

Etude numérique de la fusion/solidification par un couplage hybride Boltzmann/Volumes Finis

Soumia ADDAKIRI^{1,2}, El Alami SEMMA^{1*}, Mohammed EL GANAOU², Bernard PATEYRON⁽²⁾, Rachid BENNACER⁽³⁾

¹ Université Hassan I, laboratoire de mécanique, FST de Settat B.P. 577, Settat, Maroc

² Université de Limoges/CNRS, SPCTS, UMR CNRS 6638, 123, Albert-Thomas, 87000 Limoges, France.

⁽³⁾ LEEVAM, Université de Cergy Pontoise, 5 mail Gay Lussac, Neuville sur Oise 95031

*(auteur correspondant : semmaalama@yahoo.fr)

Résumé

On se propose de développer un couplage hybride de la méthode de Gaz sur Réseau ou lattice Boltzmann (LBM) et de la méthode des volumes finis (VF) pour étudier les problèmes de changement de phase solide/liquide. La méthode LBM est utilisée pour déterminer le champ des vitesses tandis que la méthode des volumes finis est appliquée à la détermination du champ de température. Ce modèle est validé en comparaison avec les résultats de test concernant une cavité carrée différentiellement chauffée sans changement de phase puis pour la fusion du Gallium dans une cavité allongée.

Nomenclature

\mathbf{u}	vitesse, ms^{-1}
T	température, K
P	pression, Pa
t	temps, s
f^{eq}	fonction de distribution à l'équilibre
f	fonction de distribution
c_s	vitesse du son sur réseau lattice
i	indice du réseau
F	force externe
Nu	nombre de Nusselt
Ra	nombre de Rayleigh
K	perméabilité du milieu poreux
L_f	chaleur latente

Symboles grecs

τ	temps de relaxation
ω	coefficient de pondération
ν	viscosité cinématique
δt	pas de temps
δx	constante du réseau
Ω	opérateur de collision
ρ	masse volumique
α	diffusivité thermique

1. Introduction

Récemment, la méthode de Gaz sur réseau ou Lattice Boltzmann (LB) a connu un progrès remarquable et est souvent présentée comme une alternative prometteuse aux méthodes de discrétisation classiques pour simuler des phénomènes complexes dans divers champs d'application. Entre le niveau de description microscopique associé aux équations sur les trajectoires des particules et le niveau de description macroscopique associé aux équations d'hydrodynamique, la méthode LB fournit un niveau de description intermédiaire ou mésoscopique du fluide. Historiquement, l'approche LB est développée à partir des automates cellulaires bien qu'elle puisse être dérivée directement de l'équation simplifiée de Boltzmann. Cette méthode mésoscopique est prouvée efficace dans le domaine des transferts dans des

milieux continus [1-4]. Elle a attiré l'attention des mécaniciens de fluide dans la simulation des écoulements dans des géométries complexes et en particulier les milieux poreux [5-6].

L'évolution du système se fait sur des sites en deux étapes : collision et advection ; à chaque instant, et sur chaque site les particules se heurtent avec une vitesse discrète, ce qu'on appelle phase de *propagation* et après s'éparpillent suite à un nombre de règles qui conservent exactement et localement la masse, la quantité de mouvement et l'énergie, c'est ce qu'on appelle phase de *collision*.

Dans ce papier, nous proposons un couplage hybride associant à la fois la méthode LB avec la méthode de volumes finis (VF). Ce couplage, nous permettra d'une part de réduire le coût en temps de calcul engendré par une double population et d'autre part de profiter de la souplesse fournie par les méthodes classiques.

2. Modèle mathématique

2.1. La méthode LBM pour le champ dynamique

L'équation de lattice Boltzmann dérivée de l'ensemble moyen gouvernant le modèle carré FHP (Frisch-Hasslacher-Pomeau) est donnée par :

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i \quad (1)$$

avec f_i la fonction de distribution définie pour un ensemble de particule de vitesse \mathbf{c}_i . Le terme de collision Ω_i représente le taux de changement après collision.

