

Dispersion en milieu poreux : approche LBM des transferts dans les mousses métalliques

Yann JOBIC¹, Frédéric TOPIN¹, René OCCELLI¹

¹Laboratoire IUSTI, UMR 6695, Université de Provence, Technopôle de Château-Gombert, 5, rue Enrico Fermi – 13453 Marseille Cedex 13

Résumé - Les matériaux cellulaires à forte porosité sont de plus en plus utilisés dans de nombreux domaines industriels. Nous développons un module de calcul de résolution des transferts couplés aux écoulements tridimensionnels en géométrie complexe. Nous validons le code LBM (Lattice Boltzmann Method) sur plusieurs cas de référence. Nous déterminons de plus les lois d'écoulement, la conductivité effective et la dispersion de mousses par simulation directe sur la base de tomographie.

Nomenclature

Pe	Nombre de Peclet	τ_c	Temps de relaxation (énergie)
Re	Nombre de Reynolds	ξ	vecteur des vitesses de particules
ρ	Densité du fluide (kg/m ³)	\mathbf{x}	vecteur positions
u	Vitesse débitante (m/s)	t	temps (s).
τ	Temps de relaxation (fluide)		

1. Introduction

Dans de nombreuses applications émergentes, l'optimisation de la forme de la structure ainsi que son arrangement sont recherchés pour obtenir des jeux de propriétés choisies. Il est nécessaire de développer des simulations numériques précises et performantes afin de prédire les propriétés thermiques et d'écoulement à partir d'une description géométrique de la matrice solide. De plus, la majorité des applications concerne des problèmes à régime transitoire, nous avons donc choisi la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM : Lattice Boltzmann Method) [2], celle-ci étant intrinsèquement instationnaire. LBM est un schéma numérique pour la résolution des équations décrivant les écoulements et transferts associés. Au lieu de résoudre les équations de bilan pour les champs conservés, la méthode LBM capte l'évolution de la distribution de fonctions de « particules fluides » microscopiques. Originellement, seule la masse et la quantité de mouvement étaient prises en compte dans la méthode LBM (description d'écoulements) puis celle-ci a été étendue à la résolution de l'équation de l'énergie ou de transfert de masse. Celle-ci est effectuée soit en augmentant le nombre de vitesses discrètes soit en utilisant une population de particules supplémentaires par champ scalaire. Nous utilisons cette dernière méthode sur des géométries réelles obtenues à partir d'images microtomographiques [1]. Nous modélisons ainsi les transferts thermiques conjugués dans des mousses métalliques en vue de la prédiction des propriétés thermiques (conductivité, dispersion), d'échange et d'écoulement. Nous déterminons ces grandeurs macroscopiques à partir des champs calculés à l'échelle microscopique de pression, de température et de vitesse.

2. Modèle d'écoulement :

Nous résolvons l'équation cinétique pour la distribution de fonctions des vitesses de particules : $f(\mathbf{x}, \xi, t)$, les quantités macroscopiques (comme la densité massique ρ et la densité des moments $\rho \cdot \bar{u}$) sont déduits des moments d'ordre 1 de f . Un modèle cinétique populaire

adopté dans la littérature est l'approche à un seul temps de relaxation, aussi appelé modèle BGK (Bhatnagar Gross Krook) [2] :

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \xi_\alpha \cdot \nabla f_\alpha = -\frac{1}{\lambda} (f_\alpha - f_\alpha^{(eq)}) \quad (1)$$

Où $f_\alpha^{(eq)}$ est la distribution de fonctions à l'équilibre (la distribution de fonction de Maxwell-Boltzmann), et λ est le temps de relaxation. Pour résoudre numériquement f , l'équation (1) est d'abord discrétisée dans l'espace des vitesses avec un nombre fini de vitesses $\{\xi_\alpha\}$. Dans cette équation, $f_\alpha(x,t)$ est la distribution de fonctions associée à la $\alpha^{\text{ième}}$ vitesse discrète ξ_α et $f_\alpha^{(eq)}$ est la distribution de fonctions à l'équilibre correspondante. On a utilisé une discrétisation à 19 vitesses, parmi les 27 possibles, pour la simulation d'écoulements 3D. Celle-ci offre un bon compromis entre le temps de calcul et la précision. La géométrie correspondante est la figure 1. L'équation de la distribution à l'équilibre est alors de la forme suivante [3] :

