

Nouvelle approche cinétique : application à la dispersion dans les mousses

Yann JOBIC^{1*}, Vincent PAVAN¹, Frédéric TOPIN¹, Irina GRAUR-MARTIN¹, René OCCELLI¹

¹Polytech Marseille DME
IUSTI-CNRS UMR 7343
Technopôle de Château Gombert
5 rue Enrico Fermi
13453 Marseille cedex 13

*(auteur correspondant : yann.jobic@univ-amu.fr)

Résumé - Les matériaux cellulaires légers sont de plus en plus utilisés dans de nombreux domaines de l'industrie. Il est donc important de bien simuler les écoulements complexes, instationnaires dans ces milieux à forte porosité. De plus en plus, ces derniers sont appréhendés dans des échantillons réalistes, tomographiés, via des simulations directes qui évitent les simplifications géométriques. Dans cette optique, les méthodes dites cinétiques, type Lattice Boltzmann (LBM), semblent particulièrement bien indiquées pour simuler les transferts de chaleur et de masse. Dans cette communication, nous montrons, sur les équations de Navier Stokes, que les approches cinétiques abstraites (hors LBM) développées par F. Bouchut et R. Natalini [4, 1] offrent une méthode de calcul efficace pour la simulation directe susceptible de concurrencer naturellement les méthodes LBM, aussi bien dans le domaine de la mécanique des fluides que de la thermique.

Nomenclature

A	rapport de forme	T	température
c	constante : 2	W	moments de la pdf
\mathbf{c}_l	directions unitaires des vitesses discrètes	<i>Symboles grecs</i>	
D	Dimension de l'espace physique	ρ	masse volumique (fictive) du schéma cinétique
dx	pas de discrétisation en x	$\bar{\rho}$	masse volumique du fluide
f	pdf	λ	vitesses caractéristique pour le schéma cinétique
L	nombre de vitesses discrètes	ν	viscosité
$LB(M)$	Lattice-Boltzmann (Method)	ε	indicateur de qualité de simulation
L_c	longueur caractéristique	π_0	pression de référence
P	Pression, Pa	τ	temps de relaxation
pdf	probability density function		
\mathbf{u}	vitesse macro		

1. Introduction

L'étude des phénomènes de transfert dans les mousses est interdisciplinaire et revêt une importance particulière pour de nombreuses applications telles que les échangeurs, l'ingénierie pétrolière et chimique pour ne citer que quelques exemples. Il est alors important de pouvoir quantifier les propriétés effectives (perméabilité, coefficient inertiel, conductivité thermique, etc) des échangeurs utilisés. Un outil de simulation a déjà été développé en ce sens. Il était basé sur une méthode Lattice-Boltzmann pour les équations de Navier-Stokes ainsi que pour l'équation d'énergie. Cependant, cette méthode présentait plusieurs inconvénients, liés notamment à un manque d'information sur la précision des simulations ou encore sur les conditions

de stabilité limitant le domaine applicatif. Cela nous a poussé à tester une nouvelle méthode de résolution introduite initialement pour la résolution des systèmes hyperboliques conservatif [1]. Cette méthode est basée sur un modèle cinétique à vitesses discrètes. Plus précisément, nous avons implémenté pour les équations de Navier Stokes le schéma numérique décrit par R. Natalini et M. Carfora en 2008 [4]. Mais le schéma utilisé est d'ordre plus général et peu a priori s'applique sur une large classe d'équations, incluant celles faisant intervenir la température [2]. Dans cet article nous montrons la faisabilité de la méthode en nous intéressant à des benchmarks classiques de l'équation de Navier-Stokes (écoulement de Poiseuille, tourbillons de Green-Taylor, cavité entraînée, et allées de Von Karman).

2. Méthode

Nous cherchons à résoudre les équations incompressibles de Navier-Stokes suivantes :

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} + \text{div}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nu \Delta \mathbf{u} - \nabla P \\ \text{div}(\mathbf{u}) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Où \mathbf{u} est la vitesse macroscopique, P la pression, et ν la viscosité cinématique.