L'application de l'approximation simple du temps de relaxation sur l'équation de lattice Boltzmann mène à l'équation de lattice BGK :

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(eq)}) \quad (2)$$

Avec τ le temps de relaxation et f_i^{eq} la fonction de distribution à l'équilibre dépendant des propriétés hydrodynamiques locales. La méthode LB est ainsi complètement définie par le choix de la fonction de distribution à l'équilibre [6], qui est relative au modèle choisi. Pour le modèle carré FHP dénoté par D2Q9, (figure 1), les vitesses discrètes du modèle sont définies comme suit :

$$\begin{aligned} c_0 &= (0,0) \\ c_{2k+1} &= c \left[\cos(k \frac{\pi}{2}), \sin(k \frac{\pi}{2}) \right] \\ c_{2k} &= \sqrt{2}c \left[\cos((2k-1) \frac{\pi}{4}), \sin((2k-1) \frac{\pi}{4}) \right] \end{aligned} \quad (3)$$

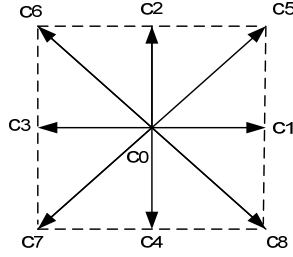


Figure 1 : Méthode LB : modèle discret D2Q9

Pour k variant de 1 à 4, et $c = \frac{\delta x}{\delta t}$; δx et δt représentent la constante lattice et le pas de temps lattice, respectivement.

La fonction de distribution à l'équilibre est explicitée sous la forme suivante :

$$f_i^{eq} = \omega_i \rho \left[1 + 3 \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{c^4} \right] \quad (4)$$

Les quantités hydrodynamiques macroscopiques sont déterminées à travers les moments dans l'espace de phase :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{x}, t) \quad (5)$$

$$\rho \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_i \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}, t) \quad (6)$$

La procédure de Chapman - Enskog pour la fonction de distribution permet de retrouver les équations de Navier Stokes.

La viscosité du fluide est reliée au temps de relaxation par la relation :

$$\nu = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \delta t \quad (7)$$

2.2. La méthode des volumes finis (VF)

Sans besoin particulier de détailler la méthode des Volumes finis, l'exposé se limite ici à quelques précisions. Les termes diffusifs sont discrétisés à l'aide d'un schéma centré et un schéma Quick associé à un limiteur de flux de type ULTIMATE [7-8] est utilisé pour les termes convectifs.

Un schéma d'Euler implicite d'ordre 2 est utilisé pour la discrétisation temporelle. Cette équation de transport associée à des conditions aux limites adéquates est réduite alors à un système linéaire résolu par l'algorithme classique de Thomas pour les systèmes tridiagonaux (TDMA).

2.3. Traitement du changement de phase

Pour le changement de phase, une formulation enthalpique est utilisée [9, 10]. La fusion prend place dans un intervalle de température autour de la température de fusion $T_m \pm \varepsilon$ (typiquement $\varepsilon = 5\%$ de ΔT). Une fraction fluide est introduite pour désigner la zone de changement de phase et distinguer ainsi les deux phases solide et liquide. Elle est définie par :

$$\begin{aligned}
f_i &= 1 && \text{pour } T > T_f + \varepsilon \\
f_i &= 0 && \text{pour } T < T_f - \varepsilon \\
f_i &= (T - T_f + \varepsilon) / 2\varepsilon && \text{pour } T_f - \varepsilon \leq T \leq T_f + \varepsilon
\end{aligned} \tag{8}$$

Thermiquement, l'effet de la chaleur latente est introduit dans l'équation d'énergie via le terme source

$$S = -L_f \frac{\partial f_l}{\partial t} \tag{9}$$

Dynamiquement, la zone de changement de phase est traitée comme milieu poreux. L'écoulement dans la zone poreuse dépend de sa perméabilité. La méthode LB est introduite en supposant que la population de la densité est uniformément distribuée dans chaque nœud. A chaque pas de temps, une particule se déplace le long d'une distance de 1 ou $\sqrt{2}$ de l'espace lattice. Si le nœud est totalement solide, $f_\alpha^*(\mathbf{x}, t)$ est complètement réfléchi et on a $f_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t + \Delta t)$. Si le nœud contient une fraction liquide non nulle, seulement une partie de $f_i^*(\mathbf{x}, t)$ se propage et l'autre partie retourne à la cellule initiale.

3. Résultats et discussion

Pour valider notre code numérique basé sur le couplage de la méthode LB avec la méthode de volumes finis, nous avons considéré le cas test classique de la cavité différentiellement chauffée contenant un fluide ayant un nombre de Prandtl ($Pr=0.71$). Le seul terme moteur dans ce problème est lié à la poussée d'Archimède. L'étude a été effectuée pour des valeurs du nombre de Rayleigh allant de $Ra=10^3$ à $Ra=10^6$. Les valeurs numériques sont en bon accord avec les résultats de référence [11]. Pour les faibles Ra , le transfert thermique est dominé par la diffusion thermique. Lorsque Ra devient important, le transfert par convection domine les effets diffusifs et les lignes isothermes se déforment jusqu'à présenter une stratification thermique. Ces comportements physiques sont bien traduits par la résolution basée sur la méthode LB.

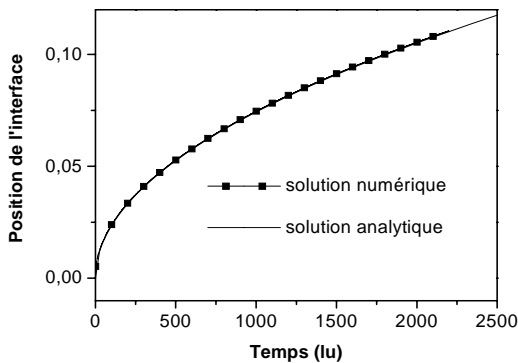


Figure 2. Comparaison des résultats numériques LBMV aux résultats analytiques

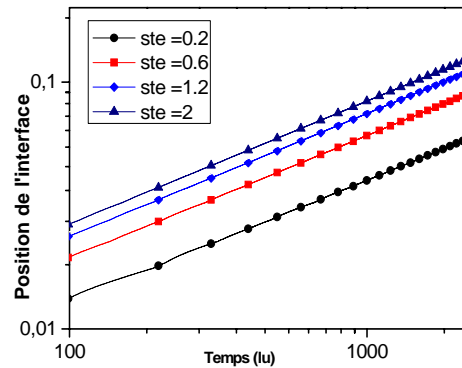


Figure 3. Effet du nombre de Stefan sur la progression du front de solidification

La présente méthode présente donc de bonnes aptitudes à simuler avec une bonne précision les phénomènes thermoconvectifs. On s'intéresse à présent au couplage avec le changement de phase solide/liquide. Le cas considéré est un choc thermique à la surface d'un liquide (présentant une solution analytique). Le domaine considéré est une cavité rectangulaire allongée horizontalement. Les parois sont toutes adiabatiques, sauf celle verticale où la

température est imposée. Une solution analytique [12] de l'évolution de la position du front de solidification en fonction du temps dans une cavité de longueur infinie est donnée par la relation :

$$X(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha t} \quad (10)$$

Où λ est une constante régie par l'équation algébrique suivante

$$\sqrt{\pi}\lambda e^{\lambda^2} = Ste \left[\frac{1}{\text{erf}(\lambda)} + \frac{\theta_F}{\text{erfc}(\lambda)} \right] \quad (11)$$

On a considéré une cavité rectangulaire de rapport de forme 0.04 remplie d'un matériau caractérisé par un nombre de Stefan $Ste=1,2$. La figure 2 montre une bonne concordance des résultats numériques (LBFVM) avec les estimations analytiques pour une valeur correspondante de λ ($\lambda=0,445$). L'erreur introduite par la considération d'une longueur finie de la cavité reste négligeable pour des positions de l'interface ne dépassant pas une limite maximale. Cette validation montre la capacité de la méthode à décrire avec précision l'évolution de l'interface solide/liquide en mode conductif.

Par la suite, on s'intéresse au couplage des phénomènes thermoconvectifs avec le changement de phase. En effet, nous considérons comme cas test (Benchmark) le problème basé sur l'expérience de Gau et Viskanta [13] souvent reprise en exercice numérique [14-16].

