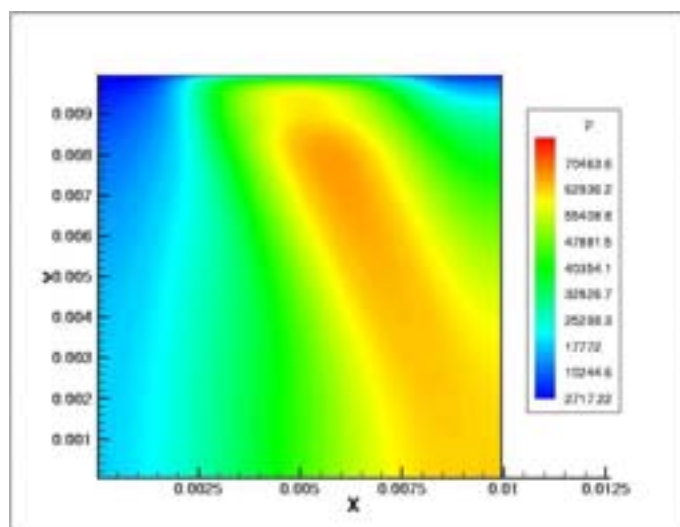
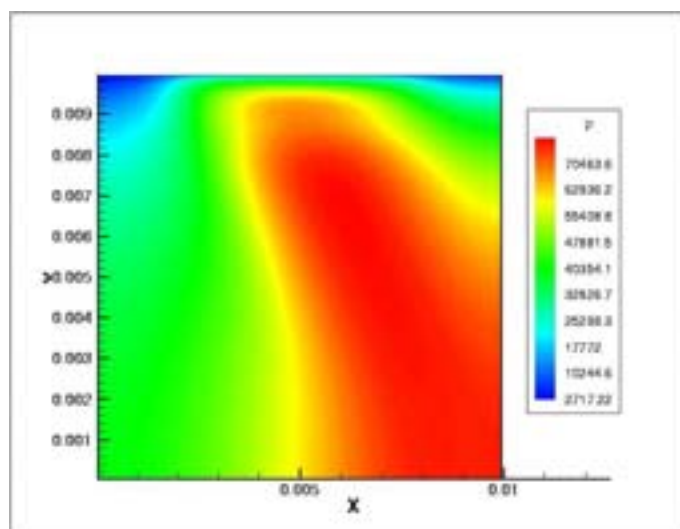
On obtient alors les résultats qui suivent, pris pour des temps de chauffe de 0.3 et 0.6 seconde. De cette manière, il nous est possible de suivre l'avancement de la réaction.

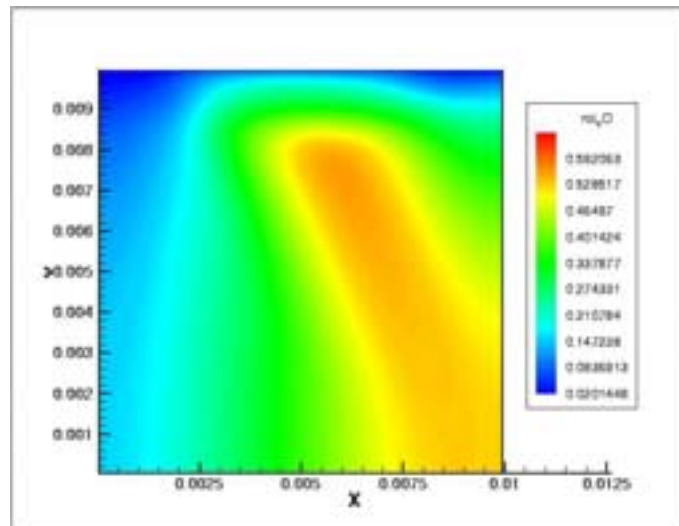
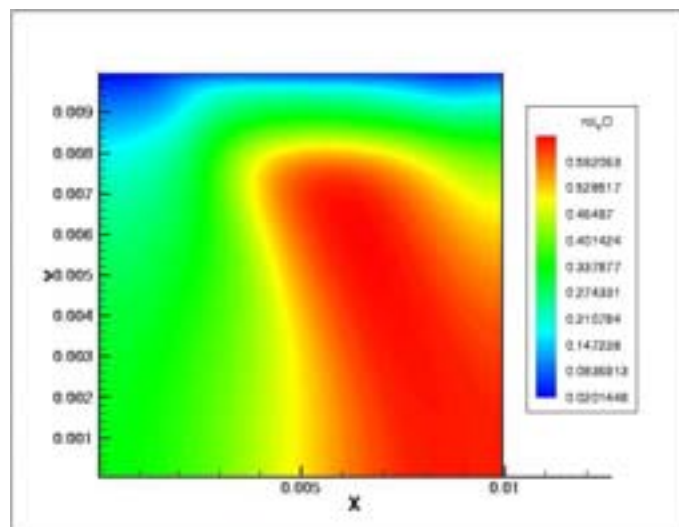
A $t = 0.3 s$, le matériau commence juste à s'échauffer (figure 7.104), ce qui fait monter la pression comme le montre la figure 7.106. Compte tenu de l'orientation des tubes à $\alpha = 25^\circ$, on s'attend à ce que le gaz s'écoule dans cette direction privilégiée. C'est en effet ce qu'on constate sur la pression et sur la masse volumique de gaz (Cf figure 7.108). Le matériau n'étant pas encore très chaud, même sur le bord, la réaction commence à peine et les courbes 7.110 et 7.112 montrent respectivement que la résine est tout juste consommée sur le bord et que la formation de coke est encore limitée.