La méthode "abstraite" est issue d'une utilisation rigoureuse de la théorie cinétique. Elle est basée sur des opérateurs collisionnels de type BGK (des inventeurs Bhatnagar, Gross et Krook en 1954) qui est de la forme suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{v}_l \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{f}_l = \frac{1}{\tau \varepsilon^2} (\mathbf{M}_l(\rho, \varepsilon \rho \mathbf{u}) - \mathbf{f}_l), \quad l = 1, \dots, L \quad (2)$$

Où $\mathbf{M}_l(\rho, \varepsilon \rho \mathbf{u})$ et \mathbf{f}_l sont des vecteurs de Maxwelliennes discrètes et de pdf (avec $D + 1$ composantes), τ un temps caractéristique microscopique lié à la viscosité du liquide, $\mathbf{v}_l := \lambda \mathbf{c}_l$ les vitesses discrètes, L le nombre de vitesses discrètes du modèle numérique et ε un petit paramètre (sans dimension) supposé tendre vers 0 (en pratique entre 0.01 et 0.3). Une fois résolue l'équation sur les pdf, on retrouve les variables macroscopiques selon :

$$\rho = \sum_{l=1}^L f_{l,0}(\mathbf{x}, t) = W_0 \quad (3)$$

$$\forall h \in [1, D], \quad \varepsilon \rho u_h = \sum_{l=1}^L f_{l,h}(\mathbf{x}, t) = W_h \quad (4)$$

u_h étant une composante de la vitesse (u_x, u_y, u_z) et ρ la masse volumique fictive. On voit clairement que la pdf est vectorielle, contrairement à celle de la méthode LB (LBM). On a une pdf par moment (vitesse et masse volumique fictive), avec pour chacune d'elles le même nombre de vitesses (dans notre cas 4 en 2D), alors qu'en LBM, on a une seule pdf avec plus de vitesses (habituellement 9 en 2D). La pression physique P du système est liée à la masse volumique fictive ρ et la masse volumique réelle $\bar{\rho}$ selon :

$$\frac{\Pi(\rho) - \Pi(\bar{\rho})}{\bar{\rho} \varepsilon^2} = P + O(\varepsilon) \quad (5)$$

La loi de pression fictive étant : $\Pi(\rho) = \frac{\pi_0}{2} \left(\frac{\rho}{\bar{\rho}} \right)^2$. En fait, l'équation 2 est résolue par un algorithme de type transport/projection, permettant techniquement de ne résoudre qu'une équation

sur les moments \mathbf{W} associés aux pdf vectorielles, sans passer par la résolution des équations cinétiques elles-mêmes. Ce schéma numérique très simple (ne faisant intervenir que des différences finies d'ordre un en espace et en temps), mais très efficace s'écrit alors selon :

$$W_d^{n+1}(\mathbf{i}) = \left(1 - \frac{\lambda dt}{\varepsilon dx}\right) W_d^n(\mathbf{i}) + \frac{\lambda dt}{\varepsilon dx} \sum_{l=1}^{l=L} M_{l,d}(\mathbf{i} - \mathbf{c}_l) \quad (6)$$

où \mathbf{i} désigne les coordonnées topologiques des noeuds du maillage physique et $\mathbf{c}_l = \pm \mathbf{e}_l, l \in [1, D]$ est une direction de base des vitesses discrètes. L'avantage de cette réécriture est que l'on ne doit plus stocker en mémoire toutes les vitesses des pdfs, contrairement à LB. On peut se contenter de travailler uniquement sur les moments de la maxwellienne, nous faisant économiser l'ensemble des vitesses des pdfs par uniquement $D + 1$ scalaires (densité+vitesses). Le jeu numérique consiste en fait à trouver la forme des vecteurs Maxwelliens \mathbf{M}_l et des paramètres numériques ($\varepsilon, dx, dt, \lambda$) pour que le schéma numérique soit stable et que les moments numériques obtenus par la résolution du système renvoient effectivement les solutions de NS. Un résultat important de la méthode abstraite obtenu par R. Natalini [4] a été de montrer que le schéma numérique était stable sous la condition suffisante que :

$$\lambda \geq D \left(\sqrt{\frac{\pi_0}{\bar{\rho}}} \right) \left(1 - \frac{dx u_m}{cv} \right)^{-1} \quad (7)$$

où u_m désigne vitesse maximale de la simulation.