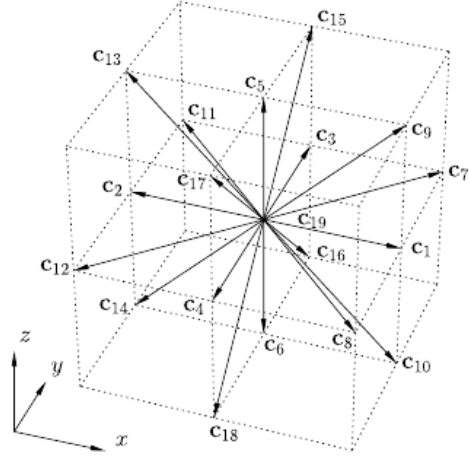


Fig1: Elément D3Q19 et vitesses discrètes associées

$$f_\alpha^{(eq)} = w_\alpha \left[\rho + \frac{3}{c^2} e_\alpha \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_\alpha \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} u \cdot u \right] \quad (2)$$

Où $c = \frac{\delta x}{\delta t}$, δx et δt sont resp. la taille d'une maille du réseau et le pas de temps, et w_α est un facteur de pondération provenant de l'intégration de la Maxwellienne et \vec{u} le vecteur vitesse. La densité et la quantité de mouvement sont données par :

$$\rho = \sum_{k=0}^{18} f_\alpha = \sum_{k=0}^{18} f_\alpha^{(eq)} \quad \text{et} \quad \rho \vec{u} = \sum_{k=1}^{18} e_\alpha f_\alpha = \sum_{k=1}^{18} e_\alpha f_\alpha^{(eq)} \quad (3)-(4)$$

Dans ce modèle, la vitesse du son est $c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}$, et la pression (gaz parfait) : $p = \rho c_s^2$

L'équation (1) peut aussi être discrétisée en espace et en temps. La forme est alors, avec le pas de temps δt et le pas d'espace $e_\alpha \delta t$:

$$f_\alpha(x_i + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - f_\alpha(x_i, t) = -\frac{1}{\tau} [f_\alpha(x_i, t) - f_\alpha^{(eq)}(x_i, t)] \quad (5)$$

$$f_\alpha(x_i + e_\alpha \delta t, t + \delta t) = \bar{f}_\alpha(x_i, t + \delta t) \quad (6)$$

Où $\tau = \frac{\lambda}{\delta t}$ et x_i est un point dans l'espace physique discrétisé. L'équation (5) est la forme discrète des équations de Boltzmann sur réseau [2]. Elle est résolue en deux étapes ; les collisions, où l'on résout l'équation (4) et la propagation décrite par (6)

$$\text{La viscosité dérivée de l'équation (5) est : } \nu = (\tau - .5)c_s^2 \delta t \quad (7)$$

2.1. Prédiction des paramètres de la loi d'écoulement dans une mousse

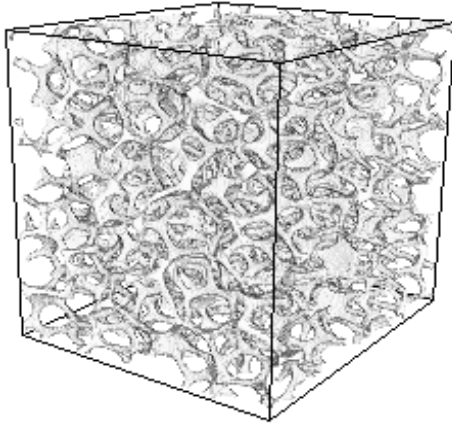


Fig. 2 : vue de la mousse : Pavé de 1.7 cm de côté (250*250*230 voxels).

