

Un Algorithme Faible Nombre de Mach pour la Simulation des Ecoulements de Fluides Supercritiques par des Méthodes Spectrales

I. RASPO^a, J. OUAZZANI^b

a. Laboratoire M2P2, UMR 6181 C.N.R.S., Université Paul-Cézanne, Technopôle de Château-Gombert, 38 rue F. Joliot Curie, 13451 Marseille Cedex 20 (France).

b. ArcoFluid, 4 allée du Doyen Georges Brus, 33600 Pessac (France) & ICMCB, UPR 9048 C.N.R.S., 87 avenue du Dr Albert Schweitzer, 33608 Pessac (France).

Résumé :

Les simulations des écoulements de fluides supercritiques ont toujours été menées avec des méthodes de volumes finis. Les algorithmes itératifs qui doivent alors être utilisés pour résoudre les équations, fortement couplées en raison des comportements critiques des propriétés de transport, entraînent des temps de calcul très longs. Dans cet article, nous proposons un nouvel algorithme pour résoudre de manière découplée les équations d'énergie et de Navier-Stokes dans le cadre de l'approximation à faible nombre de Mach avec une méthode spectrale, permettant d'obtenir un code de calcul efficace. Cet algorithme est testé sur un problème de convection naturelle pour lequel des résultats obtenus avec une méthode de volumes finis sont disponibles dans la littérature.

Abstract :

The numerical simulations of supercritical fluids flows were always performed using finite volume methods. These methods were used in association with iterative schemes for coupling all the equations, leading to very time-consuming computational codes. In this paper, we propose a new algorithm for an uncoupled solution of energy and Navier-Stokes equations in the low Mach number approximation with a spectral method. Indeed, spectral methods are known to ensure the highest accuracy and to allow the use of very fast techniques, such as FFT and complete diagonalization of the operators, leading to very efficient computational codes. The algorithm proposed is evaluated on a problem of natural convection for which results obtained with a finite volume method are available in literature.

Mots clefs : Fluides supercritiques, simulation numérique, faible nombre de Mach, méthode de projection, méthodes spectrales.

1 Introduction

A l'approche du point critique liquide-gaz, certaines propriétés de transport divergent (comme la compressibilité isotherme, le coefficient de dilatation thermique, ...) ou tendent vers zéro (comme la diffusivité thermique ou le coefficient de diffusion massique). Ces comportements critiques résultent en des phénomènes spécifiques aux fluides supercritiques (c'est-à-dire au dessus de la température et de la pression du point critique) qui ont largement été étudiés par des simulations numériques depuis le début des années 90 [1-8]. Ces simulations ont permis notamment d'identifier l'effet piston, qui avait été prédit théoriquement [9-11], comme le responsable du transfert thermique très rapide dans les fluides supercritiques, alors que le transfert par diffusion se ralentit fortement. Les études numériques basées sur la résolution des équations de Navier-Stokes complètes [1-6] ont quasiment toutes été menées dans le cadre de l'approximation à faible nombre de Mach [12] qui permet de découpler la densité de la pression dynamique apparaissant dans les équations de quantité de mouvement. Les méthodes numériques utilisées ont toujours été basées sur des approximations par volumes finis. Les algorithmes itératifs qui doivent alors être utilisés pour résoudre les équations, fortement couplées en raison des comportements critiques des propriétés de transport, entraînent des temps de calcul très longs. Récemment, Ouazzani et Garrabos [13] ont proposé un nouvel algorithme,

associé à une méthode de volumes finis, permettant de découpler totalement l'équation d'énergie et les équations de Navier-Stokes. Les tests effectués sur des problèmes de convection naturelle dans les fluides supercritiques ont révélé des gains en temps de calcul importants. Dans ce papier, nous présentons cet algorithme en association avec une méthode spectrale collocation-Chebyshev. Outre leur très grande précision, les méthodes spectrales permettent en effet d'obtenir des codes de calcul très efficaces, notamment grâce à l'utilisation de FFT pour le calcul des dérivées spatiales. Le couplage vitesse-pressure des équations de Navier-Stokes est traité par une adaptation de la méthode de projection améliorée développée par Hugues et Randriamampianina [14]. L'algorithme est testé sur le cas d'une cavité carrée remplie de fluide supercritique et chauffée par le côté, problème qui a déjà été étudié dans la littérature au moyen de méthodes de volumes finis [1, 13].