3. Résultats

3.1. Écoulement de type Poiseuille

On traite ici le cas d'un écoulement de type poiseuille dans un canal rectangulaire, qui est un cas test classique pour valider la précision des conditions de bord, en 2D et en 3D. Le nombre de Reynolds est défini par : $Re = \frac{u_{max} * L_c}{\nu}$, dans un canal rectangulaire de hauteur L_c , et u_{max} est le maximum de la vitesse dans la direction de l'écoulement. On définit alors un gradient de pression en condition limite, de la forme : $\Delta p = -\frac{8\rho u_{max}}{L_c^2}$. La solution analytique 2d de ce problème est : $u_{ex}(y) = 4\frac{u_{max}}{L_c^2} y(L_c - y)$, et la solution analytique du problème 3D est, avec les coordonnées centrées au milieu d'un plan x , avec $y \in [-L_c/2, L_c/2]$ et $z \in [-L_c/2, L_c/2]$:

$$\begin{cases} u_0 = \frac{4\rho L_c^2}{\nu \pi^3} \frac{\Delta p}{dx} \\ u_{ex}(y, z) = u_0 \sum_{k=1,3,5,\dots}^{\infty} (-1)^{\frac{k-1}{2}} \left(1 - \frac{\cosh\left(\frac{k\pi z}{L_c}\right)}{\cosh\left(\frac{k\pi z}{2}\right)} \right) \frac{\cos\left(\frac{k\pi y}{L_c}\right)}{k^3} \end{cases} \quad (8)$$

