

Méthode de Lattice Boltzmann appliquée à un problème convectif avec variations des propriétés du fluide avec la température

Florian DUGAST, Yilin FAN, Christophe JOSSET, Lingai LUO*,

Laboratoire de Thermocinétique de Nantes
Rue Christian Pauc, BP 50609, 44306 Nantes
*auteur correspondant : lingai.luo@univ-nantes.fr

Résumé - La méthode de Lattice Boltzmann (LBM) est utilisée pour la résolution numérique des transferts de masse et de chaleur. Un point clé de cette méthode est la définition d'un temps de relaxation utilisé pour prendre en compte les collisions entre les particules. Ce paramètre, lié aux propriétés physiques du fluide (viscosité, diffusivité thermique), est considéré constant au cours de la simulation alors que ces mêmes propriétés physiques peuvent évoluer pour un problème non isotherme. Notre étude porte donc sur la prise en compte de ces variations avec la LBM.

Nomenclature

f, g	fonctions de distribution	r	relatif aux variables réelles
t	temps	<i>Symboles grecs</i>	
c	vecteur vitesse microscopique	Ω	opérateur de collision
x	vecteur position	α	direction
u	vecteur vitesse macroscopique	ρ	densité macroscopique
T	Température	τ	temps de relaxation pour la fonction f
p	pression	τ_t	temps de relaxation pour la fonction g
c_s	vitesse du son dans le réseau	ν	viscosité
w_α	pondération dans la direction α	κ	diffusivité thermique
<i>Indices et exposants</i>			
eq	équilibre		

1. Introduction

La résolution numérique des problèmes convectifs est un enjeu majeur dans la conception et l'optimisation des échangeurs de chaleur. Les transferts de masse et de chaleur sont souvent calculés avec les équations de conservation de Navier-Stokes (masse, quantité de mouvement et énergie). Cependant la méthode *gaz sur réseau* ou plus communément *Lattice Boltzmann* (LB) est une alternative innovante et intéressante à cette méthode classique de par sa formulation explicite et hautement parallélisable [1]. Les premiers modèles de Lattice Boltzmann étaient utilisés pour la résolution du calcul fluide uniquement. Ensuite, des modèles pour prendre en compte la température ont été proposés. Les premières approches ajoutaient des directions de vitesse pour prendre en compte la température [2] mais cela entraînait des instabilités numériques donc il a été développé des méthodes avec l'ajout d'une seconde fonction de distribution, similaire à f pour caractériser le champ de température. Certains de ces derniers modèles négligent la dissipation visqueuse [3], [4] et d'autres la prennent en compte [5], [6], [7] mais avec une complexification (ajout de termes supplémentaires à l'équation (1) et calcul de gradients de vitesse ou de pression) qui va à l'encontre de la simplicité de la méthode Lattice Boltzmann et qui peut entraîner une surcharge de calcul importante. L'objectif de ce travail est donc de quantifier

l'influence de la prise en compte des propriétés variables d'un fluide avec la température et de proposer une méthode simple pour prendre en compte ces variations. Pour cela, nous allons modifier le temps de relaxation utilisé pour prendre en compte les collisions entre les particules. Ce paramètre, lié aux propriétés physiques du fluide (viscosité, diffusivité thermique), est le plus souvent considéré constant au cours de la simulation alors que ces mêmes propriétés physiques peuvent évoluer pour un problème non isotherme.

2. Méthode de Lattice Boltzmann

2.1. Equation de Boltzmann

Dans la méthode de Lattice Boltzmann, le fluide n'est pas considéré comme une matière continue mais plutôt comme un ensemble discret de particules fictives qui interagissent entre elles. L'équation de Boltzmann issue de la théorie cinétique est utilisée pour décrire le comportement macroscopique du fluide au travers d'une fonction de distribution $f = f(x, t, c)$ telle que [8], [9] :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \cdot \nabla f = \Omega(f) \quad (1)$$

La fonction f représente alors la probabilité qu'une particule se trouve à la position x , au temps t et avec la vitesse c . L'opérateur Ω prend en compte les collisions qui ont lieu entre les particules. Un opérateur de collision simple a été introduit par Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) [10] :

$$\Omega = -\frac{1}{\tau}[f - f^{eq}] \quad (2)$$

L'équation (1) est une équation continue et il est donc nécessaire de la discrétiser. Le domaine de calcul comprend alors un nombre discret de particules associées à une fonction f et les directions dans lesquelles les particules peuvent se déplacer sont également limitées. Pour des problèmes en 2 dimensions, la discrétisation de vitesses la plus utilisée est appelée D2Q9 pour 9 directions différentes.