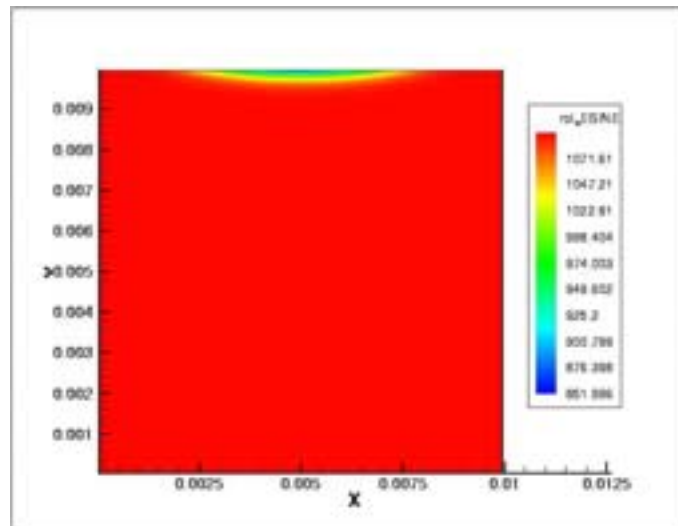
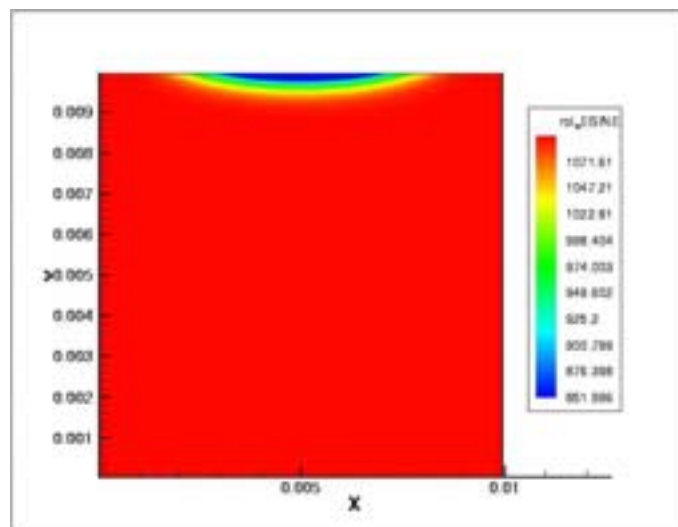
Par contre à $t = 0.6 s$, le matériau s'est un peu plus échauffé (Cf figure 7.105), la pression poursuit son évolution comme précédemment (Cf figure 7.107) et la figure 7.109 montre que la masse volumique de gaz dans le matériau a considérablement augmenté. La réaction s'active un peu plus, consommant la résine (figure 7.111) et produisant du coke (figure 7.113). On peut remarquer d'après la courbe de porosité (7.115) et la courbe de température (7.105) que la réaction s'active uniquement dans les zones où la température est assez élevée.

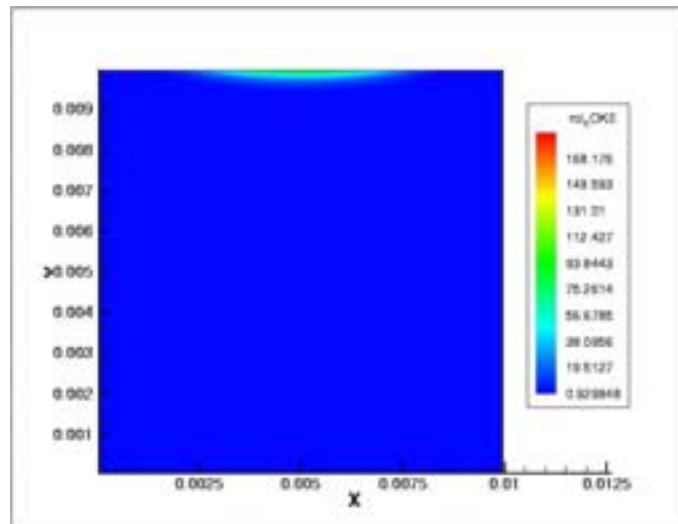
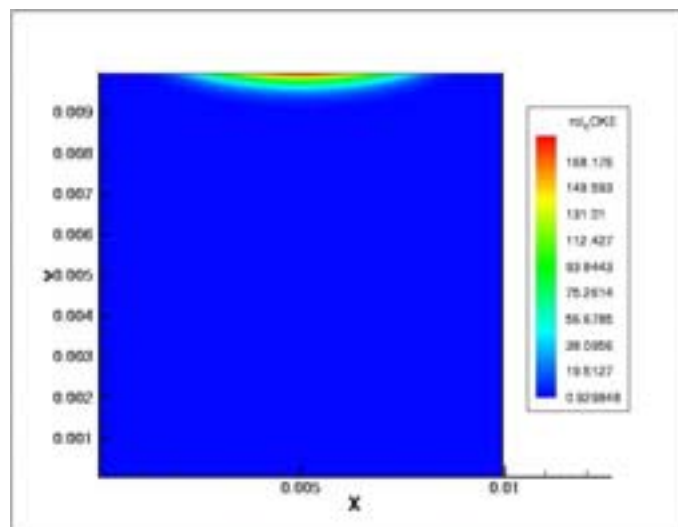
Ce dernier test permet donc de montrer la capacité des 3 modèles découplés (évolution structurale, coefficients de transport et système macroscopique) à fonctionner ensemble, pour simuler de façon très simplifiée encore, un phénomène de pyrolyse sur un domaine 2D.

