Remerciements

Les travaux présentés dans cette thèse ont été réalisés au sein du Laboratoire de Physique Statistique de l'Ecole Normale Supérieure, et je remercie Pierre Lallemand et Jean Vannimenus de m'y avoir accueillie.

Un grand merci à Stéphane Zaleski pour avoir dirigé ma thèse. Je lui sais gré de m'avoir initiée avec compétence au domaine des gaz sur réseau et à cette occasion à de nombreuses problématiques, ainsi que d'avoir facilité mon intégration au sein de la communauté scientifique. J'ai beaucoup apprécié son enthousiasme communicatif, sa disponibilité et sa bonne humeur.

Au cours de ma thèse, j'ai pu collaborer et bénéficier de l'expérience de Dominique d'Humières et Dan Rothman. Qu'ils soient remerciés pour leur soutien.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à tous les membres du laboratoire qui m'ont accueillie, conseillée, et avec qui j'ai pu avoir d'enrichissants échanges.

Mes remerciements vont aussi aux membres du Laboratoire de Modélisation en Mécanique et en particulier à Mme Renée Gatignol et à M. Henri Cabannes pour leurs encouragements et l'intérêt avec lequel ils ont suivi mon travail.

Je remercie vivement pour leur amitié les étudiants de la salle des bosons, ainsi que Valérie Pot et Bruno Lafaurie qui effectuent en ce moment leur thèse avec Stéphane Zaleski, et tous les étudiants du LPS et du Laboratoire de Géophysique grâce à qui j'ai passé de très bons moments pendant ces 3 dernières années.

Merci à tout le personnel technique et administratif qui m'a aidée au cours de mon séjour à l'Ecole Normale Supérieure, en particulier à Claude Renou et Angélique Manchon qui m'ont dirigée avec le sourire dans les méandres des formulaires administratifs, et à Isabelle Gazan qui a effectué les tirages de ce manuscrit avec diligence.

Table des matières

Préliminaire

Les phénomènes hydrodynamiques sont souvent décrits par des équations aux dérivées partielles. Par exemple, le mouvement d'un fluide est donné par les équations de Navier–Stokes. En exceptant les cas simples où une solution analytique peut être donnée, on doit généralement avoir recours à une méthode d'analyse numérique pour obtenir une solution approchée des équations.

Depuis quelques dizaines d'années, l'intérêt pour les simulations directes des équations n'a cessé de croitre. Il s'agit de simuler sur ordinateur un système simple dont le comportement macroscopique obéit aux mêmes équations que le système que l'on souhaite étudier. Par système simple, on entend généralement "automate cellulaire". Celui-ci est par définition constitué de cellules élémentaires, assimilées à de petits calculateurs ou automates de base, qui travaillent en parallèle avec tous les autres. L'automate a un nombre fini d'états en entrée et en sortie. Cela signifie entre autres que l'on travaille avec des variables entières et non réelles. Les états en sortie sont une fonction déterminée des états en entrée. La configuration d'entrée est constituée des états de la cellule considérée et de ses plus proches voisines (4 pour un réseau carré). A chaque impulsion d'horloge, chaque automate calcule ses états de sortie. Puis il informe ses plus proches voisins du résultat par transfert de données vers ceux-ci. Les automates cellulaires se prêtent par nature aux simulations numériques, et plus spécialement sur les machines parallèles. La résolution directe des équations par automate cellulaire se justifie par le fait que le comportement macroscopique d'un système ne dépend pas de tout le détail des règles d'évolution microscopique, mais essentiellement des lois de conservation vérifiées par celles-ci ainsi que des symétries du système.

Parmi les automates cellulaires, nous distinguerons ceux dont les quantités conservées peuvent être assimilées à une masse et à une quantité de mouvement - éventuellement une énergie - et qui de ce fait peuvent être utilisés pour des études en hydrodynamique. Appelés gaz sur réseau d'automates, ils se situent à la jonction de deux histoires, celle des automates cellulaires et celle de la théorie cinétique. En effet, la simulation des équations de l'hydrodynamique par automate cellulaire est liée à la description discrète de la matière.

Dès 1866, Maxwell propose un modèle particulaire pour décrire les gaz, dont les équations sont établies en 1872 par Boltzmann. Le grand succés de ces équations fut de rendre compte de l'irréversibilité. Elles restent cependant complexes et difficilement utilisables sous leur forme originale.

L'une des voies pour explorer les conséquences des interactions entre un grand nombre de molécules est la dynamique moléculaire. On définit un potentiel d'interaction le plus réaliste possible et on calcule par ordinateur le mouvement de chaque particule d'après les règles de la mécanique classique ou quantique [35]. Typiquement, le nombre de particules prises en compte lors de telles simulations est de l'ordre de la centaine, et l'échelle de temps sur laquelle on suit leur comportement varie aux environs de 10^{-10} s.

Une autre direction de recherche destinée à l'étude du comportement des fluides sur de plus longues échelles de temps consiste à simplifier autant que possible la dynamique afin de n'en garder que quelques traits essentiels. Ainsi dans la continuité du travail de Boltzmann fut développée la théorie cinétique discrète, pour laquelle les particules ne peuvent prendre qu'un nombre fini de vitesses (Broadwell 1964; Gatignol 1970).

La discrétisation sera étendue à l'espace et au temps en 1973, avec le premier modèle de gaz sur réseau d'automate dû à Hardy, Pomeau et de Pazzis (HPP). Il s'agit d'un gaz fictif de particules ponctuelles se déplaçant sur un réseau carré. Lorsque plusieurs particules se rencontrent sur un noeud du réseau, elles subissent une collision d'après des règles déterministes. Cependant son anisotropie - qui résulte de celle du réseau carré - le rend impropre aux simulations hydrodynamiques.

Le problème fut résolu en 1985 par Pomeau, Frisch et Hasslacher qui suggérèrent de remplacer le réseau carré par un réseau hexagonal (modèle FHP). Ayant un comportement hydrodynamique isotrope à l'échelle macroscopique, ce modèle a depuis lors fait l'objet de nombreuses études et donné naissance à plusieurs variantes, dont des modèles multiphasiques [11]. Soulignons que, contrairement à la plupart des approches classiques de l'hydrodynamique, les gaz sur réseau permettent de modéliser des fluides complexes à relativement peu de frais. Il semble inutile de rappeller la place importante que ceux-ci tiennent dans l'industrie et dans la recherche: suspensions de particules, fluides réactifs, écoulements multiphasiques dans des géométries plus ou moins complexes, etc.

Le modèle sur lequel porte la présente thèse appartient à cette famille de gaz sur réseau d'automates modifiés en vue de modéliser un phénomène particulier. Dans notre cas, une force attractive a été ajoutée entre les particules. Elle joue le rôle des forces intermoléculaires responsables de la cohésion des liquides. Le gaz sur réseau obtenu se sépare sous certaines conditions en régions de densités différentes: l'une, dense, où les particules sont en constante interaction et que nous appelons liquide; l'autre, de faible densité et semblable au gaz parfait du modèle FHP, appelée gaz. Ce modèle dit liquide-gaz est intéressant à plusieurs points de vue. D'une part la transition que l'on observe ne découle pas a priori de la minimisation d'une énergie libre, comme c'est le cas pour des systèmes réels ou certains modèles tels que le modèle d'Ising. Elle est dûe à l'irréversibilité de l'interaction introduite, qui permet une sélection dynamique d'une sous-région de l'espace des phases. Le modèle liquide-gaz est l'un des modèles les plus simples présentant une transition de phase dynamique et il est intéressant de l'étudier à ce titre.

D'autre part, en ce qui concerne les simulations, les gaz sur réseau fournissent un moyen relativement simple de traiter les fluides multiphasiques. Il existe bien sûr d'autres méthodes de simulation d'interfaces, mais les gaz sur réseau se distinguent de la plupart d'entre elles par le fait que les interfaces s'y créent spontanément sans qu'il soit besoin de les suivre. En particulier, les changements de topologie qui peuvent se produire ne nécessitent pas de traitement particulier. De nombreux exemples de simulations seront donnés dans cette thèse.

Après une introduction au domaine des gaz sur réseau, le modèle liquide-gaz sera présenté ainsi qu'un certain nombre de résultats obtenus à son sujet. Les articles publiés ont été regroupés dans l'appendice I.

.

Chapitre 1

Introduction à la méthode de gaz sur réseau.

Nous allons dans un premier temps décrire les modèles de base de gaz sur réseau, présenter quelques résultats de simulation et indiquer comment les équations hydrodynamiques vérifiées par ces modèles peuvent être calculées par un développement de Chapman-Enskog.

Puis nous introduirons une méthode dite de Boltzmann qui est fortement liée à celle des gaz sur réseau et qui s'exprime en termes de densités de probabilités. Enfin des modèles multiphasiques de gaz sur réseau seront présentés.

1.1 Le premier gaz sur réseau d'automates : le modèle HPP.

C'est le premier véritable gaz sur réseau. Il est dû à Hardy, Pomeau et de Pazzis [36]. Il consiste en un réseau carré aux noeuds duquel se trouvent des particules ponctuelles. Chaque particule possède l'une des 4 vitesses possibles représentées sur la figure 1. Un principe d'exclusion interdit qu'il y ait plus d'une particule ayant une vitesse donnée en un site et à un instant donnés. Ceci permet de coder l'état d'un site par 4 bits mis à 0 ou à 1 selon que l'état de vitesse correspondant est occupé ou non.

L'évolution s'effectue par pas de temps. Dans une première étape (propagation), les particules sautent au site - ou noeud - voisin dans la direction où pointe leur vitesse. Puis les particules qui sont en un même site rentrent en collision selon des règles déterministes préétablies. Les collisions conservent l'impulsion et le nombre de particules. Pour le modèle HPP, la seule collision possible est une collision

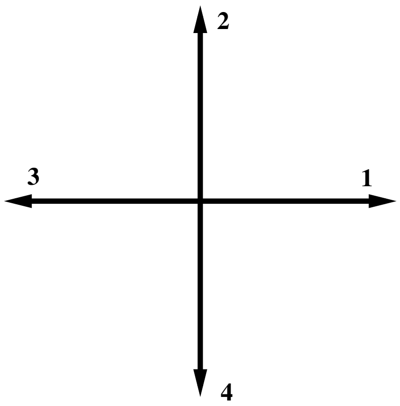


Figure 1: *Vitesses que peuvent prendre les particules dans le modèle HPP.*

frontale au cours de laquelle les particules subissent une rotation de 90° (fig 2). Le sens de la rotation n'importe pas puisque les particules sont indistinguables. Malheureusement les équations d'Euler et de Navier–Stokes pour ce modèle ne sont pas isotropes. De plus des invariants parasites ont rapidement été mis en évidence [27]. Il est clair par exemple que la dynamique conserve l'impulsion sur chaque ligne et sur chaque colonne du réseau. Ainsi, si l'on simule un écoulement dans un canal, le profil de vitesse sera forcément invariant au cours du temps.

On peut aussi remarquer que deux particules situées sur des sites plus proches voisins ne pourront jamais interagir. Elles ne feront que se croiser lors des propagations. Le gaz se décompose alors en deux sous-ensembles indépendants.

L'ensemble de ces problèmes explique que le modèle n'ait dans un premier temps pas connu l'essor que l'on pouvait en attendre.

1.2 Un gaz sur réseau isotrope : le modèle FHP.

1.2.1 Présentation du modèle.

La solution aux difficultés posées par HPP sera trouvée en 1985 par Pomeau, Frisch et Hasslacher. Elle consiste à remplacer le réseau carré par un réseau hexagonal. Ceci permet d'une part d'enrichir le nombre de collisions possibles et ainsi de détruire les invariants parasites les plus gênants. D'autre part, et c'est le plus important, les propriétés de symétrie du réseau hexagonal assurent l'isotropie des

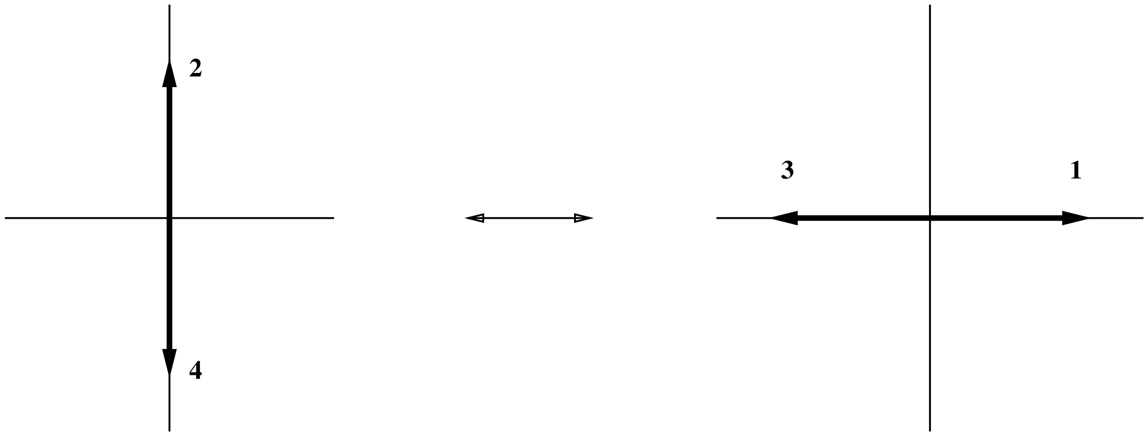


Figure 2: *Collision pour le modèle HPP. Un seul site est représenté. La collision est réversible, c'est-à-dire qu'elle peut avoir lieu aussi bien dans un sens que dans l'autre.*

équations hydrodynamiques vérifiées par le modèle. Précisons que cela ne signifie pas que les tenseurs de tous ordres soient isotropes. Il suffit que ce soit le cas pour les tenseurs qui apparaissent dans les équations de Navier–Stokes, à savoir les tenseurs d'ordre 2 et ceux d'ordre 4 dont les premiers et derniers indices permutent 2 à 2.

Nous ne décrirons plus précisement que la version dite FHP III qui a servi de point de départ à notre travail. Les particules peuvent alors prendre 7 vitesses différentes, dont 6 correspondent aux 6 directions du réseau

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \mathbf{c}_0 & = & \mathbf{0} \\ \mathbf{c}_i & = & \left(\cos\left(\frac{(i-1)\pi}{3}\right), \sin\left(\frac{(i-1)\pi}{3}\right)\right) \qquad \text{i=1 à 6} \end{array} \right. \tag{1}$$

L'évolution du gaz s'effectue de la même manière que pour HPP. L'ensemble des règles de collision utilisées pourra être trouvé dans la référence [22]. Elles sont choisies de façon à avoir une viscosité relativement faible. Des exemples de propagation et de collision sont donnés sur la figure 3.

Précisons la dynamique en utilisant les variables de Boole $\mathbf{n} = (n_0, n_1, \cdots, n_6)$ qui indiquent la présence (lorsque $n_i(\mathbf{x}, t) = 1$) ou l'absence ($n_i = 0$) d'une particule de vitesse $\mathbf{c}_i$ au site $\mathbf{x}$ et à l'instant t.

L'évolution du modèle FHP est donnée par l'équation suivante:

$$n_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = n_i(\mathbf{x}, t) + \delta_i[\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)] \tag{2}$$

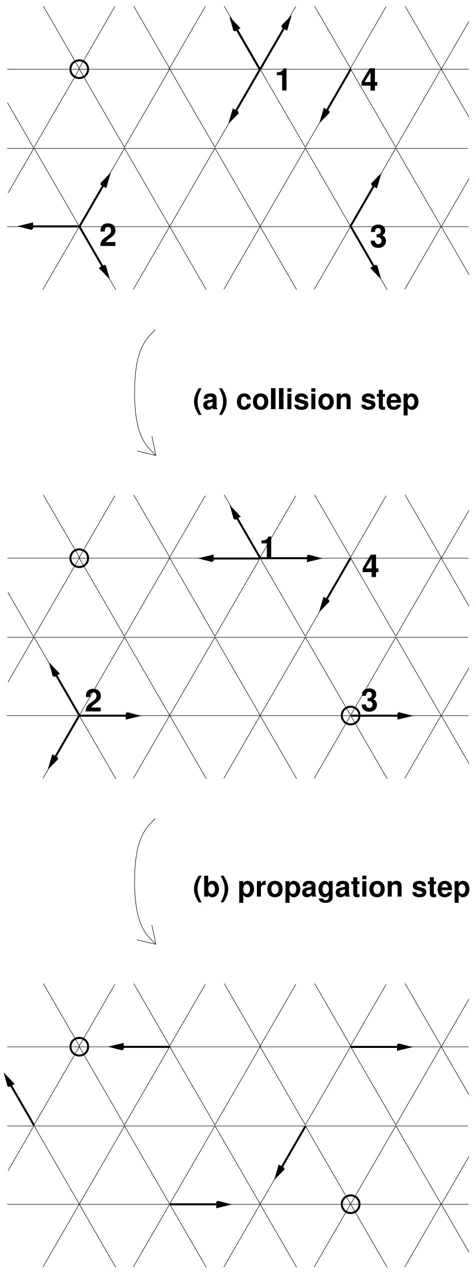


Figure 3: *Collision et propagation sur un réseau triangulaire. (a) Étape de collision. Les particules sont représentées par leur vecteur vitesse, avant et après les collisions. Les petits cercles représentent des particules au repos. Les labels 1 et 2 repèrent des collisions à deux et trois corps. Une des collisions fait intervenir une particule au repos (label 3). Chaque collision conserve l'impulsion totale du site. Certains sites sont laissés inchangés, lorsqu'il n'y a pas de redistribution possible des particules qui conserve l'impulsion (label 4). (b) Propagation des particules. Chaque particule avance d'un pas dans la direction de sa vitesse. Lorsqu'elles ne sont pas définies explicitement dans le texte, les conditions aux limites sont périodiques.*

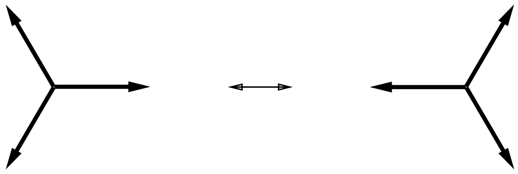


Figure 4: *Exemple de collision : collision triple.*

L'opérateur de collision δ_i décrit les changements possibles dans n_i dûs aux collisions et prend les valeurs ± 1 ou 0. C'est une somme d'expressions Booléennes, une pour chaque collision possible. Par exemple la collision à 3 corps de la figure 4 se traduit par :

$$\begin{aligned} \delta^{\text{trois corps}} = & \; n_{i+1}n_{i+3}n_{i-3}(1-n_i)(1-n_{i+2})(1-n_{i-2}) \\ & -n_i n_{i+2} n_{i-2}(1-n_{i+1})(1-n_{i+3})(1-n_{i-3}) \end{aligned} \tag{3}$$

où les indices sont définis modulo 6. L'opérateur de collision complet δ_i est alors la somme d'expressions analogues pour les collisions à deux et quatre corps. Les restrictions auxquelles doit obéir l'opérateur δ_i dans le cas général sont qu'il conserve la masse

$$\sum_i \delta_i(\mathbf{n}) = 0 \tag{4}$$

et l'impulsion

$$\sum_i \mathbf{c}_i \delta_i(\mathbf{n}) = 0 \tag{5}$$

La première expression ci-dessus permet d'exprimer la conservation de la masse à partir de l'équation microdynamique (2) :

$$\sum_i n_i(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i, t+1) = \sum_i n_i(\mathbf{x}, t) \tag{6}$$

Multipliant (2) par $\mathbf{c}_i$, prenant une somme sur i et utilisant la deuxième relation on obtient une expression qui traduit la conservation de l'impulsion:

$$\sum_i \mathbf{c}_i n_i(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i, t+1) = \sum_i \mathbf{c}_i n_i(\mathbf{x}, t). \tag{7}$$

1.2.2 Exemples de simulations : allée de Von Karman, écoulement en milieu poreux.

Avant d'introduire les modèles avec interfaces, il est bon d'illustrer quelque peu le genre de simulation hydrodynamique possible avec le modèle FHP.

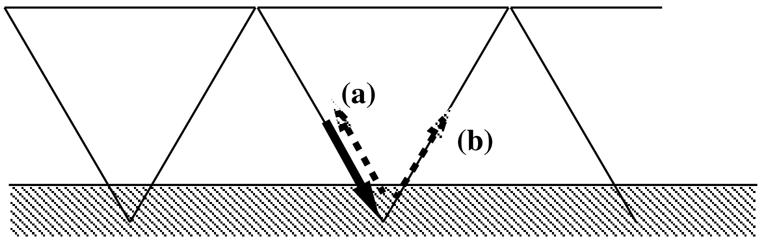


Figure 5: *Conditions aux limites imposées sur un site solide. La flèche noire représente une particule arrivant sur un site solide, juste avant l'étape de collision. La vitesse de la particule après collision est indiquée en pointillés pour 2 types de conditions aux limites. Cas (a) rebond. Cas (b) réflexion spéculaire.*

La figure 6 montre l'écoulement derrière une plaque. On observe l'allée de Von Karman typique des écoulements derrière un obstacle. La paroi solide a été obtenue en modifiant les règles de collision sur certains sites, comme illustré sur la figure 5. Le cas (a; rebond) équivaut aux conditions

$$u_{\|} = 0; \quad u_{\perp} = 0; \quad \frac{\partial j_{\|}}{\partial n} \neq 0 \tag{8}$$

et le cas (b; réflexion spéculaire) à

$$u_{\|} \neq 0; \quad u_{\perp} = 0; \quad \frac{\partial j_{\|}}{\partial n} = 0 \tag{9}$$

j désigne le flux de masse et $\mathbf{u}$ la vitesse du fluide. Les indices $\|$ et $\perp$ se rapportent aux coordonnées dans les directions parallèles et perpendiculaires à la paroi. Ces différents types de conditions aux limites ont été étudiés en détail par R. Cornubert et D. d'Humières [20, 19]. Un des avantages de la méthode de gaz sur réseau est la facilité avec laquelle une condition aux limites peut être ajoutée. Aucun remaillage n'est rendu nécessaire par la présence des bords.

Il serait impossible et inadéquat de visualiser la vitesse en tout site. Dans la figure 6, chaque vecteur vitesse est le résultat d'une moyenne spatiale sur quelques dizaines de sites. Indépendamment des exigences de lisibilité de la figure, ceci permet de réduire le bruit intrinsèque à la méthode des gaz sur réseau.

Un exemple de simulation d'écoulement en milieu poreux tiré de la réf. [53] est donné sur la figure 7. Les grains solides constituant la matrice rocheuse sont des sites rebondissants comme ceux de la figure 5. L'aspect rectangulaire des grains

Figure 6: *Simulation d'écoulement derrière une plaque. Ce champ de vitesse a été obtenu après 5000 pas de temps sur un réseau* 1024×512, *et pour un nombre de Reynolds de l'ordre de 70. De la référence [26].*

est inspiré de matrices rocheuses modèle telles que celles utilisées par Lenormand et ses collaborateurs [43].

1.3 Gaz sur réseau à 3 dimensions.

Toutes les simulations par gaz sur réseau reposent sur le fait que le mouvement macroscopique d'un fluide ne dépend pas du comportement précis à l'échelle moléculaire, mais seulement des *propriétés de symétrie* du système et des *lois de conservation* vérifiées par les règles d'évolution microscopiques. Le détail des règles ne transparaît qu'à travers les valeurs des coefficients de transport tels que la viscosité.

En deux dimensions, le réseau hexagonal a des propriétés de symétrie suffisantes pour que le gaz sur réseau obtenu obéisse dans la limite incompressible aux équations de Navier-Stokes. En trois dimensions, il n'existe pas de pavage compact de l'espace ayant les propriétés de symétrie adéquates. Le dodécaèdre conviendrait du point de vue des symétries, mais il n'est pas possible de paver l'espace avec

Figure 7: *Simulation d'écoulement dans un milieu poreux modèle.*

celui-ci.

La meilleure solution s'est avérée être de passer en quatre dimensions puis de projeter le réseau en trois dimensions [23, 49]. Le réseau utilisé est cubique face centré (en quatre dimensions). Il est défini par les sites de coordonnées entières (x_1, x_2, x_3, x_4) telles que $\sum_{k=1}^{4} x_i$ soit pair. Le modèle de gaz sur réseau correspondant est appelé FCHC - Face Centered HyperCubic.

Pour éviter toute structuration de l'écoulement dans la quatrième dimension, l'épaisseur dans cette direction est prise égale à deux noeuds seulement, avec des conditions aux limites périodiques. R. Brito et M.H. Ernst ont signalé que cela crée des corrélations entre les particules [12]. En effet, deux particules étant rentrées en collision peuvent à nouveau interagir à seulement deux pas de temps d'intervalle. Cet effet dû à la géométrie et heureusement faible introduit un écart entre la prédiction de Boltzmann et les mesures de coefficients d'autodiffusion.

Anticipons sur le paragraphe suivant et écrivons les équations de Navier-Stokes auxquelles obéit le gaz sur réseau en supposant que les gradients par rapport à la quatrième coordonnée sont négligeables. Il vient, pour $\alpha = 1$ à 3:

$$\partial_t \rho u_\alpha + \sum_{\beta=1}^{3} \partial_\beta [g(\rho) \rho u_\alpha u_\beta] = -\partial_\alpha p + F_\alpha + \eta \sum_{\beta=1}^{3} \partial_\beta^2 u_\alpha \tag{10}$$

et pour $\alpha = 4$:

$$\partial_t \rho u_4 + \sum_{\beta=1}^{3} \partial_\beta [g(\rho) \rho u_4 u_\beta] = F_4 + \eta \sum_{\beta=1}^{3} \partial_\beta^2 u_4 \tag{11}$$

La quatrième composante n'a aucune influence sur le mouvement du fluide dans les trois premières directions. Elle joue le rôle d'un scalaire passif.

La figure 8 donne une vue en perspective de la maille élémentaire projetée en trois dimensions. Les sites blancs correspondent à $x_4 = 1$ et les sites noirs à $x_4 = 0$.

Dans le modèle FCHC, les particules peuvent prendre 24 vitesses différentes, toutes de même module $\sqrt{2}$.

$\mathbf{c}_0 = (+1, +1, 0, 0)$; $\mathbf{c}_4 = (+1, 0, +1, 0)$; $\mathbf{c}_8 = (+1, 0, 0, +1)$
$\mathbf{c}_1 = (+1, -1, 0, 0)$; $\mathbf{c}_5 = (+1, 0, -1, 0)$; $\mathbf{c}_9 = (+1, 0, 0, -1)$
$\mathbf{c}_2 = (0, 0, +1, +1)$; $\mathbf{c}_6 = (0, +1, 0, +1)$; $\mathbf{c}_{10} = (0, +1, +1, 0)$
$\mathbf{c}_3 = (0, 0, +1, -1)$; $\mathbf{c}_7 = (0, +1, 0, -1)$; $\mathbf{c}_{11} = (0, +1, -1, 0)$

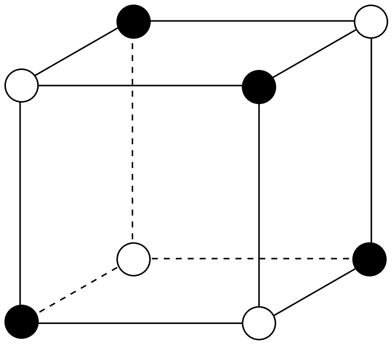


Figure 8: *Maille élémentaire du réseau FCHC projetée en trois dimensions. Les sites blancs correspondent à $x_4 = 1$ et les sites noirs à $x_4 = 0$.*

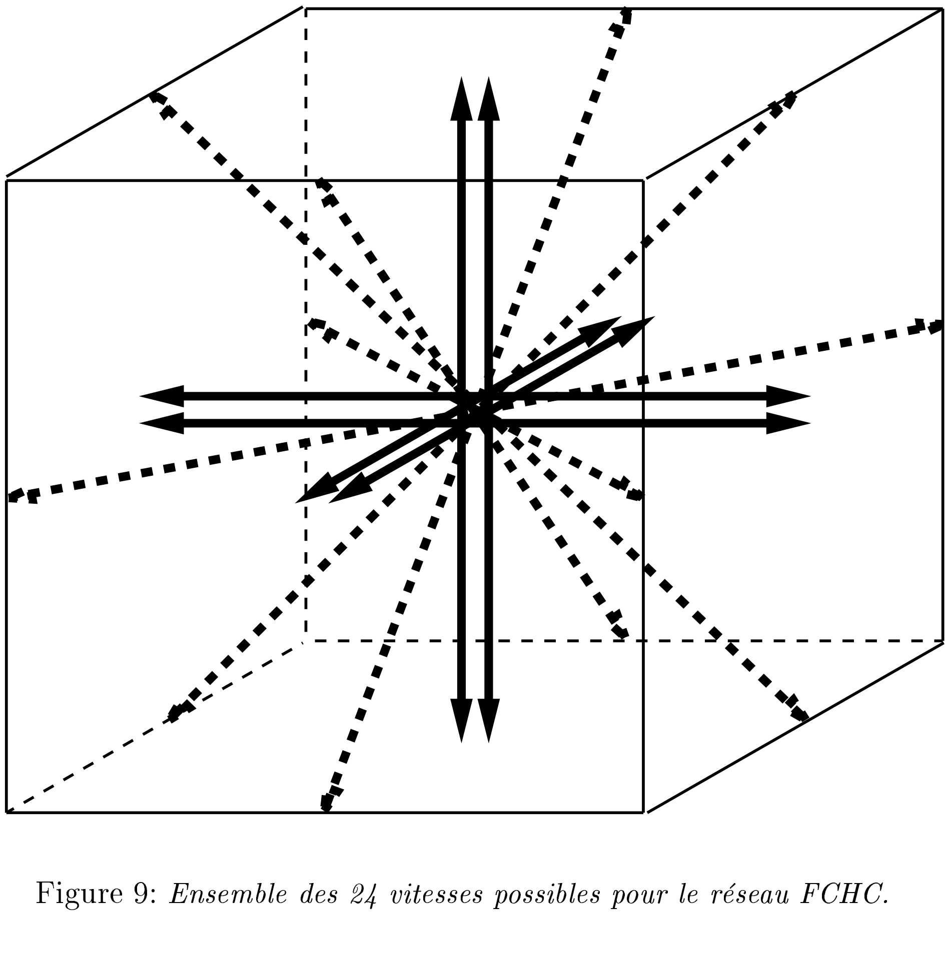


Figure 9: *Ensemble des 24 vitesses possibles pour le réseau FCHC.*

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{c}_{12} = (-1,-1,0,0); \quad \mathbf{c}_{16} = (-1,0,-1,0); \quad \mathbf{c}_{20} = (-1,0,0,-1)\\
&\mathbf{c}_{13} = (-1,+1,0,0); \quad \mathbf{c}_{17} = (-1,0,+1,0); \quad \mathbf{c}_{21} = (-1,0,0,+1)\\
&\mathbf{c}_{14} = (0,0,-1,-1); \quad \mathbf{c}_{18} = (0,-1,0,-1); \quad \mathbf{c}_{22} = (0,-1,-1,0)\\
&\mathbf{c}_{15} = (0,0,-1,+1); \quad \mathbf{c}_{19} = (0,-1,0,+1); \quad \mathbf{c}_{23} = (0,-1,+1,0)
\end{aligned}
$$

Sur la figure 9, les vitesses selon les diagonales (en poitillés) relient deux sites ayant leurs quatrièmes coordonnées identiques, alors que les vitesses doubles qui pointent au milieu des faces permettent de passer de la couche $x_4 = 0$ à la couche $x_4 = 1$, ou l'inverse. Toute vitesse $\mathbf{c}_i$ a son opposé $-\mathbf{c}_i$ dans l'ensemble des 24 vitesses.

La stratégie adoptée pour simuler le modèle diffère légèrement de celle utilisée pour les modèles bidimensionnels décrits précédemment. En deux dimensions, l'opérateur de collision est stocké sous la forme d'une table qui donne la configuration de sortie en fonction de la configuration d'entrée. La même technique utilisée telle quelle en trois dimensions requiert une place mémoire importante, à savoir $2^{24} = 16\,777\,216$ mots machine. Rem et Somers [58] ont proposé un algorithme qui réduit la taille de la table de collision à 106 496 mots machine, grâce à une utilisation judicieuse des symétries du système.

1.4 L'équation de Boltzmann, un outil d'étude théorique du gaz sur réseau.

1.4.1 Grandes lignes du calcul des équations macroscopiques régissant le mouvement du gaz sur réseau.

Par nature, la méthode de gaz sur réseau est bruitée. Comme cela a été vu précédemment, pour exploiter les résultats d'une simulation, on procède à des moyennes afin de réduire le bruit. Selon les cas, la moyenne sera uniquement spatiale, ou sera combinée à une moyenne d'ensemble. Cette dernière sera réalisée à partir de plusieurs simulations dont les caractéristiques initiales sont semblables au niveau macroscopique mais différentes par le détail microscopique.