2 Modélisation

On considère une cavité carrée de hauteur $H=1\text{cm}$ remplie d'un fluide supercritique modélisé par l'équation d'état de van der Waals. Cette équation cubique, bien que très simple, prend en compte implicitement la divergence au point critique de la compressibilité isotherme χ_T , du coefficient de dilatation thermique β_p et de la capacité calorifique à pression constante C_p . La capacité calorifique à volume constant C_V et la viscosité dynamique μ sont supposées constantes et égales à leur valeur loin du point critique, tandis que la divergence de la conductivité thermique λ est représentée par la loi $\lambda = \lambda_b \left(1 + \Lambda(T/T_c - 1)^{-0.5}\right)$, où λ_b est la valeur loin du point critique, Λ une constante réelle et T_c la température critique. Les coordonnées critiques et les propriétés physiques du CO_2 ont été considérées ($T_c=304,13\text{ K}$, $\rho_c=467,8\text{ kg.m}^{-3}$, $C_{vb}=472,313\text{ J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$, $\mu_b=3,27\times 10^{-5}\text{ Pa.s}$, $\lambda_b=3,29\times 10^{-2}\text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$, $\Lambda=0,75$).

Le fluide est initialement au repos, à l'équilibre thermodynamique à une température uniforme $T_i=(1+\varepsilon)T_c$ (où $\varepsilon\ll 1$) et stratifié avec une densité moyenne égale à ρ_c . Puis, la température de la paroi verticale en $x=0$ est progressivement augmentée pendant une seconde jusqu'à $T_i+\delta T$, avec δT de l'ordre de quelques mK, alors que les trois autres parois sont adiabatiques. L'évolution du système est gouvernée par les équations de Navier-Stokes 2D instationnaires, couplées à l'équation d'énergie et à l'équation de van der Waals, dans l'approximation à faible nombre de Mach [12]. Pour les fluides supercritiques, l'approximation de base doit être modifiée pour prendre en compte correctement la stratification du fluide [15]. Dans le cadre de cette approximation, les équations s'écrivent alors :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \rho V \cdot \nabla V = -\nabla P_{dyn} + \mu \Delta V + \frac{1}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot V) - (\rho - \rho_i) g \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho V \cdot \nabla T = -\left(P_{th} + P_{hyd} + a\rho^2\right) \nabla \cdot V + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (3)$$

$$P_{th} + P_{hyd} = \frac{\rho r T}{1 - b\rho} - a\rho^2 \quad (4)$$

où a et b sont les paramètres de l'équation de van der Waals, $r=R/M$ avec R la constante des gaz parfaits ($R=8,3145\text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$) et M la masse molaire du CO_2 ($M=0,04401\text{ kg.mol}^{-1}$), ρ_i est la densité initiale, g le vecteur gravité de composantes $(0, g)$, et P_{th} , P_{hyd} et P_{dyn} sont respectivement la pression thermodynamique (qui ne dépend que du temps), la pression hydrostatique (qui ne dépend que de la coordonnée verticale y) et la pression dynamique. La pression thermodynamique P_{th} est calculée par la conservation de la masse globale.

3 Méthode numérique

3.1 Discrétisation temporelle et approximation spatiale

Les équations (1)-(3) sont discrétisées en temps avec un schéma semi-implicite d'ordre 2 qui consiste en une discrétisation des termes instationnaires par le schéma d'Euler retardé du second ordre, une évaluation implicite des termes diffusifs et une discrétisation des termes convectifs par un schéma d'Adams-Bashforth.

L'approximation spatiale est faite par la méthode de collocation-Chebyshev. De ce fait, un changement de variable est effectué dans les deux directions d'espace afin de transformer le domaine de calcul en $[-1, +1] \times [-1, +1]$. Le code de calcul de base est celui qui avait été développé pour la résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles [16].