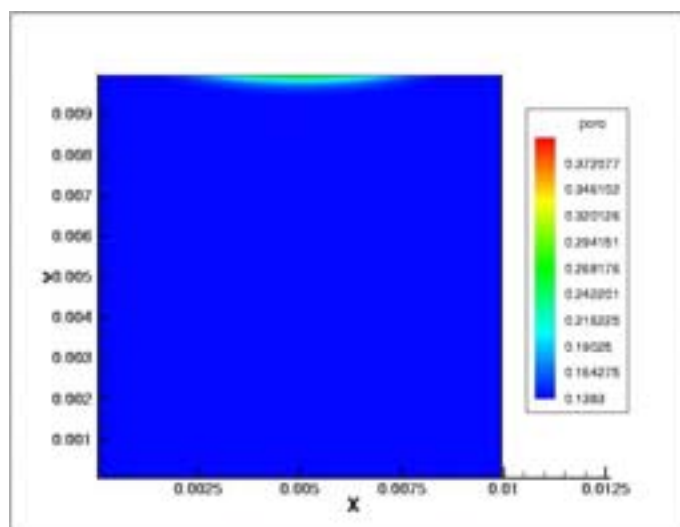
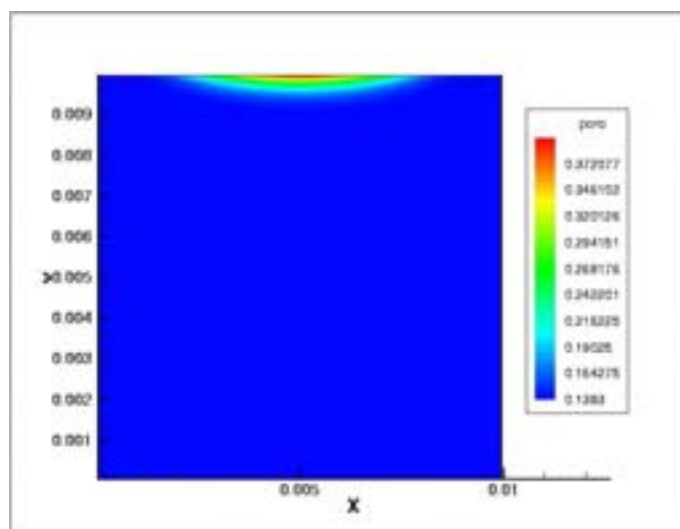
FIG. 7.104 – Evolution de la température dans le matériau à $t = 0.3$ s.FIG. 7.105 – Evolution de la température dans la matériau à $t = 0.6$ s.

FIG. 7.106 – Evolution de la pression dans le matériau à $t = 0.3$ s.FIG. 7.107 – Evolution de la pression dans la matériau à $t = 0.6$ s.

FIG. 7.108 – Evolution de la masse volumique de gaz dans le matériau à $t = 0.3$ s.FIG. 7.109 – Evolution de la masse volumique de gaz dans la matériau à $t = 0.6$ s.

FIG. 7.110 – Evolution de la masse volumique de résine dans le matériau à $t = 0.3$ s.FIG. 7.111 – Evolution de la masse volumique de résine dans la matériau à $t = 0.6$ s.

FIG. 7.112 – Evolution de la masse volumique de coke dans le matériau à $t = 0.3$ s.FIG. 7.113 – Evolution de la masse volumique de coke dans la matériau à $t = 0.6$ s.

FIG. 7.114 – Evolution de la porosité dans le matériau à $t = 0.3$ s.FIG. 7.115 – Evolution de la porosité dans la matériau à $t = 0.6$ s.