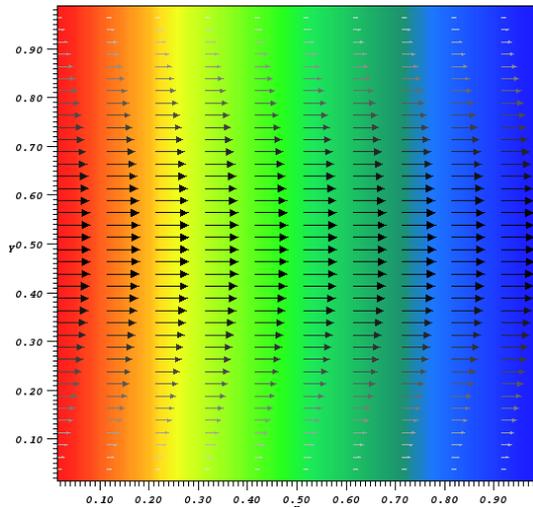


Figure 1 Solution du poiseuille 2D

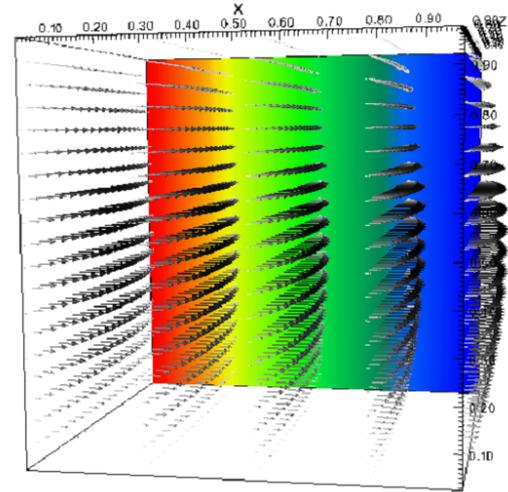


Figure 2 Solution du poiseuille 3D

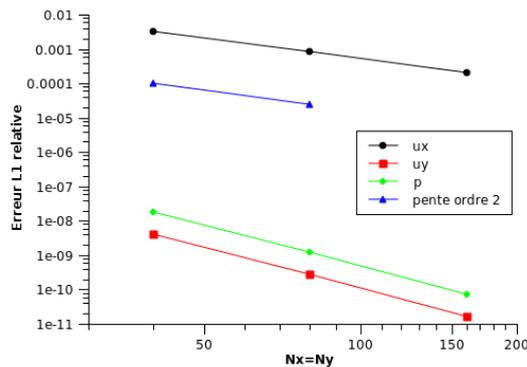


Figure 3 Convergence d'ordre 2 pour la vitesse/pression en 2d

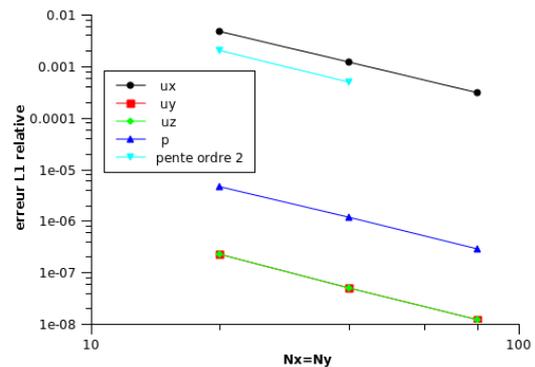


Figure 4 Convergence d'ordre 2 pour la vitesse/pression en 3d

On remarque, sur les figures 3 et 4, que l'on a une convergence d'ordre 2 en espace pour la vitesse et la pression.

3.2. Tourbillons de Green-Taylor

On considère ici le cas test 2D des tourbillons de Green-Taylor décroissants. Ce cas test est intéressant, car on a une solution analytique instationnaire, contrairement au cas précédent. Les champs de vitesses et de pression analytiques sont données par les relations suivantes, dans un domaine carré périodique de dimension 2π ([7, 4]) :

$$\begin{cases} u_1(x, y, t) = -\exp(-vt(w_1^2 + w_2^2)) \cos(w_1 x) \sin(w_2 y) \\ u_2(x, y, t) = \frac{w_1}{w_2} \exp(-vt(w_1^2 + w_2^2)) \sin(w_1 x) \cos(w_2 y) \\ P(x, y, t) = -0.25 \exp(-2vt(w_1^2 + w_2^2)) \left(\cos(2w_1 x) + \frac{w_1^2}{w_2^2} \cos(2w_2 y) \right) \end{cases} \quad (9)$$

Afin d'éviter la symétrie des solutions analytiques, on choisit des valeurs différentes pour w_1 et w_2 : $w_1 = 3$ et $w_2 = 2$. De plus, on fixe le Reynolds à $Re = 100$, et le temps physique maximal est fixé à $T = 1$ (s).