3.2 Calcul de la divergence de la vitesse

L'idée de base de l'algorithme proposé par Ouazzani et Garrabos [13] est de découpler totalement l'équation d'énergie et les équations de Navier-Stokes au pas de temps courant. Si les termes convectifs dans l'équation (3) sont approchés par un schéma d'Adams-Bashforth, le couplage entre ces équations est seulement dû au terme faisant intervenir $\nabla.V$. Or ce terme doit absolument être considéré au pas de temps courant car c'est lui qui est responsable de l'effet piston. Cependant, Ouazzani et Garrabos ont montré qu'il est possible de calculer $\nabla.V$ à partir de l'équation d'état et de l'équation de continuité. En effet, la dérivée totale de l'équation d'état donne la relation :

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\left(-\frac{rT}{(1-b\rho)^2} + 2a\rho \right) \frac{d\rho}{dt} - \frac{dP_{th}}{dt}}{\frac{\rho r}{1-b\rho}} \quad (5)$$

Alors, en insérant cette relation dans l'équation d'énergie (3) et en tenant compte de l'équation de continuité (1) pour le calcul de $d\rho/dt$, on obtient pour la divergence de la vitesse la formule suivante :

$$\nabla.V = \frac{(1-b\rho) \frac{dP_{th}}{dt} - \nabla.(\lambda \nabla T)}{-\left(P_{th} + P_{hyd} + a\rho^2\right) + 2a\rho^2(1-b\rho)} \quad (6)$$

Ainsi, en utilisant cette expression de la divergence de la vitesse dans l'équation (3), l'équation d'énergie et l'équation d'état peuvent être résolues au pas de temps courant sans avoir besoin de connaître le champ de vitesse. Il faut souligner que cette procédure est applicable quelle que soit l'équation d'état utilisée.

3.3 Résolution de l'équation d'énergie et de l'équation d'état

Au pas de temps courant $n+1$, l'équation d'énergie (3) discrétisée peut s'écrire sous la forme d'une équation de Helmholtz à coefficients variables. Afin de tirer profit des avantages de la méthode de diagonalisation matricielle complète développée pour la résolution des équations de Helmholtz à coefficients constants, la densité ρ^{n+1} et la conductivité thermique λ^{n+1} sont décomposées en deux parties, la valeur à $t=0$ et une perturbation au pas temps courant. La résolution de l'équation d'énergie nécessite alors des itérations internes qui sont incluses dans le processus itératif global de l'algorithme de Ouazzani et Garrabos. Ainsi, l'équation d'énergie à l'itération l du pas de temps $n+1$ s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \lambda_i \Delta T^l - \frac{3}{2\delta} \rho_i T^l = & \left(\rho^{l-1} - \rho_i \right) \frac{3T^{l-1}}{2\delta} + \nabla. \left(\left(\lambda^{l-1} - \lambda_i \right) \nabla T^{l-1} \right) - \rho^{l-1} \left(\frac{4T^n - T^{n-1}}{2\delta} \right) \\ & + 2(\rho V. \nabla T)^n - (\rho V. \nabla T)^{n-1} + \left(P_{th}^{l-1} + P_{hyd} + a(\rho^{l-1})^2 \right) (\nabla.V)^{l-1} \end{aligned} \quad (7)$$

L'opérateur de Helmholtz à coefficients constants est diagonalisé une fois pour toutes avant le début des itérations temporelles, et à chaque itération l , la résolution de l'équation (7) se ramène à des multiplications matricielles, opérations très rapides sur des calculateurs vectoriels. Signalons que les calculs ont été menés sur le supercalculateur NEC-SX8 de l'IDRIS.

En ce qui concerne la densité, celle-ci est calculée en utilisant la linéarisation suivante de l'équation de van der Waals :

$$\rho^k = \frac{P_{th}^k + P_{hyd}}{T^l + b(P_{th}^k + P_{hyd}) - a\rho^{k-1}(1-b\rho^{k-1})} \quad (8)$$

Ainsi, pour chaque itération l de l'algorithme de résolution de l'équation d'énergie, le couple (P_{th}^k, ρ^k) est calculé itérativement en résolvant d'abord la conservation de la masse puis l'équation (8).