Nous exhibons maintenant une coupe à $y = 5\text{mm}$ de la température (Cf figure 7.105) et de la porosité (Cf figure 7.115) pour un temps de $t = 0.6\text{s}$. Nous cherchons à déterminer la température à partir de laquelle les porosités commencent à s'ouvrir, c'est-à-dire à partir de laquelle la réaction chimique démarre. Le graphe 7.116 nous montre que pour une porosité de 14%, (la porosité initiale est, rappelons le, $\epsilon = 13.7\%$) la température est de $T = 750\text{K}$. Ce qui nous permet de conforter les résultats obtenus au paragraphe 7.2.7. On peut donc affirmer que le matériau commence à se dégrader pour une température de $T = 750\text{K}$, ce qui est une valeur raisonnable.

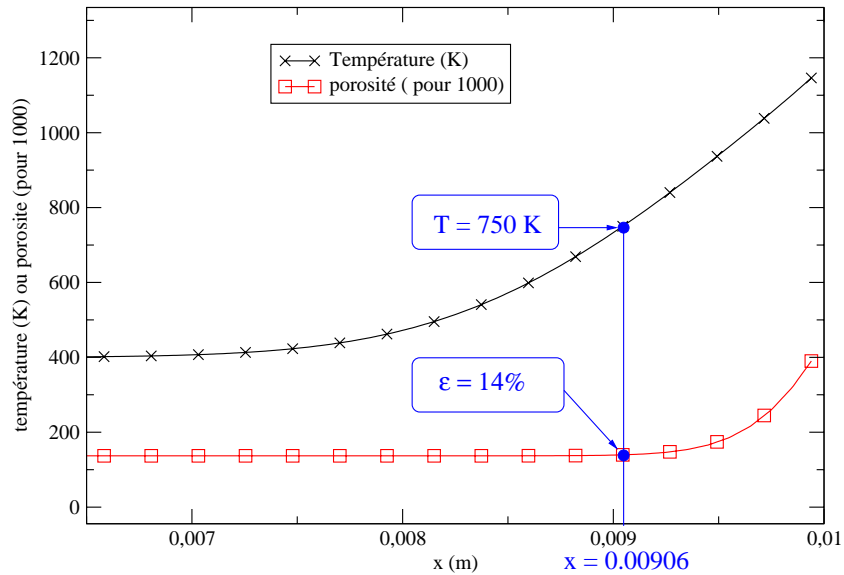


FIG. 7.116 – Evolution de la porosité et de la température dans le matériau à $t = 0.6$ s pour une coupe à $y = 5$ mm.

Chapitre 8

Conclusion et perspectives

Dans ce travail, on a développé un modèle original de transfert de masse et de chaleur dans un milieu poreux réactif en évolution structurale par une approche formelle mais rigoureuse. Ce modèle est capable de prendre en compte des régimes très différents d'écoulement de gaz dans les pores. Les coefficients de transport effectif sont à même de transférer au niveau microscopique de nombreuses propriétés liées à la géométrie microscopique du milieu.

Une technique de calcul "économique" de ces coefficients a été proposée. Elle a été soigneusement validée pour une large gamme de régimes par comparaison à des résultats de référence et à des données expérimentales.

Des simulations sur des matériaux poreux "théoriques" ont permis de mettre en évidence des propriétés intéressantes des phénomènes de transport dans des milieux poreux à géométrie microscopique complexe. On a ainsi pu montrer que l'influence de la géométrie sur la perméabilité d'une part et sur la transpiration thermique et le transport de Knudsen d'autre part sont notablement différentes.

L'approche a ensuite été étendue à des milieux réactifs dans lesquels la structure microscopique du matériau évolue sous l'effet de réactions chimiques. Elle débouche sur une hiérarchie de modèles emboîtés allant de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique. Finalement on a montré la capacité de notre démarche à aborder des problèmes tels que la prédiction du transfert thermique au coeur d'un matériau dégradable à l'aide de simulations sur des matériaux fictifs qui mettent en jeu les mêmes phénomènes que les matériaux réellement utilisés dans des protections thermiques.

Au delà de ce travail des perspectives s'ouvrent dans deux directions. D'une part la compréhension des phénomènes de transport doit être étendue à des gaz multi-espèces. D'autre part, pour aborder finement la modélisation de matériaux réels de protection thermique il convient de développer un modèle (microscopique) d'évolution structurale. C'est un travail ambitieux qui relève en premier lieu de la physico-chimie des matériaux. Une fois développé, un tel modèle trouvera naturellement sa place dans l'approche hiérarchique que nous avons présentée.