La forme discrétisée de l'équation de Boltzmann est donnée par :

$$f_\alpha(x + c_\alpha \delta x, t + \delta t) = f_\alpha(x, t) - \frac{1}{\tau}[f_\alpha(x, t) - f_\alpha^{eq}(x, t)] \quad (3)$$

Où c_α représente les vecteurs vitesse discrets.

Dans (3), le temps de relaxation τ est lié à la viscosité du fluide par la relation :

$$\nu = \frac{\tau - 0.5}{3} \quad (4)$$

Dans la méthode de Lattice Boltzmann, la fonction à l'équilibre f^{eq} de l'opérateur de collision est obtenue par un développement de Taylor à l'ordre 2 de la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann [11] :

$$f_\alpha^{eq} = w_\alpha \rho \left[1 + 3(c_\alpha u) + \frac{9}{2}(c_\alpha u)^2 - \frac{3}{2}(u^2) \right] \quad (5)$$

Comme l'équation précédente l'indique, il y a une fonction à l'équilibre pour chaque direction de vitesse. Le facteur w_α pondère l'expression en fonction des directions et la somme des facteurs de pondérations est égale à 1.

2.2. Calcul du champ de température

La fonction de distribution f est utilisée pour le calcul du champ de vitesses. Le calcul du champ de température nécessite l'introduction d'une seconde fonction de distribution, g . Celle-ci est similaire à la fonction f à l'exception du terme à l'équilibre et du nombre de directions de discrétisation [4]. En effet, seulement 5 directions sont nécessaires pour le calcul de la température (une immobile et 4 dans les directions cardinales Nord, Sud, Est, Ouest). Les équations relatives à g sont :

$$g_\alpha(x + c_\alpha \delta x, t + \delta t) = g_\alpha(x, t) - \frac{1}{\tau_t} [g_\alpha(x, t) - g_\alpha^{eq}(x, t)] \quad (6)$$

$$g_\alpha^{eq} = w_\alpha T [1 + 3(c_\alpha u)] \quad (7)$$

Le temps de relaxation τ_t de la fonction de distribution g utilisée pour le calcul de la température est liée à la diffusivité thermique du fluide et les grandeurs ν et κ utilisées pour le calcul des temps de relaxation fluide et thermique sont liés par le nombre de Prandtl du fluide :

$$\kappa = \frac{\tau_t - 0.5}{3} \quad (8)$$

$$Pr = \frac{\nu}{\kappa} \quad (9)$$

Dans les équations (5) et (7) ρ , u et T représentent respectivement la densité, la vitesse du fluide et la température. Ces grandeurs sont obtenues par les moments des fonctions f et g :

$$\rho(x, t) = \sum_{\alpha=0}^8 f_\alpha(x, t) \quad (10)$$

$$\rho u(x, t) = \sum_{\alpha=0}^8 e_\alpha f_\alpha(x, t) \quad (11)$$

$$T(x, t) = \sum_{\alpha=0}^4 g_\alpha(x, t) \quad (12)$$

Il est également possible de calculer la pression avec l'équation suivante :

$$p(x, t) = c_s^2 \rho(x, t) \quad (13)$$

La densité et la vitesse obtenues sont des grandeurs macroscopiques mais elles sont calculées en unité de réseau donc cela ne représente pas les valeurs réelles de densité et de vitesse. Le lien entre les variables du réseau et les variables réelles sera évoqué par la suite. Dans l'équation (13), c_s représente la vitesse du son : $c_s = 1/\sqrt{3}$. Une des hypothèses fortes mises en jeu dans la méthode de Lattice Boltzmann est que les vitesses calculées doivent être bien inférieures à la vitesse du son.