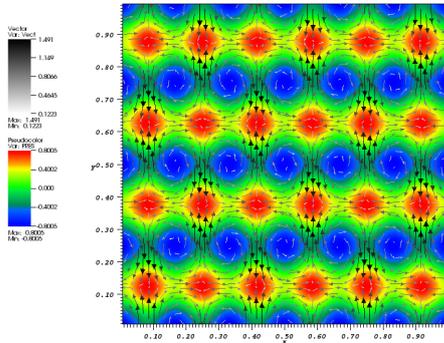


Figure 5 Champs initiaux

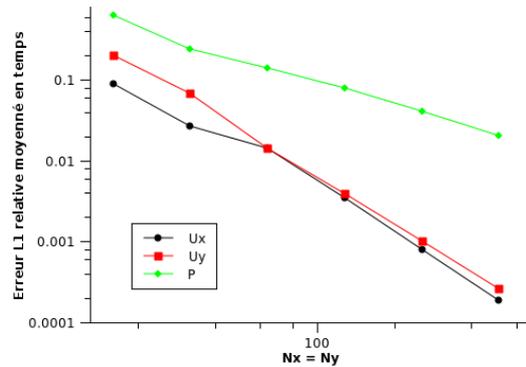


Figure 6 Erreur L1 moyennée :
Ordre 2 en vitesse et ordre 1 en pression

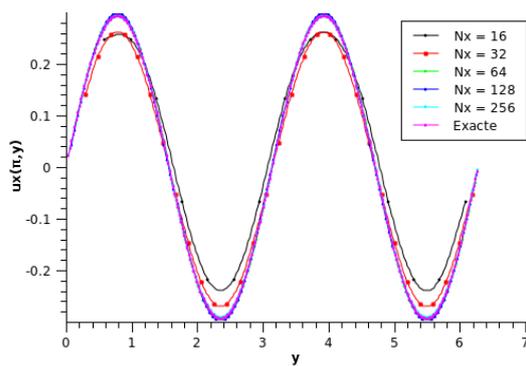


Figure 7 Vitesse u_x en $y = \pi$

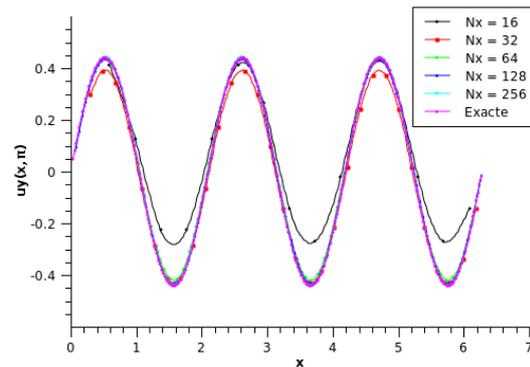


Figure 8 vitesse u_y en $x = \pi$

On a un ordre 2 en espace pour les vitesses et un ordre 1 en espace pour les pressions.

3.3. Cavité entraînée

Le problème de la cavité entraînée consiste en un écoulement visqueux incompressible dans une cavité dont une des parois se déplace avec une vitesse uniforme dans son propre plan. La géométrie du problème est présentée en figure 9. Deux cas ont été étudiés, de deux Reynolds différents : 100 et 400. On compare alors la position du centre des 3 vortex (central, amont et aval) avec les données présentés dans la littérature, utilisant des méthodes de résolutions différentes, comme une méthode multi-grid par Ghia [5], et une méthode LB par Perumal [6]. Les résultats sont condensés dans le tableau 1.

Il y a un très bon accord avec ces deux méthodes. On notera que le ε de la simulation à $Re = 100$ est de 0.125, et de la simulation à $Re = 400$ est de 0.25. On remarque qu'il n'y a pas d'impact fort sur la précision des résultats.

Localisation	Auteur	Re 100	Re 400
Vortex central	Ghia	(0.6172,0.7344)	(0.5547,0.6055)
	Perumal	(0.6156,0.7366)	(0.5534,0.6039)
	travail présent	(0.6175,0.7375)	(0.5562,0.6087)
Vortex amont	Ghia	(0.0313,0.0391)	(0.0508,0.0469)
	Perumal	(0.0320,0.0371)	(0.0501,0.0500)
	travail présent	(0.0375,0.0325)	(0.0512,0.0487)
Vortex aval	Ghia	(0.9453,0.0625)	(0.8906,0.1250)
	Perumal	(0.9405,0.0681)	(0.8896,0.1247)
	travail présent	(0.9425,0.0625)	(0.8838,0.1238)

Tableau 1 Comparaison du centre de différent vortex avec la littérature

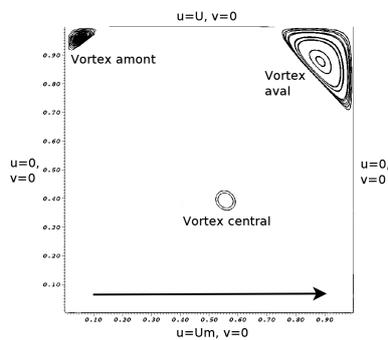


Figure 9 Géométrie du problème de la cavité entraînée avec les conditions de bords