Du point de vue théorique, l'opération de moyenne permet de passer de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique. En exprimant la conservation de la masse et de l'impulsion à l'échelle macroscopique, on peut espérer obtenir des équations semblables aux équations de Navier-Stokes dans les fluides réels. On suppose que les moyennes $< n_i >$ varient lentement dans l'espace et le temps. Prenant la moyenne de l'expression (6) et faisant un développement au premier ordre en gradient nous obtenons:

$$\partial_t \sum_i < n_i >= -\partial_\alpha \sum_i < n_i > c_{i\alpha} + \mathcal{O}(\nabla^{(2)}) \qquad (12)$$

où nous prenons la convention, suivie uniformément dans la suite de cette thèse, que les indices grecs désignent les composantes cartésiennes des vecteurs et des tenseurs, alors que les indices latins indiquent les directions de vitesse. L'opérateur ∂_α désigne $\frac{\partial}{\partial x_\alpha}$ et $\mathcal{O}(\nabla^{(n)})$ des dérivées quelconques d'ordre n. Un raisonnement analogue au précédent donne pour la conservation de l'impulsion

$$\partial_t \sum_i < n_i > c_{i\alpha} = -\partial_\beta \sum_i < n_i > c_{i\beta} c_{i\alpha} + \mathcal{O}(\nabla^{(2)}) \qquad (13)$$

En définissant la densité de masse $\rho = \sum_i < n_i >$ et la densité de quantité de mouvement $\rho u_\alpha = \sum_i < n_i > c_{i\alpha}$ et en substituant dans les équations (12) et (13) nous obtenons l'équation de conservation de la masse

$$\partial_t \rho = -\mathrm{div}(\rho \mathbf{u}) \qquad (14)$$

et l'équation de conservation de la quantité de mouvement:

$$\partial_t (\rho u_\alpha) = -\partial_\beta \Pi_{\alpha\beta} \qquad (15)$$

dans laquelle nous voyons apparaître le tenseur de flux de quantité de mouvement

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_i < n_i > c_{i\alpha} c_{i\beta}. \qquad (16)$$

Dans l'équation (15) nous prenons la convention qu'une sommation est effectuée sur les indices grecs répétés. Les signes de sommation sont par contre donnés explicitement pour les indices latins.

Alors que tous les termes de l'équation (14) sont entièrement explicites, le développement du tenseur $\Pi_{\alpha\beta}$ en termes des densités ρ et $\mathbf{u}$ requiert un certain effort. Il n'est pas surprenant que la présence d'un réseau sous jacent rende cette dérivation de l'hydrodynamique quelque peu différente du cas fluide habituel. La contribution la plus importante de FHP a été de de remarquer que dans un développement en faible vitesse u_α, un tenseur tel que $\Pi_{\alpha\beta}$ s'écrit nécessairement sous la forme

$$\Pi_{\alpha\beta} = p_0(\rho)\delta_{\alpha\beta} + \lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}(\rho) u_\gamma u_\delta + \mathcal{O}(u^4) \qquad (17)$$

où p_0 et $\lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}$ doivent être obtenus à partir des populations moyennes $< n_i >$. Dans les fluides parfaits classiques au contraire, $\lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}$ est obtenu à partir de considérations de symétrie et d'invariance Galiléenne. Mais comme ici nous travaillons avec un réseau sous jacent, ces dernières considérations de symétrie ne s'appliquent pas. Cela pourrait condamner nos efforts pour simuler un fluide s'il n'était possible de l'effacer par une propriété remarquable du réseau à symétrie hexagonale. En équations l'isotropie implique la forme générale

$$\lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}(\rho) = A(\rho)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + B(\rho)(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \tag{18}$$

où A et B doivent être déterminés à partir des populations moyennes $< n_i >$ comme nous le ferons ci-dessous. Ceci fait, l'équation de conservation de la quantité de mouvement prend la forme

$$\partial_t \rho u_\alpha + 2\partial_\beta[B(\rho)u_\alpha u_\beta] = -\partial_\alpha[p_0(\rho) + A(\rho)u^2] \tag{19}$$

Cette équation n'est pas complètement identique à l'équation d'Euler habituelle pour les fluides parfaits compressibles. Par ailleurs, nous n'avons pas donné l'expression des coefficients A, B et p_0. Cependant comme nous le montrerons plus bas, dans la limite des petites vitesses u, l'équation hydrodynamique des gaz sur réseaux est équivalente à l'équation d'Euler.

Pour obtenir les termes visqueux, et par conséquent les équations de Navier-Stokes du gaz sur réseau, il faut considérer des dérivées d'ordre deux du champ de quantité de mouvement. Le tenseur qui les relie au tenseur de flux de quantité de mouvement est un nouveau tenseur d'ordre 4. Par les mêmes arguments que précédemment, il est isotrope sur le réseau hexagonal et dépend de deux paramètres, correspondant aux viscosités de compression et de cisaillement.

Enfin, notons que la dérivation de l'hydrodynamique donnée ci-dessus, bien que partielle, met en lumière un point important: les détails des règles de collisions n'ont pas d'effet sur la forme des équations de conservation. Ils ne font qu'affecter éventuellement les coefficients obtenus.

La méthode évoquée ci-dessus ayant été employée au cours de la thèse pour étudier le modèle liquide-gaz, nous allons maintenant la décrire plus précisement.

1.4.2 Évaluation des moyennes; densités de probabilité.

Comme cela a été souligné ci-dessus, le calcul du tenseur de transfert d'impulsion requiert la connaissance des populations moyennes $< n_i >$. Si les moyennes sont suffisantes, on peut les assimiler aux probabilités N_i d'occuper l'état i au site $\mathbf{x}$ et à l'instant t. On doit ensuite faire l'hypothèse de quasi-équilibre local, c'est-à-dire que les distributions N_i peuvent se décomposer en

$$\mathbf{N} = \mathbf{N}^{eq} + \mathbf{N}^{(1)} + \mathbf{N}^{(2)} + \cdots \tag{20}$$

où les écarts à l'équilibre $\mathbf{N}^{(k)}$ sont exprimés en termes de puissances des gradients de vitesse et de densité : $\mathbf{N}^{(k)} = \mathcal{O}(\nabla^{(k)})$.

• *Distributions d'équilibre.* Un théorème H a été démontré par Michel Hénon [30] pour un gaz sur réseau éventuellement inhomogène. La démonstration est basée sur l'équilibre semi-détaillé ($\sum_s A(s \to s') = 1$ où $A(s \to s')$ est la probabilité pour qu'un état d'entrée s donne un état de sortie s' par collision) et sur l'absence de corrélations entre les particules avant la collision. Cette dernière hypothèse est appelée hypothèse de Boltzmann ou hypothèse de chaos moléculaire.

Théorème H global

La fonction

$$\sum_{j=1}^{r} [N_j \ln N_j + (1 - N_j) \ln(1 - N_j)] \tag{21}$$

est non croissante lorsque le gaz sur réseau évolue.

La somme sur j porte sur tous les états de vitesse et sur tous les sites du réseau. Il a été montré qu'alors les distributions d'équilibre $\mathbf{N}^{eq}$ sont celles de Fermi-Dirac (à cause du principe d'exclusion). Elles sont calculées dans l'appendice A et valent, une fois développées en puissance de la vitesse,

$$N_i^{eq} = d\left\{1 + \frac{Db}{b_m} u_\alpha . c_{i\alpha} + G(d)\left[c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}\right] u_\alpha u_\beta\right\} + \mathcal{O}(u^3) \tag{22}$$

avec

$$\left\{\begin{array}{lcl} d & = & \frac{\rho}{b} = \text{densité réduite.} \\ G(d) & = & \frac{D^2}{2}\frac{b^2}{b_m^2}\left(\frac{1-2d}{1-d}\right) \\ c_s^2 & = & \frac{b_m}{bD} \end{array}\right. \tag{23}$$

b_m et b sont les nombres d'états de vitesse respectivement non nulles et au total. D est la dimension de l'espace.

La forme générale de l'écart à l'équilibre au premier ordre $\mathbf{N}^{(1)}$ provient des relations de conservation de la masse et de l'impulsion ainsi que des symétries du réseau. On trouve (v. appendice B)

$$\left\{ \begin{array}{lcl} N_i^{(1)} & = & \Psi Q_{i\alpha\beta} \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\beta} - \chi \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\beta} \\ N_k^{(1)} & = & \frac{b_m}{b-b_m} \chi \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\beta} \end{array} \right. \tag{24}$$

où $Q_{i\alpha\beta} = c_{i\alpha} c_{i\beta} - (c^2/D)\delta_{\alpha\beta}$. Les coefficients Ψ et χ sont des inconnues qu'il faudra déterminer par la suite.

Il nous faut maintenant préciser à quel ordre on doit mener les développements en gradient et en vitesse pour retrouver les équations d'Euler et de Navier–Stokes.

1.4.3 Choix des ordres de grandeur.

Le calcul des équations macroscopiques auxquelles obéit le gaz sur réseau va être effectué dans la limite des faibles gradients et pour un nombre de Mach très inférieur à 1.

On introduit deux petits paramètres : ϵ tel que $\frac{\partial}{\partial_x} = \mathcal{O}(\epsilon)$ et le nombre de Mach $M = u/c_s$. On doit choisir α et γ tels que $\frac{\partial}{\partial_t} = \mathcal{O}(\gamma)$ et $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0 + \rho_1(\mathbf{x}, t)$ avec $\rho_1 = \mathcal{O}(M^\gamma)$. ρ_0 est une constante.

On veut retrouver le maximum de termes des équations de Navier–Stokes. Cette condition se traduit pour la conservation de la masse par $\gamma = \epsilon M^{1-\alpha} c_s$ et pour la conservation de l'impulsion par $M^{1-\alpha} + M = M^{\alpha-1} + \nu\epsilon/c_s$. Cette dernière relation mène à des impossibilités sauf si $\alpha = 1$. En reportant cette valeur dans l'expression précédente on a $\gamma = \epsilon c_s$. Finalement, les ordres de grandeurs retenus sont

$$\begin{array}{rcl} \frac{\partial}{\partial_x} & = & \mathcal{O}(\epsilon); \\ u & = & \mathcal{O}(M c_s); \\ \rho_1(\mathbf{x}, t) & = & \mathcal{O}(M); \\ \frac{\partial}{\partial_t} & = & \mathcal{O}(\epsilon c_s); \end{array}$$

La vitesse du son pour un gaz sur réseau étant d'ordre 1, on notera souvent $\mathcal{O}(M) = \mathcal{O}(u)$.

1.4.4 Equations macroscopiques au premier ordre - Equations d'Euler.

Le tenseur $\Pi_{\alpha\beta}$ défini par l'équation (17) doit être évalué à l'ordre $\mathcal{O}(u^2)$. A cet ordre, les corrections à l'équilibre ne sont pas prises en compte. D'après l'expression de N_i^{eq} donnée ci-dessus, l'équation (15) devient

$$\partial_t \rho u_\alpha + \partial_\beta [g(\rho) \rho u_\alpha u_\beta] = -\partial_\alpha [p(\rho, u^2)] \tag{25}$$

avec

$$\begin{aligned} g(\rho) &= \frac{b}{b_m} \frac{D}{D+2} \frac{1-2d}{1-d} && (26) \\ c_s^2(\rho) &= \frac{b_m}{b} \frac{1}{D} && (27) \\ p(\rho, u^2) &= c_s^2 \rho + \frac{\rho}{2} g(\rho) \left[1 - c_s^2 (D+2)\right] u^2 && (28) \end{aligned}$$

La vitesse du son vaut $c_s = \sqrt{(\partial p / \partial \rho)_{u=0}}$, ce qui justifie les notations utilisées dans l'équation 22.

1.4.5 Equations macroscopiques au second ordre - Equations de Navier–Stokes.

Le tenseur de transfert d'impulsion devra être évalué à l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon u) + \mathcal{O}(u^2)$. Cette fois, la moyenne $< n_i >$ doit être remplacée par $N_i^{eq} + N_i^{(1)}$. Il nous faut donc calculer les coefficients Ψ et χ qui interviennent dans l'expression de $N_i^{(1)}$. Ceux-ci sont obtenus en inversant l'équation d'évolution au premier ordre

$$N_i^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t+1) - N_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \Delta_i \left(\mathbf{N}^{eq} + \mathbf{N}^{(1)} \right). \tag{29}$$

Il serait beaucoup trop lourd de considérer dans sa totalité l'opérateur de collision Δ obtenu par moyenne de l'opérateur microdynamique δ. Une première simplification provient de l'hypothèse de chaos moléculaire, qui a déjà été employée pour justifier l'expression des distributions d'équilibre. Puisqu'on néglige les corrélations entre particules avant les collisions, les moyennes des produits apparaissant dans l'équation (3) sont remplacées par le produit des distributions de densité. Ensuite, on linéarise le terme de collision autour de l'équilibre en tenant compte de l'invariance par collision de la distribution d'équilibre de Fermi-Dirac. L'équation d'évolution au premier ordre devient

$$N_i^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t+1) - N_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \Omega_{ij} N_j^{(1)} \tag{30}$$

Les symétries du problème imposent la forme de la matrice Ω. L'expression et les propriétés de Ω que nous allons donner dans ce qui suit correspondent au modèle

FHP. Une généralisation à d'autres réseaux pourra être trouvée dans les références [7, 38].

Pour FHP, Ω est de la forme

$$\Omega = \begin{pmatrix} \xi & \kappa \cdots \kappa \\ \kappa & \\ \vdots & A \\ \kappa & \end{pmatrix} \tag{31}$$

où A est une matrice 6×6 circulante: $A_{ij} = A_{i-1,j-1}$, les indices étant pris modulo 6.

Les probabilités de mettre en mouvement une particule au repos, ou de stopper une particule en mouvement sont égales entre elles (équilibre semi-détaillé) et valent alors 6κ.

En ce qui concerne les états de vitesse différents de zéro, l'invariance par rotation $\pi/3$ impose que la modification de N_i dûe à N_j ne dépende que de la position relative de $\mathbf{c}_i$ et $\mathbf{c}_j$, c'est à dire de $|i-j|$. La matrice A est donc de la forme:

$$A = \begin{pmatrix} a_0 & a_{60} & a_{120} & a_{180} & a_{120} & a_{60} \\ a_{60} & a_0 & a_{60} & a_{120} & a_{180} & a_{120} \\ a_{120} & a_{60} & a_0 & a_{60} & a_{120} & a_{180} \\ a_{180} & a_{120} & a_{60} & a_0 & a_{60} & a_{120} \\ a_{120} & a_{180} & a_{120} & a_{60} & a_0 & a_{60} \\ a_{60} & a_{120} & a_{180} & a_{120} & a_{60} & a_0 \end{pmatrix} \tag{32}$$

où les indices indiquent l'angle que forment les deux états de vitesse concernés. Alors il est immédiat de vérifier que Ω a pour vecteurs propres les vecteurs suivants:

- $X^0 = (N_c, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$, vecteur de masse associé à la valeur propre λ_0,
- $\{c_{ix}\}_{i=0\text{à}6}$ et $\{c_{iy}\}_{i=0\text{à}6}$ associés à la valeur propre λ_1,
- $\{Q_{ixx}\}_{i=0\text{à}6}$ et $\{Q_{ixy}\}_{i=0\text{à}6}$ associés à la valeur propre λ (on définit $Q_{0\alpha\beta} = 0$ et $Q_{i\alpha\beta} = c_{i\alpha}c_{i\beta} - \frac{c^2}{D}\delta_{\alpha\beta} \;\; \forall i = 1$ à 6),
- $V^\gamma = (0, 1, -1, 1, -1, 1, -1)$ associé à γ,
- $V^\tau = (-\frac{6}{N_c}, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$ associé à τ.

Comme cela est détaillé dans l'appendice D, la conservation de la masse et de l'impulsion imposent que $\lambda_0 = \lambda_1 = 0$. Les valeurs propres λ,γ et τ dépendent du détail des règles de collision.

Dans l'expression (24), $N_i^{(1)}$ est donné comme combinaison linéaire de vecteurs propres de Ω. Les coefficients Ψ et χ sont simplement obtenus par projection de l'équation d'évolution au premier ordre (30) sur ces vecteurs propres. On trouve $\lambda\Psi = D/b_m$ et $\chi\kappa b_m = 1/(b_m+1)^2$.

Une fois que $N_i^{(1)}$ est connu, on développe l'expression du tenseur de transfert d'impulsion $\Pi_{\alpha\beta}$ à l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon u) + \mathcal{O}(u^2)$. Les équations de Navier–Stokes liées à la conservation de l'impulsion sont alors

$$\partial_t \rho u_\alpha + \partial_\beta [g(\rho)\rho u_\alpha u_\beta] = -\partial_\alpha p + \partial_\beta \left(\nu \partial_\beta(\rho u_\alpha)\right) + \partial_\alpha \left[\left(\frac{D-2}{D}\nu + \zeta\right)\partial_\beta(\rho u_\beta)\right] \quad (33)$$

où

$$\nu = -\frac{1}{2(D+2)} - \frac{b_m}{D(D+2)}\Psi \quad (34)$$

$$\zeta = \frac{b_m}{D}\chi - \frac{1}{2D} + \frac{1}{2}c_{s0}^2. \quad (35)$$

Les viscosités ν et ζ de cisaillement et de compression dépendent du détail des collisions par l'intermédiaire des valeurs de Ψ et χ. Leurs expressions ont été données dans [22] pour le modèle FHP et dans [37] pour le modèle FCHC.

1.5 Le modèle de Boltzmann, une méthode de simulation numérique inspirée des gaz sur réseau.

1.5.1 Présentation du modèle.

Parallèlement aux gaz sur réseau booléens se sont développés des modèles dits de Boltzmann [44]. Le système considéré est toujours le même, à savoir un gaz de particules ponctuelles se déplaçant sur un réseau et évoluant par alternance de collisions et de propagations. Cependant, les variables booléennes représentant l'occupation des états sont remplacées par des probabilités d'occupation. La configuration dans laquelle se trouve le système n'est alors plus donnée par des variables entières mais par des variables réelles.

Précisons le modèle. On commence par donner les distributions d'équilibre. Par exemple en deux dimensions sur un réseau hexagonal, on peut prendre

$$N_i^{eq}(\mathbf{u}, \rho) = d + 2d_0 \left(c_{i\alpha} u_\alpha + 2Q_{i\alpha\beta} u_\alpha u_\beta \right) \tag{36}$$

où d_0 est une densité fixée. Ces distributions de pseudo-équilibre sont une approximation des distributions de Fermi-Dirac, choisies de façon à obtenir des équations de Navier–Stokes identiques à celles d'un fluide réel.

L'évolution des distributions de densité est donnée par l'équation de Boltzmann linéarisée suivante :

$$N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c_i}, t+1) = N_i(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=1}^{b_m} \Omega_{ij} \{ N_j(\mathbf{x}, t) - N_j^{eq}[\mathbf{u}(\mathbf{x}, t), \rho(\ X, t)] \} \tag{37}$$

Ω est appelé opérateur de collision linéarisé. Il est choisi selon des méthodes bien connues [39, 7, 47], de façon à conserver la masse et l'impulsion, et à assurer l'isotropie des équations de Navier–Stokes. Il permet aussi d'ajuster à volonté la viscosité ν.

Si l'on se place en deux dimensions, sur un réseau hexagonal, la forme générale de Ω est la même qu'au paragraphe précédent (équation (31)). Ω est entièrement défini à partir de ses vecteurs propres, qui sont résumés dans la table 1. Ici, λ,γ et τ peuvent être fixés arbitrairement, sans référence à des règles précises de collision. Il faudra seulement les choisir de façon à rester dans le domaine de convergence du modèle. On met d'habitude τ et γ à -1 afin que les écarts à l'équilibre s'amortissent le plus rapidement possible.
La valeur propre λ est liée à la viscosité par

$$\nu = -\frac{1}{4} \left(\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \tag{38}$$

Son choix fixe donc la viscosité qui peut être rendue arbitrairement petite, voire négative. Une valeur minimale de la viscosité sera cependant fixée par les conditions de stabilité. D'autre part, il faut veiller à ce que l'échelle de dissipation visqueuse ne soit pas plus petite que la maille du réseau.

1.5.2 Comparaison de la méthode de Boltzmann sur réseau avec celle de gaz sur réseau booléen.

Si l'on compare les deux approches, les temps de calculs pour la méthode de Boltzmann s'avèrent supérieurs à ceux des gaz sur réseau d'un facteur 100 environ.

Vecteurs propres	Valeurs propres
$X^0 = (N_c, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$	0
$\{c_{ix}\}_{i=0à6}$ et $\{c_{iy}\}_{i=0à6}$	0
$\{Q_{ixx}\}_{i=0à6}$ et $\{Q_{ixy}\}_{i=0à6}$	λ
$V^\gamma = (0, 1, -1, 1, -1, 1, -1)$	γ
$V^\tau = (-\frac{6}{N_c}, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$	τ

Table 1: *Vecteurs propres de l'opérateur de collision linéarisé pour le modèle de Boltzmann. N_c est le nombre de particules au repos.*

Ils sont comparables à ceux des méthodes de type éléments finis : dans les deux cas on travaille sur des variables réelles et non entières. La contrepartie en est que l'on évite le bruit intrinsèque au gaz sur réseau; il devient superflu d'effectuer des moyennes sur les résultats.

Le bruit microscopique du gaz booléen est toutefois un avantage lorsqu'il rentre effectivement en jeu dans le phénomène physique considéré (coalescence de gouttes, stabilité de films liquides, etc...). Il n'est alors pas nécessaire de le rajouter comme c'est le cas dans une équation de Langevin [48].

Soulignons d'autre part que les coefficients de transport d'un gaz sur réseau booléen sont difficilement contrôlables. On se contente généralement de les mesurer a posteriori lors des simulations. Bien sûr, on peut modifier la viscosité en jouant sur le choix des règles de collision. Mais bien que la relation entre les deux soit connue, l'ajustement de la viscosité requiert une optimisation qui ne peut être faite que numériquement [37]. De plus, l'étendue des valeurs accessibles reste limitée. Les paramètres d'un modèle de Boltzmann sont beaucoup plus aisément maîtrisés. Pour reprendre l'exemple de la viscosité, celle-ci apparait directement liée à l'une des valeurs propres de l'opérateur de collision linéarisé et peut être ajustée à volonté. La méthode de Boltzmann permet donc d'atteindre des nombres de Reynolds plus élevés. D'autre part, la liberté qui est laissée quant au choix de la distribution d'équilibre permet d'ajuster à 1 le coefficient $g(\rho)$ de non-invariance galiléenne qui apparait dans l'équation (25).

Les prédictions théoriques sont également facilitées. Pour trouver les équations d'évolution macroscopiques, on procède comme indiqué pour le gaz booléen. Cependant, le point de départ étant directement une équation sur les distributions (37) on évite l'étape de prise de moyennes, et le calcul de Ω à partir du détail des règles de collision microscopiques.

En règle générale, il est plus simple d'étendre à trois dimensions un modèle de Boltzmann plutôt qu'un gaz sur réseau booléen.

1.6 Quelques modèles multiphasiques de gaz sur réseau.

La simulation d'écoulements avec interfaces est l'un des points forts des gaz sur réseau. Celles-ci se forment spontanément sous l'effet de règles microscopiques adéquates, et ne nécessitent aucun traitement particulier, même dans le cas où l'interface change de topologie par reconnexion de domaines (v. figure 10). De plus, les règles d'évolution utilisées assurent automatiquement la conservation de la masse et de l'impulsion.

On peut par exemple considérer deux fluides non miscibles, désignés par leur couleur bleue ou rouge. C'est le cas du modèle de Rothman et Keller [54], encore appelé ILG (immiscible lattice gas). La recoloration des particules après une collision est déterminée d'après la couleur dominante dans les sites voisins. Grossièrement, la règle est telle que les particules rouges repartent autant que possible vers les régions rouges et les particules bleues vers les régions bleues. La masse totale, la quantité de mouvement totale et le nombre de particules bleues (ou rouges) sont conservés.

Plus précisément, chaque site du gaz sur réseau contient des particules rouges et/ou bleues mais il y a au plus une particule (rouge ou bleue) dans chacune des directions $\mathbf{c}_1, \cdots, \mathbf{c}_6$. Dans les réalisations habituelles chaque site peut en outre contenir une particule au repos soumise à la même règle d'exclusion. La configuration au site $\mathbf{x}$ est alors décrite par les variables booléennes $\mathbf{r} = (r_i)$ et $\mathbf{b} = (b_i)$ avec la contrainte que $r_i + b_i < 2$.

Sur un site $\mathbf{x}$ donné, le flux de couleur est défini par:

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, \mathbf{b}) = \sum_i \mathbf{c}_i [r_i(\mathbf{x}) - b_i(\mathbf{x})] \tag{39}$$

Le gradient de couleur est défini par

$$\mathbf{f} = \sum_i \sum_{\text{voisins} j} \mathbf{c}_j [r_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j) - b_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j)] \tag{40}$$

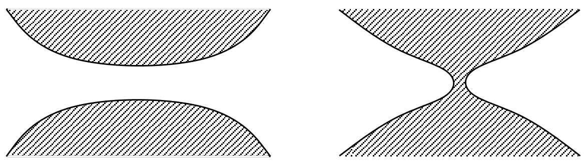


Figure 10: *Reconnexion de deux domaines entrainant un changement de la topologie de l'interface.*

La configuration $(\mathbf{r}', \mathbf{b}')$ issue de $(\mathbf{r}, \mathbf{b})$ après collision est définie de la façon suivante. On recherche une configuration qui maximise la quantité:

$$W = \mathbf{q}(\mathbf{r}', \mathbf{b}').\mathbf{f} \tag{41}$$

avec les contraintes de conservation de la masse:

$$\sum_i r_i = \sum_i r_i' \qquad\qquad \sum_i b_i = \sum_i b_i' \tag{42}$$

et de la quantité de mouvement

$$\sum_i (r_i + b_i)\mathbf{c}_i = \sum_i (r_i' + b_i')\mathbf{c}_i \tag{43}$$

S'il y a plus d'un choix possible de configuration de sortie maximisant W, une sélection aléatoire est effectuée.

Une caractéristique de ce modèle est sa capacité à représenter la séparation de phase dans un mélange. Un exemple est montré sur la figure 11. La simulation est effectuée sur une maille de taille $256 \times \frac{\sqrt{3}}{2} 256$. Remarquons que le facteur $\frac{\sqrt{3}}{2}$ provient de l'espacement entre les rangées de sites dans la direction perpendiculaire à un axe du réseau hexagonal. On l'omettra dans ce qui suit. A mesure que le temps de simulation avance, la taille des domaines croît. Ce phénomène est dû à la présence de tension capillaire dans le modèle. Les mesures effectuées montrent que chaque phase est presque pure (à plus de 99%). Or, dans une phase pure, les règles d'évolution se ramènent exactement à celles du modèle FHP. Dans une phase homogène, le fluide obéit donc aux mêmes équations de Navier–Stokes que FHP. Un modèle de Boltzmann basé sur le même principe a été développé [32] et étendu à trois dimensions [34].

Un autre modèle est celui de Rem et Somers [57]. L'idée consiste à colorer non seulement les particules mais aussi les trous. Ceux-ci, en se propageant dans le

Figure 11: *Séparation de phase dans une simulation du modèle ILG. A mesure que le temps progresse les régions rouges et bleues s'agrandissent. De la référence [52].*

direction inverse à celle des particules, apportent en un site de l'information sur la couleur des sites voisins. Alors le gradient de couleur peut être estimé sur un seul site. L'issue de la collision dépend du gradient de couleur selon des règles analogues à celles du modèle ILG. La couleur des trous doit être redéfinie après la collision.

La séparation de phase peut aussi être provoquée par des réactions entre les espèces [21, 25]. Celles-ci doivent favoriser l'espèce majoritaire en chaque noeud. Des simulations de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz ont été réalisées par un modèle de ce type [17]. Un inconvénient est qu'alors on ne conserve plus le nombre de particules de chaque espèce et qu'à la faveur d'une fluctuation, l'une des phases peut envahir tout le système.

H. J. Bussemaker et M. H. Ernst ont mis en évidence une transition de phase mettant en jeu une seule espèce de particules et qui se produit lorsque la règle d'équilibre semi-détaillé n'est plus vérifiée par les collisions [14]. Des zones de densités et de vitesses différentes se forment. L'état qui en résulte a été étudié par une théorie de champ moyen [15]. L'étude de cette transition est d'autant plus importante que la violation de l'équilibre semi-détaillé a été proposée comme

Figure 12: *Invasion d'un milieu poreux dans le modèle ILG. Les carrés gris représentent des grains solides mouillés par le fluide blanc. Le fluide noir est non mouillant. De la référence [51].*

moyen de ramener à 1 le coefficient $g(\rho)$ de non-invariance galiléenne (équation 33) [13, 25].

.

Chapitre 2

Présentation du modèle liquide gaz

Contrairement aux modèles multiphasiques précédents, le modèle liquide-gaz comporte un seul type de particules. Sous l'effet d'une force attractive le système se sépare en deux phases de densités différentes, toutes deux constituées de particules mobiles. Dans la phase dense - liquide - les particules interagissent constamment entre elles. Par contre, la phase gazeuse, de densité moindre, est quasiment un gaz parfait. En faisant varier ρ on observe une gamme de structures plus riche que dans le cas du modèle ILG. Ceci est dû à l'absence de symétrie entre les phases gaz et liquide dans notre modèle, contrairement au cas des phases bleue et rouge d'ILG.

D'autre part, les phases liquide ou gaz n'ont pas un comportement hydrodynamique aussi simple que celui du modèle ILG. En effet les interactions ont lieu même en dehors de l'interface et la dynamique ne peut pas se ramener à celle de FHP. Nous verrons plus loin comment cela se traduit dans les équations macroscopiques.

Un certain nombre d'articles ayant déjà été publiés sur le modèle ont été inclus tels quels dans cette thèse. Aussi ne reprendrons-nous pas intégralement leur contenu. Le lecteur sera renvoyé de temps à autre à l'un des articles de l'appendice I s'il souhaite des éclaircissements sur des points particuliers, ou s'il désire avoir une vue plus complète du travail effectué sur le sujet.

Dans un premier temps, les diverses variantes utilisées vont cependant être présentées de façon systématique. Puis un certain nombre de résultats seront exposés afin de rapprocher des points éventuellement répartis entre plusieurs publications, de les confronter à des résultats obtenus par d'autres équipes, ou de donner des précisions sur leur obtention. Des travaux non publiés ont également été ajoutés.

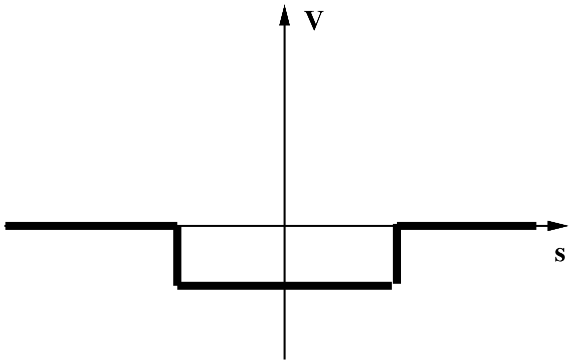


Figure 13: *Potentiel carré correspondant à une interaction effectuée exclusivement à la distance r d'une particule. La coordonnée s repère la distance à une particule.*

2.1 Définition des différents modèles utilisés

2.1.1 Modèle minimal.

En raison de sa simplicité, nous commençons par la description du modèle dit "minimal" bien que celui-ci soit chronologiquement le dernier venu. Le point de départ est le modèle FHP III tel qu'il a été décrit au paragraphe 1.2. Aux étapes de collision et de propagation, on ajoute une étape d'interaction. L'idée est d'exercer une force attractive entre les particules. Pour cela, on cherche des couples de particules en train de s'éloigner l'une de l'autre et on les renvoie l'une vers l'autre.

La portée r de l'interaction est choisie une fois pour toutes au début de la simulation. L'interaction n'a lieu qu'entre particules distantes de r, c'est-à-dire que des particules plus éloignées *ou plus proches* n'interagissent pas. Ceci correspond à un puit de potentiel carré (fig. 13).

Précisons la mise en oeuvre de l'interaction. Dans tout ce qui suit, on utilise l'indice négatif $-i$ pour désigner l'état de vitesse $-\mathbf{c}_i$. Pour toute paire de sites $(\mathbf{x}, \mathbf{x} + r\mathbf{c}_i)$, où $i = 1$, 2, ou 3, la condition d'avoir une interaction est

$$\gamma_i = n_{-i}(\mathbf{x})[1 - n_i(\mathbf{x})][1 - n_{-i}(\mathbf{x} + r\mathbf{c}_i)]n_i(\mathbf{x} + r\mathbf{c}_i) \tag{44}$$

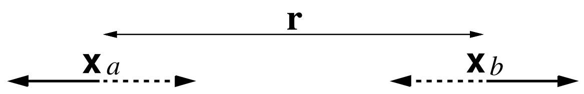


Figure 14: *Interaction du modèle minimal.*

Si $\gamma_i = 1$, alors

$$\begin{cases} n'_i(\mathbf{x}) & = & 1 \\ n'_{-i}(\mathbf{x}) & = & 0 \\ n'_i(\mathbf{x}+r\mathbf{c}_i) & = & 0 \\ n'_{-i}(\mathbf{x}+r\mathbf{c}_i) & = & 1 \end{cases} \tag{45}$$

Autrement dit, l'équation d'évolution microscopique devient

$$n_i(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i, t+1) = n_i(\mathbf{x}, t) + \delta_i[\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)] + \gamma_i - \gamma_{-i} \tag{46}$$

Ceci est illustré par la figure 14. On n'a représenté que deux sites situés à une distance r l'un de l'autre et supposés vérifier les conditions pour que l'interaction ait lieu. Les flèches en traits pleins et pointillés indiquent les états de vitesse respectivement pleins et vides avant l'interaction. Les états non-visualisés peuvent indifféremment être occupés ou non. Alors les particules représentées par les flèches continues sont mises dans les états vides (flèches en pointillés), c'est-à-dire que leur vitesse est changée en son opposé.