Les pas d'espace et de temps (δx et δy) sont choisis égaux à 1. L'étape de streaming est illustrée par la Figure 1. Sur ce schéma, on voit qu'aux frontières du domaine, les fonctions de distribution dans certaines directions vont être inconnues. Le calcul de ces inconnues permet d'imposer les conditions aux limites souhaitées (vitesse en entrée, paroi, température ou flux de chaleur). L'implémentation est décrite dans [12] pour les conditions aux limites concernant le fluide. Pour imposer un flux de chaleur sur la paroi haute du domaine, l'inconnue est la distribution g dans la direction 4 donc nous utilisons le calcul suivant au noeud n (Figure 2) :

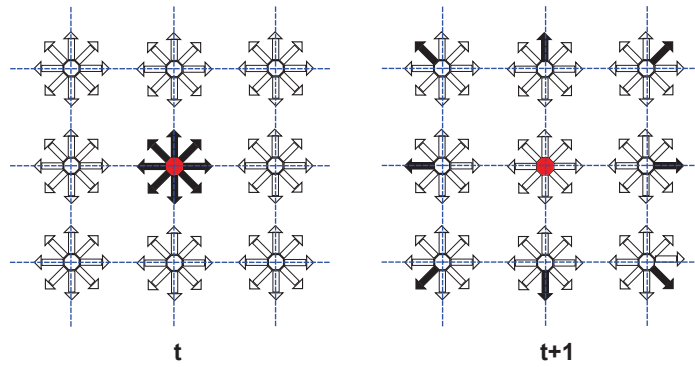


Figure 1 Etape de streaming

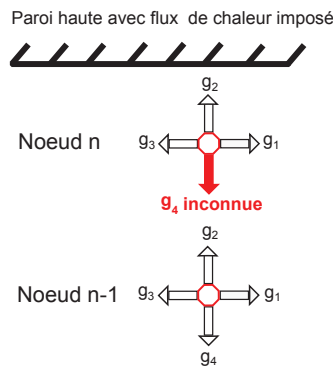


Figure 2 Condition de flux

$$g_4^n = g_4^{n-1} - w_4 * q \quad \text{avec} \quad q = \frac{-\phi * e}{k} \quad (14)$$

Dans cette équation, ϕ est le flux de chaleur en W/m^2 , e est la distance entre les deux éléments n et $n - 1$ en m et k est la conductivité thermique du matériau en $W/(m.K)$.

La méthode de Lattice Boltzmann simule un régime transitoire car les particules se déplacent de proche en proche jusqu'à atteindre un état d'équilibre. Pour aboutir au régime permanent, il est donc nécessaire d'effectuer un grand nombre d'itérations, qui comprennent chacune une étape de collision, un déplacement des particules et l'application des conditions aux limites.

3. Prise en compte de la variation des propriétés du fluide avec la température

La problématique à résoudre est que les temps de relaxation des fonctions f et g sont normalement fixés au début de la simulation et restent le plus souvent constants alors qu'ils sont liés notamment à la viscosité. Or cette grandeur peut évoluer avec la température pour un problème non isotherme, ce qui peut entraîner des écarts importants entre la simulation numérique et la réalité. Dans la littérature, ce phénomène est soit négligé, soit pris en compte mais de manière complexe, ce qui nuit à la simplicité et l'efficacité de la méthode de Lattice Boltzmann. Nous proposons donc de prendre en compte les variations des propriétés du fluide avec la température dans la méthode LB avec une démarche simple pour améliorer la précision de ce modèle sans l'alourdir. Connaissant la viscosité réelle du fluide considéré en fonction de la température (tables thermodynamiques), la viscosité est écrite comme une fonction de la température sur