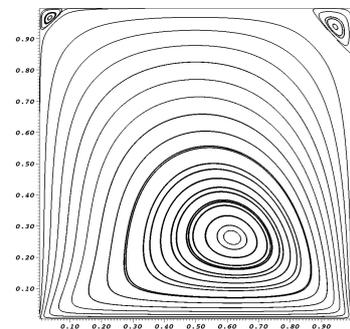


Figure 10 Lignes de courant à $Re = 100$

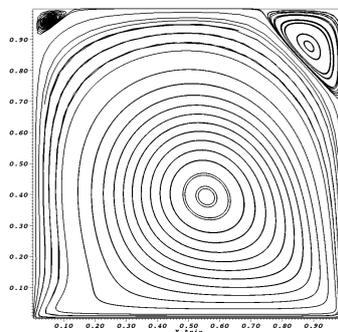


Figure 11 Lignes de courant à $Re = 400$

3.4. Écoulement autour d'un carré

Ce cas test concerne un écoulement laminaire autour d'un carré au centre de deux plaques se trouvant à une distance H (voir la figure 12). Un paramètre important est le facteur bloquant, représentant le rapport entre H et la longueur d'un côté du carré D . Celui-ci a été fixé à 8, conformément à la référence [8].

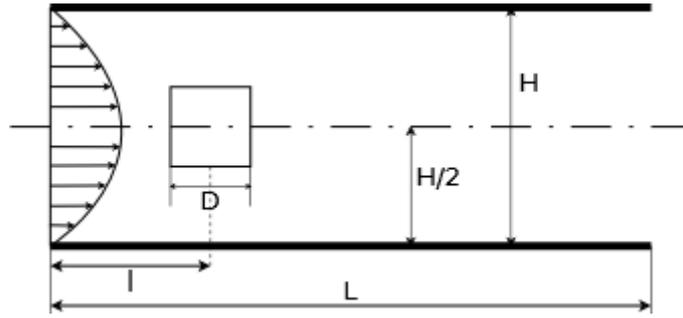


Figure 12 Géométrie du cas test

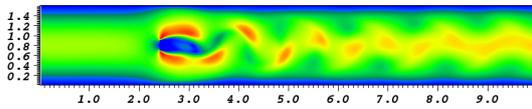


Figure 13 Champ de vitesse avec décrochement en haut du carré à $Re = 80$

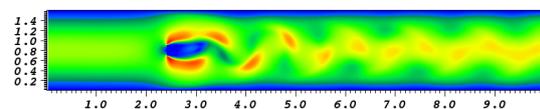


Figure 14 Champ de vitesse avec décrochement en bas du carré à $Re = 80$

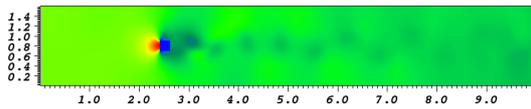


Figure 15 Champ de pression avec décrochement en haut du carré à $Re = 80$

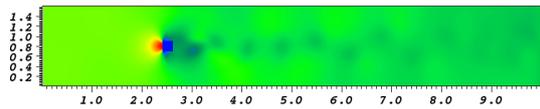


Figure 16 Champ de pression avec décrochement en bas du carré à $Re = 80$

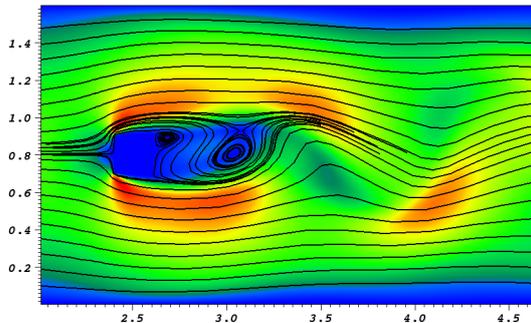


Figure 17 Zoom sur le carré avec les lignes de courant et la magnitude de vitesse à $Re = 80$