Les interactions dans les autres directions sont définies exactement de la même manière. Il est à noter que puisque seuls les états de vitesse parallèles à l'interaction interviennent, les interactions dans chacune des directions sont indépendantes et peuvent être effectuées dans n'importe quel ordre. D'autre part, dans une direction donnée, les interactions ont lieu sur toutes les paires $(\mathbf{x}, \mathbf{x}+\mathbf{c}_i)$ en même temps, sans que cela crée d'ambiguité quant au résultat.

Une autre façon de décrire l'interaction consiste à introduire des particules messagères de masse nulle se déplaçant infiniment vite par rapport aux particules et appelées de ce fait “photons”. Leur mise en oeuvre est décrite dans l'article reproduit en annexe I.4. La figure 15 donne un exemple d'interaction qui met en évidence l'équivalence des deux représentations. Seuls 3 sites alignés et séparés par une distance r ont été dessinés. Les configurations de départ sont telles que des photons sont émis dans chacun des 3 sites. Les photons se propagent sur une

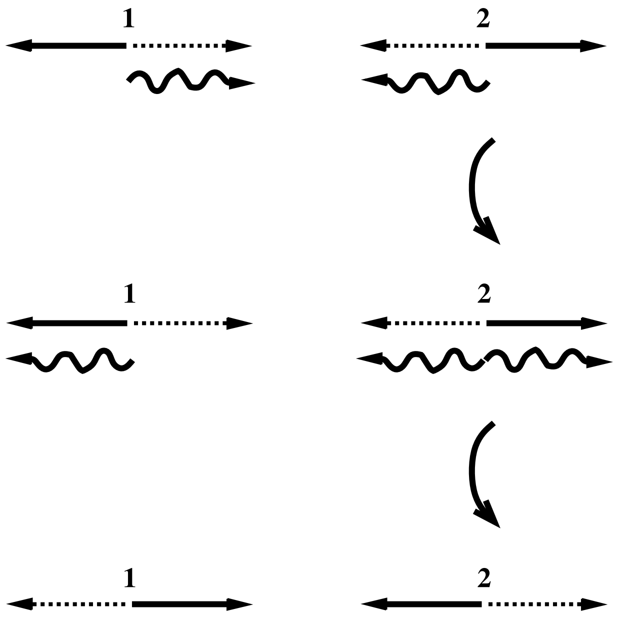


Figure 15: *Exemple d'interaction réalisée avec les photons. Les flèches droites indiquent la présence ou l'absence de particules. Les fléches ondulantes représentent des photons.*

distance r. Seuls deux d'entre eux seront absorbés par une particule, ce qui a pour effet de renverser la vitesse de celle-ci. Ce processus est équivalent à effectuer l'interaction de la figure 14 entre les sites 1 et 2. L'algorithme utilisant les photons est défini de telle manière qu'une particule qui absorbe un photon en a forcément émis un précédemment, qui est absorbé au même instant par une particule située à la distance r de la première.

2.1.2 Modèle maximal et variantes.

Nous allons décrire maintenant des modèles qui sont historiquement antérieurs au modèle minimal, et plus compliqués que celui-ci. C'est pour cette dernière raison que ces modèles n'ont été étudiés qu'en deux dimensions (réseau hexagonal).

L'idée est toujours d'échanger une certaine quantité d'impulsion entre deux sites. Cependant l'interaction peut maintenant faire intervenir des vitesses non parallèles à la direction de l'interaction - l'impulsion échangée restant quant à elle parallèle à cette direction. Notons que le nombre de particules en chaque site

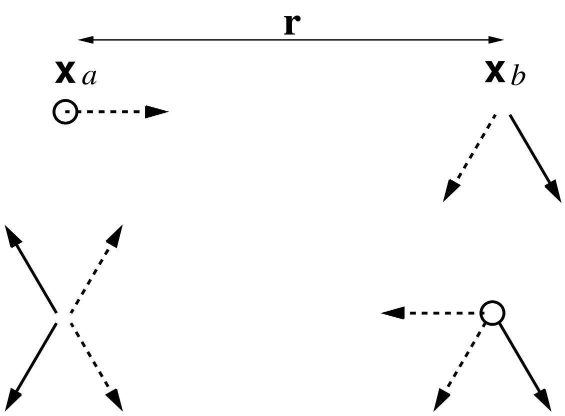


Figure 16: *Exemples d'interactions pour le modèle maximal.*

et l'impulsion totale de la paire sont toujours conservés. Des exemples de telles interactions sont donnés sur la figure 16.

a) Le modèle maximal. Par définition du modèle maximal, on échange entre les deux sites de la paire l'impulsion la plus grande possible pourvu que cela reste compatible avec le principe d'exclusion d'une part, la conservation de la masse en chaque site et de l'impulsion totale de la paire d'autre part.

Considérons une paire de sites $\mathbf{x}_1$ et $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + r\mathbf{c}_k$, dont les configurations sont respectivement $\mathbf{n}^{(1)}$ et $\mathbf{n}^{(2)}$. Le nombre de particules et l'impulsion totale au site $\mathbf{x}_i$ valent $\rho_i = \sum_j n_j^{(i)}$ et $g_i = \sum_j n_j^{(i)}\mathbf{c}_j$. On notera avec des primes ces mêmes grandeurs après l'interaction. L'impulsion échangée vaut alors $\mathbf{t} = \mathbf{g}'_1 - \mathbf{g}_1 = \mathbf{g}_2 - \mathbf{g}'_2$. Pour trouver les configurations de sortie $\left(\mathbf{n}'^{(1)}; \mathbf{n}'^{(2)}\right)$, on explore l'ensemble des couples de configurations de sortie $\left(\tilde{\mathbf{n}}'^{(1)}; \tilde{\mathbf{n}}'^{(2)}\right)$ tels que $\tilde{\rho}'_i = \rho_i$ et $\tilde{\mathbf{g}}'_1 + \tilde{\mathbf{g}}'_2 = \mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2$. On choisit celui qui maximise $\mathbf{t}.\mathbf{c}_k$ (cas d'une interaction attractive). Dans le cas où plusieurs états de sortie obéissent à ce critère, on en retient un arbitrairement.

Il serait lourd d'effectuer ces opérations à chaque étape d'interaction. On le fait une fois pour toutes en début de simulation et on stocke le résultat dans une table d'interaction (éventuellement plusieurs pour tenir compte des cas où divers états de sortie sont possibles. Les tables seront alors choisies aléatoirement ou explorées séquentiellement pendant la simulation).

b) Modèle dit restreint. En fait, parmi toutes les interactions possibles, on peut choisir de façon tout à fait arbitraire lesquelles des interactions seront effectuées. La première fois que le modèle liquide-gaz a été simulé, seules les interactions ne faisant pas intervenir les particules au repos ont été prises en compte. Ce modèle a par la suite été appelé modèle restreint (ou simplifié) [4] par opposition au modèle maximal. On peut penser que l'interaction effective du modèle restreint sera moins forte que celle du modèle maximal et perturbera donc moins les densités d'équilibre, ce qui devrait rendre meilleures les prédictions théoriques. Ce sera effectivement vérifié dans la suite.

c) Ordre d'exploration des paires (modèles maximal et restreint). Dans le cas du modèle minimal, les interactions peuvent être réalisées en parallèle sur toutes les paires de sites à distance r les uns des autres. Au contraire, pour les modèles maximal et restreint, il n'est pas équivalent d'explorer les paires dans un ordre ou dans un autre et il va nous falloir rentrer dans des considérations plus techniques afin de décrire la démarche que nous avons adoptée.

Tout d'abord, les interactions ne peuvent plus être réalisées de façon indépendante dans les trois directions, puisqu'elles font intervenir des vitesses non parallèles à la direction d'interaction. Aussi l'interaction n'est-elle effectuée que dans une direction à chaque pas de temps. L'expérience a montré que le résultat est le plus isotrope lorsque tous les trois pas de temps on choisit aléatoirement dans quel ordre les trois directions d'interaction seront explorées lors des trois pas de temps suivants.

De plus, si un site $\mathbf{x}_a$ appartient à deux paires différentes $(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a)$ et $(\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_c)$, même parallèles entre elles, le résultat peut être différent selon que le site $\mathbf{x}_a$ interagit d'abord avec $\mathbf{x}_b$ ou avec $\mathbf{x}_c$. La figure 17 en donne un exemple. Pour éviter ce type de situation, l'étape d'interaction est décomposée en deux sous-étapes, au cours desquelles l'interaction n'est effectuée que sur un sous-ensemble de paires indépendantes entre elles. Les interactions peuvent alors être réalisées en parallèle sur toutes les paires considérées.

Précisons la façon dont sont définis ces sous-ensembles dans le cas de l'interaction parallèle à $\mathbf{c}_1$: dans un premier temps, de l'impulsion est échangée uniquement entre les sites des paires $(\mathbf{x}, \mathbf{x} + r\mathbf{c}_1)$ telles que $\mathbf{x} = 2i\mathbf{c}_1 + j\mathbf{c}_2$ (fig. 18(a)).

Pour restituer l'homogénéité spatiale du transfert d'impulsion, on explore dans un second temps les paires horizontales restantes (fig. 18(b)). Un site qui était situé

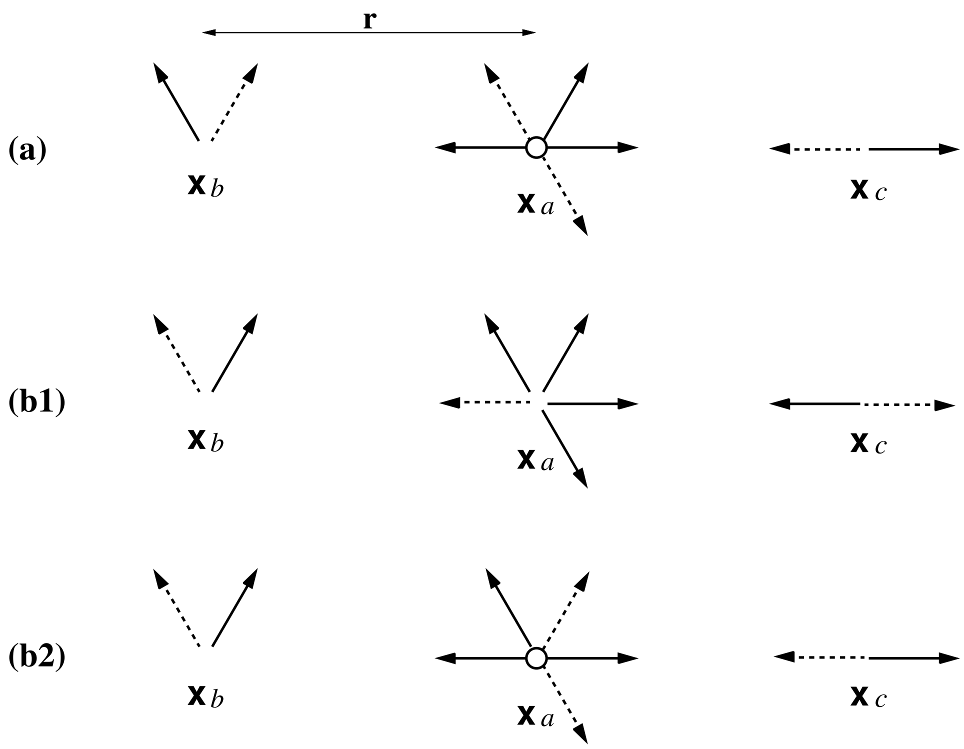


Figure 17: *Influence de l'ordre d'exploration des paires sur le résultat de l'interaction. On représente trois sites situés à une distance r les uns des autres. (a) Etat avant l'interaction. (b) Etats après l'interaction. (b1) L'interaction est réalisée sur la paire $(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a)$ puis sur $(\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_c)$. (b2) L'interaction est réalisée sur $(\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_c)$ puis sur $(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a)$.*

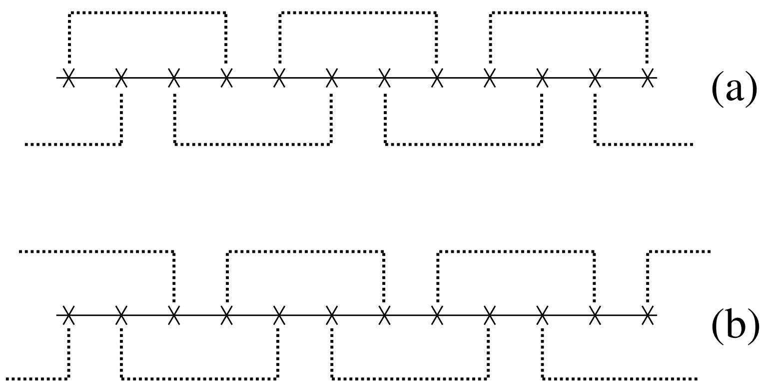


Figure 18: *Paires de sites en interaction. On n'a représenté qu'une seule ligne de sites.*

à droite d'une paire lors de la première série d'interactions se retrouve à gauche d'une paire. En définitive, toutes les paires horizontales subissent l'interaction. Cette décomposition simple de l'ensemble des paires n'est possible que si r est impair, ce qui est le cas dans toutes nos simulations.

Les paires non-horizontales sont explorées de façon similaire. Signalons cependant que la description que nous venons de donner est une approximation de la procédure effectivement employée pour le choix des paires. En pratique, l'homogénéité et l'isotropie imposent des contraintes un peu plus subtiles qui sont discutées dans [6] (appendice I.3).

2.1.3 Interaction conditionnelle.

Selon les applications envisagées il peut être intéressant de modifier la forme de l'équation d'état ou les densités d'équilibre. Ceci est obtenu d'une part en changeant la force de l'interaction (modèles minimal, maximal ou restreint), d'autre part en n'effectuant l'interaction que sous certaines conditions. Par exemple, si l'interaction n'a lieu qu'entre les sites contenant plus de n_0 particules, les densités d'équilibre augmentent avec n_0 (notons que si n_0 est trop grand, il n'y a plus de transition de phase!). Les variantes utilisées dans cette thèse sont résumées dans la table 2.

Modèle	caractéristiques
A	L'interaction a lieu dès que possible
B	L'interaction est attractive si $n > 2$ et répulsive sinon. n est le nombre total de particules dans la paire.
C	L'interaction a lieu seulement si $n > 4$

Table 2: *Quelques–unes des variantes possibles du modèle maximal.*

2.2 Exemples de décomposition spinodale.

Un réseau bidimensionnel est initialisé avec une densité uniforme. Pour certaines valeurs de la densité et de la distance d'interaction, le système se sépare spontanément en deux phases de densités différentes, comme cela est illustré par la figure 19. Les zones grises (blanches) indiquent des densités strictement supérieures (inférieures) à deux particules par site. Il est à noter que la séparation observée ne provient pas uniquement d'un effet de seuil lié aux conventions de couleur. Les profils de densité qui seront présentés plus loin indiquent un saut très net de la densité au niveau de l'interface. Celle-ci varie typiquement d'un facteur 10 sur quelques unités-réseau de longueur. Les conditions aux limites sont périodiques.

La simulation de la figure 19 a été initialisée avec une densité réduite de 0.15. Rapidement, des domaines liquides sont créés sous forme de gouttes. L'anisotropie dûe au réseau est visible sur certaines d'entre elles. Selon la densité initiale se formeront des gouttes ou des bulles. La figure 20 a été obtenue pour une densité de départ bien plus élevée (0.4). Au bout de 10 pas de temps commencent à apparaitre des fluctuations de la densité. Puis la taille des domaines croit, jusqu'à l'obtention d'une bulle unique.

On retrouve sur les simulations l'asymétrie qui existe entre les phases liquide et gaz. Les gouttes de la figure 19 ont, au moins dans un premier temps, une forme beaucoup plus allongée que les bulles de la figure 20. Ce sont plutôt des domaines liquides reliés entre eux par des films de liquide. Au contraire les bulles qui se forment à plus forte densité acquièrent assez vite une forme quasi-circulaire.

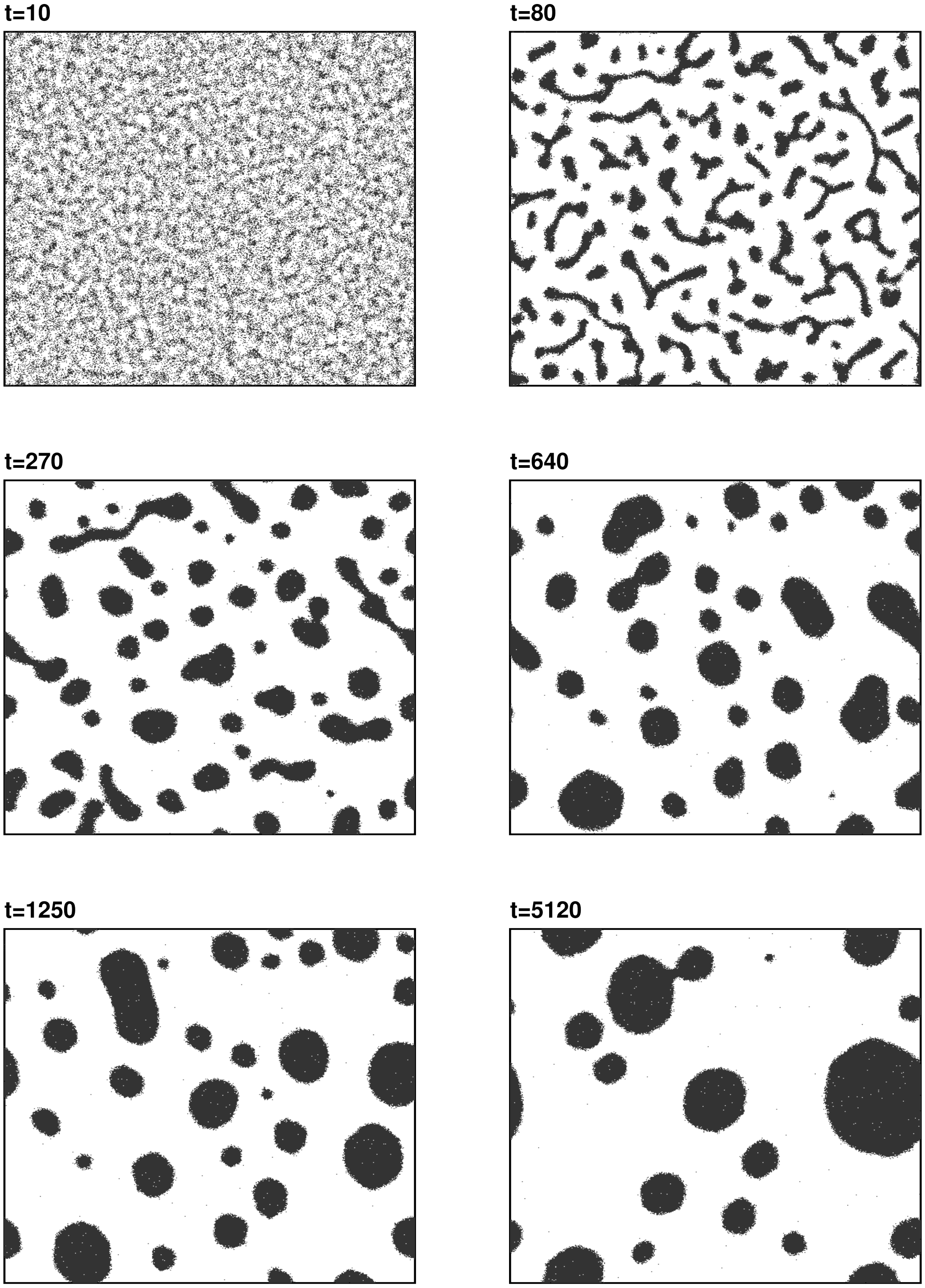


Figure 19: *Décomposition obtenue sur un maillage* 480×480, *avec* $r = 5$ *et une densité initiale uniforme* $d = 0.15$.

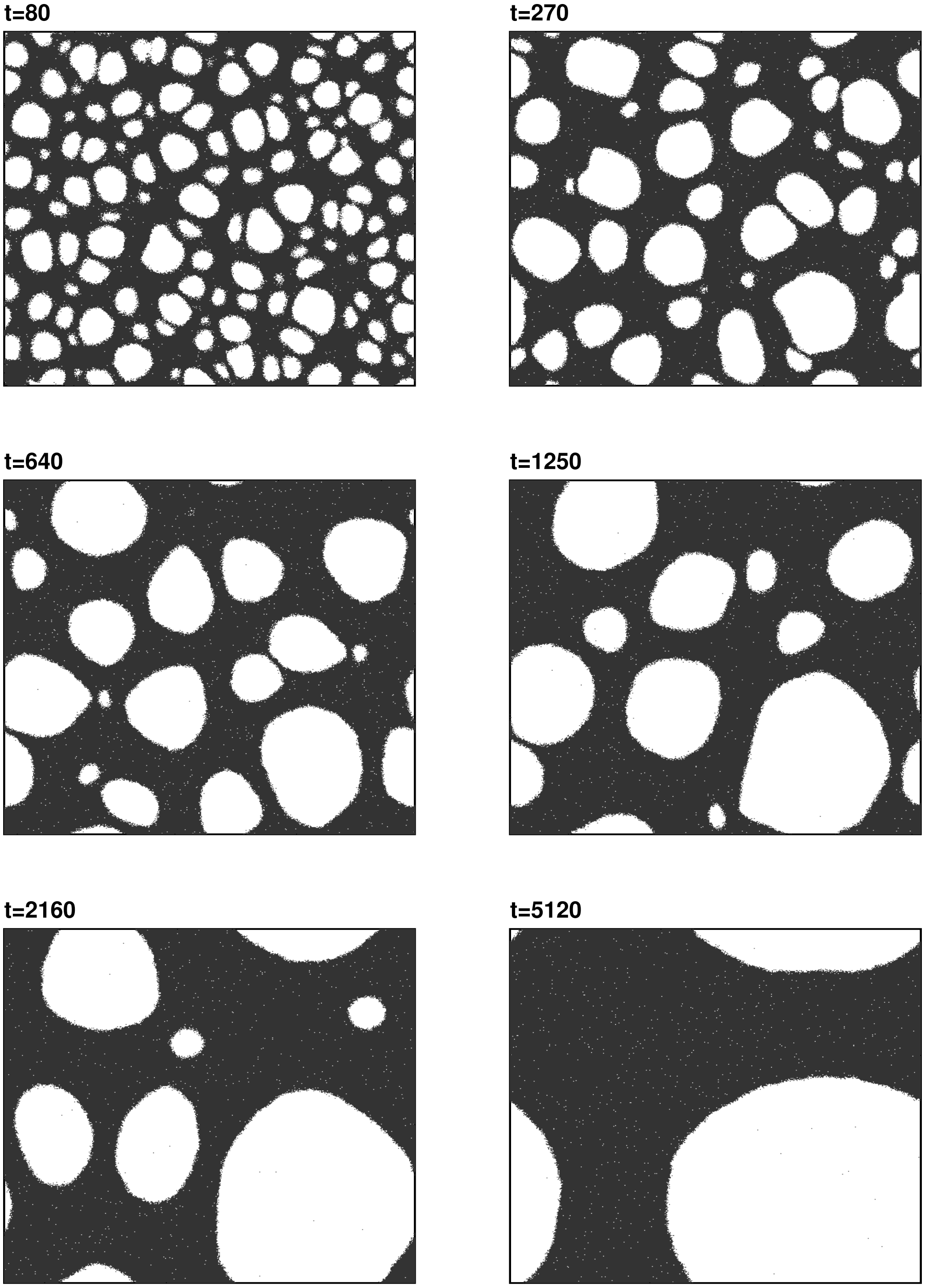


Figure 20: *Décomposition obtenue sur un maillage* 480×480, *avec* $r = 5$ *et une densité initiale uniforme* $d = 0.4$.

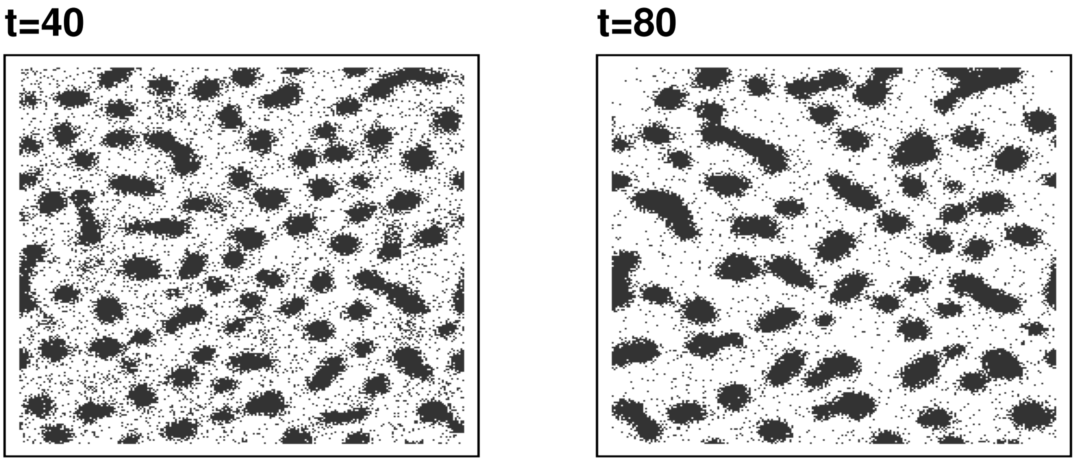


Figure 21: *Décomposition obtenue avec la variante C,* $r = 5R$*, sur un réseau* 240×240*. La densité initiale vaut* 0.2 *particule par état.*

Lorsqu'elles sont séparées par des films liquides, elles peuvent néanmoins présenter des facettes.

La décomposition de la figure 21 a été obtenue pour la variante C du modèle, dont les densités d'équilibre sont plus élevées que pour la forme A de base du modèle liquide-gaz.

La décomposition observée dans les simulations suit bien le mécanisme décrit par Landau et Lifshitz [42]. Dans un milieu homogène, des fluctuations forment de petites quantités d'une nouvelle phase. Comme la création d'une interface est un processus énergétiquement défavorable, seules les fluctuations dont la taille atteint une certaine valeur critique peuvent survivre. Les autres se redissolvent. Nous observons effectivement dans nos simulations la disparition des bulles les plus petites et la croissance des plus grandes (figure 22). D'autres mécanismes de croissance ont pu être observés, comme la rupture de films liquides séparant deux zones gazeuses. La figure 23 illustre le processus symétrique, à savoir la coalescence de gouttes.

2.3 Modèle liquide-gaz à une dimension.

Nous avons également développé un modèle liquide-gaz à une dimension, à partir du modèle de d'Humières, Lallemand et Qian [24]. Les particules peuvent prendre

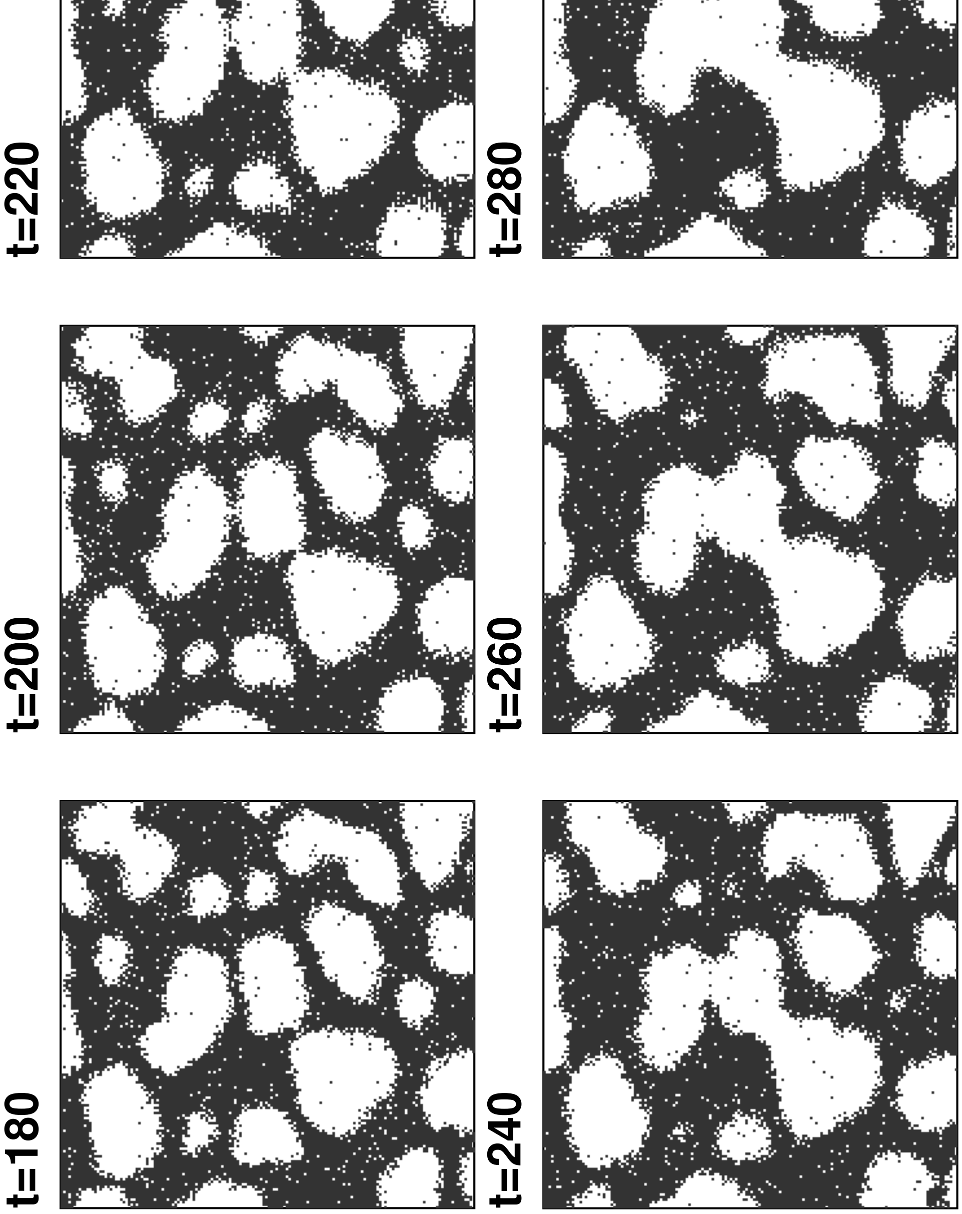


Figure 22: *Croissance des domaines par disparition des bulles de petit rayon et rupture de films liquides. On ne montre qu'une partie du réseau, de taille* 120×120*. La simulation a été réalisée avec le modèle A, pour* $r = 3$ *et une densité initiale de* 0.3 *particule par état.*

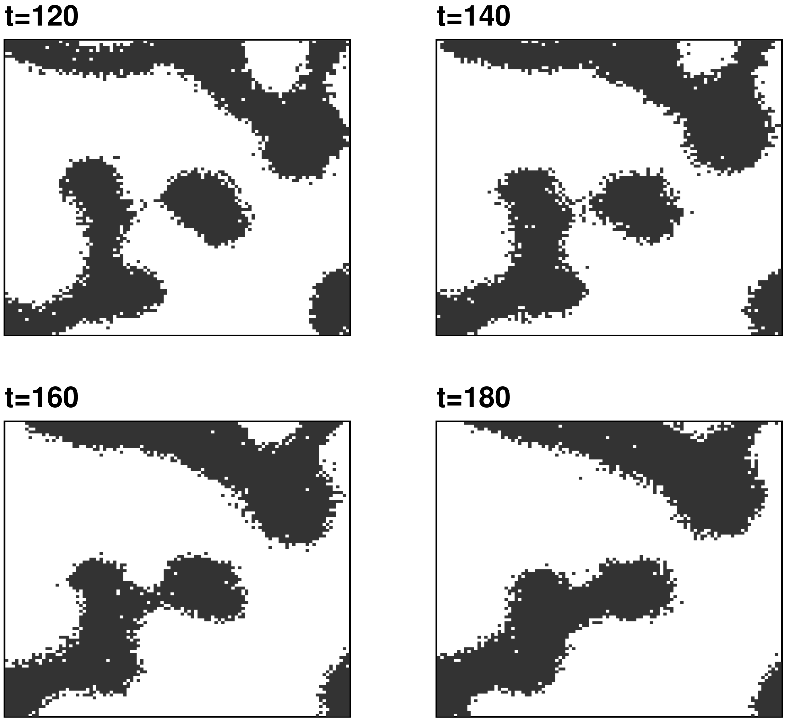


Figure 23: *Coalescence de gouttes. On ne montre qu'une partie du réseau. La simulation a été réalisée avec le modèle A, pour $r = 5$ et une densité initiale de* 0.2 *particule par état.*

5 vitesses :

$$\mathbf{c}_i = i\,\mathbf{e}_x \qquad \text{i = -2 à +2} \tag{47}$$

L'interaction est toujours réalisée entre deux particules situées à une distance r l'une de l'autre. Les vitesses des deux particules doivent être de même module $\|\mathbf{c}_i\| = 1$ ou 2 afin de conserver l'impulsion. L'équation d'évolution s'écrit exactement comme celle du modèle FHP (équation 46).

Des simulations ont été effectuées, mettant en évidence une séparation en deux phases de densités différentes, pour $r = 3, 5$ ou 7. Sur la figure 24, on a porté l'espace en abcisse et le temps en ordonnée. Les domaines liquides croissent par coalescence, et par ajout progressif de particules, jusqu'à obtention d'un domaine unique.

2.4 Extension du modèle liquide-gaz à 3 dimensions.

Pour étendre le modèle liquide-gaz à 3 dimensions, nous sommes partis du modèle FCHC décrit au paragraphe 1.3. Toute vitesse $\mathbf{c}_i$ a son opposé $\mathbf{c}_{-i} = -\mathbf{c}_i$ dans l'ensemble des 24 vitesses, ce qui permet de définir l'interaction comme en deux dimensions (équation 46).

La simulation de la figure 25 a été obtenue sur un maillage $120 \times 120 \times 20$ et avec $r = 8$, en partant d'une densité uniforme $\rho = 6$ particules par site. L'épaisseur étant faible, on a une structure quasiment bidimensionnelle. Les images tridimensionnelles ont été obtenues par une projection en perspective. Le fluide est opaque quand sa densité est supérieure à 5 particules par site. Il est représenté en gris pour une abcisse paire et en noir pour une abcisse impaire, de façon à mieux visualiser les reliefs.

En prenant un réseau $96 \times 96 \times 64$, on obtient une structure tridimensionnelle (figure 26). Comme en deux dimensions, nous pensons que la taille des domaines va croître jusqu'à atteindre les dimensions de la boite.

Nous avons eu recours à l'algorithme de Rem et Somers [58] pour réduire la taille des tables de collision. Quant aux interactions, leur simplicité permet un codage sous forme booléenne qui évite la définition d'une table.

Les simulations ont été réalisées sur des stations de travail Sun SPARC 2 et Solbourne.

Figure 24: *Séparation en 2 phases de densités différente obtenue avec le modèle unidimensionnel, sur une chaîne de 480 sites, pour* $r = 7$ *et* $\rho_{t=0} = 2.5$ *particules par site. Un point gris (noir) indique la présence de 1 ou 2 particules par site (respectivement 3 à 5). L'espace est reporté en abcisse et le temps en ordonnée. Le temps s'écoule vers le bas.*

350, 400 *et* 500.

Figure 25: *Décomposition tridimensionnelle obtenue sur un réseau* $192 \times 192 \times 20$, *pour une densité initiale* $\rho = 6$ *particules par site et pour une portée d'interaction* $r = 8$. *L'état du réseau est visualisé aux temps* $t = 300$, 350, 400 *et* 500.

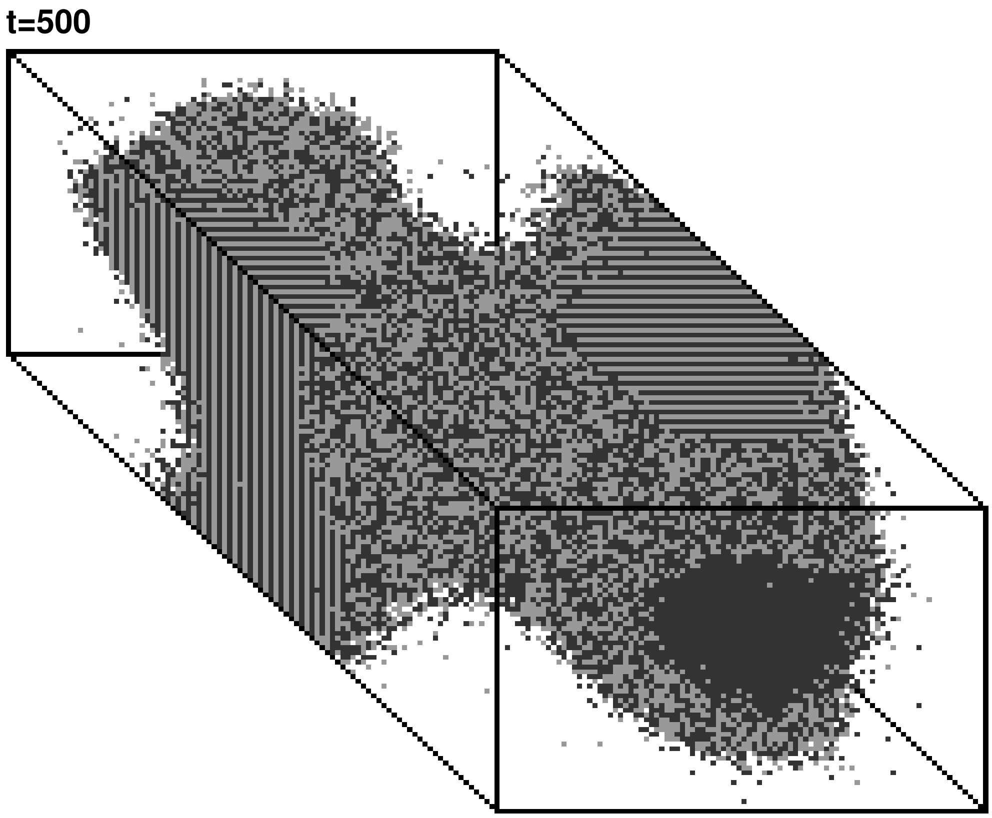


Figure 26: *Décomposition tridimensionnelle obtenue sur un réseau* $96 \times 96 \times 64$, *pour une densité initiale* $\rho = 6$ *particules par site et pour une portée d'interaction* $r = 8$. *L'état du réseau est visualisé au temps* $t = 500$.

2.5 Exemples d'application du modèle liquide-gaz.

2.5.1 Mousses de savon bidimensionnelles; étude des films liquides.

Nous avons essayé de simuler la formation de mousses de savon bidimensionnelles, comme dans les expériences sur les films de Langmuir [8]. Une décomposition spinodale est réalisée sur un réseau 240×240. Mais à la différence de toutes les simulations présentées jusqu'ici, 300 particules sont détruites à chaque pas de temps. Dans l'expérience des films de Langmuir, cela correspond à la dissolution des molécules amphiphiles dans la solution en volume. Les structures qui en résultent apparaissent dans la figure 27. L'état atteint pour $t = 440$ est instable et évolue vers une structure cellulaire similaire à celle obtenue dans les expériences. Cette simulation préliminaire illustre la possibilité de simuler des films liquides avec notre modèle

2.5.2 Evaporation en milieu poreux.

La facilité avec laquelle les conditions aux limites sur des parois solides peuvent être définies prédestine les gaz sur réseau à simuler des écoulements dans des géométries compliquées. Un autre intérêt de la méthode est de faire le lien entre le microscopique et le macroscopique. Les écoulements en milieu poreux font de fait intervenir plusieurs échelles : celle du pore et une échelle macroscopique dite de Darcy. Une simulation en milieu poreux a déjà été présentée à propos du modèle ILG de fluides non-miscibles.

Le modèle liquide-gaz est utilisé pour étudier l'évaporation en milieu poreux. Un certain nombre de tests sur l'écoulement dans un capillaire ont été effectués. Ils sont réunis dans la référence [46]. En particulier a été étudié l'accrochage du ménisque à l'entrée et à la sortie du capillaire. D'autre part, un écoulement important par les films de mouillage a été mis en évidence. Nous ne présenterons ici qu'un exemple de simulation d'évaporation réalisé sur un réseau 240×240 (figure 28). Un milieu poreux idéalisé est formé par 12 grains solides carrés de taille variable, placés régulièrement. Les largeurs de capillaires qui en résultent varient entre 16 et 32 unités réseau. Les conditions aux limites sont périodiques à droite et à gauche. La boite de simulation est limitée en haut et en bas par des parois solides. Au départ tout le milieu est rempli par du liquide. Le processus d'évaporation est provoqué en supprimant toutes les particules qui atteignent la paroi supérieure. Ceci revient à fixer la pression du gaz à zéro en haut de la boite. Un champ de

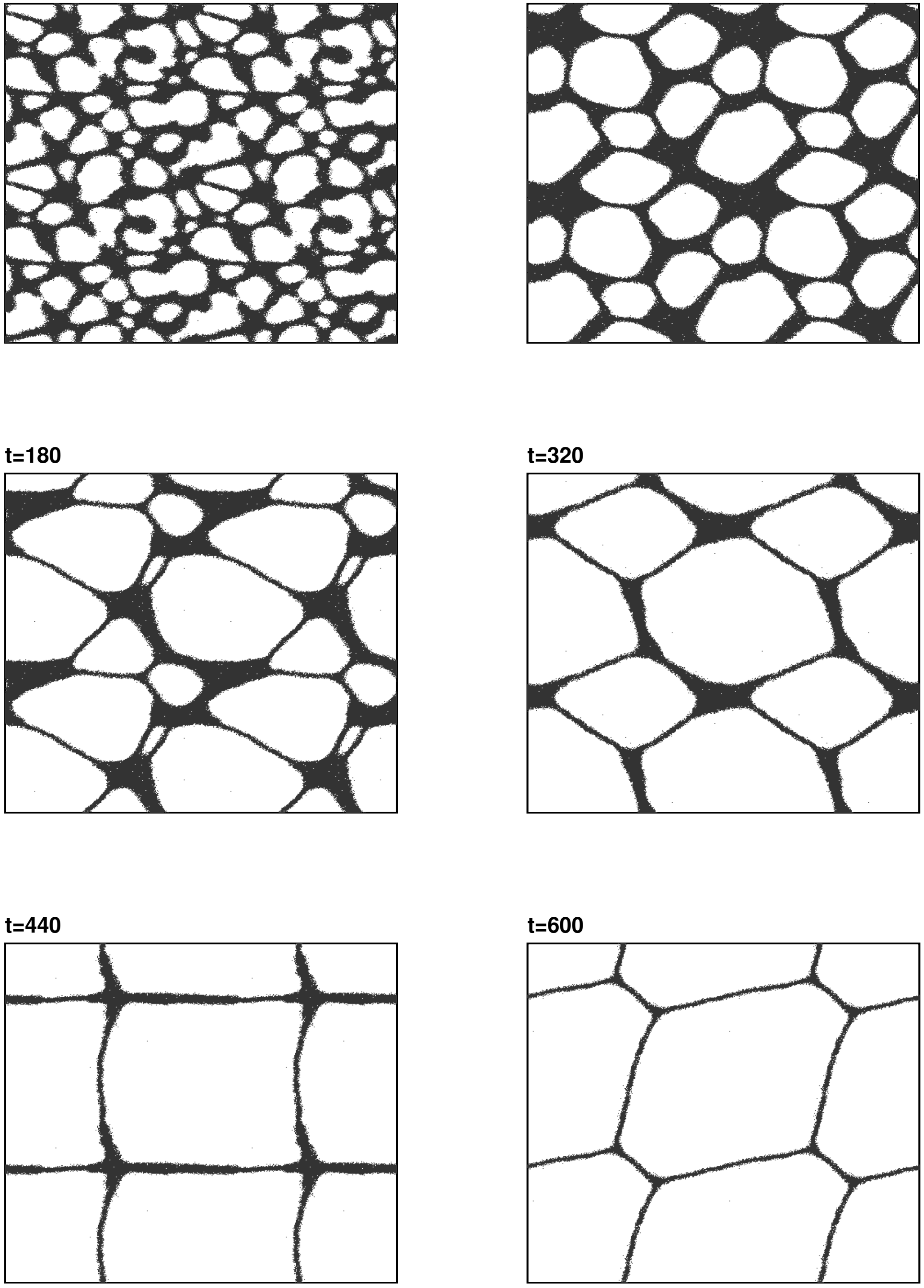


Figure 27: *Décomposition spinodale au cours de laquelle sont éliminées des particules. Le réseau est initialisé avec une densité uniforme de $d = 0.3$. On a pris $r = 5$. Les conditions aux limites sont périodiques. La même image a été représentée 4 fois pour faciliter la visualisation.*

gravité de 10^{-3} est imposé. C'est -à-dire qu'à chaque pas de temps, on tire au hasard des particules auxquelles on communique si possible une impulsion négative. La quantité d'impulsion négative ajoutée à chaque pas de temps vaut en moyenne 10^{-3} unités par particule.

Un paramètre important pour ce type de phénomènes est le nombre capillaire $C_a = \eta_G U/\sigma$. η_G est la viscosité du gaz et U une vitesse caractéristique de l'écoulement. Pour la simulation présente, le nombre capillaire est estimé à $C_a \simeq 10^{-2}$.

Le front de séchage est irrégulier, et on a vérifié que cela est d'autant plus vrai que la taille du domaine simulé est grande par rapport à l'échelle des pores. On s'attend cependant à ce que le front redevienne plus plat à des échelles supérieures, comme cela est prédit par la théorie. A cause d'un phénomène de recondensation, certains capillaires situés dans la phase gazeuse restent remplis de liquide. Le phénomène d'évaporation-condensation se produit aussi au niveau du front de séchage où l'on observe du liquide venant remplir un capillaire précédemment séché. Le liquide progresse brutalement dans les pores les plus étroits. Ce comportement est similaire à celui observé par Shaw [56] dans des expériences.

Au cours du séchage, la vitesse d'avancée du front diminue. Cela peut être expliqué par la diminution du gradient de pression entre le haut de la boite et le front d'évaporation.

2.5.3 Infiltration d'un liquide dans un milieu poreux.

Un autre domaine d'application du modèle est celui de l'étude de l'infiltration dans un milieu poreux. La quantité d'eau qui pénètre dans la roche en fonction du temps est donnée par ce qu'on appelle la loi d'infiltration. Beaucoup de lois empiriques ou analytiques ont été proposées. Néanmoins, on ne dispose pas de méthode qui permette d'étudier les mécanismes à l'échelle microscopique. Aussi est-ce dans cette optique que Liliana di Pietro a commencé une étude de l'infiltration avec le modèle liquide-gaz [28]. Ses mesures sont en bon accord avec la loi d'infiltration de Philips

$$Q = At^{1/2} + Bt \tag{48}$$

Le premier terme provient des effets capillaires qui dominent la dynamique aux temps courts. Puis la vitesse de progression dans le milieu tend vers une constante, sous l'effet du gradient de pression. La comparaison a été effectuée en ajustant uniquement le coefficient A. Un exemple d'infiltration est donné sur la figure 29.

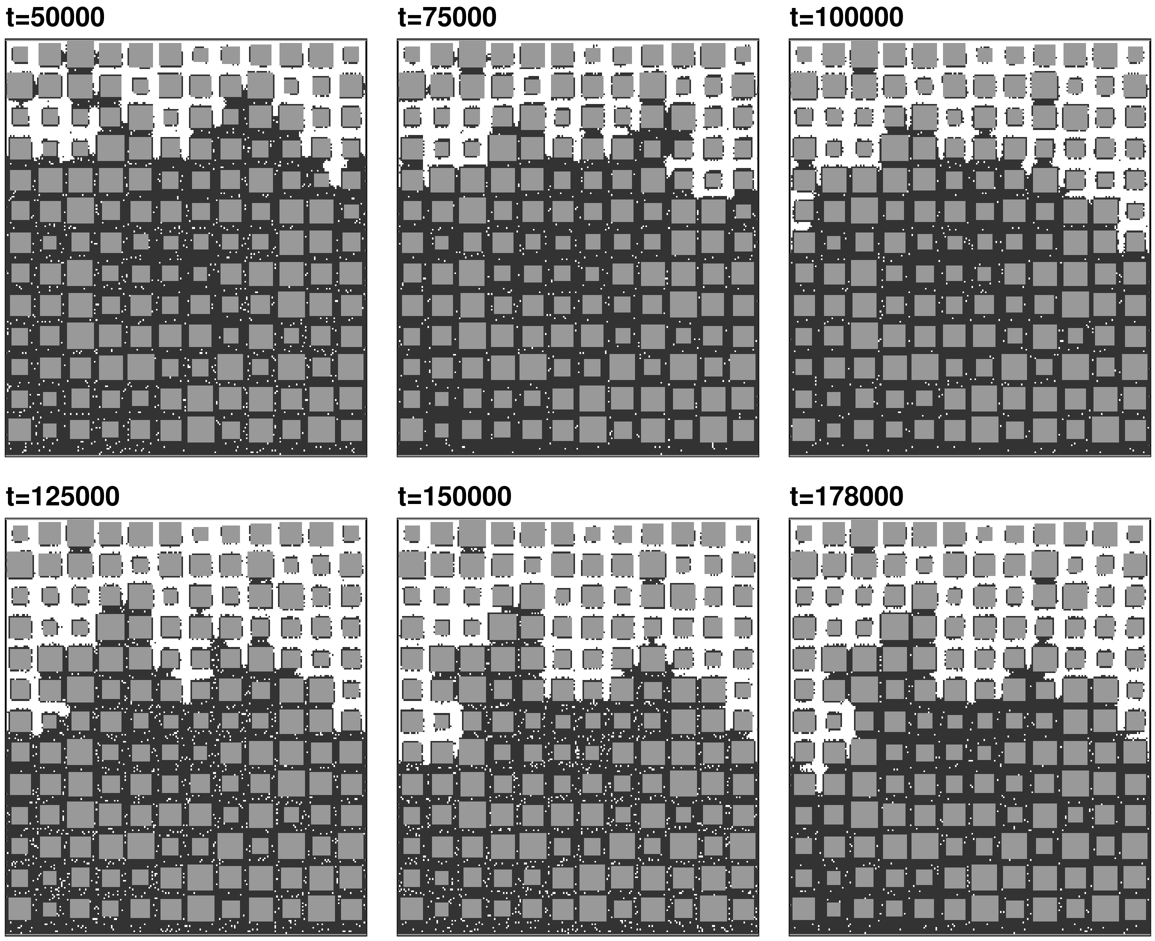


Figure 28: *Evaporation sur un réseau 480 × 480.*

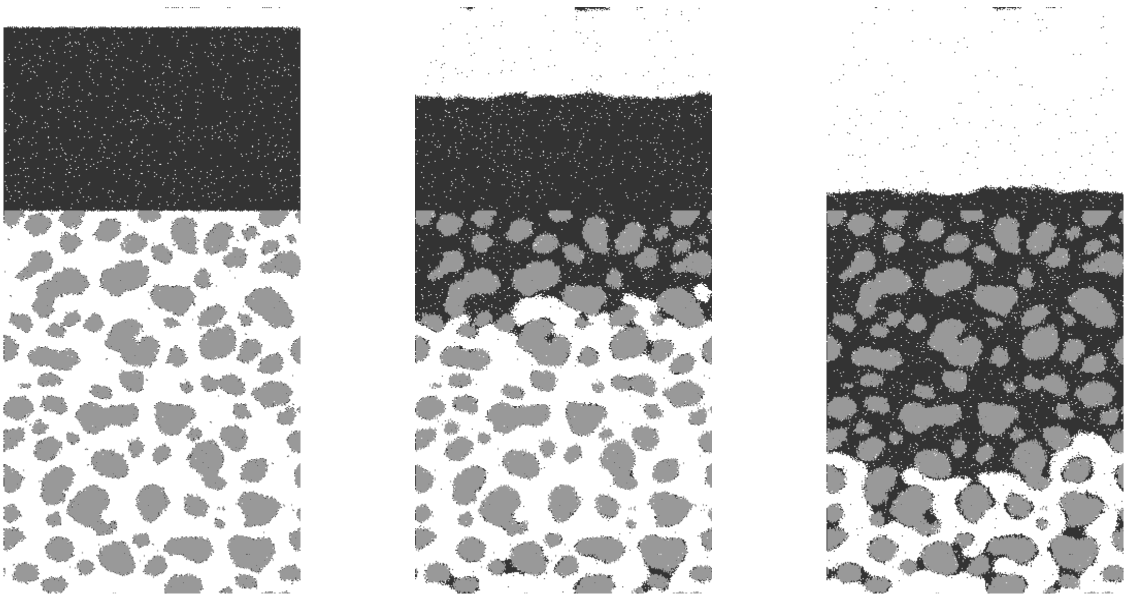


Figure 29: *Infiltration d'un liquide dans un milieu poreux sous l'effet de la gravité. De la référence [28].*

Chapitre 3

Propriétés du modèle liquide-gaz.

3.1 Calcul des équations hydrodynamiques pour le modèle minimal.

Nous allons calculer les équations hydrodynamiques du mouvement dans la limite des faibles nombres de Mach et gradients. Cette approximation exclue la région de l'interface. Les équations seront valables dans les zones homogènes.

On suppose de plus que l'on ne s'écarte jamais beaucoup de l'équilibre local.

Une hypothèse fondamentale du calcul est celle du chaos moléculaire, encore appelée hypothèse de Boltzmann. Elle postule que les corrélation entre les particules juste avant une étape de collision ou d'interaction sont négligeables. Pour l'essentiel, elle est justifiée par la vérification a posteriori des prédictions qu'elle permet.

La méthode générale est la même que celle utilisée pour le gaz parfait au paragraphe 1.4. Puisque l'opérateur d'interaction conserve le nombre de particules en chaque site et l'impulsion de chaque paire de sites en interaction, le calcul doit mener à des équations de type Euler et Navier–Stokes.

Dans tout le calcul qui suit, on se place dans le cas $b = b_m + 1$. Les ordres de grandeurs choisis sont les mêmes que pour le modèle FHP (v. page 19).

L'équation d'évolution microscopique 46 donne par moyenne d'ensemble

$$N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = N_i(\mathbf{x}, t) + \Delta_i[\mathbf{N}] + \Gamma_i[\mathbf{N}'] - \Gamma_{-i}[\mathbf{N}'] \tag{49}$$

où Δ est l'opérateur de collision et Γ_i une fonction non-locale de la distribution $\mathbf{N}'$

après collision qui correspond à l'opérateur microdynamique γ_i (équation 44).

$$\Gamma_i[\mathbf{N}'] = \mu \left[1 - N'_i(\mathbf{x})\right] N'_{-i}(\mathbf{x}) \left[1 - N'_{-i}(\mathbf{x} + r\mathbf{c}_i)\right] N'_i(\mathbf{x} + r\mathbf{c}_i), \tag{50}$$

$$\mathbf{N}' = \mathbf{N} + \Delta[\mathbf{N}]. \tag{51}$$

μ représente une fréquence d'interaction ($0 \leq \mu \leq 1$). Cela revient à effectuer les interactions avec une probabilité μ.

La distribution après l'étape de collision doit être déterminée. Elle est définie par

$$N'_i = N_i + \Omega_{ij} N_j \tag{52}$$

Les collisions laissent invariante la distribution d'équilibre de Fermi-Dirac :

$$\Omega_{ij} N_j^{eq} = 0 \tag{53}$$

Après collision, le développement autour des distributions d'équilibre est noté

$$N'_i = N_i^{eq} + N_i'^{(1)} + N_i'^{(2)} + \cdots \tag{54}$$

Alors l'équation (52) devient à l'ordre le plus bas

$$N_i'^{(1)} = \left(\delta_{ij} + \Omega_{ij}\right) N_j^{(1)} \tag{55}$$

En reportant dans cette équation l'expression (24) de $N_j^{(1)}$ et en utilisant les relations $\sum_{i=1}^{b_m} Q_{i\alpha\beta} = 0$ et $\sum_{i=1}^{b_m} A_{ij} = -\kappa(b - b_m)$ (car le vecteur de masse $(N_c, 1, \ldots, 1)$ est vecteur propre de Ω associé à la valeur propre zéro), on obtient finalement

$$\left\{ \begin{array}{lcl} N_i'^{(1)} & = & \left[(1+\lambda)\Psi Q_{i\alpha\beta} + \kappa N_c \left(1 - \frac{1}{N_c \kappa} + \frac{b_m}{N_c^2}\right) \chi \delta_{\alpha\beta}\right] \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\beta} \\ N_k'^{(1)} & = & -\kappa b_m \left(1 - \frac{1}{N_c \kappa} + \frac{b_m}{N_c^2}\right) \chi \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\beta} \end{array} \right. \tag{56}$$

Au premier ordre, l'équation d'évolution s'écrit

$$N_i^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t+1) - N_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \Omega_{ij} N_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \Gamma_i(\mathbf{N}^{eq}) - \Gamma_{-i}(\mathbf{N}^{eq}). \tag{57}$$

Pour simplifier, on se limite au cas $b = b_m + 1$.

Les différents termes de l'équation doivent être développés en puissances du gradient et de la vitesse (développement de Chapman-Enskog). Si on développe naturellement le terme d'interaction $\hat{\Gamma}_i = \Gamma_i - \Gamma_{-i}$, il sera ensuite difficile de trouver comment mettre le résultat sous la forme d'un gradient. Aussi a-t-on eu recours à une astuce de calcul.

Remarquons tout d'abord que la valeur de $\hat{\mathbf{\Gamma}}$ pour des distributions homogènes en espace est obtenue en fixant r à zéro. On a

$$\hat{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{M})_{r=0} = 0 \tag{58}$$

pour toute distribution $\mathbf{M}$. Il est équivalent de développer $\hat{\mathbf{\Gamma}}$ par rapport à $\mathbf{x}$ ou d'utiliser un développement de Taylor-Maclaurin par rapport à r :

$$\hat{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{x}, r) = \hat{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{x}, 0) + r\frac{\partial \hat{\mathbf{\Gamma}}}{\partial r} + \frac{r^2}{2}\frac{\partial^2 \hat{\mathbf{\Gamma}}}{\partial r^2} + \cdots + \frac{r^n}{n!}\frac{\partial^n \hat{\mathbf{\Gamma}}}{\partial r^n} + \cdots \tag{59}$$

avec $(r^n/n!)\,(\partial^n \hat{\mathbf{\Gamma}}/\partial r^n) = \mathcal{O}((\partial_\alpha)^n)$.

Au premier ordre, (58) et (59) conduisent à

$$\hat{\mathbf{\Gamma}}^{(1)}(\mathbf{N}') = r\frac{\partial}{\partial r}\hat{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{N}^{eq}) \tag{60}$$

La symétrie des termes Γ_i et Γ_{-i} permet d'écrire

$$\left.\frac{\partial \hat{\mathbf{\Gamma}}_i}{\partial r}\right|_{r=0} = c_{i\alpha}\left.\frac{\partial \Gamma_i}{\partial x_\alpha}\right|_{r=0} \tag{61}$$

pour toute distribution $\mathbf{M}$. C'est cette propriété qui permet de faire apparaitre le résultat directement sous forme d'un gradient. L'équation au premier ordre est alors

$$N_i^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t+1) - N_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \Omega_{ij} N_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) + r c_{i\alpha}\partial_\alpha \Gamma_i(\mathbf{N}^{eq}). \tag{62}$$

La projection de cette équation sur les vecteurs propres de masse $(1, \cdots, 1)$ et d'impulsion $c_{i\alpha}$ donne deux conditions de solubilité exprimant la conservation de la masse et de l'impulsion:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha(\rho u_\alpha) = 0 \tag{63}$$
$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\alpha \Pi_{\alpha\beta} = 0 \tag{64}$$

où le tenseur de flux d'impulsion vaut

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_i \left[N_i^{eq} - r\Gamma_i(\mathbf{N}^{eq})\right] c_{i\alpha} c_{i\beta}. \tag{65}$$

L'équation d'Euler provient de (22), (64) et (65) :

$$\partial_t \rho u_\alpha + \partial_\beta[g_{\mu r}(\rho)\rho u_\alpha u_\beta] = -\partial_\alpha[p_{\mu r}(\rho, u^2)] \tag{66}$$

Les paramètres peuvent être exprimés en fonction de la force d'interaction $z = \mu r$

$$g_z(\rho) = \frac{b}{b_m}\frac{D}{D+2}\frac{1-2d}{1-d}\left[1+\frac{4zd^2(1-d)^2}{1-2d}\right] \tag{67}$$

$$c_{sz}^2(\rho) = \frac{b_m}{b}\frac{1}{D}\left[1-2zd(1-d)(1-2d)\right] \tag{68}$$

$$p_z(\rho,u^2) = c_{s0}^2\rho - \frac{b_m z}{D}d^2(1-d)^2 + \frac{\rho}{2}\left[g_z(\rho) - g_0(\rho)c_{sz}^2(D+2)\right]u^2 \tag{69}$$

Pour $r = 0$ on retrouve les valeurs correspondant au gaz parfait. L'expression de la pression sera discutée un peu plus loin (paragraphe 3.2.1).

Il est maintenant possible d'inverser l'équation (62) - c'est-à-dire de calculer les facteurs Ψ et χ introduits dans l'expression de $N_i^{(1)}$. On trouve $\lambda\psi = D/b_m$ et $\chi\kappa b_m = 1/(b_m+1)^2$ *comme pour le modèle sans interactions.*

L'équation au second ordre est

$$\begin{aligned} N_i^{eq}(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i,t+1) &+ N_i^{(1)}(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i,t+1) - N_i^{eq}(\mathbf{x},t) - N_i^{(1)}(\mathbf{x},t) \\ &= \Lambda_{ij}\left[N_j^{(1)}(\mathbf{x},t) + N_j^{(2)}(\mathbf{x},t)\right] \\ &\quad + r c_{i\alpha}\partial_\alpha\Gamma_i(\mathbf{N}^{eq}) + \hat{\mathbf{\Gamma}}^{(2)}(\mathbf{N}') \end{aligned} \tag{70}$$

où le terme d'interaction au second ordre est donné par

$$\hat{\mathbf{\Gamma}}^{(2)}(\mathbf{N}') = r\frac{\partial}{\partial r}\frac{\delta\hat{\mathbf{\Gamma}}}{\delta\mathbf{N}}(\mathbf{N}^{eq})\mathbf{N}'^{(1)} + \frac{r^2}{2}\frac{\partial^2\hat{\mathbf{\Gamma}}}{\partial r^2}(\mathbf{N}^{eq}). \tag{71}$$

De (50) et (22) on tire

$$\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{\delta\hat{\mathbf{\Gamma}}_i}{\delta\mathbf{N}}(\mathbf{N}^{eq})\mathbf{N}'^{(1)}\right] = d(1-d)(1-2d)c_{i\alpha}\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left[\mathbf{N}_i'^{(1)} + \mathbf{N}_{-i}'^{(1)}\right] \tag{72}$$

$$\frac{\partial^2\hat{\mathbf{\Gamma}}_i}{\partial r^2}(\mathbf{N}^{eq}) = 2D\frac{b}{b_m}d^2(1-d)c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}\frac{\partial^2 u_\gamma}{\partial x_\alpha\partial x_\beta}. \tag{73}$$

La condition de solubilité au second ordre associée à la conservation de l'impulsion conduit, après un calcul sans difficultés mais un peu long, à

$$\partial_t\rho u_\alpha + \partial_\beta[g_{\mu r}\rho u_\alpha u_\beta] = -\partial_\alpha p_{\mu r} + \partial_\beta\left(\nu\partial_\beta(\rho u_\alpha)\right) + \partial_\alpha\left[\left(\frac{D-2}{D}\nu+\zeta\right)\partial_\beta(\rho u_\beta)\right] \tag{74}$$

où

$$\nu = \nu_0 + \frac{2\mu r}{D+2}d(1-d)(1-2d)\left[1+\frac{b_m}{D}\psi\right] + \frac{\mu r^2}{D+2}d(1-d) \tag{75}$$

$$
\begin{aligned}
\zeta &= \zeta_0 - \frac{1}{2}(c_{s\,\mu r}^2 - c_{s0}^2) - \frac{\mu r}{D(D+2)} d(1-d)(1-2d) \\
&\times \left[\frac{2b_m + 2b(D-2) - Db_m}{b} + \chi b_m (D+2) + \frac{D-2}{D} b_m \psi \right] \\
&+ \frac{\mu r^2}{D} d(1-d) \qquad (76)
\end{aligned}
$$

Dans ces expressions, ν_0 and ζ_0 sont les viscosités du gaz parfait données par les équations (34) et (35). Soulignons que les contributions dûes aux interactions s'avèrent indépendantes de l'opérateur de collision. Comme ces corrections dépendent de r de façon quadratique, on s'attend à ce que les effets visqueux augmentent rapidement avec la distance d'interaction.

Les résultats ci-dessus sont valides quand il y a un état de vitesse nulle. Cependant pour le modèle FCHC, on n'a que des particules en mouvement. Les expressions correspondantes sont obtenues pour $b_m = b$ et $\chi = 0$. Cela laisse inchangé l'équation d'état, et donc la valeur critique de la distance d'interaction r.

Gerits, Ernst et Frenkel [31] ont eux aussi calculées les équations hydrodynamiques pour le modèle minimal, par un formalisme utilisant les modes propres de l'opérateur d'évolution. Les résultats qu'ils obtiennent sont concordants avec les nôtres.

3.2 Propriétés des diverses variantes du modèle liquide-gaz.

3.2.1 Equation d'état.

a) Expression analytique de la pression. **Dans le cas du modèle minimal**, où un seul type d'interaction est envisagé, la pression a déjà été calculée en même temps que les équations hydrodynamiques (équation 69). On avait négligé les corrélations entre états et entre sites à distance r, de façon à pouvoir factoriser les distributions. L'expression finale prise à $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ est une équation d'état de type Van der Waals. Pour $r > r_c = \sqrt{27} = 5.2$, la pente $\frac{dp}{d\rho}$ est négative sur un certain intervalle de densité. C'est la région de décomposition spinodale ; les fluctuations de la densité sont amplifiées et conduisent à une séparation de phase. L'équation d'état pour $r = 7$ et en dimension 3 a été tracée sur la figure 30. On l'obtient à

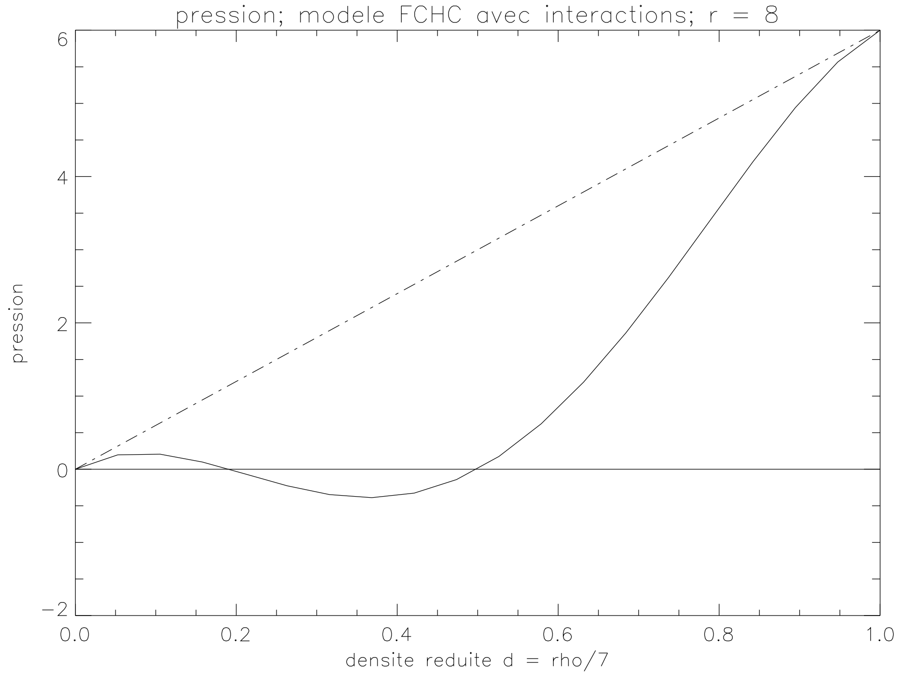


Figure 30: *Equation d'état du modèle minimal en trois dimensions (D=4!) et pour $r = 8$, calculée par un développement de Chapman-Enskog.*

partir de l'équation d'état (69) pour $D = 4$ et $b = b_m = 24$.

Pour un fluide réel, p_z est la pression statique. Dans le cas du gaz sur réseau apparait une dépendance anormale en u^2 qui traduit sa non-invariance galiléenne. En effet, dans le référentiel $\mathcal{R}'$ lié à son mouvement moyen, un gaz sur réseau aura bien sûr une vitesse moyenne nulle. Mais par contre, excepté pour un ensemble discret de vitesses $\mathbf{u}$, le réseau y sera en mouvement. La pression que l'on mesure alors dans $\mathcal{R}'$ n'a aucune raison d'être égale à la pression statique, à la différence de ce qui se passe pour un fluide réel.

Dans le cas des modèles maximal et restreint, le nombre d'interactions de types différents à prendre en compte est trop important pour que les équations hydrodynamiques complètes puissent être calculées. Cependant, une expression analytique de l'équation d'état a pu être trouvée, en repartant du tenseur de transfert d'impulsion qui apparait dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (équation 16).

Pour un gaz sur réseau, la contribution à Π dûe à la propagation des particules,

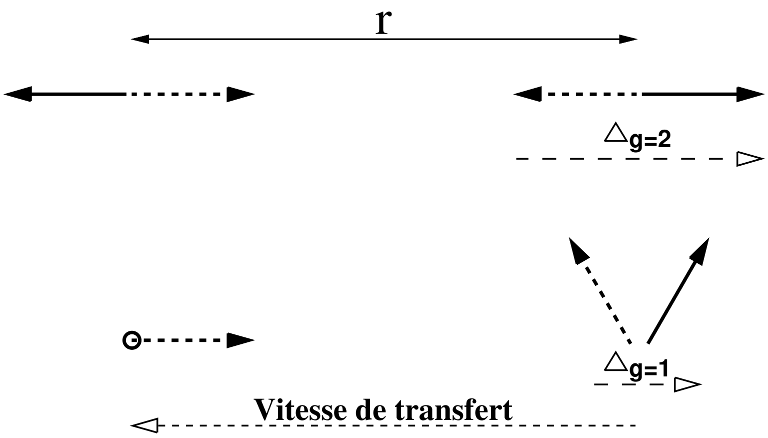


Figure 31: *Impulsion transférée lors d'une interaction.*

toutes supposées de masse unité, est

$$\Pi^{(prop)}_{\alpha\beta}(\mathbf{x},t) = \sum_i N_i(\mathbf{x},t)\, c_{i\alpha} c_{i\beta} \tag{77}$$

Les personnes qui ne seraient pas familières avec ce type de définition trouveront des rappels de théorie cinétique en Appendice E.
Si le gaz est au repos ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$), on a

$$\Pi^{(prop)}_{\alpha\beta} = \frac{b_m c^2}{D} \rho \delta_{\alpha\beta} \tag{78}$$

On en déduit la pression du gaz parfait

$$p^{GP} = \frac{b_m c^2}{D} \rho \tag{79}$$

L'ajout des interactions modifie la pression. Considérons une interaction parallèle à $\mathbf{c}_k$, au cours de laquelle une impulsion $\Delta \mathbf{g}$ est échangée entre les sites (figure 31). La vitesse du transfert de quantité de mouvement est $-r\mathbf{c}_k$. Sa contribution au tenseur flux d'impulsion vaut $-r\Delta g c_{k\alpha} c_{k\beta}$. La correction à la pression dûe aux interactions attractives est donc négative et proportionnelle à r. Si l'on connait la distribution de densité, on peut calculer la probabilité d'avoir chacune des interactions possibles et en déduire la pression.

On suppose qu'avant l'interaction les corrélations sont négligeables. La probabilité d'une interaction I_j faisant intervenir n particules vaudrait $d^n(1-d)^n$ si elle était effectuée seule. Du fait qu'elle peut être en compétition avec d'autres interactions, il faut connaitre en détail la procédure d'interaction pour en déterminer la probabilité P_j. Notons $\mathcal{I}_j$ l'impulsion échangée entre les sites lors de l'interaction I_j. Cette interaction n'est effectuée que dans une seule direction $\mathbf{c}_k$ à chaque pas de temps. La contribution moyenne au tenseur $\Pi_{\alpha\beta}$ vaut

$$\sum_{k=1}^{b_m} -\frac{1}{b_m} r \mathbf{c}_{k\alpha} \mathbf{c}_{k\beta} \frac{\mathcal{I}_j}{2} P_j \tag{80}$$

La somme sur j - c'est-à-dire sur les divers types d'interaction possibles - nous donne le flux d'impulsion correspondant à la première série d'interaction. On rappelle que, pour augmenter l'homogénéité, les interactions sont effectuées deux fois de suite dans la même direction (figure 18). Or avant la deuxième étape d'interaction, on ne peut plus supposer que les distributions sont factorisées. Il faut recalculer la probabilité P'_j pour qu'ait lieu chaque interaction I_j en tenant compte des corrélations introduites par la première série d'interactions. Celles-ci augmentent l'efficacité de la deuxième série : on a $P'_j > P_j$.

La contribution des interactions à la pression vaut finalement :

$$\begin{aligned} p^{(inter)} &= -\frac{r}{2} \sum_{j=1}^{J} \mathcal{I}_j (P_j + P'_j) \frac{1}{b_m} \sum_{k=1}^{b_m} \frac{1}{D} \sum_{\alpha=1}^{D} C_{k\alpha}^2 && (81) \\ &= -\frac{r}{2D} \sum_{j=1}^{J} \mathcal{I}_j (P_j + P'_j). && (82) \end{aligned}$$

Le calcul de ce terme est trop long pour être réalisé entièrement manuellement, excepté pour le modèle restreint. Le résultat a été obtenu en faisant du dénombrement sur ordinateur. Pour simplifier, on ne donne ci-dessous l'expression de la pression que dans le cas d'une seule série d'interaction. Avec deux séries d'interactions, le polynome trouvé serait de degré double.

- pour le modèle maximal

$$\begin{aligned} p &= 3d - r[17(\breve{d}^2 + \breve{d}^{12}) + 136(\breve{d}^3 + \breve{d}^{11}) + 571(\breve{d}^4 + \breve{d}^{10}) + 1506(\breve{d}^5 + \breve{d}^9) \\ &\quad +2662(\breve{d}^6 + \breve{d}^8) + 3216\breve{d}^7] \qquad \text{avec} \quad \breve{d}^n \equiv d^n(1-d)^{14-n} \end{aligned} \tag{83}$$

- pour le modèle restreint

$$p = 3d - r\left[3d^2(1-d)^2 - 2d^3(1-d)^3 + d^4(1-d)^4\right] \tag{84}$$

- pour la variante C (définie dans la table 2)

$$\begin{aligned} p &= 3d - r[1506(\breve{d}^5 + \breve{d}^9) + 2662(\breve{d}^6 + \breve{d}^8) + 3216\breve{d}^7 \\ &\quad +571\breve{d}^{10} + 136\breve{d}^{11} + 17\breve{d}^{12}]. \end{aligned} \tag{85}$$

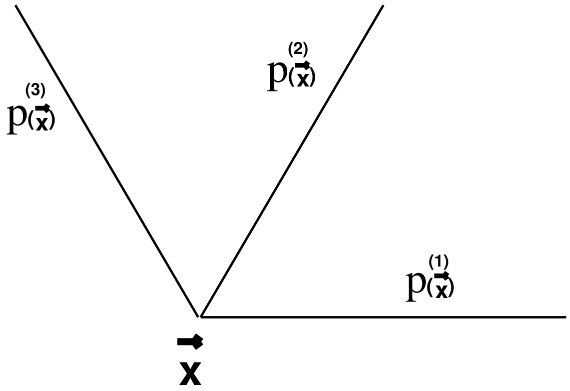


Figure 32: *Notations utilisées lors des mesures de transferts d'impulsion.*

b) Mesures de pression. Il s'est avéré plus pratique de mesurer les échanges d'impulsion par lien plutôt que par site. Au cours d'une simulation, les échanges d'impulsion le long de chaque lien du réseau $(\mathbf{x}, \mathbf{x}+\mathbf{c}_k)$ sont comptabilisés et notés $p^{(i)}(\mathbf{x}, t)$, $(i = 1$ à $3)$. Chaque particule qui se propage le long d'un lien contribue pour $+1$. Si une impulsion $\mathcal{I}$ est échangée au cours d'une interaction, tous les liens qui séparent les deux sites de la paire se voient affecter la contribution $-\mathcal{I}$.

Le tenseur flux d'impulsion est lié à ces échanges par :

$$\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3} \left[p^{(i)}(\mathbf{x}, t) + p^{(i)}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k, t) \right] c_{i\alpha} c_{i\beta}. \tag{86}$$

Dans le cas d'une phase homogène on a

$$\Pi = \begin{pmatrix} p^{(1)} + \frac{1}{4}(p^{(2)} + p^{(3)}) & 0 \\ 0 & \frac{3}{4}(p^{(2)} + p^{(3)}) \end{pmatrix}$$

L'isotropie implique que $p = \Pi_{xx} = \Pi_{yy} = \frac{1}{2}(p^{(1)} + p^{(2)} + p^{(3)})$. La pression a été ainsi mesurée sur des réseaux $240 \times 240 \times \sqrt{3}/2$ initialisés avec une densité uniforme ρ.

Les mesures ont étés comparées aux expressions analytiques. La figure 33 illustre le cas du modèle restreint. Les résultats obtenus pour d'autres variantes figurent dans les références [4, 6]. Récemment, Valérie Pot a mesuré la pression pour le modèle à trois dimensions. Elle trouve un bon accord avec la prédiction théorique. Les corrélations dûes à la géométrie du réseau FCHC et signalées page 13 n'induisent donc pas de pathologie à ce niveau. Ceci n'était pas évident a priori dans

modèle	r	λ/r	ν_L	ν_G
A	3	16	1.25±0.1	-
A	5	16	3.08±0.1	-
A	7	16	5.15±0.1	-
A	9	16	9.8±0.05	-
A	3	32	1.30±0.2	1.192±0.1
B	3	16	1.17 ±0.04	-
C	3	16	1.69 ±0.2	0.67±0.04

Table 3: *Mesures de viscosité pour quelques variantes du modèle liquide-gaz.*

la mesure où on ignore si les interactions effectuées dans la quatrième dimension renforcent les corrélations.

3.2.2 Mesures de la viscosité.

• Des expériences numériques d'ondes de cisaillement ont permis de mesurer la viscosité pour diverses variantes du modèle. Le champ de vitesse initial est sinusoidal: $u_1(\mathbf{x}, t) = A_0 \sin(2\pi x_2/\lambda)$, $u_2 = 0$. On observe alors la décroissance de l'amplitude $A(t)$ de l'onde. D'après la théorie, celle-ci varie en $\exp(-k^2\nu t)$ et donne donc accès à la viscosité de cisaillement. Le détail des mesures figure dans la référence [6] (appendice I.3). Les résultats ont été résumés dans la table 3 On retrouve le comportement asymptotique en r^2 (v. figure 34) prévu par le calcul de viscosité effectué au paragraphe 3.1. Cette dépendance en r^2 peut aussi être trouvée par un raisonnement heuristique donné en appendice dans la référence [6].
• D'autre part, Liliana di Pietro [29, 28] a simulé des écoulements à l'intérieur de canaux pour la phase dense du modèle liquide-gaz. Elle obtient des profils de Poiseuille avec une bonne précision (figure 35), vérifiant sur ce cas particulier le comportement hydrodynamique du modèle. De plus, tant que la vitesse est inférieure à 0.08 unités réseau, la valeur de la viscosité trouvée est égale à celle obtenue par ondes de cisaillement. Au-delà, les points expérimentaux obéissent toujours à une loi parabolique, mais la viscosité diverge : c'est une fonction croissante de la vitesse (fig. 36). Cette augmentation avait déjà été observée pour le gaz sur réseau simple. Cependant, elle est plus rapide pour le modèle liquide-gaz. Il serait

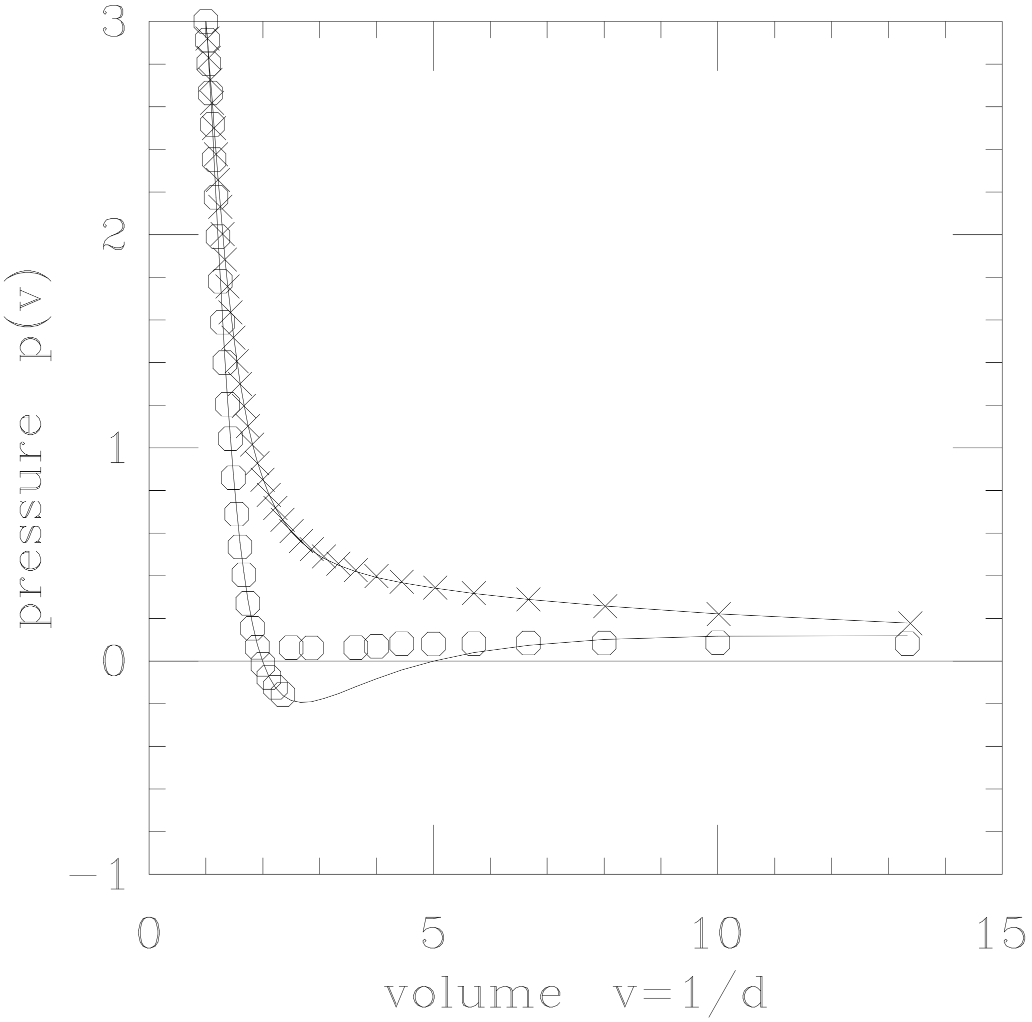


Figure 33: *Equation d'état pour le modèle restreint. La courbe théorique (ligne continue) est comparée à des mesures reportées sous forme d'octogones et de croix pour $r = 3$ et 7. On observe une transition de phase pour $r = 7$ mais pas pour $r = 3$.*

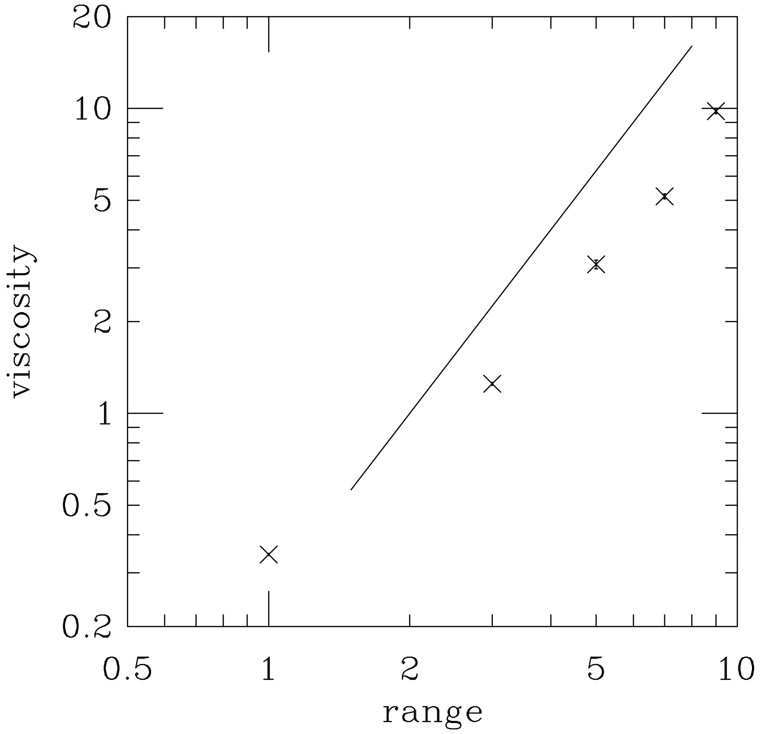


Figure 34: *Variation de la viscosité avec la portée de l'interaction* r*. La droite dessinée à titre indicatif correspond à une courbe en* r^2*.*

Figure 35: *Profil de Poiseuille pour un écoulement en canal du modèle liquide-gaz.*

souhaitable de trouver comment atténuer cet effet indésirable. Il faudrait aussi vérifier si la rupture de pente qui semble se produire pour $v = 0.07$ est confirmée par des mesures plus fines.

3.2.3 Tension de surface.

a) Mesures du tenseur de pression. Il est important pour les applications de connaitre la valeur de la tension de surface pour chaque variante du modèle liquide-gaz. Nous ne savons pas actuellement la prédire théoriquement, même dans le cas simple du modèle minimal. Aussi avons nous procédé à deux séries de mesures. L'une se base sur la vérification de la loi de Laplace. Les résultats figurent dans le paragraphe suivant.

Auparavant nous allons exposer une autre technique de mesure de la tension de surface basée sur la définition mécanique de la tension de surface (v. Appendice F) qui traduit l'anisotropie de la pression au niveau de l'interface:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} (p_n(z) - p_t(z))\, dz. \tag{87}$$

où p_n et p_t sont les pressions respectivement normale et tangentielle à l'interface supposée plane, et où z est la coordonnée dans la direction normale à l'interface.

Figure 36: *Mesures de viscosité déduites des profils de Poiseuille pour plusieurs vitesses d'écoulement.*

Pour fabriquer l'interface plane, on initialise la simulation en remplissant à moitié une boite, comme indiqué sur la figure 37. Des parois limitent la boite en haut et en bas. On y impose des conditions aux limites de rebond. A droite et à gauche, les conditions aux limites sont périodiques. La mesure se fait en l'absence de champ de gravité. Alors l'interface risque de ne pas être fixe, la bande de liquide étant libre de se déplacer dans la boite. Aussi la paroi inférieure attire-t-elle légèrement le fluide, afin que la phase dense y reste attachée. Ceci est réalisé en choisissant au hasard des particules dans les quatre lignes de sites au dessus de la paroi, et en leur communiquant une petite impulsion dirigée vers le bas.

L'équilibre est atteint rapidement. Nous avons vérifié qu'en choisissant des densités initiales proches des densités d'équilibre, le régime transitoire est négligeable devant la durée des mesures. Comme cela a été expliqué à propos des mesures de pression, tous les tranferts d'impulsion $p^{(1)}$, $p^{(2)}$, et $p^{(3)}$ le long des liens du réseau sont comptabilisés lors d'une simulation. A la différence des mesures précédentes, on s'attend à ce que les valeurs moyennes de ces transferts soient des fonctions de z.
On en déduit les pressions normales et tangentielles comme indiqué dans la référence [6] (appendice I.3). La figure 38 donne un exemple de profil de densité et de variation de la pression en fonction de z. La tension de surface s'en

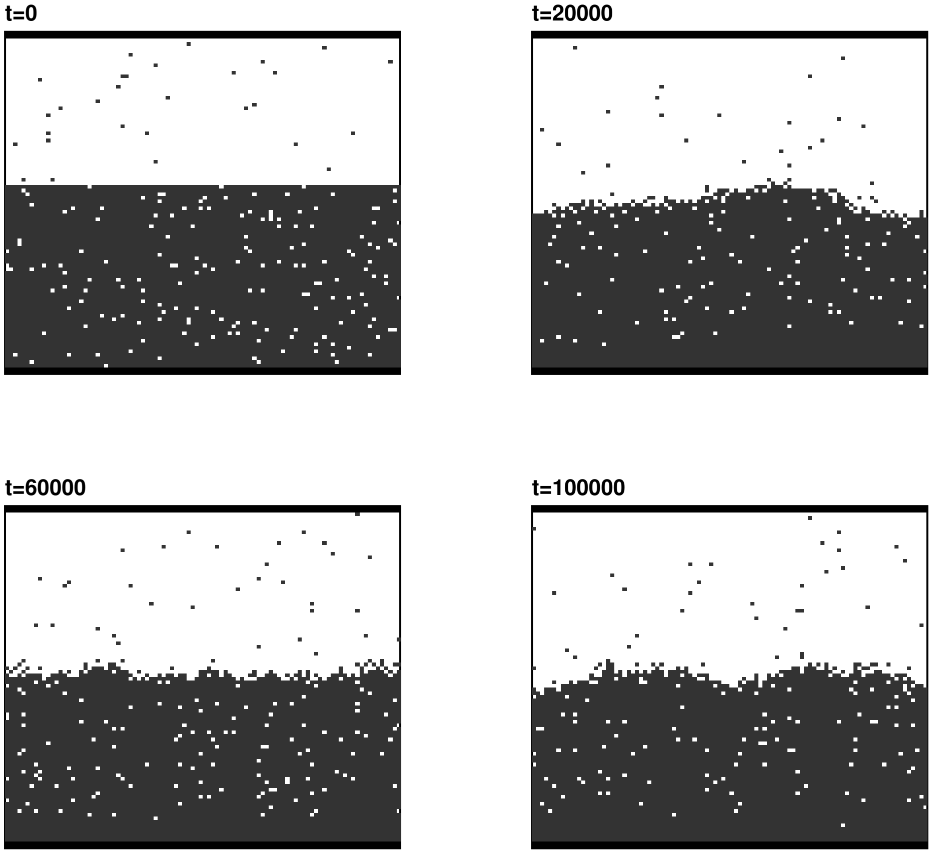


Figure 37: *Simulation au cours de laquelle est effectuée une mesure de la tension de surface basée sur sa définition mécanique. Les parois solides sont représentées en noir.*

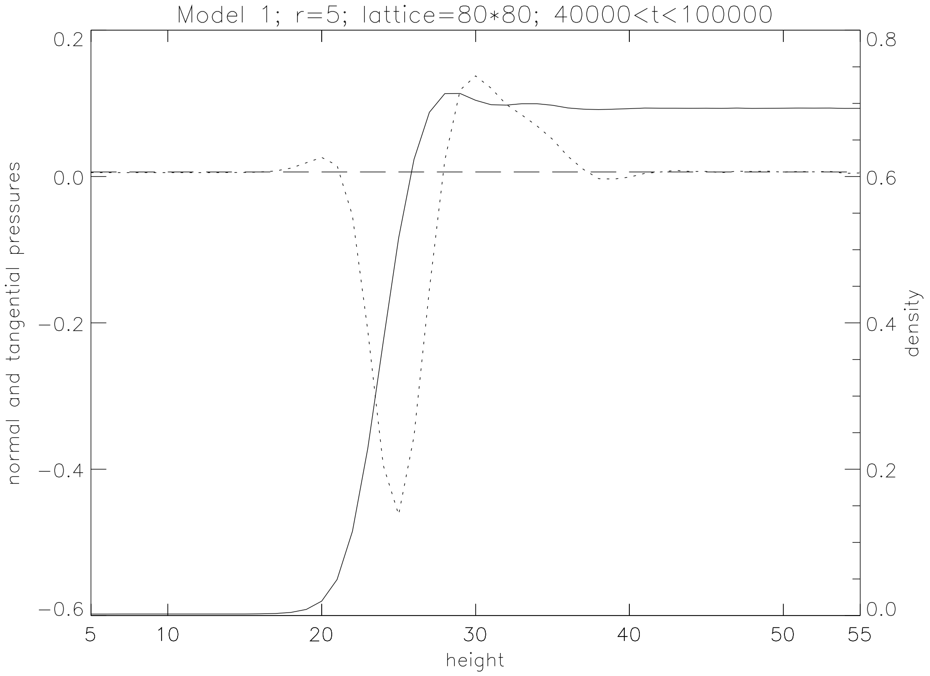


Figure 38: *Pression normale (courbe en tirets) et tangentielle (courbe en pointillés) en fonction de la hauteur z dans la boite. La courbe continue donne le profil de densité.*

déduit par intégration de $p_n - p_t$. Les valeurs de tension de surface pour diverses variantes du modèle maximal (définies dans la table 2) ont été réunies dans la table 4. Chaque valeur est une moyenne obtenue à partir de 5 simulations. Pour chaque simulation, les profils de pression ont été calculés sur 40.000 à 100.000 pas de temps. L'erreur correspond à 2 écart-types évalués sur les 5 valeurs mesurées. Il est également possible par légère modification des règles d'interaction de modifier la tension de surface en gardant la même équation d'état [6].

D'après les valeurs de la table 4, la tension de surface varie linéairement avec r (fig 39).

b) Conséquences de l'anisotropie de tension de surface. La tension de surface a été mesurée pour plusieurs inclinaisons de l'interface par rapport aux axes du réseau, mettant en évidence une anisotropie. L'objet du calcul qui suit est d'évaluer la déformation des bulles qui en résulte.

TENSION DE SURFACE			
Modèle	r	β	σ
A	3	30^o	0.20 ± 0.015
A	3	0^o	0.25 ± 0.03
A	5	30^o	1.00 ± 0.08
A	5	0^o	1.53 ± 0.03
A	7	30^o	1.92 ± 0.05
A	9	30^o	2.70 ± 0.10
B	3	30^o	0.32 ± 0.03
B$*$	3	30^o	0.42 ± 0.01
C	3	30^o	0.02 ± 0.03
C	3	0^o	0.035 ± 0.023

Table 4: *Valeurs de la tension de surface; β est l'angle que forme l'interface avec la direction $\mathbf{c}_1$. Pour le modèle B*, la tension de surface a été maximisée sans modifier les densités d'équilibre, comme cela est décrit dans la référence [6].*

On suppose que la bulle est immobile. Ceci est évidemment une approximation car en fait elle se déforme continuellement sous l'effet des fluctuations microscopiques. Suite à cette hypothèse, la pression est prise constante à l'intérieur de la bulle, ainsi qu'à l'extérieur. On considère que la loi de Laplace est vérifiée en tout point de l'interface.

La variation de la tension de surface est supposée sinusoidale :

$$\sigma(\theta) \simeq \sigma_0 + \sigma_1 \sin(6\theta)$$

en utilisant des coordonnées polaires dont l'origine est au centre de la bulle.
Elle engendre une déformation de l'interface que l'on écrit :

$$l(\theta) = l_0 + b \sin(6\theta). \tag{88}$$

On se place dans la limite des faibles déformations :

$$\begin{cases} \sigma_1 & \ll & \sigma_0 \\ l_1 & \ll & l_0 \end{cases} \tag{89}$$

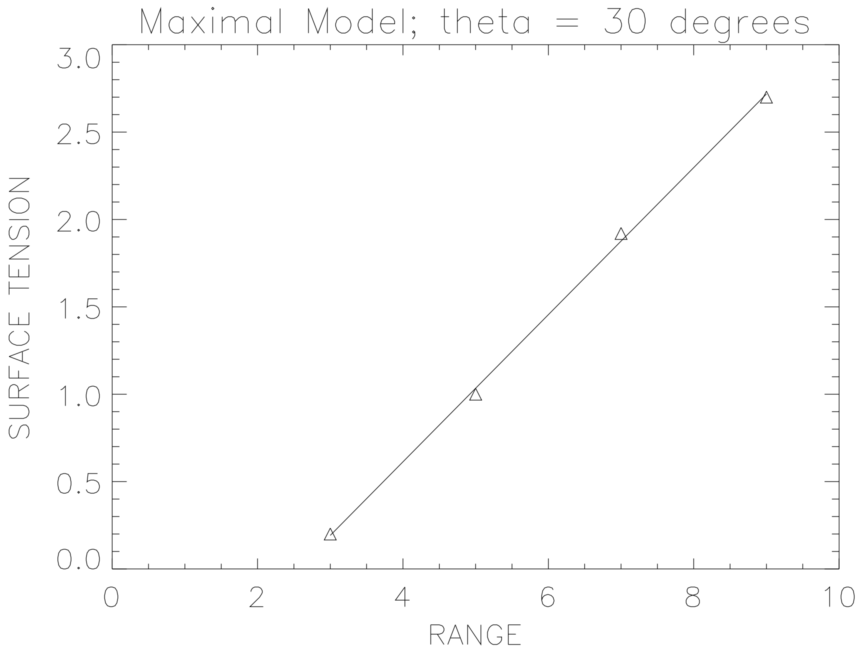


Figure 39: *Tension de surface en fonction de la portée de l'interaction pour le modèle maximal; l'angle beta entre l'interface et la direction* $\mathbf{c}_1$ *est* 30^o*. La droite résulte d'un ajustement aux moindres carrés.*

La loi de Laplace s'exprime par

$$R(\theta) = \frac{\sigma(\theta)}{\Delta p} \tag{90}$$

$R(\theta)$ est le rayon de courbure local de l'interface et Δp la différence de pression entre l'intérieur et l'extérieur de la bulle. On la prend égale à σ_0/l_0.

$$R(\theta) = l_0 \left(1 + \frac{\sigma_1}{\sigma_0} \sin(6\theta)\right) \tag{91}$$

On rappelle l'expression du rayon de courbure en coordonnées polaires

$$\frac{1}{R} = \frac{l^2 + 2l'^2 - ll''}{(l^2 + l'^2)^{3/2}}$$

où $l' = \frac{dl}{d\theta}$ et $l'' = \frac{d^2l}{d\theta^2}$. Cela peut encore s'écrire

$$(l^2 + l'^2)^{3/2} = R(\theta) \left[l^2 + 2l'^2 - ll''\right]. \tag{92}$$

Au premier ordre en ϵ défini par $\mathcal{O}(\sigma_1/\sigma_0) = \mathcal{O}(\epsilon) = \mathcal{O}(l_1/l_0)$, on obtient

$$\frac{l_1}{l_0} = -\frac{1}{35} \frac{\sigma_1}{\sigma_0}. \tag{93}$$

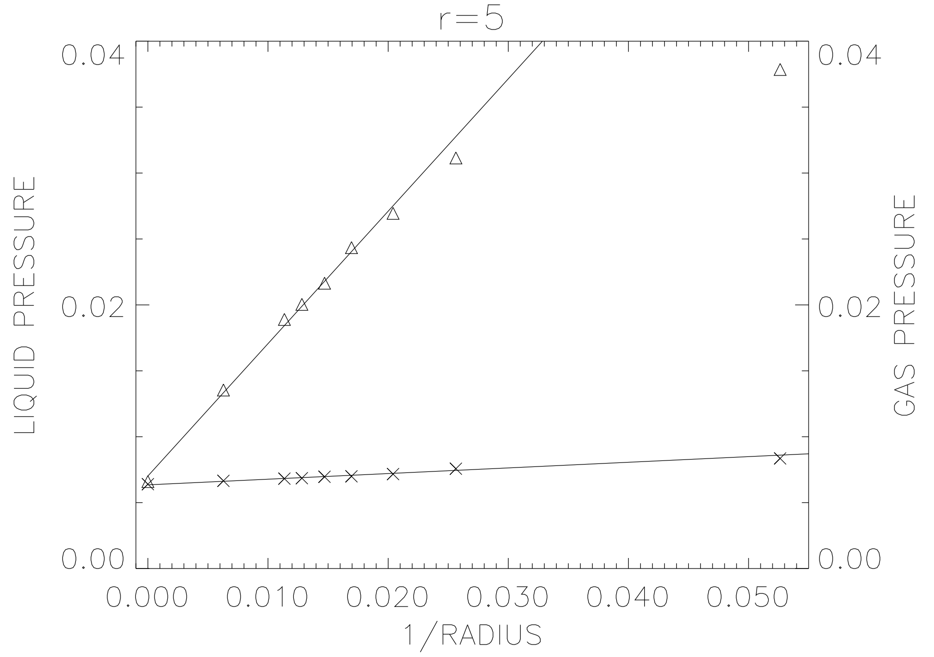


Figure 40: *Pressions au sein du gaz (valeurs les plus faibles) et du liquide en fonction de l'inverse de la courbure $1/R$, pour $r = 5$.*

Les anisotropies de tension de surface observées correspondent donc à une déformation l_1/l_0 de 0.6% pour $r = 3$ et 1.2% pour $r = 5$.

En régime dynamique, les conséquences de l'anisotropie pourraient être plus importantes, en particulier dans les premières phases de la décomposition spinodale.

c) Loi de Laplace. Nous avons utilisé dans le paragraphe précédent la loi de Laplace. Il convient de vérifier que celle-ci est effectivement vérifiée, au moins de façon globale. Pour cela, nous avons simulé des gouttes de liquide ayant divers rayons et mesuré les pressions à l'intérieur et à l'extérieur, ainsi que le profil de densité. Ce dernier permet d'évaluer le rayon de la goutte, une fois l'équilibre atteint. Pour chaque simulation, un système d'axe a été asservi au centre de la goutte pour éviter les décalages dûs au mouvement brownien.

Les résultats pour $r = 5$ ont été reportés sur la figure 40. Ils correspondent à des moyennes sur au moins 24000 pas de temps. On trouve bien une variation

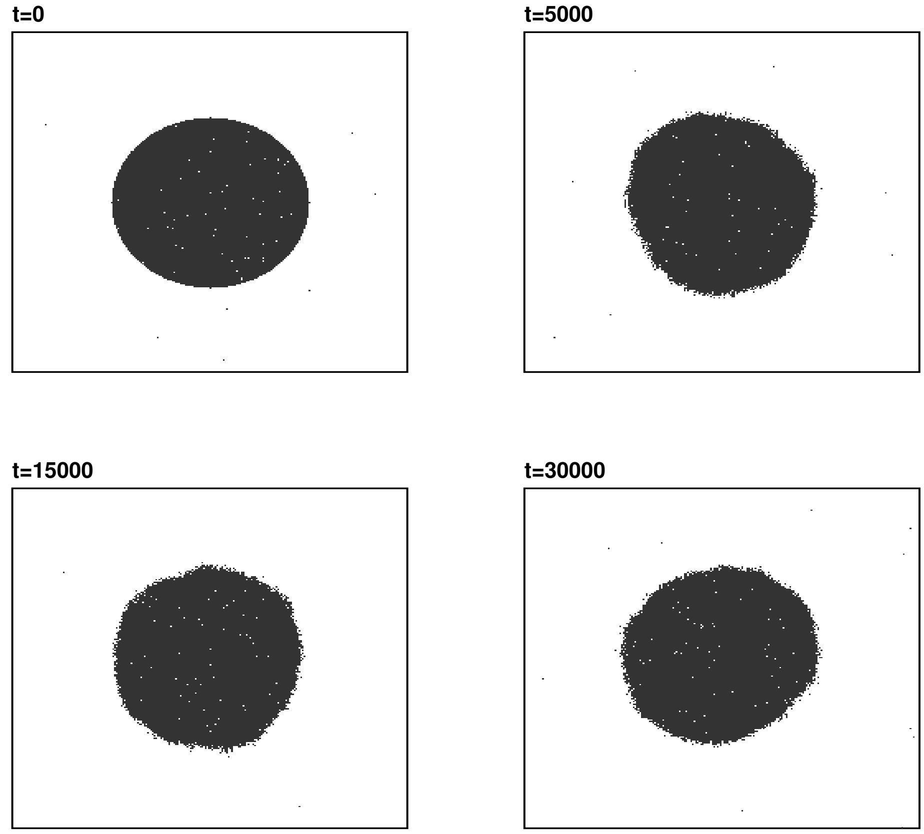


Figure 41: *Vérification de la loi de Laplace sur des gouttes de liquide. Le rayon initial de la goutte est de* 60 *unités réseau, et la distance d'interaction vaut* $r = 5$*. Les fluctuations de la forme de la goutte sont faibles (comparer avec le cas* $r = 3$*, figure 42).*

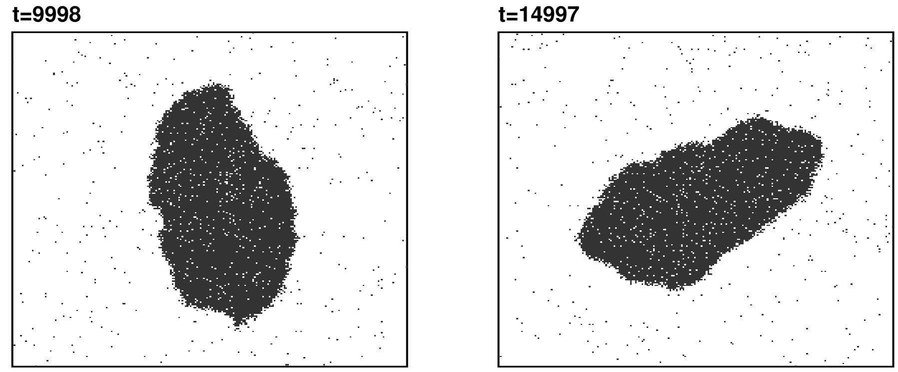


Figure 42: *Vérification de la loi de Laplace sur des gouttes de liquide. Le rayon initial de la goutte est de* 58 *unités réseau, et la distance d'interaction vaut* $r = 3$*. Les fluctuations de la forme de la goutte empèchent d'avoir des mesures significatives.*

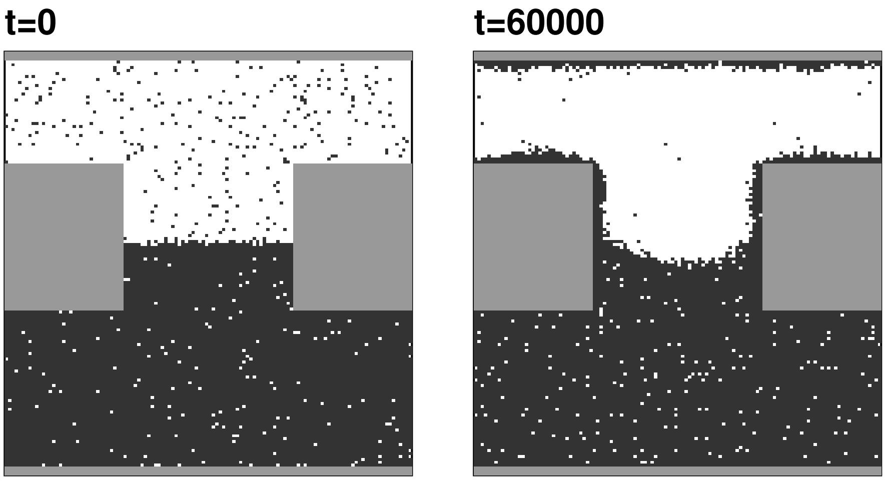


Figure 43: *Ménisque bloqué dans un capillaire.*

linéaire en fonction de la différence de pression, excepté pour les rayons trop petits où l'on observe la divergence habituelle à la loi de Laplace. La valeur de tension de surface qui s'en déduit est $\sigma = 1.14 \pm 0.16$, ce qui est compatible avec les mesures d'anisotropie du tenseur de pression (table 4).

Pour $r = 3$, les mesures sont beaucoup plus bruitées. Il suffit de comparer les simulations des figures 40 et 43. Ceci n'est pas étonnant puisque l'on s'approche du point critique. Pour s'affranchir des fluctuations de la forme de la goutte, d'autres mesures ont été réalisées sur un ménisque coincé dans un capillaire (figure 43) par Valérie Pot. Le capillaire est limité par deux blocs solides qui sont mouillants vis à vis du liquide; les sites solides attirent le liquide en échangeant de l'impulsion avec les sites situés à distance r.

A nouveau on vérifie la loi de Laplace, cette fois-ci pour $r = 3$. La tension de surface mesurée vaut $\sigma = 0.23 \pm 0.02$, ce qui correspond aux mesures basées sur la définition mécanique.

3.2.4 Valeurs des pressions et densités d'équilibre de part et d'autre d'une interface.

On ne peut pas écrire d'équation de conservation de l'énergie pour le modèle liquide-gaz indépendante de l'équation de conservation de la masse, qui est automatiquement vérifiée. Supposons que l'on puisse appliquer les premier et sec-

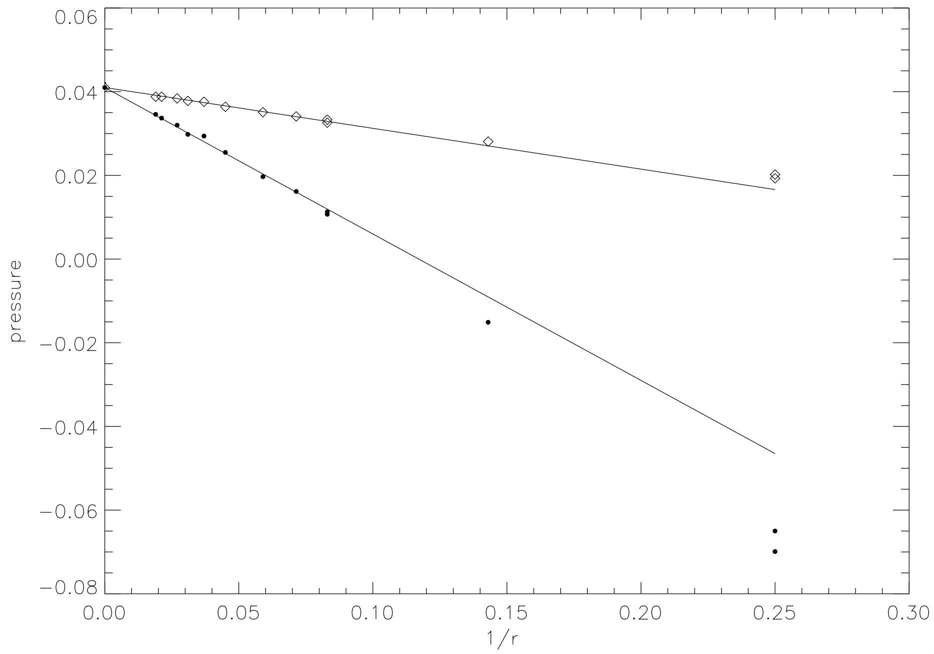


Figure 44: *Résultat de l'expérience en tube capillaire. Les pressions d'équilibre pour le liquide et le gaz sont données en fonction de la demi-largeur du capillaire. Les losanges représentent la pression gazeuse et les cercles la pression du liquide. Issu de la référence [46].*

ond principes de la thermodynamique. Puisque l'énergie est conservée, l'état d'équilibre est déterminé uniquement par la maximisation de l'entropie: c'est un état homogène. Pour que l'état d'équilibre soit un état à phases séparées, il faut d'une certaine manière rendre caduque le second principe. C'est le rôle que joue l'irréversibilité de l'interaction. En effet, celle-ci permet que le système soit confiné dans une région de l'espace des phases par suite de contraintes dynamiques. L'interaction est choisie telle que cette région corresponde justement à des états à deux phases séparées.

a) Densités d'équilibre pour une interface plane. Si l'interface peut être supposée étendue, on peut écrire son équation sous forme d'un développement en puissances du gradient:

$$p(x) = p_0 + a_0(\rho)\frac{d\rho}{dx} + a_1(\rho)\left(\frac{d\rho}{dx}\right)^2 + a_2(\rho)\frac{d^2\rho}{dx^2} \tag{94}$$

L'équation doit être invariante par changement d'orientation de l'axe des x, d'où $a_0 = 0$.

Nozières et Quemada ont montré comment, pour une équation de cette forme, on peut définir un pseudo potentiel Ψ, tel que les densités d'équilibre soient deux minimums égaux de Ψ [45]. Ψ est une fonction intégrale dépendant des coefficients a_i. Les densités d'équilibre sont donc parfaitement déterminées même si on ne peut pas définir de potentiel thermodynamique au sens habituel du terme.

En réalité, pour les modèles dont nous disposons actuellement, l'interface est relativement raide. Sa largeur est typiquement de 2 ou $3r$. Il faut dans ce cas écrire l'équation de l'interface sous forme d'une équation intégro-différentielle, dont la résolution devrait constituer un travail futur.

Les densités d'équilibre peuvent facilement être augmentées ou diminuées en réalisant des interactions conditionnelles comme cela a été indiqué au paragraphe 2.1.3. Un exemple d'équation d'état modifiée est donné dans [4] (appendice I.2). Ne disposant pas pour l'instant de moyen de prédire les densités et pressions d'équilibre, nous les avons mesurées pour diverses variantes du modèle liquide-gaz. Pour cela nous avons initialisé les simulations avec une bande de liquide se refermant sur elle-même (conditions aux limites périodiques) et effectué les mesures dès que celle-ci était à l'équilibre. Les résultats sont réunis dans la table 5. Nous avons vérifié que les pressions du gaz et du liquide sont égales à la précision des mesures près.

DENSITES ET PRESSIONS D'EQUILIBRE					
Modèle	r	β	$p_{gaz} \times 10^4$	densité du gaz$\times 10^4$	densité du liquide $\times 10^4$
A	3	30^o	407 ± 2	165 ± 9.4	5750 ± 5
A	3	0^o	408 ± 3	165 ± 1.6	5750 ± 3
A	5	30^o	59 ± 2	21 ± 0.8	6932 ± 2
A	5	0^o	68 ± 2	24.2 ± 0.61	6926 ± 3.2
A	7	30^o	15 ± 1	5.1 ± 0.2	7549 ± 1
A	9	30^o	5.1 ± 0.4	1.7 ± 0.15	7724 ± 4
B	3	30^o		1021 ± 2	6115 ± 2
B	3	0^o		1025 ± 1.5	6117 ± 2
C	3	30^o		2400 ± 2	7620 ± 1

Table 5: *Densités et pression d'équilibre pour une interface plane; les erreurs indiquées correspondent à deux écarts-type.*

b) Les relations de Gibbs-Thomson. Lors d'une séparation de phase, les fluctuations doivent atteindre une taille critique pour survivre, sans quoi elles disparaissent sous l'effet de la tension de surface [42]. Parmi les relations qui déterminent la valeur de cette taille critique se trouvent les relations de Gibbs-Thomson. Celles-ci relient les pressions d'équilibre $p^{(i)}$ de part et d'autre d'une interface courbe à la pression d'équilibre p_0 pour une interface plane, dans les mêmes conditions de température et de pression:

$$\begin{aligned} p_1 &= p_0 + \Delta p \tfrac{\rho_1}{(\rho_1 - \rho_2)} \\ p_2 &= p_0 + \Delta p \tfrac{\rho_2}{(\rho_1 - \rho_2)} \end{aligned} \qquad (95)$$

La phase à l'intérieur de la courbure est repérée par l'indice 1. Dans le monde réel, ou dans le cas où l'on peut définir une énergie libre pour le modèle (modèle de type Ising par exemple), ces relations découlent de l'égalité des potentiels chimiques de deux phases en équilibre [50].

Pour notre modèle où aucune énergie libre n'a pour l'instant être définie, il n'y a a priori aucune raison pour que ces relations soient encore vérifiées. Pourtant, le réalisme des simulations en dépend. Nous avons donc cherché par des mesures lors de simulations si ces relations étaient malgré tout vérifiées ou non.

Dans un premier temps, il est commode d'obtenir des relations explicites en p_i. On utilise la loi de Laplace. On a vu au paragraphe précédent que celle-ci était valide. D'ailleurs, puisqu'elle découle d'arguments cinétiques, et non thermodynamiques, il aurait été étonnant qu'elle ne le soit pas. Il en résulte

$$\begin{aligned} p_1 &= p_0 + \tfrac{\sigma}{R}\tfrac{\rho_1}{(\rho_1-\rho_2)} \\ p_2 &= p_0 + \tfrac{\sigma}{R}\tfrac{\rho_2}{(\rho_1-\rho_2)} \end{aligned} \tag{96}$$

Le but des simulations présentées au paragraphe précédent n'était en fait pas uniquement la vérification de la loi de Laplace. Les figures 40 et 44 permettent également de s'assurer que les pressions d'équilibre varient de façon linéaire avec l'inverse du rayon. Le signe de la pente des droites obtenues diffère entre les deux figures. En effet, la nature de la phase à l'intérieur de la courbure n'est pas la même dans les deux types de simulations.

Pour exploiter l'expérience numérique en capillaire, les relations de Gibbs-Thomson ont été réécrites de façon à faire apparaitre un coefficient α.

$$\left.\begin{array}{c} p_1 = p_0 + (1 - \alpha\frac{\rho_2}{\rho_2-\rho_1})(p_1 - p_2) \\ p_2 = p_0 - \alpha\frac{\rho_2}{\rho_2-\rho_1}(p_1 - p_2) \\ p_1 - p_2 = \frac{\sigma\cos\theta}{R'} \end{array}\right\} \tag{97}$$

Dans le monde réel, le coefficient α vaut exactement 1. La valeur mesurée dans notre cas pour une distance d'interaction $r = 3$ est $\alpha = 1.34 \pm 0.01$. Heureusement, celle-ci est positive; sinon, tout espoir d'avoir des simulations réalistes aurait dû être abandonné. Ici, une remise à l'échelle doit permettre de ramener ce coefficient à 1.

Une conséquence des relations de Gibbs-Thomson a été observée lors de simulations d'évaporation en milieu poreux telles que celle de la figure 28. Il s'agit de la formation de bulles de gaz dans la phase liquide par cavitation. Cela se produit dans les pores les plus étroits. En effet, la pression du liquide peut devenir négative pour des rayons de courbure suffisamment petits.

.

Chapitre 4

Modèle de Boltzmann avec transition liquide–gaz.

La méthode de Boltzmann consiste à remplacer les variables booléennes indiquant l'occupation d'un site par les probabilités d'occupation de ces mêmes sites. Cette approche a déjà été décrite dans le cas général au paragraphe 1.5. Nous allons introduire ici une version liquide-gaz du modèle de Boltzmann qui sans être exactement le pendant du modèle liquide-gaz booléen s'en inspire fortement.

Les avantages intrinsèques à la méthode ont déjà été discutés lors de sa présentation. Ici, un autre avantage est que la force de l'interaction attractive pour le modèle de Boltzmann peut être augmentée à volonté. Il est donc possible de ne considérer que des interactions de portée unitaire, réduisant ainsi la non-localité des règles d'évolution.

Nous allons présenter une séparation de phase obtenue avec le modèle de Boltzmann liquide-gaz, puis nous donnerons les équations hydrodynamiques correspondantes. Des tentatives ont été effectuées pour prédire la tension de surface. Pour finir, nous signalerons l'existence de courants circulaires parasites au niveau des interfaces lorsque celles-ci sont inclinées par rapport aux axes du réseau.

4.1 Présentation du modèle (en deux dimensions), définition de l'interaction attractive.

On considère toujours des particules se déplaçant sur un réseau hexagonal. Parmi les $6 + N_c$ états de vitesse possibles, 6 correspondent aux 6 directions du réseau et les états restants sont des états à vitesse nulle, dont les probabilités d'occupation sont égales entre elles. On note $N_l(\mathbf{x}, t)$, $(l = 1$ à $6)$ la probabilité d'occuper l'état

l au site $\mathbf{x}$ et à l'instant t. C'est une variable réelle. Le nombre moyen de particules immobiles en un site est $N_c N_0(\mathbf{x},t)$. Dans tout ce qui suit, on a pris $N_c = 6$.

On ajoute un terme d'interaction à l'équation d'évolution (37)

$$N_i(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i, t+1) - N_i(\mathbf{x},t) = \sum_j \Omega_{ij} N_j^{neq}(\mathbf{x},t) + \mu\Gamma_i. \tag{98}$$

$\mathbf{N}^{neq}$ est l'écart à la distribution de Fermi-Dirac.

Γ_i est l'opérateur d'interaction. Il est multiplié par un coefficient μ, qui permet d'ajuster la force de l'interaction. Cela peut correspondre à des interactions effectuées avec une probabilité μ.

Γ_i doit conserver le nombre de particules en chaque site, l'impulsion globale, et provoquer une attraction entre particules. On a choisi:

$$\begin{aligned} \Gamma_0 &= 0 \\ \Gamma_i &= f\left[\tilde{\rho}\left(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{c}_i}{2}\right)\right] - f\left[\tilde{\rho}\left(\mathbf{x}-\frac{\mathbf{c}_i}{2}\right)\right] \quad \forall i = 1 \text{ à } 6 \end{aligned} \tag{99}$$

avec

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}\left(\mathbf{x}+\tfrac{\mathbf{c}_i}{2}\right) &= \rho(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i) \\ f(X) &= X^n\left[(6+N_c)^2 - X\right]^n \end{aligned} \tag{100}$$

Cette expression ne dérive pas directement d'une interaction booléenne. On peut cependant l'interpréter en considérant que le terme X^n provient de la probabilité d'avoir n particules en un site, et $\left[(6+N_c)^2 - X\right]^n$ de celle d'avoir n trous. $2n$ serait alors le nombre de particules impliquées dans l'interaction.

4.2 Observation d'une transition de phase.

Aucune fluctuation n'étant présente dans le modèle de Boltzmann, il est nécessaire d'introduire une perturbation pour provoquer la transition de phase à partir d'une densité initiale uniforme. Pour cela nous avons ajouté de faibles fluctuations aléatoires de la densité à l'état initial. Les images présentées ont été obtenues pour un maillage 128×128, avec $N_c = 6, n = 1, \mu = 1.2 \times 10^{-4}$, et une densité initiale 0.48.

Les gouttes obtenues sont clairement anisotropes. Nous espérions trouver une autre formulation du terme d'interaction faisant intervenir les densités des sites sans distinguer les états de vitesse, qui garantisse une plus grande isotropie de

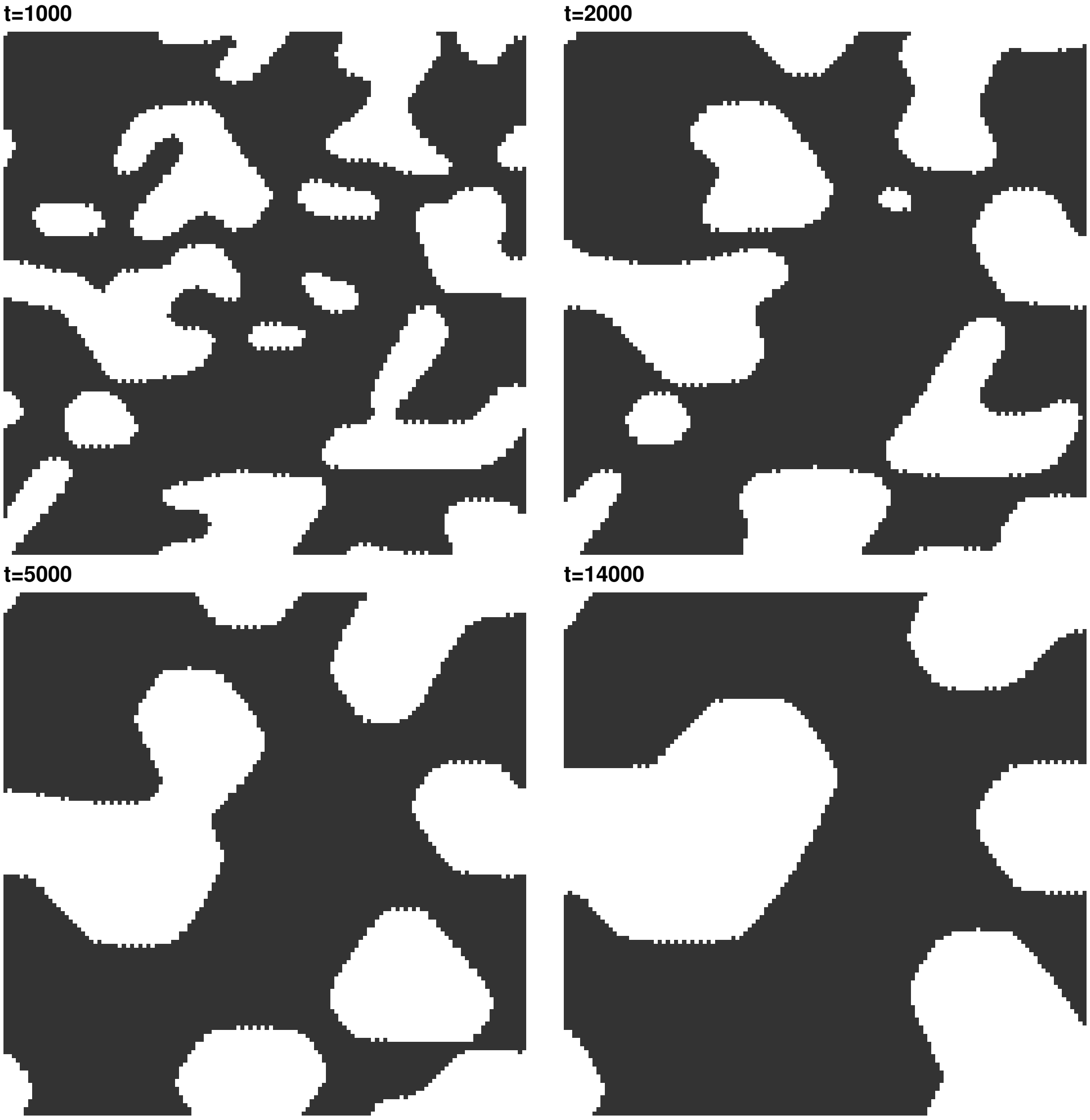


Figure 45: *Séparation de phase obtenue avec le modèle de Boltzmann . L'état du système est représenté aux pas de temps 1000, 2000, 4000 et 11000. Les zones blanches (respectivement grises) correspondent à des densités par état inférieures (supérieures) à* 0.4.

la tension de surface (invariance par rotation $\pi/12$ au lieu de $\pi/6$). Malheureusement nos essais dans ce sens furent infructueux. Comme depuis a été introduit le modèle minimal (booléen) dont la simplicité permet aussi de dériver les équations hydrodynamiques et d'envisager une extension à trois dimensions, le modèle de Boltzmann a été pour l'instant abandonné au profit du modèle minimal.

4.3 Calcul des équations hydrodynamiques.

La méthode est analogue à celle utilisée pour le modèle minimal. On se restreint toujours aux faibles gradients et faibles vitesses. Nous n'avons considéré que des fluctuations de densité du second ordre et de ce fait n'avons pas obtenu la viscosité de compression.

Nous avons pris

$$\frac{\partial}{\partial x} = \mathcal{O}(\epsilon); \quad \frac{u}{c_s} = \mathcal{O}(\eta); \quad \rho(\mathbf{x},t) = \rho_0 + \eta^2 \rho_1(\mathbf{x},t); \quad \frac{\partial}{\partial t} = \mathcal{O}(\epsilon\eta). \tag{101}$$

La projection de l'équation d'évolution (98) au 1^{er} ordre sur le vecteur de masse donne

$$\partial_\alpha u_\alpha = 0 + \mathcal{O}(\epsilon^2\eta) + \mathcal{O}(\epsilon\eta^3) \tag{102}$$

La projection sur le vecteur $\{c_{i\alpha}\}_{i=0 à 6}$ au deuxième ordre conduit à

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho u_\gamma + \frac{\partial\left[g(\rho)\rho u_\gamma u_\mu\right]}{\partial x_\mu} = -\frac{\partial p}{\partial x_\gamma} + \nu\frac{\partial^2 \rho u_\gamma}{\partial x_\mu^2} + \mathcal{O}(\epsilon^2\eta^3) + \mathcal{O}(\epsilon^3\eta) \tag{103}$$

avec

$$\left\{\begin{array}{ccc} g(\rho) & = & \frac{6+N_c}{12}\left(\frac{1-2d}{1-d}\right) \\ p(\rho,u^2) & = & 3d - 3\mu f + \frac{N_c^2-36}{24} d\left(\frac{1-2d}{1-d}\right) u^2 \\ \nu & = & -\frac{1}{4}\left(\frac{1}{\lambda}+\frac{1}{2}\right) \end{array}\right. \tag{104}$$

Il serait possible d'ajuster $g(\rho)$ à 1 par un autre choix des distributions d'équilibre.

Contrairement au cas du modèle minimal, l'interaction ici ne modifie pas la viscosité. Cela vient de ce que le terme d'interaction fait intervenir la densité totale sur les sites et non l'occupation d'états de vitesse particuliers. Ainsi la dépendance en i ne se traduit que par les préfacteurs dans le développement de Taylor:

$$\Gamma_i = c_{i\beta}\frac{\partial f}{\partial x_\beta} + \frac{1}{2}c_{i\beta}c_{i\gamma}\frac{\partial^2 f}{\partial x_\beta \partial x_\gamma} + \mathcal{O}(\epsilon^3\eta^2) \tag{105}$$

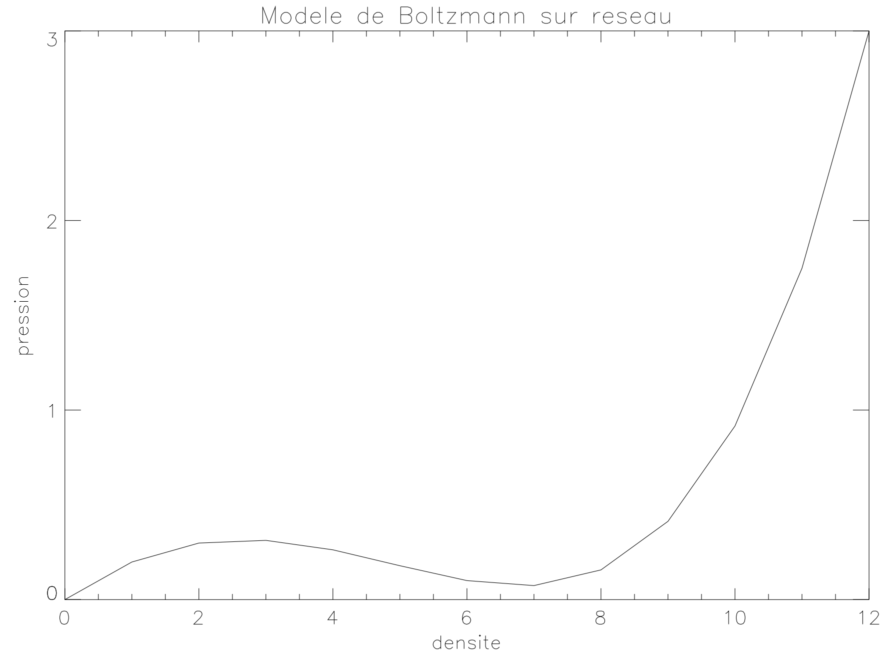


Figure 46: *Equation d'état pour le modèle de Boltzmann. Les paramètres sont ceux de la simulation 45.*

Par projection sur $c_{i\alpha}$, le terme en dérivée seconde de f s'annule. D'autre part, la correction du premier ordre $N_i^{(i)}$ à la densité d'équilibre laisse inchangée la densité $\rho(\mathbf{x})$ donc ne modifie pas le terme $\frac{\partial f}{\partial x_\beta}$. Aucune correction à la viscosité n'apparait.

Sur la figure 46, la courbe d'équation d'état a été tracée pour les valeurs des paramètres correspondant à la simulation de la figure 45. On retrouve bien la région spinodale (zone à pente négative), et métastable (zone à pente positive, en dessous du plateau de Maxwell).

4.4 Mesures et prédiction de la tension de surface du modèle de Boltzmann.

4.4.1 Vérification de la loi de Laplace.

On réalise un certain nombre de simulations avec des gouttes de rayon variable. Une fois l'équilibre atteint, on mesure les transferts d'impulsion à l'intérieur et à

R	9	15	20	21	24	25
σ	0.058	0.070	0.060	0.073	0.058	0.073

Table 6: *Valeurs de la tension de surface obtenues par la loi de Laplace.*

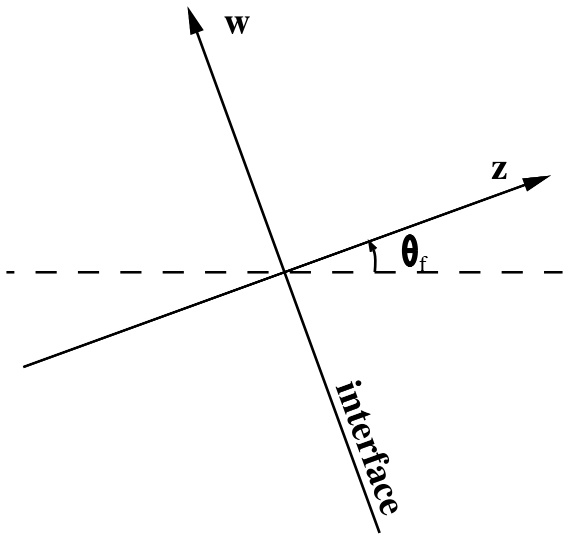


Figure 47: *Système de coordonnées employé. La ligne en tirets indique la direction de vitesse formant le plus petit angle θ_f avec la normale à l'interface. Alors $\theta_f \in [-\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{6}]$.*

l'extérieur de l'interface et on en déduit les pressions intérieures et extérieures. La tension de surface est calculée en utilisant la loi de Laplace. Les résultats sont reportés dans la table 6. La valeur moyenne est $\sigma = 0.065 \pm 0.005$. Pour toutes les simulations réalisées, les densités d'équilibre sont $\rho_{int} = 8.475 \pm 0.075$ et $\rho_{ext} = 1.395 \pm 0.075$. Ces résultats sont plus bruités que ce que l'on attendrait pour un modèle de Boltzmann. Il est possible qu'il n'y ait pas de solution d'équilibre pour l'interface et que celle-ci oscille entre plusieurs positions proches. Une variation du rayon de seulement une unité réseau pourrait alors modifier fortement l'état thermodynamique dans lequel se trouve l'interface.

4.4.2 Expression analytique de la tension de surface. Calcul dans le cas d'une interface en marche d'escalier.

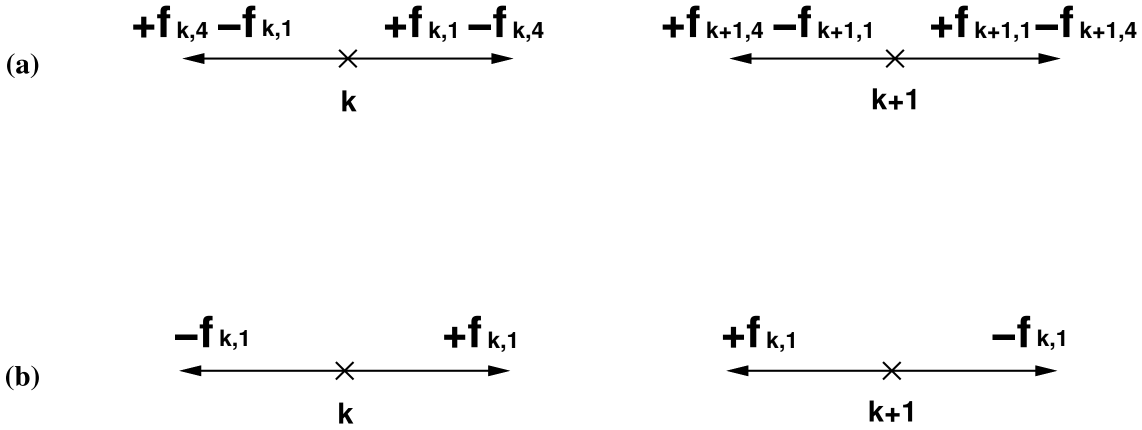


Figure 48: *Impulsion échangée lors d'une interaction dans la direction* $\mathbf{c}_1$*. Chaque fléche représente un état de vitesse. (a) La variation de population de cet état dûe aux interactions dans la direction horizontale est indiquée au dessus de chaque flèche. (b) Même figure que la précédente, en ne gardant que les termes communs aux 2 sites.*

a) Formule générale obtenue à partir de la définition mécanique de la tension de surface. Nous allons partir de la définition mécanique de la tension de surface (87). La coordonnée tangentielle sera désormais notée w pour éviter toute ambiguité avec le temps (figure 47). La définition discrète de la tension de surface s'écrit

$$\sigma = \frac{1}{N_w} \sum_{i,\mathbf{X}} p_z(\mathbf{x}) - p_w(\mathbf{x}) \tag{106}$$

où on fait une moyenne sur N_w sites dans la direction w. On exprime les pressions normales et tangentielles en référence au tenseur de transfert d'impulsion: $p_n = \Pi_{zz}$ et $p_t = \Pi_{ww}$. Dans le cas du modèle de Boltzmann étudié ici, on a

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_i \left(N_i c_{i\alpha} c_{i\beta} + \frac{1}{2} \mathcal{I}_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \right). \tag{107}$$

Le premier terme correspond à la propagation et le deuxième aux interactions. $\mathcal{I}_i$ est l'impulsion échangée entre les sites lors d'une interaction. Il faut calculer cette quantité d'après la définition (99) de l'opérateur d'interaction. Considérons une interaction dans la direction $\mathbf{c}_1$ et notons $f_{k,j} = f\left[\overline{\rho}(\mathbf{x}_k + \mathbf{c}_j/2)\right]$. Dans la figure 48, on a représenté par des flèches les états de vitesses horizontales en deux sites voisins. Au dessus de chaque flèche, on indique les variations de population de ces états dûes aux interactions (48 a). Puis on simplifie la figure en ne gardant que le

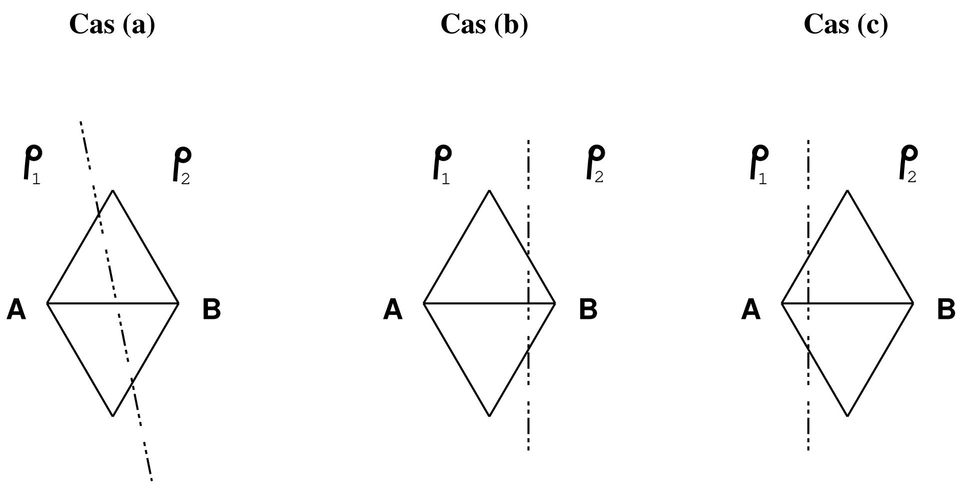


Figure 49: *Une interface peut couper le maillage de trois façons différentes. Les schémas ci-dessus sont valables pour une interface qui fait un angle avec la verticale compris entre $-\pi/6$ et $\pi/6$. Le système étant invariant par rotation $\pi/3$, on peut toujours se ramener à ce cas.*

terme commun aux deux sites, à savoir $f_{k,1} = f_{k+1,4}$. La figure 48b met en évidence que l'échange d'impulsion entre les deux sites vaut $-2f_{k,1}c_{1\alpha}$. En généralisant aux autres directions, on a $\mathcal{I}_j c_{i\alpha} = -2\mu f\left[\overline{\rho}(\mathbf{x}+\mathbf{c}_j/2)\right] c_{i\alpha}$. L'équation (106) devient

$$\sigma = \frac{1}{N_w}\sum_{i,\mathbf{X}} N_i(\mathbf{x},t)\left(c_{iz}^2 - c_{iw}^2\right) - \frac{1}{N_w}\mu\sum_{i,\mathbf{X}} f\left[\overline{\rho}(\mathbf{x}+\mathbf{c}_j/2,t)\right]\left(c_{iz}^2 - c_{iw}^2\right). \quad (108)$$

En supposant que l'on a atteint un état stationnaire, on obtient (v. appendice G)

$$\sigma = Re\left\{-\frac{N_y}{N_w}\mu e^{\{-2i\theta_f\}}\sum_{\mathbf{X},k} j^k\left[\frac{\Gamma_k}{\lambda} + f(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{c}_k}{2})\right]\right\} \quad (109)$$

Pour calculer ce terme, il faut faire des hypothèses sur le profil de densité. L'interface étant relativement raide (largeur d'environ 4 unités de longueur), nous avons étudié le cas de la marche d'escalier.

Pour pouvoir mener des calculs complêts, où le profil de densité serait obtenu comme résultat et non introduit en hypothèse, il faudrait que nous puissions obtenir des interfaces très larges afin de rester dans le cadre de l'hypothèse de faible gradient. A ce jour, nous n'avons pas trouvé le moyen de réaliser une telle interface.

b) Cas d'une interface en marche d'escalier. L'interface peut couper le maillage de trois manières différentes, comme indiqué sur la figure 49, avec les probabilités suivantes.

- cas (a) : probabilité $\sqrt{3}\tan\theta_f$
- cas (b) : probabilité $\left(1-\sqrt{3}\tan\theta_f\right)/2$
- cas (c) : probabilité $\left(1-\sqrt{3}\tan\theta_f\right)/2$

Tous calculs faits on trouve (v. appendice H)

$$\sigma = -\mu\mathcal{F}(\theta_f)\left(f^1+f^2-2f^{1/2}\right) \tag{110}$$

avec

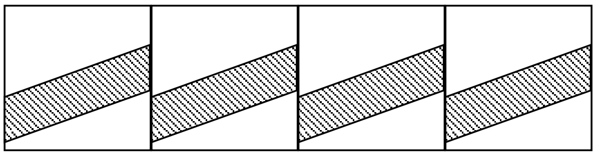
$$f^1 = f(\rho_1^2);\ f^2 = f(\rho_2^2);\ f^{1/2} = f(\rho_1\rho_2) \tag{111}$$

et $\mathcal{F}(\theta)$ définie par

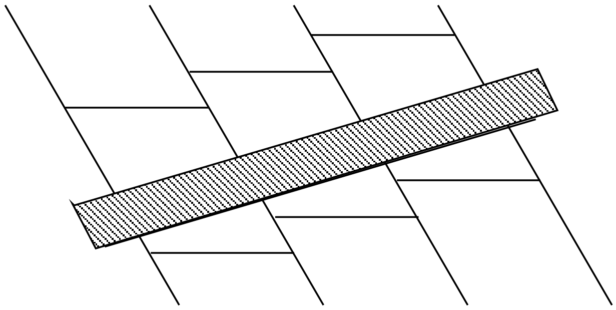
$$\begin{cases} \mathcal{F}(\theta) = \cos\theta\left\{\frac{3}{2}-\cos 2\theta\right\} \quad \text{pour } \theta\in\left[0,\frac{\pi}{6}\right] \\ \mathcal{F}(\theta)\text{est paire} \\ \mathcal{F}(\theta)\text{est périodique de période } \frac{\pi}{3}. \end{cases} \tag{112}$$

4.4.3 Réalisation d'une interface à pente réglable par modification des conditions aux limites.

Pour étudier l'influence du réseau sur le comportement d'une interface, il est utile de pouvoir incliner celle-ci d'un angle quelconque par rapport aux axes du réseau. Or les conditions aux limites étant périodiques, on ne peut pas a priori donner n'importe quelle inclinaison à une bande de liquide (voir figure 50a). Il faut ajuster les conditions aux limites de façon à ce que la bande soit continue, pour une inclinaison donnée. Pour le modèle de Boltzmann, nous avons utilisé un réseau de base de forme parallèlepipèdique. En modifiant les conditions aux limites on fait "glisser" les parallèlepipèdes les uns par rapport aux autres pour obtenir les bonnes conditions de raccord (fig. 50b).
Remarque : Il faut prendre certaines précautions pour définir les conditions initiales et pour représenter les résultats. En effet la fenêtre carrée de visualisation ne permet plus de voir l'ensemble du réseau, à moins qu'on ne l'agrandisse (figure 51).



a) Conditions aux limites habituelles



b) Conditions aux limites adaptees a l'inclinaison de la bande

Figure 50: *(a) Mise en évidence de la nécessité de changer les conditions aux limites lorsqu'on veut simuler une bande de liquide inclinée par rapport aux axes. (b) Ajustement des conditions aux limites en vue d'assurer la continuité de la bande de liquide.*

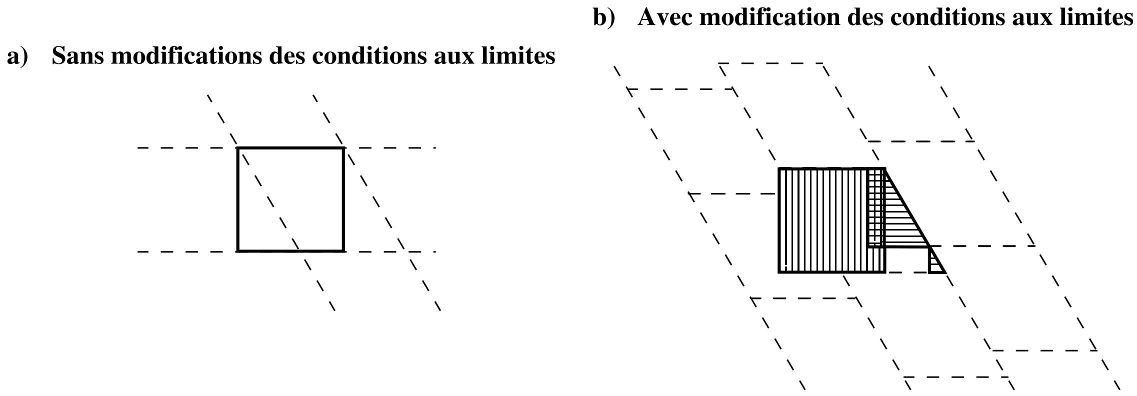


Figure 51: *(a) Avec les conditions aux limites habituelles, tout le parallèlépipède élémentaire est visible dans la fenêtre carrée de visualisation. (b) Les parties hachurées correspondent à ce que l'on voit du parallèlépipède central. Les parties hachurées horizontalement ont été rapportées pour tenir compte des conditions aux limites périodiques. Une zone du parallèlépipède central reste blanche et n'est donc pas vue.*

4.4.4 Observation de courants parasites.

Dans le cas d'une interface inclinée, des courants circulaires parasites apparaissent au niveau de l'interface (figure 52). Ils proviennent de la discrétisation en espace de l'interface qui crée de petits gradients de pression locaux. Ils ont aussi été observés avec le modèle de Boltzmann issu du gaz sur réseau ILG [33]. Ces courants existent dans des méthodes autres que les gaz sur réseau telles que VOF [40, 41]. Comme ils résultent de la compétition entre la tension de surface qui les crée et la viscosité, Andrew Gunstensen et Stéphane Zaleski ont émis l'hypothèse que la vitesse de ces courants était en $\frac{\sigma(\theta)}{\eta}$ où η est la viscosité cinématique. Ceci a été vérifié par Andrew Gunstensen [33]. Plus précisement, il trouve

$$\frac{\eta u_{parasite}}{\sigma} \simeq 0.03 \tag{113}$$

pour le modèle ILG de Boltzmann.

Figure 52: *Courants parasites circulaires observés au niveau de l'interface lorsque celle-ci est inclinée.*

Figure 53: *Champ de vitesse lorsque l'interface est alignée sur un axe du réseau.*

Conclusion

L'objet de ce travail était la réalisation d'un modèle simple de système liquide-gaz, qui permette des études hydrodynamiques en présence d'interfaces. L'ajout d'une interaction attractive au modèle de gaz sur réseau FHP a permis effectivement d'obtenir la séparation du fluide en deux phases de densités différentes. Dernièrement, le modèle a été étendu à 3 dimensions. Les équations hydrodynamiques ont été calculées dans le cadre de l'hypothèse de chaos moléculaire et confrontées à des mesures de pression, avec un bon accord. Bien que les règles d'évolution microscopiques du modèle soient irréversibles, nous avons retrouvé beaucoup des comportements à grande échelle des interfaces. La loi de Laplace est vérifiée, comme on pouvait s'y attendre d'après des arguments mécaniques. Elle donne une valeur de la tension de surface en accord avec des mesures directes effectuées par ailleurs. La tension de surface varie linéairement avec la portée r de l'interaction. Les effets visqueux sont bien représentés à grande échelle. Le comportement quadratique en r de la viscosité a été retrouvé sur les mesures.

Les relations de Gibbs-Thomson ne sont pas vérifiées, ce qui semble provenir de l'irréversibilité microscopique. Toutefois, les pressions d'équilibre suivent bien une loi linéaire par rapport à la pression capillaire, et le coefficient correctif α est positif ce qui est essentiel pour obtenir une dynamique de transition de phase correcte.

L'étude présente demeure cependant incomplète. Citons quelques points qui nécessiteraient un approfondissement.
(i) On ne connait pas le coefficient de non-invariance galiléenne $g(\rho)$ pour le modèle maximal. L'expression obtenue pour le modèle minimal n'a pas permis de ramener $g(\rho)$ à l'unité.
(ii) Suite à la non-invariance galiléenne, la continuité de la composante tangentielle de la vitesse sur une interface n'est plus acquise. Le coefficient K de proportionalité entre les composantes de part et d'autre de l'interface devrait être ramené à 1 par renormalisation. Cependant, un compte rapide des coefficients à ajuster $(K, g(\rho_G), g(\rho_L), \alpha)$ montre qu'il ne sera pas possible de les ramener tous à leurs valeurs dans le monde réel par renormalisation de la masse, de l'espace et du temps. Cela pourra être fait dans des cas particuliers où par exemple la densité du gaz ou la vitesse de l'une des phases tend vers zéro.
(iii) La théorie du modèle doit être encore développée. En particulier, nous ne savons pas prédire les densités d'équilibre. L'influence du bruit microscopique

pourrait également être étudiée à l'aide d'une équation de type Langevin.

La simplicité de la dernière version du modèle (dite minimale) devrait permettre d'apporter des réponses à ces questions ouvertes.

Du point de vue de la physique statistique, le comportement d'un système liquide-gaz au voisinage du point critique reste mal connu et il serait intéressant de voir si on retrouve des exposants critiques universels dans le cas du gaz sur réseau. Plus généralement, nous aimerions mieux comprendre ce qui caractérise une transition de phase dûe à la dynamique, par opposition aux transitions de phase classiques. Cela rejoint un certain nombre de questions qui se posent quant à la thermodynamique des gaz sur réseau [9, 16].

En collaboration avec Valérie Pot, un travail sur l'évaporation en milieu poreux a été commencé. La gravité joue un rôle majeur dans la stabilisation des fronts d'invasion obtenus, dès que le contraste de densité entre les phases est important. En recourant aux simulations numériques, on peut s'en affranchir afin de mieux observer les mécanismes secondaires.

Nous envisageons également d'étudier la décomposition spinodale sous micro-gravité. Là aussi, il sera intéressant de pouvoir s'affranchir du champ de gravité afin de déterminer le rôle de la capillarité. Des expériences ont été réalisées dans ce sens [10]. Un avantage des méthodes numériques est de pouvoir effectuer des mesures en tout point de l'échantillon, alors que les méthodes optiques utilisées pour les expériences ont généralement une longueur de pénétration limitée.

L'une des premières étapes du travail consistera à retrouver la loi de croissance des domaines en $t^{1/3}$ prédite par Lifshitz-Slyozov. Cette loi a bien été observée expérimentalement [10]. Elle est suivie d'une loi de croissance linéaire aux temps plus longs.

Récemment, Wiltzius et Cumming [59] ont découvert un autre régime en $t^{3/2}$. Ce mode de croissance rapide n'a toujours pas été expliqué théoriquement. Parmi les hypothèses émises, l'existence de ce mode pourrait être causée par la présence de parois dans le système (A. Cumming, communication privée). Cette possibilité sera explorée ; la modélisation d'une paroi solide dans un gaz sur réseau est extrêmement simple et les propriétés de mouillage et de capillarité du modèle liquide-gaz ont déjà été étudiées dans le cadre du travail sur l'évaporation en milieu poreux [46].

Le grand contraste de densité entre les deux phases du modèle permettra aussi l'étude de structures de type lames de savon, où la forte asymétrie entre les phases joue un rôle important. Les expériences réalisées par Berge, Simon et Libchaber (1989) montrent bien comment la dynamique des films liquides reliant les gouttes modifie les lois de croissance des domaines. Une simulation préliminaire en 2D a confirmé la possibilité de représenter de tels systèmes à l'aide d'un gaz sur réseau [6].

Prochainement, une autre espèce gazeuse doit être ajoutée au modèle. Elle pourra modéliser par exemple une atmosphère, ce qui est essentiel pour représenter nombre de phénomènes d'évaporation. Parmi ceux-ci figure l'étalement de gouttes sur une surface sous l'effet de la gravité. Il serait intéressant d'observer à l'aide des gaz sur réseau la formation du film précurseur et son rôle dans l'avancée de la phase en volume.

D'autres problèmes plus complexes peuvent également être abordés par cette méthode. En modifiant les interactions, on pourrait modéliser des phases complexes de polymères (vésicules, phases lamellaires ou hexagonales).

.

Appendice A

Distributions d'équilibre de Fermi-Dirac pour le gaz sur réseau.

Considérons un état d'équilibre uniforme caractérisé par la densité moyenne par site

$$\rho = \left\langle \sum_{i=1}^{b} n_i(\mathbf{x}) \right\rangle \tag{A.114}$$

et par la vitesse moyenne $\mathbf{u}$ telle que

$$\rho\mathbf{u} = \left\langle \sum_i n_i \mathbf{c}_i \right\rangle \tag{A.115}$$

Ici les crochets $\langle\ \rangle$ indiquent une moyenne sur tous les sites du réseau.

Les quantités conservées du système sont le nombre de particules et l'impulsion. De plus, à cause du principe d'exclusion, les particules considérées sont des fermions. A partir d'un théorème H démontré par Michel Hénon [37] et dans le cadre de l'hypothèse de chaos moléculaire, on trouve comme distribution d'équilibre [30]

$$N_i^{eq} = \frac{1}{1 + \exp\left[h + \mathbf{q}.\mathbf{c}_i\right]} \tag{A.116}$$

où N_i est la probabilité de trouver une particule dans l'état i en un site. h et $\mathbf{q}$ sont des fonctions de la densité ρ et de la vitesse $\mathbf{u}$. Ils sont choisis indépendants de i, ce qui suppose que l'équilibre semi-détaillé est vérifié. Or a priori les interactions détruisent l'équilibre entre particules mobiles et au repos. Il faudrait donc distinguer ces dernières en leur donnant une densité différente. Cependant, dans le cas où il n'y a qu'un état de vitesse nulle, on négligera cet effet.

La distribution d'équilibre doit être invariante lorsqu'on change $\mathbf{u}$ en $-\mathbf{u}$ et $\mathbf{c}_i$ en $-\mathbf{c}_i$. Alors les fonctions $h(\rho, \mathbf{u})$ et $\mathbf{q}(\rho, \mathbf{u})$ sont respectivement paire et impaire. Un développement en puissance de u conduit à

$$\left\{ \begin{array}{lcl} h & = & h_0 + B_{ij} u_i u_j + \mathcal{O}(u^4) \\ \mathbf{q} & = & \left(\mathbf{a}_1.\frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|}\right) \mathbf{u} + \mathcal{O}(u^3) \end{array} \right. \tag{A.117}$$

ce qui s'écrit encore, à cause de l'isotropie des tenseurs d'ordre deux imposée par la symétrie du réseau,

$$\left\{\begin{array}{lcl} h & = & h_0 + h_2 u^2 + \mathcal{O}(u^4) \\ \mathbf{q} & = & q_1 \mathbf{u} + \mathcal{O}(u^3) \end{array}\right. \tag{A.118}$$

On obtient les coefficients h_0, h_2 et q_1 en reportant l'expression de N_i^{eq} dans les définitions (A.114) et (A.115) de la densité et de la vitesse moyennes.

Un développement de l'équation A.116 conduit finalement à

$$N_i^{eq} = d\left\{1 + \frac{Db}{b_m}\mathbf{u}.\mathbf{c}_i + G(d)\left[c_{i\alpha}c_{i\beta} - c_s^2\delta_{\alpha\beta}\right]u_\alpha u_\beta\right\} + \mathcal{O}(u^3) \tag{A.119}$$

avec

$$\left\{\begin{array}{lcl} G(d) & = & \frac{D^2}{2}\frac{b^2}{b_m^2}\left(\frac{1-2d}{1-d}\right) \\ c_s^2 & = & \frac{b_m}{bD} \end{array}\right. \tag{A.120}$$

L'expression (A.119) a été calculée pour un état uniforme. On peut étendre ce résultat à des champs de densité et de vitesse variables en espace, en faisant l'hypothèse d'équilibre local. Les moyennes qui apparaissent dans les définitions (A.114) et (A.115) ne sont plus prises sur l'ensemble du réseau mais seulement sur une petite sous-région, qui comporte typiquement quelques dizaines de sites et sur laquelle on suppose que la densité et la vitesse ne varient pas beaucoup.

Appendice B

Correction à la distribution d'équilibre de Fermi-Dirac au premier ordre.

On a développé les distributions de probabilité autour de l'équilibre :

$$\mathbf{N} = \mathbf{N}^{eq} + \mathbf{N}^{(1)} + \mathbf{N}^{(2)} + \cdots \tag{B.121}$$

où $\mathbf{N}^{(n)}$ est exprimé en terme de puissances des gradients de vitesse et de densité : $\mathbf{N}^{(n)} = \mathcal{O}((\partial_\alpha)^n)$.

Au premier ordre, $N^{(1)}$ est de la forme

$$N_i^{(1)} = M_{i\alpha\beta}\frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\beta} + N_{i\alpha}\frac{\partial\rho}{\partial x_\alpha} \tag{B.122}$$

$$N_k^{(1)} = M'_{\alpha\beta}\frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\beta} + N'_\alpha\frac{\partial\rho}{\partial x_\alpha} \tag{B.123}$$

On emploie l'indice i pour les états de vitesse non nulle et k pour l'état de repos.

Les propriétés de symétrie du réseau imposent la forme [30] :

$$M_{i\alpha\beta} = \Psi Q_{i\alpha\beta} - \chi\delta_{\alpha\beta} \tag{B.124}$$

$$N_{i\alpha} = \sigma C_{i\alpha} \tag{B.125}$$

$$M'_{i\alpha\beta} = \chi'\delta_{\alpha\beta} \tag{B.126}$$

$$N'_\alpha = 0 \tag{B.127}$$

Par définition, $Q_{i\alpha\beta} = c_{i\alpha}c_{i\beta} - \frac{c^2}{D}\delta_{\alpha\beta}$. Puisque $\sum_{i=1}^{b} N_i = \rho = \sum_{i=1}^{b} N_i^{eq}$, et $\sum_{i=1}^{b_m} \mathbf{c}_i N_i = \rho\mathbf{u} = \sum_{i=1}^{b_m} \mathbf{c}_i N_i^{eq}$, la correction $N_i^{(1)}$ doit vérifier

$$\left\{\begin{array}{rcl} \sum_{i=1}^{b} N_i^{(1)} & = & 0 \\ \sum_{i=1}^{b_m} \mathbf{c}_i N_i^{(1)} & = & \mathbf{0} \end{array}\right. \tag{B.128}$$

ce qui implique que $\sigma = 0$ et $\chi' = b_m\chi/(b-b_m)$. Finalement,

$$\left\{\begin{array}{rcl} N_i^{(1)} & = & \Psi Q_{i\alpha\beta}\frac{\partial\rho u_\alpha}{\partial x_\beta} - \chi\delta_{\alpha\beta}\frac{\partial\rho u_\alpha}{\partial x_\beta} \\ N_k^{(1)} & = & \frac{b_m}{b-b_m}\chi\delta_{\alpha\beta}\frac{\partial\rho u_\alpha}{\partial x_\beta} \end{array}\right. \tag{B.129}$$

.

Appendice C

Formulaire des relations sur les vitesses.

Les propriétés de symétrie [30] de l'ensemble des vitesses imposent un certain nombre de relations:

$$\sum_i c_i = 0 \tag{C.130}$$

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = \frac{b_m c^2}{D} \delta_{\alpha\beta} \tag{C.131}$$

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} = 0 \tag{C.132}$$

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} = \frac{b_m c^4}{D(D+2)} \left(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}\right) \tag{C.133}$$

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \left(c_{i\gamma} c_{i\delta} - \frac{c^2}{D}\delta_{\gamma\delta}\right) = \frac{b_m c^4}{D(D+2)} \left(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \frac{2}{D}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\right) \tag{C.134}$$

D est la dimension de l'espace. b_m est le nombre d'états de vitesse non nulle, et b le nombre total d'états de vitesse. On ne considère qu'un seul module de vitesse non nul $c = 1$.

Appendice D

Passage des relations de conservation microscopiques aux relations sur les coefficients de la matrice de collision Ω.

D.1 Conservation de la masse.

La conservation de la masse lors des collisions s'écrit

$$\sum_{i=1}^{6} N_i(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i, t+1) + N_c N_0(\mathbf{x}, t+1) = \sum_{i=1}^{6} N_i(\mathbf{x}, t) + N_c N_0(\mathbf{x}, t) \tag{D.135}$$

En utilisant l'équation d'évolution, on a

$$\begin{aligned}\textstyle\sum_{i=1}^{6} \left[N_i(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=0}^{6} \Omega_{ij} N_j^{neq}(\mathbf{x}, t)\right] + N_c \left[N_0(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=0}^{6} \Omega_{0j} N_j^{neq}(\mathbf{x}, t)\right] \\ = \textstyle\sum_{i=1}^{6} N_i(\mathbf{x}, t) + N_c N_0(\mathbf{x}, t)\end{aligned} \tag{D.136}$$

d'où en simplifiant les deux membres de l'équation

$$\sum_{j=0}^{6} \left[\sum_{i=1}^{6} \Omega_{ij} + N_c \Omega_{0j}\right] N_j^{neq}(\mathbf{x}, t) = 0 \tag{D.137}$$

soit

$$\sum_{j=0}^{6} \left[\sum_{i=0}^{6} X_i^0 \Omega_{ij}\right] N_j^{neq}(\mathbf{x}, t) = 0 \tag{D.138}$$

On rappelle que $X^0 = (N_c, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$ est vecteur propre de Ω associé à la valeur propre λ_0.