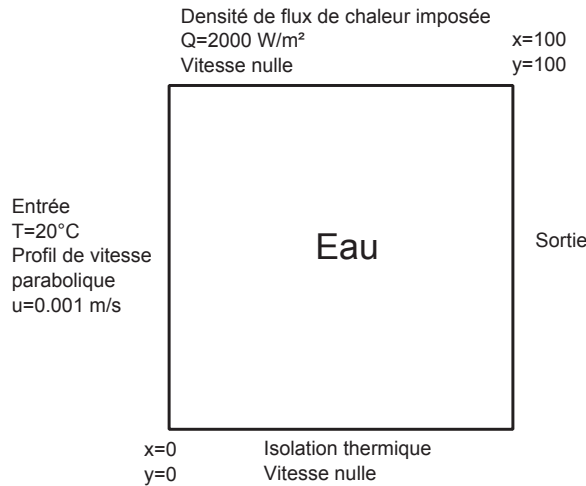


Figure 3 Configuration du problème

un intervalle donné. Lors de l'étape de collision de LBM, la température est calculée en chaque point du système avec (12), ce qui permet de calculer la viscosité avec la fonction précédemment explicitée. Ensuite les temps de relaxation sont calculés avec la nouvelle viscosité en chaque point, par rapport à la viscosité et aux temps de relaxation initiaux. Par exemple, si par rapport à la température initiale, la viscosité réelle est divisée par 2, la viscosité du réseau est également divisée par 2, ce qui entraîne une modification des temps de relaxation.

3.1. Configuration du problème

Le cas utilisé pour valider cette démarche est un écoulement 2D dans un canal et le fluide utilisé est de l'eau. Le domaine est carré et mesure 100 mm de côté. Les parois sont situées en haut et en bas. Le fluide entre (à gauche) avec un profil de vitesse parabolique et une vitesse de 0.001 m/s. Un flux de chaleur de 2000 W/m^2 est imposé sur la paroi haute du domaine.

Avant de lancer le calcul, il est important d'avoir une idée des températures de borne que pourrait atteindre le système étudié car une modification trop importante des temps de relaxation pourrait entraîner des instabilités numériques et entraîner une divergence du calcul. Nous avons évoqué auparavant que τ ne devait pas être inférieur à 0.5. Par exemple, si en initialisation la température est de 20°C et que τ est égal à 1, une variation trop importante de la viscosité pourrait avoir pour conséquence la diminution de τ jusqu'à une valeur proche de 0.5, et à ce moment là, la méthode serait en défaut.

3.2. Lien entre variables du réseau Lattice Boltzmann et variables réelles

Ce lien est effectué au travers du temps de relaxation τ de l'opérateur de collision.

La viscosité ne pouvant pas être nulle ou négative, τ doit être supérieur à 0.5. Le calcul peut devenir instable quand τ s'approche de cette valeur limite donc en pratique, il est préférable de choisir $\tau \geq 0.6$. Comme τ et ν sont directement liés, cela restreint le choix de la viscosité. Par exemple pour le cas étudié, il n'est pas possible de choisir une viscosité pour l'eau de $1\text{e-}6$ car τ serait de 0.500003. Il faut donc dans ce cas choisir une viscosité pour la méthode LB différente de la viscosité réelle et le lien entre ces deux grandeurs est réalisé via le nombre de Reynolds.

$$Re_{LBM} = 100 = \frac{uD}{\nu} = \frac{0.04 * 200}{0.08} \quad (15)$$

$$Re_{Comsol} = 100 = \frac{u_r D_r}{\nu_r} = \frac{0.001 * 0.1}{1e - 6} \quad (16)$$

Dans le cas étudié, D_r correspond à la largeur de l'écoulement donc D correspond au nombre d'éléments situés dans la largeur de l'écoulement.

3.3. Résultats obtenus

Dans un premier temps, la méthode de Lattice Boltzmann utilisée (LB) est comparée avec Comsol Multiphysics (Eléments Finis), utilisé comme référence ici. Ensuite, deux simulations sont réalisées : l'une avec des propriétés de l'eau constantes et l'autre avec des propriétés variables avec les deux outils numériques. Pour la méthode de Lattice Boltzmann, le domaine comporte 40 000 éléments (200*200) et la convergence est obtenue quand la variation maximale du champ de température entre 2 itérations est inférieure à $1e-4$ degré. Cela demande environ 100 000 itérations pour un temps de calcul de 40 secondes. Pour Comsol Multiphysics, le maillage comporte 11 000 éléments et la tolérance utilisée pour la convergence est de $1e-4$. Le temps de calcul est de 25 secondes. Les maillages des deux outils numériques permettent d'obtenir une stabilité des résultats. Les Figures 4 et 5 représentent respectivement les champs de vitesse et de température obtenus avec la méthode de Lattice Boltzmann (ces champs sont similaires à ceux obtenus avec Comsol). Nous observons bien des variations de température plus importantes au niveau de la paroi haute, où le flux de chaleur est présent. Les différences entre les simulations à propriétés constantes ou variables sont peu visibles avec ce type de graphique donc pour une comparaison plus fine, les Figures 6 et 7 présentent les mesures des points situés respectivement sur les frontières droite et haute du domaine. A noter sur la Figure 6, l'échelle des abscisses a été réduite pour plus de visibilité car il n'y avait pas de variation de température dans l'intervalle masqué (de 0 à 70 mm). Nous observons un écart de 0.3 % entre les deux méthodes numériques ce qui permet de valider l'utilisation de la méthode de Lattice Boltzmann. Ensuite, il y a un écart de 2°C entre les simulations à propriétés constantes et variables.

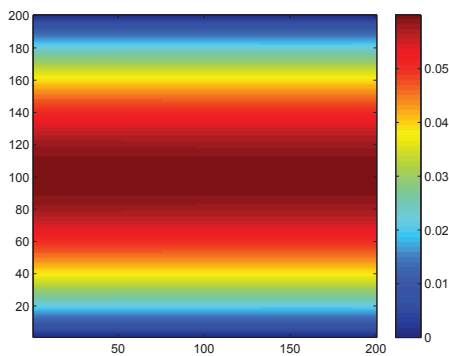


Figure 4 *Champ de vitesse*

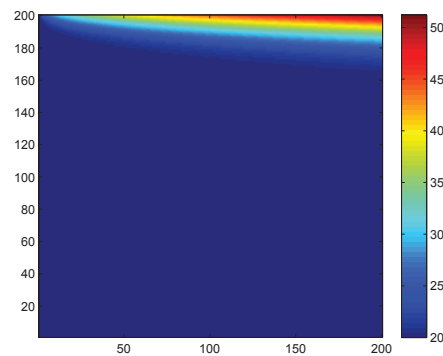


Figure 5 *Champ de température*

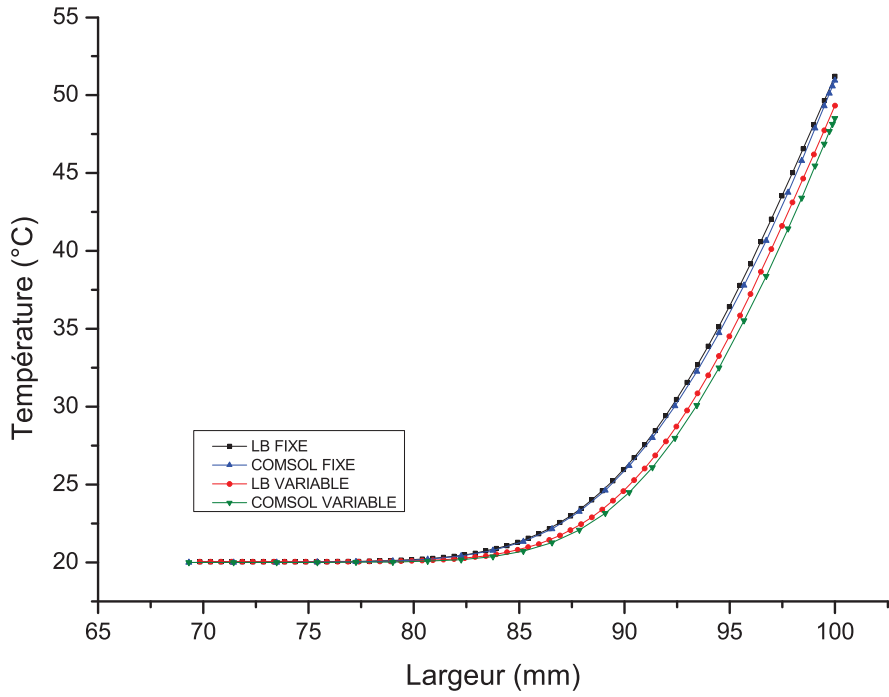


Figure 6 Comparaison du champ de température (vertical)

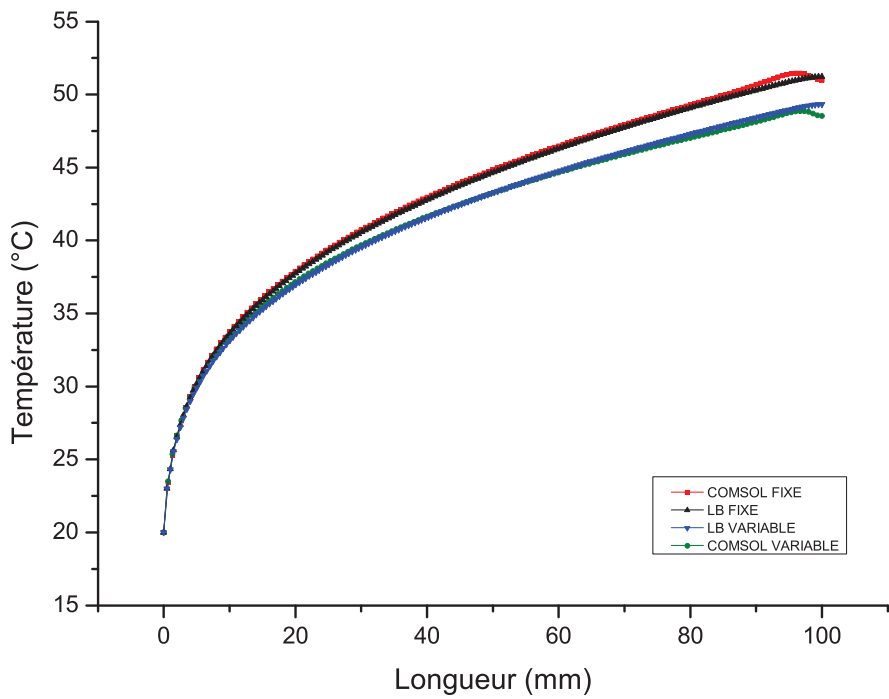


Figure 7 Comparaison du champ de température (horizontal)

4. Conclusion

Les faibles écarts entre la méthode de Lattice Boltzmann et Comsol permettent de valider le modèle proposé pour un écoulement fluide non isotherme. L'amélioration proposée qui consiste à prendre en compte la variation de la viscosité du fluide avec la température avec la méthode de Lattice Boltzmann est assez simple à mettre en pratique et conduit à un écart de température assez important par rapport à une simulation à viscosité constante donc cette différence souligne l'intérêt de prendre en compte les propriétés variables du fluide.

Références

- [1] Christian Obrecht, Frédéric Kuznik, Bernard Tourancheau, and Jean-Jacques Roux. A new approach to the lattice boltzmann method for graphics processing units. *Computers & Mathematics with Applications*, 61(12) :3628–3638, 2011.
- [2] F. Alexander, S. Chen, and J. Sterling. Lattice Boltzmann thermohydrodynamics. *Physical Review E*, 47(4) :R2249–R2252, April 1993.
- [3] Y. Peng, C. Shu, and Y. Chew. Simplified thermal lattice Boltzmann model for incompressible thermal flows. *Physical Review E*, 68(2) :026701, August 2003.
- [4] Y.Y. Yan and Y.Q. Zu. Numerical simulation of heat transfer and fluid flow past a rotating isothermal cylinder - a lbm approach. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51 :2519–2536, 2008.
- [5] Xiaoyi He, Shiyi Chen, and Gary D. Doolen. A Novel Thermal Model for the Lattice Boltzmann Method in Incompressible Limit. *Journal of Computational Physics*, 146(1) :282–300, October 1998.
- [6] Yong Shi, T. Zhao, and Z. Guo. Thermal lattice Bhatnagar-Gross-Krook model for flows with viscous heat dissipation in the incompressible limit. *Physical Review E*, 70(6) :066310, December 2004.
- [7] Jinku Wang, Moran Wang, and Zhixin Li. A lattice Boltzmann algorithm for fluid solid conjugate heat transfer. *International Journal of Thermal Sciences*, 46(3) :228–234, March 2007.
- [8] Dieter A. Wolf-Gladrow. *Lattice Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*, volume 1725 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2000.
- [9] Sauro Succi. *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*, volume 222. Oxford University Press, 2001.
- [10] P. Bhatnagar, E. Gross, and M. Krook. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Physical Review*, 94(3) :511–525, May 1954.
- [11] Limin Wang, Yilin Fan, and Lingai Luo. Heuristic optimality criterion algorithm for shape design of fluid flow. *Journal of Computational Physics*, 229(20) :8031–8044, October 2010.
- [12] Qisu Zou and Xiaoyi He. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Physics of Fluids*, 9 :1591, 1997.