En résumé, l'algorithme itératif pour la résolution au pas de temps $n+1$ des équations d'énergie et d'état est le suivant :

1. Initialiser T^l , P_{th}^l , ρ^l et $(\nabla.V)^l$ avec les valeurs au pas de temps précédent n ;
2. Résoudre l'équation de Helmholtz (7), avec les conditions aux limites du problème, pour T^l par la méthode de diagonalisation matricielle complète ;
3. Calculer la nouvelle conductivité thermique λ^l ;
4. Calculer de façon itérative le couple (P_{th}^l, ρ^l) ;
5. Calculer la divergence de la vitesse $(\nabla.V)^l$ par l'équation (6) ;
6. Répéter les opérations 2 à 5 jusqu'à convergence de T , ρ et P_{th} .

La convergence est supposée obtenue lorsque $Res = \max(ResT, Res\rho, ResP_{th})$ (avec $Res\rho = \max((\rho^l - \rho^{l-1})/\rho^l)$ pour $\rho = T, \rho, P_{th}$) est inférieur à 10^{-11} .

3.4 Résolution des équations de Navier-Stokes

Lorsqu'on débute la résolution des équations de Navier-Stokes (1)-(2) discrétisées au pas de temps $n+1$, la densité ρ^{n+1} et la divergence de la vitesse $(\nabla.V)^{n+1}$ sont déjà connues. Il est alors possible d'utiliser une méthode de projection pour résoudre les équations de Navier-Stokes. Ainsi, nous avons adapté la méthode de projection modifiée proposée par Hugues et Randriamampianina [14] pour la résolution des équations incompressibles aux écoulements à faible nombre de Mach. L'algorithme est le suivant :

Calcul d'une pression préliminaire : La première étape consiste à calculer une pression préliminaire \bar{P}_{dyn}^{n+1} à partir d'une équation de Poisson obtenue en prenant la divergence de l'équation (2) discrétisée et de conditions aux limites de Neumann obtenues en projetant cette même équation normalement aux frontières :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta \bar{P}_{dyn}^{n+1} = \nabla \cdot \left[-2(\rho V \cdot \nabla V)^n + (\rho V \cdot \nabla V)^{n-1} + \rho^{n+1} \left(\frac{4V^n - V^{n-1}}{2\delta t} \right) + \frac{1}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot V)^{n+1} \right. \\ \quad \left. - (\rho^{n+1} - \rho_i) g \right] + \mu \Delta (\nabla \cdot V)^{n+1} + \frac{3}{2\delta t} \left(\frac{3\rho^{n+1} - 4\rho^n + \rho^{n-1}}{2\delta t} \right) & \text{dans } \Omega \\ \frac{\partial \bar{P}_{dyn}^{n+1}}{\partial n} = n \cdot \left[-2(\rho V \cdot \nabla V)^n + (\rho V \cdot \nabla V)^{n-1} + \frac{4}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot V)^{n+1} - (\rho^{n+1} - \rho_i) g \right. \\ \quad \left. - 2\mu \nabla \times (\nabla \times V^n) + \mu \nabla \times (\nabla \times V^{n-1}) \right] & \text{sur } \partial\Omega \end{array} \right. \quad (9)$$

avec Ω le domaine de calcul ($\Omega =]-1, +1[\times]-1, +1[$) et $\partial\Omega$ sa frontière.

Calcul de la vitesse prédite V^* : La vitesse prédite est calculée implicitement en résolvant l'équation (2) discrétisée et en prenant en compte le gradient de la pression préliminaire :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho^{n+1} \frac{3V^* - 4V^n + V^{n-1}}{2\delta t} + 2(\rho V \cdot \nabla V)^n - (\rho V \cdot \nabla V)^{n-1} = -\nabla \bar{P}_{dyn}^{n+1} + \mu \Delta V^* + \frac{1}{3} \mu \nabla (\nabla \cdot V)^{n+1} & \text{dans } \Omega \\ V^* = V_B^{n+1} & \text{sur } \partial\Omega \end{array} \right. \quad (10)$$

avec V_B^{n+1} la vraie condition aux limites de la vitesse (ici $V_B^{n+1} = 0$). Comme pour l'équation d'énergie, la densité est décomposée en sa valeur initiale et une perturbation pour permettre l'utilisation de la méthode de diagonalisation matricielle complète. Quelques itérations (de 3 à 5 suivant les cas) sont alors nécessaires pour résoudre les problèmes de Helmholtz pour les composantes de V^* .