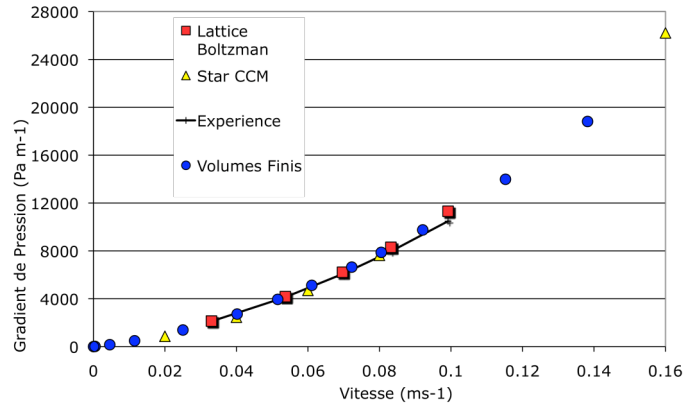


Fig. 3 : Gradient de pression vs vitesse. Comparaison avec l'expérience [4] et les calculs [5].

Nous avons tout d'abord validé le module de calcul dans le cas d'un poiseuille établi dans un canal fluide avec une erreur relative de 0.1% sur la vitesse par rapport à la solution analytique. A partir de reconstructions tomographiques de mousses (c.f. figure 2), nous déterminons les champs de vitesses et de pression locale puis moyennons ces résultats pour obtenir la perméabilité et le coefficient inertiel caractéristiques de tels milieux [1]. Les résultats sont comparés aux données expérimentales disponibles pour valider la méthode (figure 3). L'évolution du gradient de pression en fonction de la vitesse du fluide suit la loi de Forchheimer. D'un point de vue numérique, le maillage comporte 22 168 000 points, pour un calcul de 4h11 sur 48 processeurs. Il y a une excellente concordance entre les résultats et l'expérience. De ces calculs, la perméabilité et le coefficient inertiel peuvent être prédits à partir de géométrie réelle.

3. Transferts thermique

Nous utilisons une deuxième distribution de fonction (Yan et Zu [6]) :

$$g_\alpha(x + e_\alpha \delta t, t + \delta t) - g_\alpha(x, t) = \frac{g_\alpha^{(eq)}(x, t) - g_\alpha(x, t)}{\tau_c} \quad (8)$$

Dans cette équation, τ_c est le paramètre de relaxation adimensionné, $g_\alpha(x, t)$ est la distribution de fonctions décrivant la température, et $g_\alpha^{(eq)}(x, t)$ est la distribution de fonctions à l'état d'équilibre pour la α -ème direction. Celle-ci est définie par :

$$g_\alpha^{(eq)}(x, t) = \omega_\alpha \left[1 + \frac{3}{c^2} e_\alpha \cdot u \right] \text{ et la température est } T = \sum_\alpha g_\alpha \quad (9)-(10)$$

Cette formulation correspond au transport convecto-diffusif de l'énergie en l'absence de dissipations visqueuses et de travail des forces de pression, décrite par l'équation macroscopique suivante [7] :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (uT) = D \nabla^2 T \quad \text{avec le nombre de Prandtl associé : } Pr = \frac{2\tau - 1}{2\tau_c - 1}$$

$$\text{La diffusivité (m}^2/\text{s) est donnée par : } D = c_s^2 (\tau_c - 0.5) \delta t. \quad (11)$$

3.1. Validation 1 : Transferts dans un fluide en convection forcée

Nous étudions le cas d'une gaussienne de température transportée par un écoulement à vitesse constante U_0 . On place alors une gaussienne en condition initiale, qui est diffusée et advectée par le champ de vitesse. La solution analytique est :

$$T(x,t) = T_0 \sqrt{\frac{a^2}{a^2 + Dt}} e^{-\frac{(x-U_0t)^2}{4(a^2 + Dt)}} \quad (12)$$

On trace alors (figure 4) l'évolution de la gaussienne à différents temps. On en déduit, d'une part, que le schéma est conservatif, la surface sous les courbes étant constante. D'autre part, à partir de la solution analytique et en fittant les résultats calculés, nous pouvons estimer la diffusion numérique introduite par la méthode, qui est inférieure à 1% (0,09% à Peclet de 50). La méthode LBM est donc bien adaptée pour la prédiction de la dispersion (hydrodynamique et thermique) à partir de calcul sur topologie réelle.