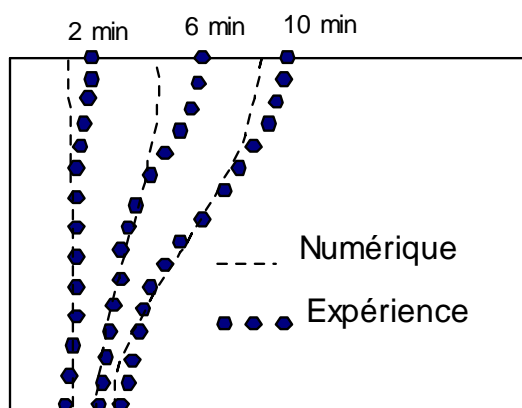


Figure 4. Profils comparés de l'interface solide/liquide

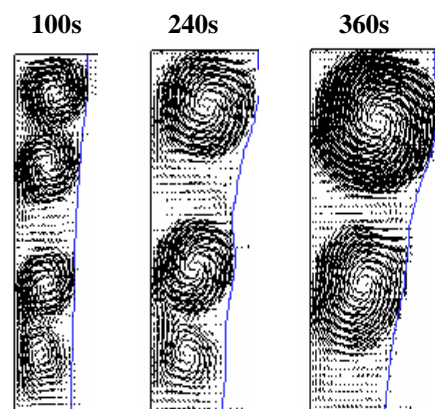


Figure 5. Champ de vitesses et interface en différents instants

Les résultats numériques en termes de structures d'écoulement et position de l'interface solide/liquide (figure 4 et 5) sont en bon accord avec les résultats de référence [13, 14]. En effet, au début de la fusion, il y a apparition d'une cellule d'écoulement de faible intensité pour les premiers instants ($t < 20s$). Par la suite et avec la progression de l'interface et l'augmentation du nombre de Rayleigh de la phase liquide, il y a bifurcation vers un régime multicellulaire (figure 5). Le principe LB permet une bonne description du mode d'écoulement et le couplage LB/VF assure une résolution efficace du couplage entre le champ thermique et dynamique en présence du changement de phase.

Conclusion

Ce travail présente le développement d'une méthode hybride associant la méthode de Lattice de Boltzmann et la méthode de volumes finis. Les résultats numériques montrent la capacité

de la présente méthode de décrire avec une précision acceptable le couplage des champs thermiques, dynamiques et les phénomènes de changement de phases. La méthode est à présent en cours d'extension pour étudier la cinétique de changement de phase solide/liquide dans des configurations de croissance cristalline complexes.

Références

- [1] S. Chen and G. D. Doolen, Lattice Boltzmann method for fluid flows, *Ann. Rev. Fluid Mech.* 30, pp. 329-364, 1998.
- [2] L.-S. Luo, The lattice-gas and lattice Boltzmann methods: Past, Present, and Future Proceedings of the International Conference on Applied Computational Fluid Dynamics, Beijing, China, pp. 52-83, 2000.
- [3] S. Succi, *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford Science Publications (2001).
- [4] R. Peyret, and T.D. Taylor, *Computational Methods for Fluid Flow*, Springer-Verlag, New York, 1983.
- [5] O. Dardi et J. McCloskey, Lattice Boltzmann scheme with real numbered solid density for the simulation of flow in porous media. *Phys. Rev. E* vol57 (1998) 4834-4837.
- [6] A. Dupuis, from a lattice Boltzmann model to a parallel and reusable implementation of a virtual river. Thèse soutenue à Genève en Suisse (2002)
- [7] B.P Leonard, "A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolation", *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 19, 59-98, (1979).
- [8] B.P. Leonard and S. Mokhtari, "Beyond first order upwinding: the ULTRA-SHARP alternative for non-oscillatory steady-state simulation of convection", *Int. J. Numerical Methods Eng.*, 30, 729-766 (1990).
- [9] M. El Ganaoui, A. Lamazouade, P. Bontoux and D. Morvan Computational solution for fluid flow under solid/liquid phase change conditions, *Int. J. Computers and Fluids*, vol.31, issues 4-7, pages 539-556, 2002.
- [10] E. A. Semma, M. El Ganaoui, V. Timchenko and E. Leonardi, Some Thermal Modulation Effects on Directional Solidification, *FDMP*, vol. 2, N° 3, pp. 191-202, (2006).
- [11] G. De Vahl Davis, Natural convection of air in a square cavity: a benchmark numerical solution, *Int. J. Numer. Fluid Meth. Fluids* 3 (1983).
- [12] M. N. Ozisik, *Heat Conduction*. New York: John Wiley, 1993.
- [13] C. Gau and R. Viskanta, Melting and solidification of a metal system in a rectangular cavity," *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 27, no. 1, pp. 113, 123, 1984.
- [14] F. Stella and M. Giangi, Melting of a pure metal on a vertical wall: Numerical simulation," *Numerical Heat Transfer A*, vol. 38, pp. 193 - 208, 2000.
- [15] T. A. Campbell and J. N. Koster, Visualization of liquid- solid interface morphologies in gallium subject to natural convection," *J. Crystal Growth*, vol. 140, pp. 414 - 425, 1994.
- [16] M. Lacroix and V. R. Voller, Finite difference solutions of solidification phase change problems: Transformed versus fixed grids," *Numerical Heat Transfer B*, vol. 17, pp. 25 - 41, 1990.