Calcul de la vitesse corrigée : L'étape de projection est réalisée en résolvant un problème de Poisson pour la variable intermédiaire $\varphi = 2\delta(P_{dyn}^{n+1} - \bar{P}_{dyn}^{n+1})/3$. Ce problème de Poisson est établi de sorte que le champ de vitesse final V^{n+1} satisfasse l'équation de continuité (1) et s'écrit :

$$\begin{cases} \Delta\varphi = \nabla \cdot (\rho^{n+1} V^*) + \frac{3\rho^{n+1} - 4\rho^n + \rho^{n-1}}{2\delta} & \text{dans } \Omega \\ \frac{\partial\varphi}{\partial n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (11)$$

La vitesse et la pression au pas de temps $n+1$ sont ensuite calculées sur l'ensemble du domaine par les équations :

$$V^{n+1} = V^* - \frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla \varphi, \quad P_{dyn}^{n+1} = \bar{P}_{dyn}^{n+1} + \frac{3}{2\delta} \varphi \quad (12)$$

4 Résultats

Les calculs ont été menés pour une distance au point critique $T_i - T_c = 1\text{K}$ (soit $\varepsilon = 3,288 \times 10^{-3}$) et un chauffage $\delta T = 10\text{mK}$ avec une résolution comportant 81 polynômes dans les deux directions et un pas de temps $\delta t = 10^{-2}$. Les champs de température instantanés sont représentés sur la figure 1. Ils sont tout à fait similaires à ceux obtenus précédemment avec des méthodes de volumes finis [1, 13] : le chauffage de la paroi verticale génère un panache thermique chaud qui, au cours du temps, s'étale le long de la paroi supérieure, alors que le cœur de la cavité est chauffée de manière homogène par l'effet piston.

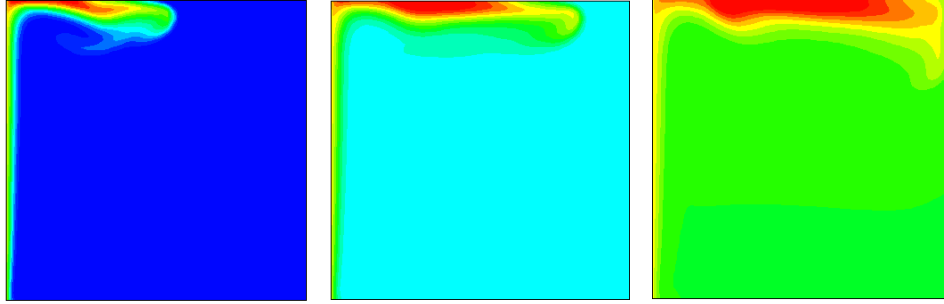


FIG. 1 – Iso-contours du champ $T - T_i$ à $t=4,5\text{s}$, $t=6,5\text{s}$ et $t=10\text{s}$ (de gauche à droite).

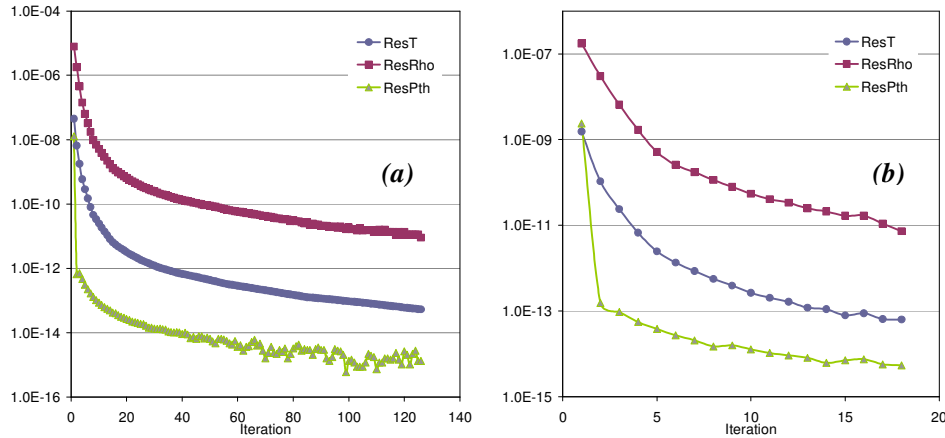


FIG. 2 – Evolution des résidus sur T , ρ et P_{th} en fonction du nombre d'itérations de l'algorithme à (a) $t=4,5\text{s}$ et (b) $t=10\text{s}$.