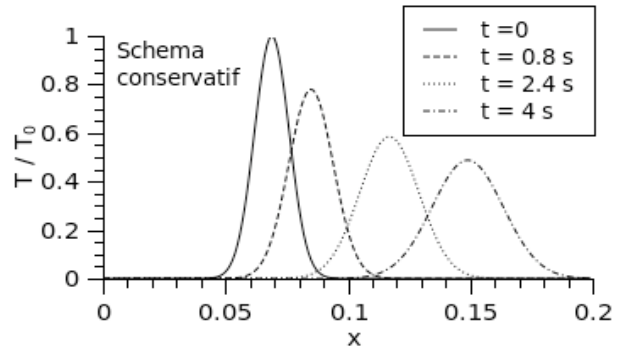


Figure 4 : Profil de température à différents instants

3.2. Validation 2 : conductivité d'un milieu stratifié

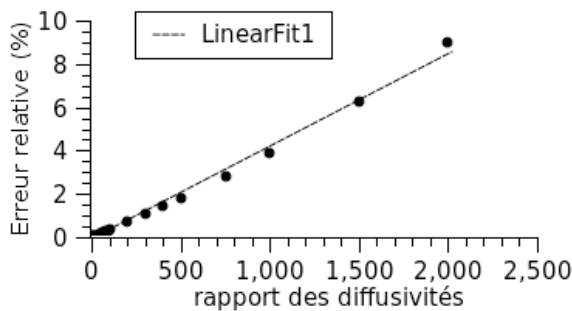


Figure 5 : erreur relative en fonction du contraste de diffusivité

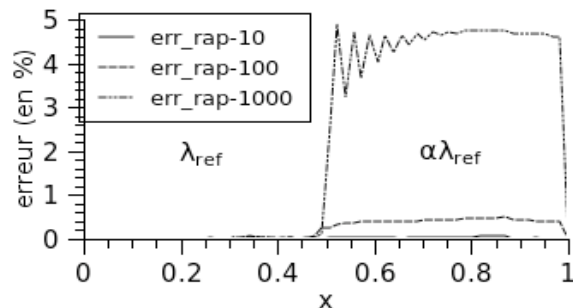


Figure 6 : répartition spatiale de l'erreur pour plusieurs ratio de diffusivité

Nous nous intéressons aux propriétés de conduction thermique de tels milieux diphasiques, pour lesquelles le contraste de conductivité entre phases est important. Nous avons tout d'abord évalué l'erreur liée à ce contraste dans un cas de référence : un bicouche soumis à des conditions de Dirichlet.

Nous présentons la variation de l'erreur (définie comme l'écart à la pente théorique) en fonction du contraste de conductivité des deux couches. L'erreur croît linéairement (figure 5). Nous analysons la répartition spatiale de ces erreurs (figure 6). On remarque que de fortes instabilités apparaissent pour de grands rapports de diffusivité. L'erreur est très importante dans le domaine de droite, où la diffusivité est forte. Cela est dû au paramètre de relaxation, définissant la diffusivité, qui impose d'après l'équation (11) un temps de relaxation trop important, et s'écarte alors du temps de mise à l'équilibre. Nous définissons alors deux zones. La première pour des rapports de diffusivité inférieurs à 200, qui possède une erreur inférieure à 1% (zone d'utilisation de l'outil); et une zone de « confiance » (erreur inférieure à

5%) pour des rapports de diffusivités allant jusqu'à 1250. Des méthodes, en cours d'implémentation et de validation, existent pour diminuer ces instabilités, à l'instar des méthodes à plusieurs temps de relaxation (MRT). De plus, la méthode LBM intrinsèquement instationnaire et à l'ordre 2 en temps est naturellement adaptée pour des applications instationnaires. Les résultats présentés ici amplifient évidemment le cumul des erreurs en plus de celles dues à l'inadéquation de la valeur du paramètre de relaxation dans le schéma actuel.

4. Dispersion

4.1.1. Dispersion de Taylor

Nous validons le calcul de la dispersion grâce à la solution analytique de Taylor. Le cas test est un domaine 2D avec un poiseuille établi, auquel nous faisons advecter et diffuser une gaussienne. Nous calculons la valeur moyenne de la concentration au cours du temps du plan perpendiculaire à la direction de l'écoulement. Celle-ci est de la forme :

$$\bar{C}(x,t) = C_0 \sqrt{\frac{a^2}{a^2 + D_{xx}t}} e^{-\frac{(x-U_0t)^2}{4(a^2 + D_{xx}t)}} \quad (13)$$

On fait alors une régression par rapport à l'équation (13) pour trouver la dispersion apparente D_{xx} . On compare cette valeur à la solution théorique $D_{xx} = D(1 + Pe^2/210)$, c.f. figure 7. Il y a un excellent accord avec la solution analytique.

4.1.2. Analyse quantitative

On a alors calculé de manière identique la dispersion longitudinale dans une mousse (figure 2) pour différents Peclet. On place la mousse dans un canal. Les conditions de bords sont des symétries. On impose un débit en entrée, et une sortie libre. Nous mesurons alors la valeur moyenne de la dispersion dans un plan, en aval de la mousse [8]. Après avoir fait une régression sur l'équation (13), nous en déduisons la dispersion longitudinale. Le résultat est illustré par la figure 8. On remarque que l'on est à deux ordres de grandeur au-dessus de la dispersion hydrodynamique. De plus on a des valeurs de dispersion importantes, même pour de faibles nombres de Peclet.

4.1.3. Application aux cas de mousse métallique

Nous avons donc calculé la dispersion dans une direction, mais celle-ci est un tenseur. Pour en observer les effets dans les autres directions, on fait le test du passage d'une boule gaussienne dans une mousse (figure 2), avec, pour la partie écoulement, une vitesse X en

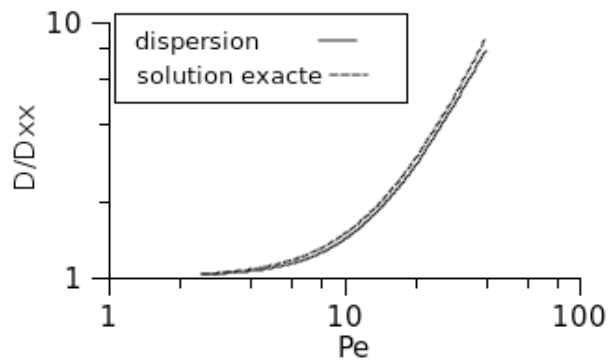


Figure 7 : Coefficient de dispersion longitudinal en fonction du Peclet. Comparaison avec la solution analytique.

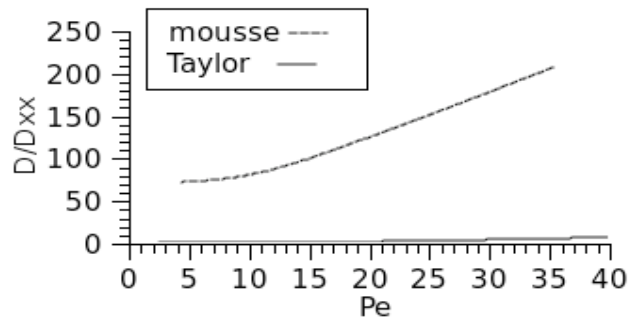


Figure 8 : Prédiction de la dispersion adimensionnée dans une mousse. Comparaison avec la dispersion hydrodynamique

entrée constante U_0 sur la face Ouest, une sortie libre sur la face Est, et des conditions de symétrie pour les autres faces. On observe alors la déformation de la boule initiale, qui fait apparaître une diffusion apparente dans trois directions (figure 9). Dans le cas présent, on note une forte déformation de la boule initiale dans la direction Y, qui caractérise qualitative-ment les propriétés dispersives de cette mousse. L'analyse quantitative est en cours de réalisation.