Bibliographie

- [1] Charrier P., Dubroca B., Asymptotic transport models for heat and mass transfert in reactive porous media. *Siam J. Multiscale Model. Simul.* 2 1, 124-157., **2003**
- [2] B. Dubroca, G. Duffa, B. Leroy, High Temperature Mass and Heat Transfer Fluid-Solid coupling, in *40th AIAA Aerospace Sciences, Meeting and Exhibit*, AIAA, **2002**
- [3] G. L. Vignoles, P. Charrier, C. Preux, B. Dubroca, Rarefied pure gas transport in non-isothermal porous media : effective transport properties from homogenization of the kinetic equation. *Soumis à J. of Transport in Porous Media*.
- [4] P. Charrier, B. Dubroca, C. Preux, Computation of effective transport coefficients of a microscale gas flow, Article accepté pour publication au *Journal of Transport Theory and Statistical Physics*.
- [5] C. Preux, G. L. Vignoles, P. Charrier, B. Dubroca, Influence of porous medium geometry on rarefied non-isothermal gas transport, *Proceeding of the 4th International Conference on Computational Heat and Mass Transfer*, Paris-Cachan, France, May 17-20, 2005, R. Bennacer, A. A. Mohamad, M. El Ganaoui, and J Sicard editors, Lavoisier, Paris, France **2005** Vol. 1, pp. 447-452.
- [6] C. Preux, Modeling of heat and mass transfer for microflows on porous media, *Proceeding of 3rd International Conference on Microchannels and Minichannels*, Toronto, Ontario, Canada, June 13-15, **2005**.
- [7] P. Charrier, B. Dubroca, G. Duffa, J. F. Epherre, C. Preux, Modeling and computing heat transfer in pyrolyzable thermal protection systems, *proceedings of 5th European Workshop on Thermal Protection Systems and Hot Structures*, SP-631, Août **2006**, ISBN 92-9092-942-1
- [8] Walder A., les alliages à base de nickel pour disques, les composites intermétalliques, les composites céramiques, *Journée SF2M/Section Nord : Les matériaux pour applications à hautes température, Les matériaux pour moteurs d'avions du présent et de l'avenir*, Lille, France ; 2 décembre **1999**
- [9] Laub B., Venkatapathy E., Thermal Protection System Technology and Facility Needs for Demanding Future Planetary Missions, *International workshop on planetary probe atmospheric entry and descent trajectory analysis and science*, Lisbon, Portugal, 6-9 October **2003**
- [10] V. Ducamp, *Tranferts thermiques dans un matériau composite carbone résine*, Rapport de thèse, Avril **2002**.

- [11] T. Suzuki, Y. Yamamoto, Coupled analysis of flowfield and thermal response of ablative test under arc-heated flow conditions, AIAA 2006-778, **2006**
- [12] H.A.J. Knops, F. Laturelle, A. Degueil, S. Fiorot, T.B. Wertheimer, MSC.Marc-ATAS : Advanced thermal analysis software for modelling of rocket motors and other thermal protection systems, proceedings of 5th European Workshop on Thermal Protection Systems and Hot Structures, SP-631, Août **2006**, ISBN 92-9092-942-1
- [13] Naslain R., Langlais F., CVD-processing of ceramic-ceramic composite materials. In R.E. Tressler, G.E. Messing, C.G. pantano, and R.E. Newnham, editors, *Tailoring multiphase and composite ceramics, volume 20 of Mat. Sci. Res.*, pages 145-164. Kluwer Acad. Pub., Dordrecht, The Netherlands, **1986**
- [14] *Handbook of Thin-Film Deposition Processes and Techniques*. Materials Science and Process Technology Series. Noyes, Park Ridge, NJ, USA, 1 edition, **1988**
- [15] Bardos C., Dumas L., Golse F., Diffusion approximation for billiards with totally accommodating scatterers, J. Statist. Phys., 86, pp. 351-375, **1997**
- [16] Quintard M., Whitaker S., Ecoulement monophasique en milieu poreux : effet des hétérogénéités locales, J. Méca. Théorique et Appliquée 6, 5, 691-726. **1987**
- [17] K. Aoki, P. Degond, Homogenization of a flow in a periodic channel of small section, Multiscale Modeling and Simulation 1 (2),pp. 304-334, **2003**
- [18] Bensoussan A., Lions J. L., Papanicolau G., Asymptotic analysis for periodic structures, Stud. Math. Appl. 5, North-Holland, Amsterdam, **1978**
- [19] Keller, J. B., Darcy's law for flow in porous media and the two-space method. Nonlinear partial differential equations in engineering and applied science (Proc. Conf., Univ. Rhode Island, Kingston, R.I., 1979), pp. 429-443, Lecture notes in pure and appl. math., 54, Dekker, New York, **1980**
- [20] Allaire G., Continuity of the Darcy's law in the low-volume fraction limit. Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa Cl. Sci. (4) 18, no. 4, 475-499, **1991**
- [21] Mason E. A., Malinauskas A. P., Gas Transport in Porous Media : The Dusty-Gas Model, Chemical engineering monographs. Elsevier, **1983**.
- [22] Kerkhof, P. J. A. M., A modified Maxwell-Stefan model for transport through inert membranes : the Binary Friction Model. The Chemical Engineering Journal, 64, 319-343, **1996**
- [23] Bouchut F. ; Golse F. ; Pulvirenti M. *Kinetic equations and asymptotic theory*. Series in applied mathematics, Gauthier-villars/Elsevier, **2000**.
- [24] Charrier P., Dubroca B., Asymptotic transport models for heat and mass transfert in reactive porous media. C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math., **2003**, 336.
- [25] Bardos C. ; Golse F. ; Levermore D., Fluid dynamic limits of kinetic equations. I. Formal derivations, J. Statist. Phys., 63, pp.323-344. **1991**
- [26] Gross E. P. ; Bathnagar P.L. ; Krook M. A model for collision process in gases. I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. Phys. Rev. **1954**, 94, 511-525