Concernant l'algorithme itératif pour la résolution des équations d'énergie et d'état, un nombre maximum de 150 itérations est fixé. Cependant, le nombre d'itérations effectuées réellement pour satisfaire le critère de convergence dépend de la raideur de la solution, comme le montrent les évolutions des résidus sur la figure 2. Au temps $t=4,5\text{s}$, les gradients de température et de densité au voisinage de la paroi chauffée sont très

importants et plus de 120 itérations sont nécessaires alors que moins de 20 itérations suffisent lorsque la solution est plus homogène (à $t=10s$). On constate de plus que, dans tous les cas, c'est la densité qui converge le moins bien et c'est donc cette variable qui va gouverner la convergence globale de l'algorithme. La même remarque avait été faite lors des calculs effectués au moyen d'une méthode de volumes finis [17]. En ce qui concerne la résolution des équations de Navier-Stokes, l'erreur en norme L_2 sur l'équation de continuité varie entre 10^{-11} et 10^{-9} à l'intérieur du domaine de calcul et la vitesse de glissement sur les parois varie entre 3×10^{-9} et 3×10^{-7} au cours du temps.

5 Conclusion

Dans cet article, nous avons associé l'algorithme proposé par Ouazzani et Garrabos [13] pour découpler l'équation d'énergie et les équations de Navier-Stokes à une méthode spectrale collocation-Chebyshev. L'utilisation d'une méthode de projection et de la diagonalisation matricielle complète pour la résolution des équations de Helmholtz permet d'obtenir un code de calcul efficace sur des calculateurs vectoriels. Il s'agit maintenant d'améliorer la convergence de l'algorithme itératif pour réduire encore les temps de calcul.

References

- [1] Zappoli B., Amiroudine S., Carlès P., Ouazzani J., Thermoacoustic and buoyancy-driven transport in a square side-heated cavity filled with a near-critical fluid, *J. Fluid Mech.*, 316, 53-72, 1996.
- [2] Jounet A., Mojtabi A., Ouazzani J., Zappoli B., Low-frequency vibrations in a near-critical fluid, *Phys. Fluids*, 12, 197-204, 2000.
- [3] Amiroudine S., Bontoux P., Larroude P., Gilly B., Zappoli B., Direct numerical simulation of instabilities in a two-dimensional near-critical fluid layer heated from below, *J. Fluid Mech.*, 442, 119-140, 2001.
- [4] Amiroudine S., Zappoli B., Piston-effect-induced thermal oscillations at the Rayleigh-Bénard threshold in supercritical ^3He , *Phys. Rev. E*, 90, 105303, 2003.
- [5] Accary G., Raspo I., Bontoux P., Zappoli B., Reverse transition to hydrodynamic stability through the Schwarzschild line in a supercritical fluid layer, *Phys. Rev. E*, 72, 035301, 2005.
- [6] Raspo I., Meradji S., Zappoli B., Heterogeneous reaction induced by the piston effect in supercritical binary mixtures, *Chem. Eng. Sci.*, 62, 4182-4192, 2007.
- [7] Chiwata Y., Onuki A., Thermal plumes and convection in highly compressible fluids, *Phys. Rev. Letters*, 87, 144301, 2001.
- [8] Furukawa A., Meyer H., Onuki A., Numerical simulation studies of the convective instability onset in a supercritical fluid, *Phys. Rev. E*, 71, 067301, 2005.
- [9] Onuki A., Ferrel R. A., Fast adiabatic equilibration in a single-component fluid near the liquid-vapor critical point, *Phys. Rev. A*, 41, 2256-2259, 1990.
- [10] Boukari H., Schaumeyer J. N., Briggs M. E., Critical speeding up in pure fluids, *Phys. Rev. A*, 41, 2260-2263, 1990.
- [11] Zappoli B., Bailly D., Garrabos Y., Le Neindre B., