Unités

Le code issu de l'algorithme Lattice-Boltzmann a naturellement besoin de paramètres physiques pour fixer les grandeurs du réseau telles que les pas de temps Δt et de longueur Δx.

En premier lieu, le pas géométrique est donné par la longueur de Bjerrum ; par exemple, si on veut simuler de l'eau à température ambiante ($L_B = 0,7\,\mathrm{nm}$) et que nous fixons en unité du réseau $L_B = 0.4\,\Delta x$, le pas du réseau est alors de $1.75\,\mathrm{nm}$.

$$L_B = 0,7\,\mathrm{nm} = \mathrm{bjl}\,\Delta x$$
$$\mathrm{bjl} = 0.4 \;\Rightarrow\; \Delta x = 1.75\,\mathrm{nm}\;.$$

Autrement dit, c'est le rapport entre la longueur de Bjerrum donnée en unité réelle et en unité du réseau qui fixe le pas du réseau.
Le pas de temps est quant à lui déjà fixé par Δx ; la viscosité cinématique de la simulation étant celle de l'eau ($\nu = 10^{-6}\,\mathrm{m}^2.\mathrm{s}^{-1}$) qui vaut $\frac{1}{6}\frac{\Delta x^2}{\Delta t}$ en unité du réseau, on a donc $\Delta t = 0.51\,\mathrm{ps}$.

$$\nu = 10^{-6}\,\mathrm{m}^2.\mathrm{s}^{-1} = \frac{1}{6}\frac{\Delta x^2}{\Delta t}$$
$$\Rightarrow\; \Delta t = 0.51\,\mathrm{ps}\;.$$

Maintenant Δx et Δt sont en mètres et en secondes. L'unité de masse du réseau m est donnée par la relation entre la vitesse du son dans le fluide c_s et la température : $c_s^2 = \frac{1}{\beta m} = \frac{\Delta x^2}{3\Delta t^2}$. β étant égal à 3 on a $m = 1,06.\,10^{-27}\,\mathrm{kg}$.

$$c_s^2 = \frac{1}{3m} = \frac{\Delta x^2}{3\Delta t^2}$$
$$\Rightarrow\; m = 1,06.\,10^{-27}\,\mathrm{kg}\;.$$

Ainsi, pour simuler de l'eau la densité massique doit être fixé à 5070 en unité du réseau, $d = 5070\,\frac{m}{\Delta x^3} = 10^3\,\mathrm{kg.m}^{-3}$.

$$d = 10^3\,\mathrm{kg.m}^{-3} = \mathrm{rho\_0}\,\frac{m}{\Delta x^3}$$
$$\Rightarrow\; \mathrm{rho\_0} = 5070\;.$$

Il est possible d'ajouter des forces volumiques et un champ électrique s'exerçant sur le fluide dans la simulation.
Par force volumique, on sous-entend ici un gradient de pression dans la direction y (par exemple). On fixe sa valeur par le biais du paramètre fv :

$$-\nabla_y P = \text{fv}\,\frac{m}{\Delta x^2 \Delta t^2}\ .$$

La valeur du champ électrique est fixée par le paramètre elec_slope de cette manière :

$$E_y = -\frac{\text{elec\_slope}}{\beta e \Delta x} = -\frac{\text{elec\_slope}}{3}\,\frac{m\Delta x}{e\Delta t^2}\ .$$

La composition du fluide en ions est déterminée par sigma et debye_l ; une valeur négative de debye_l signifie qu'une seule sorte d'ion est présent (sans sel ajouté), la charge des contre-ions est déterminée par le signe de sigma.
debye_l n'est pas une longueur de Debye totale, ce paramètre indique uniquement la concentration en sel ajouté :

$$\rho_{sel} = \frac{1}{8\pi\ \text{bjl debye\_l}^2}\,\frac{1}{N_a \Delta x^3}$$

en mol.m^{-3}.
sigma est le nombre de charges à répartir sur les noeuds solides ; soit ceux voisins d'un noeud fluide (répartition surfacique), soit tout les noeuds solides (répartition volumique). Dans le cas d'un cylindre de rayon $R\Delta x$ le long de l'axe y avec une répartition surfacique des charges on a

$$\sigma = \frac{\text{sigma}}{2\pi R L y}\,\frac{1}{\Delta x^2}$$

en e.m^2 et avec $Ly\Delta x$ la longueur de la boite de simulation. On peut maintenant connaître la concentration en contre-ions $\rho_{\text{c.-ions}}$. toujours en géométrie cylindrique, le nombre de charges à compenser étant de $2\pi R L_y|\sigma|$ et le nombre de contre-ions de $L_y \pi R^2 \rho_{\text{c.-ions}}$ on a

$$\rho_{\text{c.-ions}} = \frac{2|\sigma|}{R} = \frac{|\text{sigma}|}{\pi R^2 L_y}$$

en unité du réseau (Δx^{-3}). Dans le cas ou la charge de surface est négative la concentration en cations est donnée (en Δx^{-3}) par

$$\rho_+ = \ \rho_{\text{sel}} + \rho_{\text{c.-ions}} = \frac{1}{8\pi\ \text{bjl debye\_l}^2} + \frac{|\text{sigma}|}{\pi R^2 L_y}$$