- [27] Andries P. ; Le Tallec P. ; Perlat J-P. ; Perthame B. The Gaussian-BGK model of Boltzmann equation with small Prandtl number. *Eur. J. Mech.B Fluids*, 19 (6), 813-830. **2000**
- [28] Sone Y., *Kinetic Theory and Fluid Dynamics*, Birkhauser **2002**.
- [29] Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear system*, PWS Publishing Company, **1996**.
- [30] Peyret R., Taylor T. D., *Computational methods for fluid flow*. Springer Verlag, **1983**.
- [31] C. Desmeuzes, B. Dubroca, G. Duffa, S. Limasset, Modeling of Wall Catalicity in Hypersonic Flows in Chemical Nonequilibrium, International Symposium on Shock Waves, Australia, **1997**
- [32] V.P. Carey, *Liquid-Vapor Phase Change Phenomena : an Introduction to the Thermodynamics of Vaporization and Condensation Processes in Heat Transfer Equipment*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington, **1992**
- [33] J. Nagle, R. F. Strickland-Constable, Oxidation of Carbon between 1000-2000°C, Proceedings of 5th Conference on Carbon, p 154-164, **1962**
- [34] B. Dubroca, G. Duffa, B. Leroy, Problèmes aérothermiques à l'équilibre thermodynamique local dans un milieu à composition élémentaire variable, à paraître.
- [35] Ohwada T., Sone Y., Aoki K., Numerical analysis of the Poiseuille and thermal transpiration flows between two parallel plates on the basis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Phys. Fluids A* **1989**, 1 12, 2042-2049.
- [36] Kosuge S. *Private communication*.
- [37] Aoki K, Dynamics of rarefied gas flows : asymptotic and numerical analyses of the Boltzmann equation, in 39th AIAA Aerospace Sciences, Meeting and Exhibit, AIAA 2001-0874, **2001**
- [38] Sharipov F., Rarefied gas flow through a long tube at any temperature ratio, *J. Vac. Sci. Technol. A* 14(4), 2627-2635, **1996**
- [39] Mason E. A. ; Malinauskas A. P. Flow and diffusion of gases in porous media. *J. Chem. Phys.* **1977** 46 8, 3199-3216.
- [40] C. Preux, P. Charrier, B. Dubroca, G. L. Vignoles, Modélisation numérique du transfert de masse et de chaleur dans un écoulement microfluidique, Communication au 17^{ieme} congrès Français de Mécanique, Troyes, France, Septembre **2005**.
- [41] Vignoles. G. L., Modelling binary, Knudsen, and transition regime diffusion inside complex porous media, *J. de physique IV C5*, 159-166, **1995**
- [42] Anguy Y., Bernard D., Ehrlich R., The local change of scale method for modelling fluid flow in natural porous media I : Numerical tools. *Adv. Water Res.* **1994**
- [43] Coindreau O., Vignoles G. L., Computing Structural and Transport Properties of C/C Composites from 3D Tomographic Images, in R. Martins, C. Dias, E. Fortunato, I. Ferreira, H. Godinho, and R. Monteiro (eds.) : *Advanced Materials Forum II*, Vol. 455-456 of *Mater. Sci. Forum*. Zurich, pp. 751-754, Trans. Tech. Publications. **2004**
- [44] Vignoles G. L., Image segmentation for hard X-ray phase contrast images of C/C composites, *Carbon* 39, 167-173 **2001**
- [45] www.engineeringtoolbox.com

- [46] L.C. Hartung, R.A. Mitcheltree, P A. Gnoffo, Coupled radiation effects in thermochemical nonequilibrium shock-capturing flowfield calculations, in 27th AIAA Thermophysics Conference, 92-2868, **1992**

Annexe A

Détail des matrices utilisées pour le modèle asymptotique de transport

A.1 Avec la base “transitionnelle” à 13 moments)

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3/5\sqrt{5} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/5\sqrt{5} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/5\sqrt{5} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/5\sqrt{10} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/5\sqrt{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3/5\sqrt{5} & 1/5\sqrt{5} & 1/5\sqrt{5} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/5\sqrt{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/5\sqrt{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4}{15} \pi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{4}{15} \pi & 4/5 \pi & \frac{4}{15} \pi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4}{15} \pi \\ 0 & \frac{4}{15} \pi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4/5 \pi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{15} \pi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4}{15} \pi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{15} \pi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.6})$$

$$A_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4}{15} \pi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4}{15} \pi \\ 0 & 0 & 0 & \frac{4}{15} \pi & \frac{4}{15} \pi & 4/5 \pi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{15} \pi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{15} \pi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4/5 \pi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4}{15} \pi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{15} \pi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.7})$$

A.3 La base “complète” à 21 éléments

Pour cette nouvelle méthode, toutes les matrices sont sous la forme :

$$A_i^\pm = \begin{bmatrix} A_{i,12moments}^\pm & B_i^\pm \\ B_i^{\pm T} & \tilde{A}_{i,9moments}^\pm \end{bmatrix} \quad (\text{A.8})$$

Où

$A_{i,12moments}^\pm$ sont les matrices de la méthode *MAT* privées de leur première ligne et de leur première colonne, car le moment 1 n'existe plus.

$\tilde{A}_{i,9moments}^\pm$ sont les matrices de la méthode *MAT* – *RK* multipliées par le coefficient $\frac{\sqrt{2RT_0}}{2\pi\sqrt{\pi}}$ pour une raison de normalisation.

et B_i^\pm représentent les termes extra-diagonaux de couplage entre les bases que nous allons détailler.

et la matrice S pour un opérateur du type BGK :

$$S_{12moments}^{BGK} = \frac{1}{\sqrt{RT_0}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & -2/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & -2/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.12})$$

$$S_{9moments}^{BGK} = \frac{1}{\sqrt{RT_0}} \begin{bmatrix} \frac{-15\pi^{3/2}+40\sqrt{\pi}}{45\pi^{3/2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-15\pi^{3/2}+40\sqrt{\pi}}{45\pi^{3/2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-15\pi^{3/2}+40\sqrt{\pi}}{45\pi^{3/2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{4}{45} & \frac{2}{45} & \frac{2}{45} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{45} & -\frac{4}{45} & \frac{2}{45} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{45} & \frac{2}{45} & -\frac{4}{45} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{15} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{15} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{15} \end{bmatrix} \quad (\text{A.13})$$

$$S_{9moments}^{ES-BGK} = \begin{bmatrix} 1/45 \frac{-15\pi+40}{\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/45 \frac{-15\pi+40}{\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/45 \frac{-15\pi+40}{\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{52}{225} & \frac{173}{450} & \frac{173}{450} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{173}{450} & \frac{52}{225} & \frac{173}{450} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{173}{450} & \frac{173}{450} & \frac{52}{225} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{23}{300} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{23}{300} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{23}{300} \end{bmatrix} \quad (\text{A.16})$$

$$S_{diagonale}^{ES-BGK} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/12 \sqrt{2} & 1/3 \sqrt{2} & 1/3 \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 \sqrt{2} & 1/12 \sqrt{2} & 1/3 \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 \sqrt{2} & 1/3 \sqrt{2} & 1/12 \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/4 \\ 2/15 \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{\pi}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2/15 \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{\pi}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2/15 \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{\pi}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.17})$$

Annexe B

Détails des calculs des différentes longueurs

B.1 Le calcul de $\tilde{\delta}$

Soit un écoulement 1D entre deux plaques parallèles.

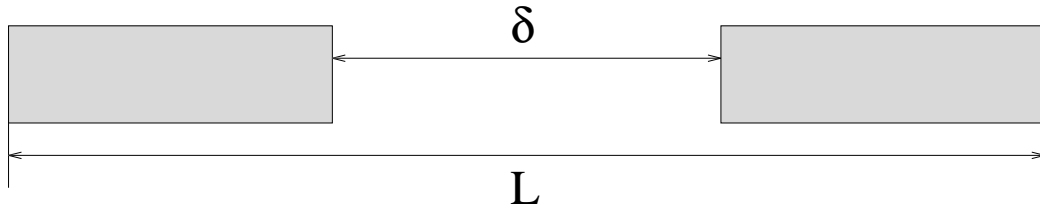


FIG. B.1 – La faille 1D

En régime de Darcy et grâce au modèle asymptotique de transport développé dans [1], on en déduit que le coefficient de transport de masse D est défini par :

$$D = -\frac{1}{\sqrt{RT_0}L} \int_0^L \int_{v_1} \int_{v_2} \int_{v_3} v_2^2 f_0 b_{v_1} dV dx, \quad (\text{B.1})$$

avec $f_0 = \frac{\sqrt{2}\rho}{4(\pi RT_0)^{3/2}} e^{\left(\frac{v_1^2 + v_2^2 + v_3^2}{2RT_0}\right)}$ et b_{v_1} la solution de l'équation

$$\frac{\mu}{\sqrt{RT_0}} \partial_{yy} b_{v_1} = 1 \quad \text{sur la faille,} \quad (\text{B.2})$$

$$b_{v_1} = 0 \quad \text{si solide.} \quad (\text{B.3})$$

Ce qui nous amène à :

$$D = \frac{RT_0 \delta^3 \rho}{12\mu L}, \quad (\text{B.4})$$

or d'après la loi de Darcy, $B = \frac{\mu D}{\rho RT_0}$. On en déduit la perméabilité B :

$$B = \frac{\delta^3}{12L}. \quad (\text{B.5})$$

Et donc on exprime l'épaisseur δ de la faille en fonction de B :

$$\delta = (12LB)^{\frac{1}{3}}. \quad (\text{B.6})$$

Or ici, la faille n'est pas constituée de deux plaques parallèles, elle est un peu plus complexe (Cf 6.12). Mais en ce qui concerne le coefficient de transport de masse et donc la perméabilité, en régime fluide, l'épaisseur la plus fine va jouer un rôle prépondérant (sorte de goulot d'étranglement). Et donc pour déterminer la longueur δ , on peut utiliser la formule suivante :

$$\tilde{\delta} = (12LB)^{\frac{1}{3}}. \quad (\text{B.7})$$

B.2 Le calcul de la perméabilité d'un microtube sur une cellule de section carrée

Soit $D(d)$ le coefficient de transfert de masse d'un microtube de diamètre d , et $S_{cellule}$ la surface de la cellule (constant). On a :

$$D(d) = -\frac{1}{\sqrt{RT_0}S_{cellule}} \int_{S_{cellule}} \int_{v_1} \int_{v_2} \int_{v_3} v_2^2 f_0 b_{v_1} dV ds, \quad (\text{B.8})$$

où :

$$\Delta b_{v_1} = g \quad \text{sur la section du microtube,} \quad (\text{B.9})$$

$$b_{v_1} = 0 \quad \text{si solide.} \quad (\text{B.10})$$

Si on suppose l'existence de plusieurs microtubes sur une surface $S_{cellule}$ identique, le coefficient $D_n(d)$ de transfert de masse de n microtubes est donné par :

$$D_n(d) = nD(d). \quad (\text{B.11})$$

Et donc, en ce qui concerne la perméabilité, la loi de Darcy nous amène à :

$$B_n(d) = \frac{\mu D_n(d)}{\rho RT_0} = n \frac{\mu D(d)}{\rho RT_0}. \quad (\text{B.12})$$

Pour le calcul de D , nous allons utiliser le code HAMMLET. Nous devons faire bien attention à la définition du coefficient. En effet :

$$D_{hammlet}(d) = -\frac{1}{\sqrt{RT_0}S_{fluide}} \int_{S_{fluide}} \int_{v_1} \int_{v_2} \int_{v_3} v_2^2 f_0 b_{v_1} dV ds, \quad (\text{B.13})$$

ce qui nous amène à écrire $D(d) = \frac{S_{fluide}}{S_{cellule}} D_{hammlet}(d)$.

Or dans le cas d'un microtube $S_{fluide} = \pi(d/2)^2$, et donc grâce à (B.12), on arrive à l'expression :

$$B_n(d) = \frac{n\mu\pi d^2}{4\rho RT_0 S_{cellule}} D_{hammlet}(d), \quad (\text{B.14})$$

Or, si on décide de choisir $S_{cellule}$ comme un carré de coté l , on obtient alors

$$B_n(d) = \frac{n\mu\pi d^2}{4\rho RT_0 l^2} D_{hammet}(d). \quad (\text{B.15})$$

Modélisation et calcul du transfert de masse et de chaleur dans un milieu poreux réactif en évolution structurale et applications.

Résumé

L'objectif de ce travail est de développer un modèle et des techniques d'approximation numérique pour le transfert de masse et de chaleur dans un milieu poreux réactif en évolution structurale. Le modèle est obtenu par un changement d'échelle utilisant une technique d'homogénéisation d'une équation cinétique couplée à une équation de conduction thermique. Il permet de prendre en compte une large gamme de régimes pour le gaz allant d'un écoulement continu à un écoulement raréfié. L'approche est validée par de nombreuses comparaisons numériques, en particulier vis-à-vis de données expérimentales et met en évidence le caractère tensoriel des différents phénomènes de transport et leur évolution suivant le régime de l'écoulement. L'application de ces modèles, en particulier à l'étude de protections thermiques est présentée.

Mots clés : Modélisation, théorie cinétique, milieu poreux, Boltzmann, homogénéisation, coefficients de transport effectifs, méthode de Galerkin, transport de masse et de chaleur.

Modeling and computation of heat and mass transfer in reactive porous media with structural evolution and applications.

Abstract

The goal of this work is to derive a model and techniques of numerical approximation for heat and mass transfer in reactive porous media with structural evolution. The model is obtained by a scaling using a technique of homogenization of a kinetic equation coupled to an equation of thermal conduction. It is able to treat various physical regimes for the gas, from a continuous flow to a rarefied flow. The approach is validated by several numerical comparisons, in particular with respect to experimental data and shows the tensorial character of the various phenomena of transport and their evolution according to the regime of the flow. The application of these models, in particular to the study of thermal protection systems is presented.

Key words : Modeling, kinetic theory, porous media, Boltzmann, homogenization, effective transport coefficients, Galerkin method, heat and mass transfer.

Discipline : Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique

Laboratoire : Mathématiques Appliquées de Bordeaux - Université Bordeaux 1
33405 Talence Cedex