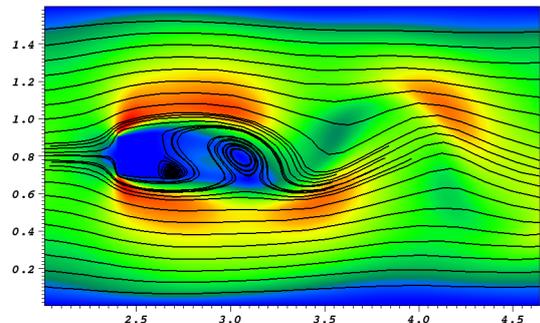


Figure 18 Zoom sur le carré avec les lignes de courant et la magnitude de vitesse à $Re = 80$

Un nombre adimensionné important pour pouvoir faire l'analyse quantitative est le nombre de Strouhal. Physiquement, il représente le rapport du temps d'advection et du temps caractéristique de l'instationnarité. Celui-ci est calculé à partir de la longueur d'un coté du carré D , de la fréquence caractéristique entre les vortex f_c et du maximum de vitesse dans le domaine u_{max} par la relation suivante :

$$St = \frac{f_c D}{u_{max}} \quad (10)$$

La fréquence caractéristique a été déterminé à partir d'une analyse spectrale (transformation de fourrier rapide) de la série en temps du coefficient de portance. Pour $Re = 80$, nous avons trouvé $f_c = 0.02751 Hz$, ce qui a donné un $St = 0.13755$, à comparer à la valeur référence $St = 0.131$ ([8]). Cela fait une erreur de l'ordre de 5%. Le ε de la simulation étant de 0.25, nous pouvons attendre une solution approchée de l'ordre de 6%, ce qui valide le résultat de la simulation.

4. Conclusion

Les méthodes cinétiques abstraites sont donc des méthodes performantes et prometteuses. Développées ici sur l'équation de Navier-Stokes, elles bénéficient néanmoins d'un cadre théorique bien posé qui permet leur déclinaison pour une large classe d'équation de transports. Nous avons des raisons de penser ici, à ce stade des résultats que nous avons présentés, que ces méthodes peuvent concurrencer de façon intéressante les méthodes de type LB.

Références

- [1] F. Bouchut, construction of BGK models with a family of convex entropy for a system of conservation laws, *Journal of Statistical Physics*, vol 95, n° 1/2, 1999
- [2] F. Bouchut, F. Guarguaglini, R. Natalini, Diffusive BGK Approximations for Nonlinear Multidimensional Parabolic Equations, *Indiana University Mathematics Journal*, 49(2000), 723-749
- [3] D. Aregba-Driollet and R. Natalini, Discrete kinetic schemes for multidimensional systems of conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.* 37 (2000) 1973-2004.
- [4] M Carfora, R. Natalini, A discrete kinetic approximation for the incompressible Navier-Stokes equations, *ESAIM : M2AN*, Vol. 42, N° 1, 2008, pp. 93-112
- [5] U. Ghia, K.N. Ghia, C.T. Shin, High-Resolutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method, *J. Comput. Phys.*, 48 (1983) 387-411.
- [6] D.A. Perumal, A.K. Dass, Application of lattice Boltzmann method for incompressible viscous flows, *Appl.Math. Modell.* (2012), <http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2012.09.028>
- [7] M. Reider and J. Sterling, Accuracy of discrete velocity BGK models for the simulation of the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Fluids* 24 (1995) 459-467.
- [8] M. Breuer, J. Bernsdorf, T. Zeiser, F. Durst, Accurate computations of the laminar flow past a square cylinder based on two different methods : lattice-Boltzmann and finite-volume, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Volume 21, Issue 2, April 2000, Pages 186-196

Remerciements

Les auteurs souhaitent exprimer leur gratitude au professeur Marc Médale pour les différents conseils qu'il nous a prodigué.