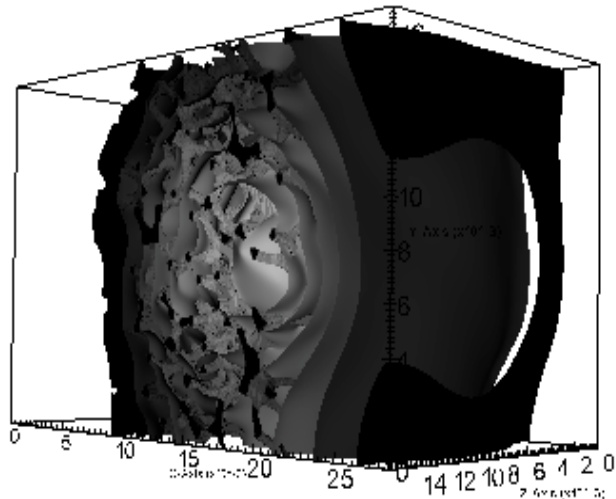


Figure 9 : Iso-concentration dans la mousse

Informatiquement parlant, c'est un code fortran 90 parallèle. Les calculs ont été effectués sur un cluster de deux machines octoproscesseurs quadri-cœurs (64 cœurs AMD en tout) ce qui conduit à environ 0.14 s par pas de temps et par équation.

5. Conclusion

L'outil numérique a été validé. Nous l'avons utilisé pour prédire différents paramètres de transport et d'écoulement dans les mousses métalliques. Nous pouvons maintenant calculer la dispersion. Par la suite, nous nous concentrerons sur le calcul de propriétés macroscopiques, tels la perméabilité, les coefficients inertiels, les coefficients de transfert de chaleur et la conductivité effective. L'impact des paramètres géométriques de la structure sur les propriétés macroscopiques sera ensuite systématiquement analysé dans le but de proposer une texture solide optimisée vis-à-vis de propriétés macroscopiques spécifiées pour plusieurs applications (échangeur de chaleur, réacteur chimique, ..).

Références

- [1] Brun E., et al., *Microstructure and transport properties of cellular materials: representative volume element*. Advanced material Engineering, 2009. 21(N° 10): p. 805-810.
- [2] Bhatnagar P.L., Gross E.P. and Krook M. (1954) 'A model for collision processes in gases, I. small amplitude processes in charged and neutral one-component system', *Phys. Rev.*, Vol. 94, pp.511–525.
- [3] Qian, Y., d'Humieres, D. and Lallemand, P. (1992) 'Recovery of Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method', *Europhys. Lett.*, Vol. 17, pp.479–484.
- [4] Bonnet, J.-P., F. Topin, and L. Tadrist, *Flow laws in metal foams: compressibility and pore size effects*. Transport in Porous Media, 2008. 73(2): p. 233-254.
- [5] Hugo, J.-M., et al., *Conjugate Heat and Mass Transfer in Metal Foams: A Numerical Study for Heat Exchangers Design*. Diffusion in Solids and Liquids V, 2010. p. 297-301
- [6] Y.Y. Yan, Y.Q. Zu, Numerical simulation of heat transfer and fluid flow past a rotating isothermal cylinder — a LBM approach, *Int. J. Heat Mass Transfer* 51 (2008) 2519–2536.
- [7] Z. Guo, B. Shi, C. Zheng, A coupled lattice BGK model for the Boussinesq equations, *Int. J. Numer. Methods Fluids* 39 (4) (2002) 325–342.
- [8] S. Didierjean, H.P. Amaral Souto, R. Delannay and C. Moyne, 'Dispersion in periodic porous media. Experience versus theory for two-dimensional systems'. *Chemical Engineering Science*, Vol. 52, No 12, pp. 1861-1874 (1997)