D'autre part, les corrections aux distributions d'équilibre vérifient la relation

$$\sum_{j=1}^{6} N_j^{neq} + N_c N_0^{neq} = 0 \tag{D.139}$$

On élimine N_0^{neq} entre les équations (D.139) et (D.138):

$$\sum_{j=1}^{6} \left[\sum_{i=0}^{6} X_i^0 \Omega_{ij}\right] N_j^{neq} - \frac{1}{N_c} \sum_{j=1}^{6} \left[\sum_{i=0}^{6} X_i^0 \Omega_{i0}\right] = 0 \tag{D.140}$$

$$\sum_{j=1}^{6}\sum_{i=0}^{6}\left[X_i^0\Omega_{ij}-\frac{1}{N_c}X_i^0\Omega_{i0}\right]N_j^{neq}=0 \tag{D.141}$$

Or les N_j^{neq} pour $j=1$ à 6 sont indépendants. Donc

$$\sum_{i=0}^{6}\left[X_i^0\Omega_{ij}-\frac{1}{N_c}X_i^0\Omega_{i0}\right]=0 \quad \forall j=1 \text{ à } 6. \tag{D.142}$$

Ceci s'écrit en fonction des coordonnées de Ω:

$$a_0+2a_{60}+2a_{120}+a_{180}+N_c\kappa-\frac{6\kappa}{N_c}-\xi=0 \tag{D.143}$$

Cette relation est en particulier vérifiée lorsque la valeur propre λ_0 est nulle. C'est ce que l'on choisira toujours d'imposer.

D.2 Conservation de l'impulsion.

La méthode est exactement la même que précédemment. La conservation de l'impulsion lors d'une collision s'exprime par

$$\sum_{i=1}^{6}N_i(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i,t+1)\mathbf{c}_i=\sum_{i=1}^{6}N_i(\mathbf{x},t)\mathbf{c}_i \tag{D.144}$$

d'où, en utilisant l'équation d'évolution,

$$\sum_{j=0}^{6}\sum_{i=1}^{6}\Omega_{ij}\mathbf{c}_iN_j^{neq}=0 \tag{D.145}$$

On projette cette relation sur l'axe (Oα):

$$\sum_{j=0}^{6}\sum_{i=1}^{6}\Omega_{ij}c_{i\alpha}N_j^{neq}=0 \tag{D.146}$$

D'après l'équation (D.139) on obtient

$$\sum_{j=1}^{6}\sum_{i=1}^{6}\left[\Omega_{ij}c_{i\alpha}-\frac{1}{N_c}\Omega_{i0}c_{i\alpha}\right]N_j^{neq}=0 \tag{D.147}$$

Les N_j^{neq} pour $j=1$ à 6 sont indépendants.

$$\Omega_{ij}c_{i\alpha}-\frac{\Omega_{i0}c_{i\alpha}}{N_c}=0 \quad \forall j=1 \text{ à } 6. \tag{D.148}$$

En remplaçant les $c_{i\alpha}$ par leurs valeurs pour le modèle FHP, on obtient

$$a_0+a_{60}-a_{120}-a_{180}=0 \tag{D.149}$$

Ceci impose que $c_{i\alpha}$ est vecteur propre de Ω associé à la valeur propre 0.

En conclusion, une condition suffisante pour que les collisions définies par la matrice Ω conservent la masse et la quantité de mouvement est

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \lambda_0 & = & 0 \\ \lambda_1 & = & 0 \end{array} \right. \tag{D.150}$$

c'est-à-dire

$$\left\{ \begin{array}{l} a_0 + 2a_{60} + 2a_{120} + a_{180} + N_c\kappa = 0 \\ a_0 + a_{60} - a_{120} - a_{180} = 0 \\ \xi = -\frac{6\kappa}{N_c} \end{array} \right. \tag{D.151}$$

Appendice E

Rappels sur l'expression du tenseur de transfert d'impulsion en théorie cinétique discrète.

Une forme générale de l'équation de conservation de l'impulsion est

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{\alpha\beta}}{\partial x_\alpha} = \rho F_\alpha \tag{E.152}$$

où F_α est une force volumique. $\Pi_{\alpha\beta}$ est le tenseur flux de quantité de mouvement.

Plaçons-nous du point de vue de la théorie cinétique discrète, et appelons $\{\mathbf{u}_i\}_{i=1 \grave{a} p}$ l'ensemble des vitesses que peuvent prendre les molécules. On suppose que ces dernières ont toutes la même masse m. Soit N_i le nombre de molécules de vitesse $\mathbf{u}_i$ par unité de volume. Alors le tenseur flux de quantité de mouvement s'écrit

$$\Pi_{\alpha\beta} = m \sum_i N_i \, u_{i\alpha} u_{i\beta}. \tag{E.153}$$

On définit la masse volumique par $\rho = m \sum_i N_i$ et la vitesse moyenne $\mathbf{v}$ par $\rho \mathbf{v} = m \sum_i N_i \mathbf{u}_i$. Π peut se décomposer en

$$\Pi_{\alpha\beta} = m \sum_i N_i \, (u_{i\alpha} - v_\alpha)(u_{i\beta} - v_\beta) - m \sum_i N_i \, v_\alpha v_\beta + m \sum_i N_i \, (v_\alpha u_{i\beta} + u_{i\alpha} v_\beta) \tag{E.154}$$

soit

$$\begin{cases} \Pi_{\alpha\beta} = -\sigma_{\alpha\beta} + \rho v_\alpha v_\beta \\ \text{ avec } \sigma_{\alpha\beta} = -m \sum_i N_i (u_{i\alpha} - v_\alpha)(u_{i\beta} - v_\beta) \end{cases} \tag{E.155}$$

$\rho \, v_\alpha v_\beta$ représente le flux d'impulsion convectif et - $\sigma_{\alpha\beta}$ le flux d'impulsion diffusif. σ est encore appelé tenseur des contraintes.

Si le fluide est au repos, seuls les termes diagonaux de σ sont non nuls. Le fluide étant supposé isotrope, on a

$$\sigma_{\alpha\beta} = -p \delta_{\alpha\beta} \tag{E.156}$$

Alors la pression statique vaut

$$p = \frac{m}{D} \sum_i N_i (\mathbf{u}_i - \mathbf{v})^2 \tag{E.157}$$

où D est la dimension de l'espace.

Quand le fluide est en mouvement, le tenseur des contraintes devient

$$\sigma_{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta} + \sigma'_{\alpha\beta} \tag{E.158}$$

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \eta\left[\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{D}\delta_{\alpha\beta}\frac{\partial v_l}{\partial x_l}\right] + \zeta\frac{\partial v_l}{\partial x_l}\delta_{\alpha\beta} \tag{E.159}$$

η et ζ sont les viscosités respectivement cinématique et de volume. La contrainte normale $\sigma_{\alpha\alpha}$ n'est plus égale à la pression statique, elle inclut le terme de viscosité volumique et on l'appelle alors pression mécanique.

Appendice F

Définition mécanique de la tension de surface.

Au niveau de l'interface, le tenseur de pression n'est plus isotrope. Nous allons introduire une définition de la tension de surface qui traduit cette anisotropie [55]. Le raisonnement qui suit suppose que l'on peut définir de façon non ambigüe les valeurs locales des champs thermodynamiques $p, \rho \ldots$

Considérons un système diphasique confiné dans un cube de dimensions $L_x \times L_y \times L_z$ (figure 54). Les deux phases sont séparées par une surface horizontale. Dans chacune des parties homogènes la pression est une quantité scalaire p. Près de l'interface, c'est un tenseur diagonal

$$\Pi = \begin{pmatrix} p_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & p_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & p_{zz} \end{pmatrix}$$

où les symétries imposent $p_{xx} = p_{yy}$; de plus la conservation de l'impulsion se traduit par $p_{zz} = p$. On définit les pressions normales et tangentielles

$$p_t(z) = p_{xx} = p_{yy} \tag{F.160}$$

$$p_n(z) = p \tag{F.161}$$

Si on déplace de δy la paroi $y = L_y$ de façon adiabatique et réversible, le travail fourni au système est

$$\delta W = -L_x \delta y \int_{-L_z/2}^{L_z/2} p_{yy}(z) dz. \tag{F.162}$$

S'il n'y avait pas d'interface, le travail serait

$$\delta W' = -L_x \delta y \int_{-L_z/2}^{L_z/2} p(z) dz. \tag{F.163}$$

La différence entre les deux traduit l'excès d'énergie libre dû à la tension de surface:

$$dF = \delta W = \sigma \delta A + \delta W' \tag{F.164}$$

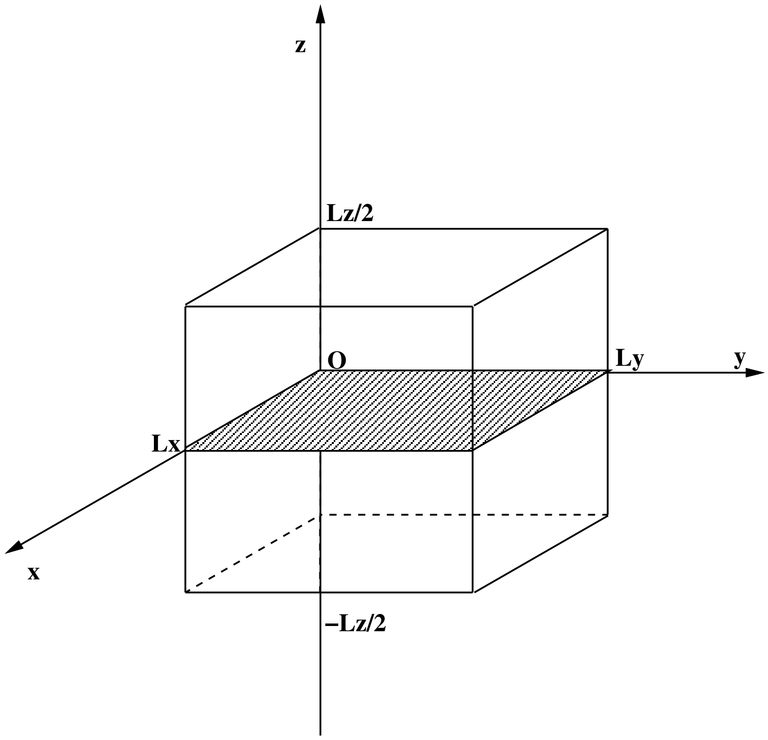


Figure 54: *Système considéré pour introduire la définition mécanique de la tension de surface. La surface hachurée représente l'interface qui sépare les deux fluides.*

avec $\delta A = L_x \delta y$. On en déduit

$$\sigma = \int_{-L_z/2}^{L_z/2} (p(z) - p_{yy}(z))\, dz \tag{F.165}$$

Comme la pression n'est anisotrope qu'au voisinage de l'interface, les bornes d'intégration peuvent être rejetées à l'infini.

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} (p_n(z) - p_t(z))\, dz. \tag{F.166}$$

Cette équation est généralement appelée définition mécanique de la tension de surface. La valeur de σ ainsi obtenue est la même que celle qui intervient dans la loi de Laplace.

Donnons quelques ordres de grandeur [55]. L'épaisseur de la surface d'un liquide à son point normal d'ébullition est environ de 1 nm ou 10 **A**. La tension de surface vaut typiquement 20.10^{-3}NM^{-1}. Alors l'ordre de grandeur de $p_n(z) - p_t(z)$ est 200 bars. Comme $p \simeq 1$ bar, cela signifie que la valeur moyenne de $p_t(z)$ est -200 bars!

Appendice G

Calcul de la tension de surface du modèle de Boltzmann, formule générale.

L'objet de cet appendice est d'expliciter la définition discrète de la tension de surface

$$\sigma = \frac{1}{N_w} \sum_{i,\mathbf{x}} N_i(\mathbf{x}, t) \left(c_{iz}^2 - c_{iw}^2\right) - \frac{1}{N_w} \mu \sum_{i,\mathbf{x}} f \left[\overline{\rho}(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{c}_j}{2}, t)\right] \left(c_{iz}^2 - c_{iw}^2\right). \quad \text{(G.167)}$$

On suppose que l'on a atteint un état stationnaire. La dépendance en t disparait. Notons $U_i = c_{iz}^2 - c_{iw}^2 = Q_{izz} - Q_{iww}$. Etant combinaison linéaire de vecteurs propres de Ω tous associés à la même valeur propre λ, U_i est lui-même vecteur propre associé à la valeur propre λ. Alors :

$$\sum_i U_i N_i^{eq} = \frac{1}{\lambda} \sum_i \lambda U_i N_i^{eq} = \frac{1}{\lambda} \sum_{ij} \Omega_{ij} U_j N_i^{eq} = \frac{1}{\lambda} \sum_j U_j \left(\sum_i N_i^{eq} \Omega_{ij} \right) = 0 \quad \text{(G.168)}$$

En décomposant les distributions en

$$N_i = N_i^{eq} + N_i^{neq}, \quad \text{(G.169)}$$

on obtient

$$\sigma = \frac{1}{N_w} \sum_{i,\mathbf{x}} N_i^{neq}(\mathbf{x}) U_i - \frac{1}{N_w} \mu \sum_{i,\mathbf{x}} f(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j/2) U_i. \quad \text{(G.170)}$$

Utilisons l'équation d'évolution

$$N_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) = N_i(\mathbf{x}) \Omega_{ij} N_j^{neq} + \mu \Gamma_i. \quad \text{(G.171)}$$

On fait la somme sur tous les sites du réseau et on utilise la relation $\sum_{\mathbf{x}} N_i(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i) = \sum_{\mathbf{x}} N_i(\mathbf{x})$. Alors

$$\sum_{\mathbf{x}} \left[\Omega_{ij} N_j^{neq} + \mu \Gamma_i\right] = 0. \quad \text{(G.172)}$$

On projette sur U_i ce résultat :

$$\sum_{i,\mathbf{x}} U_i N_i^{neq} = -\frac{1}{\lambda} \sum_{i,\mathbf{x}} U_i \mu \Gamma_i \quad \text{(G.173)}$$

Comme indiqué sur la figure 47, on appelle θ_f l'angle entre la normale à l'interface et une direction de réseau $\mathbf{c}_j$ choisie de façon à ce que θ_f soit minimal. Soit θ_i l'angle entre $\mathbf{c}_j$ et $\mathbf{c}_i$ où $\mathbf{c}_i$ est un état de vitesse quelconque. Alors

$$\begin{aligned} U_i &= c_{iz}^2 - c_{iw}^2 = \cos^2(\theta_i - \theta_f) - \sin^2(\theta_i - \theta_f) && \text{(G.174)} \\ &= Re\left\{e^{\{2i(\theta_i - \theta_f)\}}\right\} = Re\left\{e^{\{-2i\theta_f\}} j^i\right\} && \text{(G.175)} \end{aligned}$$

où $j^3 = 1$. Finalement, on a

$$\sigma = Re\left\{-\frac{N_y}{N_w}\mu e^{\{-2i\theta_f\}} \sum_{\mathbf{x},k} j^k \left[\frac{\Gamma_k}{\lambda} + f(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{c}_k}{2})\right]\right\} \tag{G.176}$$

Appendice H

Calcul de la tension de surface dans le cas d'une interface en marche d'escalier (modèle de Boltzmann).

On évalue les différents termes de l'équation (109) dans le cas d'une interface raide. L'interface peut couper le maillage de 3 manières différentes (figure 49). Pour chaque cas, on calcule

$$T \equiv \sum_{\mathbf{x},k} j^k f\left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{c}_k}{2}\right) \quad \text{et} \quad W \equiv \sum_{\mathbf{x},k} j^k \Gamma_k \tag{H.177}$$

où $j^3 = 1$. On rappelle que θ_f est défini de telle manière que $\theta_f \in \left[0, \frac{\pi}{6}\right]$. On note

$$f^1 = f(\rho_1^2);\ f^2 = f(\rho_2^2);\ f^{1/2} = f(\rho_1\rho_2) \tag{H.178}$$

- cas (a) :

$$\begin{aligned} T &= j^0 f^{1/2} + j^1 f^{1/2} + j^2 f^1 + j^3 f^1 + j^4 f^1 + j^5 f^1 \\ &\quad + j^0 f^2 + j^1 f^2 + j^2 f^2 + j^3 f^{1/2} + j^4 f^{1/2} + j^5 f^2 \\ &= j^2 \left(f^1 + f^2 - 2f^{1/2}\right) \end{aligned}$$

  où, dans la première égalité, la première ligne donne les contributions du point A et la deuxième les contributions du point B (v. figure 49). D'autre part

$$\begin{aligned} W &= j^0\left(f^{1/2} - f^1\right) + j^1\left(f^{1/2} - f^1\right) + j^3\left(f^1 - f^{1/2}\right) + j^4\left(f^1 - f^{1/2}\right) \\ &\quad + j^0\left(f^2 - f^{1/2}\right) + j^1\left(f^2 - f^{1/2}\right) + j^3\left(f^{1/2} - f^2\right) + j^4\left(f^{1/2} - f^2\right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

- cas (b) :

$$\begin{aligned} T &= j^0 f^{1/2} + \left(j^1 + j^2 + j^3 + j^4 + j^5\right) f^1 \\ &\quad + \left(j^0 + j^1\right) f^2 + \left(j^2 + j^3 + j^4\right) f^{1/2} + j^5 f^2 \\ &= f^{1/2} - f^1 \end{aligned}$$

et

$$W = 0 \tag{H.179}$$

- cas (c) :

$$\begin{aligned} T &= f^{1/2} - f^2 \\ W &= 0 \end{aligned}$$

En multipliant les diverses contributions par les probabilités d'avoir chacun des cas on a

$$\begin{aligned} T + \frac{W}{\lambda} &= \sqrt{3}\tan\theta_f j^2 \left(f^1 + f^2 - 2f^{1/2}\right) + \left(\frac{1-\sqrt{3}\tan\theta_f}{2}\right)\left(2f^{1/2} - f^1 - f^2\right) \\ &= \frac{\left(f^1 + f^2 - 2f^{1/2}\right)}{2}\left\{\sqrt{3}\tan\theta_f\left(2j^2+1\right) - 1\right\} \end{aligned}$$

Reportons cela dans l'expression (109) de la tension de surface :

$$\begin{aligned} \frac{N_w}{\mu N_y}\sigma &= -Re\left\{e^{\{-2i\theta_f\}}\left(T + \frac{W}{\lambda}\right)\right\} \\ &= \frac{\left(f^1 + f^2 - 2f^{1/2}\right)}{2}\left\{3 - 2\cos 2\theta_f\right\} \end{aligned}$$

Or

$$\frac{N_y}{N_w} \simeq \cos\theta_f \tag{H.180}$$

On définit $\mathcal{F}(\theta) = \cos\theta\,\{3/2 - \cos 2\theta\}$. Alors

$$\sigma = \mu\mathcal{F}(\theta)\left(f^1 + f^2 - 2f^{1/2}\right) \tag{H.181}$$

Appendice I

Articles avec guides de lectures.

I.1 Gaz sur réseau avec une transition liquide-gaz [5].

Présentation du modèle liquide-gaz sous sa première forme, qui sera par la suite appelée “restreinte”. Il s'agit d'un modèle de gaz sur réseau qui conserve l'impulsion et pour lequel les particules peuvent interagir à distance. Les interactions sont choisies de façon à provoquer une transition de phase. Un état uniforme peut alors se séparer spontanément en deux phases respectivement denses et diluées. La description de l'interaction attractive non-locale est suivie d'un exemple de décomposition obtenue lors d'une simulation. L'équation d'état est calculée dans le cadre de l'hypothèse de Boltzmann.

I.2 Un modèle liquide-gaz sur réseau [4].

Présentation du modèle liquide-gaz en deux dimensions, entre autres sous sa forme dite maximale. Plusieurs types d'interactions sont suggérés et leurs propriétés sont discutées. Des exemples de décompositions spinodales sont donnés et commentés. La pression, de type Van der Waals, est calculée dans le cadre de l'hypothèse de Boltzmann pour ces nouvelles formes du modèle. Elle est en accord avec les observations numériques. L'isotropie est étudiée à l'aide de transformées de Fourier du champ de densité pris à différents instants sur des simulations.

I.3 Transition de phase liquide-gaz dynamique [6].

Etude du modèle maximal et de ses variantes. La formulation analytique de l'équation d'état, ainsi que des mesures des densités d'équilibre et de la viscosité de cisaillement sont données pour les différentes variantes. La viscosité de cisaillement varie comme $\nu \sim r^2$ où r est la portée de la force attractive. La densité d'équilibre du gaz diminue rapidement avec r.

La tension de surface est évaluée par mesure du tenseur de pression. On montre qu'elle varie comme $\sigma \sim A(r - r_c)$. On s'attend à ce que r_c corresponde au point critique de la transition liquide–gaz. On vérifie d'autre part la validité de la loi de Laplace. On remarque la disparition des invariants parasites de Mc Namara et Zanetti [60].

Une série de mesure est effectuée sur des gouttes de rayons différents. Les densités et pressions d'équilibre varient avec la courbure de l'interface. La dépendance par rapport à l'inverse du rayon est bien linéaire comme dans les relations de Gibbs-Thomson, mais les coefficients ne sont pas ceux de la thermodynamique. La possibilité de renormaliser les coefficients du gaz sur réseau qui diffèrent de ceux du fluide réel est discutée.

I.4 Gaz sur réseau tridimensionnel avec interactions attractives minimales [1].

Extension du modèle à trois dimensions. Les équations hydrodynamiques du modèle liquide-gaz sont calculées par la méthode de Chapman-Enskog. En particulier, on obtient l'expression des vicosités de cisaillement et de compression. Une modélisation de l'interaction en termes de photons est introduite, ce qui permet de ne faire intervenir que des communications entre plus proches voisins. La possiblité d'implanter ce modèle sur une machine parallèle telle que la RAP [18] est discutée. Des exemples de décomposition en 3 dimensions sont présentés.

Certaines publications n'ont pas été reproduites dans la thèse. Le contenu de la référence [2] a été repris dans [1]. Les personnes ayant des difficultés avec la langue anglaise pourront cependant s'y reporter.

L'article [3] se place d'un point de vue plus qualitatif. On y présente les modèles liquide-gaz et ILG. L'accent est mis sur les possibilités et limites de ces méthodes.

La référence [46] provient d'un travail sur l'évaporation effectué en collaboration avec en particulier Valérie Pot. Les relations de Gibbs-Thomson ont été testées pour un ménisque coincé dans un capillaire (v. page 77). Les conclusions sont concordantes avec celles obtenues dans le cas des gouttes de liquide. L'accrochage des ménisques à l'entrée et à la sortie du capillaire -également observé expérimentalement- a été mis en évidence.

Un cas simple a été considéré, afin de permettre la comparaison avec des résultats analytiques. Il s'agit d'un tube initialement rempli de liquide. En fixant la pression en haut du tube, on provoque une évaporation et le tube se vide peu à peu. Si l'on néglige la conduction par les films de mouillage, la vitesse d'avancée du front peut être calculée analytiquement. Pour le modèle maximal, il existe un écart avec les mesures. En fait dans ce cas, le transport a lieu au moins pour moitié par les films de mouillage et le calcul ne peut pas s'appliquer. Ce type de transport par les films devrait pouvoir être observé expérimentalement. Pour la variante C du modèle qui a une densité gazeuse plus élevée, l'accord avec l'expression analytique est meilleur et on vérifie que le transport est effectué essentiellement par la phase gazeuse. On retrouve alors bien le profil de Poiseuille.

Pour finir, des simulations d'évaporation en milieu poreux ont permis de retrouver beaucoup des observations faites par Lenormand et col. [43] lors d'expériences sur des réseaux de capillaires. Les milieux poreux considérés sont constitués de grains carrés (v. figure 28) ou hexagonaux.

Références

[1] C. Appert, D. d'Humières, and S. Zaleski, *Three dimensional lattice gas with minimal interactions*, to be printed in *Transport Theory and Statistical Physics* - Proceedings of Euromech 287 - Discrete Models in Fluid Dynamics (1992).

[2] C. Appert, D. d'Humières, and S. Zaleski, *Lattice gas with minimal attractive interactions*, C. R. Acad. Sci. Paris **316, Série II** (1993), 569–574.

[3] C. Appert, V. Pot, and S. Zaleski, *Les liquides analogiques sur réseau*, Bulletin de la SFP **83** (1992), 8.

[4] C. Appert, D. Rothman, and S. Zaleski, *A liquid gas model on a lattice*, Physica D **47** (1991), 85.

[5] C. Appert and S. Zaleski, *Lattice gas with liquid gas transition*, Phys. Rev. Lett. **64** (1990), no. 1, 1–4.

[6] C. Appert and S. Zaleski, *Dynamical liquid-gas phase transition*, Journal de Physique - France **II 3** (1993), 309–337.

[7] R. Benzi, S. Succi, and M. Vergassola, *The lattice Boltzmann equation: theory and applications*, Physics Reports **222** (1992), 145–197.

[8] Bruno Berge, Adam J. Simon, and Albert Libchaber, *Dynamics of gas bubbles in monolayers*, Physical Review A **41** (1990), 6893–6900.

[9] Didier Bernardin and Olivier E. Sero-Guillaume, *Lattice gases mixtures models for mass diffusion*, European Journal of Mechanics, B/Fluids **9** (1990), 21–46.

[10] D. Beysens, P. Guenoun, and F. Perrot, *Phase separation of critical binary fluids under microgravity: Comparison with matched-density conditions.*, Physical Review A **38** (1988), 4173–4185.

[11] Jean-Pierre Boon, *Statistical mechanics and hydrodynamics of lattice gas automata : an overview*, Physica **D 47** (1991), 3–8.

[12] R. Brito and M. H. Ernst, *Lattice gases in slab geometries.*, Physical Review A **44** (1991), 8384.

[13] C. Burges and S. Zaleski, *Buoyant mixtures of cellular automaton gases*, Complex Systems **1** (1987), 31–50.

[14] H. J. Bussemaker and M. H. Ernst, *Biased lattice gases with correlated equilibrium states*, Journal of Statistical Physics **68** (1992), 431–455.

[15] H. J. Bussemaker and M. H. Ernst, *A mean field theory for biased lattice gas models*, preprint (1992).

[16] Carlo Cercignani, *On the thermodynamics of a discrete velocity gas*, preprint (1992).

[17] P. Clavin, P. Lallemand, Y. Pomeau, and G. Searby, *Simulation of free boundaries in flow systems by lattice-gas models*, Journal of Fluid Mechanics **188** (1988), 437–464.

[18] André Clouqueur and Dominique d'Humières, *R.A.P., a family of cellular automaton machines for fluid dynamics*, Helvetica Physica Acta ; Birkhauser Verlag, Basel **62** (1989).

[19] Rémi Cornubert, *Conditions aux limites des modèles cinétiques discrets : couche de Knudsen et obstacles.*, Thèse de Doctorat de Paris VI, 1991.

[20] Rémi Cornubert, Dominique d'Humières, and David Levermore, *A Knudsen layer theory for lattice gases*, Physica **D 47** (1991), 241–259.

[21] David Dab, Jean-Pierre Boon, and Yue-Xian Li, *Lattice-gas automata for coupled reaction-diffusion equations*, Physical Review Letters **66** (1991), 2535–2538.

[22] D. d'Humières and P. Lallemand, *Numerical simulations of hydrodynamics with lattice gas automata in two dimensions*, Complex Systems **1** (1987), 599–332.

[23] D. d'Humières, P. Lallemand, and U. Frisch, *Lattice gas models for 3D hydrodynamics*, Europhys. Lett. **2** (1986), 291–297.

[24] D. d'Humières, P. Lallemand, and Yuehong Qian, *Modèles monodimensionnels de gaz sur réseau, divergence de la viscosité.*, C. R. Acad. Sci. Paris **t. 308, Série II** (1989), 585–590.

[25] D. d'Humières, P. Lallemand, and Geoffrey Searby, *Numerical experiments on lattice gases : Mixtures and galilean invariance*, Complex Systems **1** (1987), 633–647.

[26] D. d'Humières, Y. Pomeau, and P. Lallemand, *Simulations d'allées de Von Karman bidimensionnelles à l'aide d'un gaz sur réseau*, C. R. Acad. Sci. Paris **II 301** (1985), 1391–1394.

[27] D. d'Humières, Y. Qian, and P. Lallemand, *Invariants in lattice gas models*, Discrete Kinematic Theory, Lattice Gas Dynamics and Foundations of Hydrodynamics (R. Monaco, ed.), World Scientific, 1989, pp. 102–113.

[28] L. di Pietro, A. Melayah, and S. Zaleski, *Modelling water flow in unsaturated porous media by interacting lattice gas–cellular automata: II infiltration*, submitted to Water Research Resources (1992).

[29] Liliana di Pietro, *Transferts d'eau dans des milieux à porosité binodale: modélisation par la méthode de gaz sur réseaux*, Thèse de Doctorat de l'Université de Montpellier II, 1993.

[30] U. Frisch, D. d'Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau, and J.P. Rivet, *Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions*, Complex Systems **1** (1987), 649–707.

[31] M. Gerits, M.H. Ernst, and D. Frenkel, *Lattice gas automata with attractive and repulsive interactions*, Physical Review A (submitted).

[32] A. K. Gunstensen, D. H. Rothman, S. Zaleski, and G. Zanetti, *Lattice Boltzmann model of immiscible fluids*, Physical Review A **43** (1991), no. 8, 4320–4327.

[33] Andrew K. Gunstensen, *Lattice-Boltzmann studies of multiphase flow through porous media*, PHD - MIT, 1992.

[34] Andrew K. Gunstensen and Dan H. Rothman, *Microscopic modeling of immiscible fluids in three dimensions by a lattice Boltzmann method*, Europhys. Letters **18** (1992), 157–161.

[35] Jean-Pierre Hansen and Ian R. McDonald, *Theory of simple liquids*, Academic Press, 1976.

[36] J. Hardy, Y. Pomeau, and O. de Pazzis, *Time evolution of a two dimensional model system. I: invariant states and time correlation functions*, Journal of Mathematical Physics **14** (1973), 1746–1759.

[37] Michel Hénon, *Viscosity of a lattice gas*, Complex Systems **1** (1987), 763–789.

[38] F. Higuera and J. Jimenez, *Boltzmann approach to lattice gas simulations*, Europhys. Lett. **9** (1989), 663–668.

[39] F. Higuera, S. Succi, and R. Benzi, *Lattice gas dynamics with enhanced collisions*, Europhys. Letters **9** (1989), 345–349.

[40] C.W. Hirt and B.D. Nicholls, *Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries*, Journal of Computational Physics **39** (1981), 201–225.

[41] B. Lafaurie and S. Zaleski, *Front capturing for flows with surface tension: Volume Of Fluid revisited*, preprint (1992).

[42] Landau and Lifshitz, *Course of theoretical physics, volume 10, Physical kinetics*, Pergamon Press, 1981.

[43] R. Lenormand, C. Zarcone, and A. Sarr, *Mechanisms of the displacement of one fluid by another in a network of capillary ducts*, Journal of Fluid Mechanics **135** (1983), 337–353.

[44] G. McNamara and G. Zanetti, *Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata*, Physical Review Letters **61** (1988), 2332.

[45] P. Nozières and D. Quemada, *A possible instability mechanism for plug formation in a sheared suspension flow*, Europhys. Letters **2** (1986), 129–135.

[46] V. Pot, C. Appert, A. Melayah, D. H. Rothman, and S. Zaleski, *Modelling water flow in unsaturated porous media by interacting lattice gases–cellular automata: I. evaporation.*, submitted to Water Resources Research (1992).

[47] Y. H. Qian, D. d'Humières, and P. Lallemand, *Lattice BGK models for Navier-Stokes equation*, Europhys. Letters **17** (1992), 479–484.

[48] Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics*, Mc Graw - Hill.

[49] Jean-Pierre Rivet, Michel Hénon, Uriel Frisch, and Dominique d'Humières, *Simulating fully three-dimensional external flow by lattice gas methods,*, Europhys. Letters **7** (1988), 231–236.

[50] Y. Rocard, *Thermodynamique*, Masson, Paris, 1952.

[51] D. H Rothman, *Simple models of complex fluids*, Microscopic simulations of complex hydrodynamics (M. Mareschal and B. Holian, eds.), Plenum Press, 1992, pp. 221–238.

[52] Daniel H. Rothman and Stéphane Zaleski, *Spinodal decomposition in a lattice-gas automaton*, Journal de Physique - France **50** (1989), 2161–2174.

[53] D.H Rothman, *Cellular automaton fluids: a model for flow in porous media*, Geophysics **53** (1988), 509–518.

[54] D.H Rothman and J. M. Keller, *Immiscible cellular-automaton fluids*, Journal of Statistical Physics **52** (1988), 1119–1127.

[55] Rowlinson and Widom, *Molecular theory of capillarity*, Clarendon Press, Oxford, 1982.

[56] T. M. Shaw, *Drying as an immiscible displacement process with fluid counterflow*, Physical Review Letters **59** (1987), 1671.

[57] J. A. Somers and P. C. Rem, *Analysis of surface tension in two-phase lattice gases*, Physica D **47** (1991), 39–46.

[58] J. A. Somers and P. C. Rem, *Obtaining numerical results from the 3D FCHC-lattice gas*, Lecture Notes in Physics **398** (1992), 59–78.

[59] Pierre Wiltzius and Andrew Cumming, *Domain growth and wetting in polymer mixtures*, Physical Review Letters **66** (1991), 3000–3003.

[60] Gianluigi Zanetti, *Counting hydrodynamic modes in lattice gas automata models*, Physica **D 47** (1991), 30–35.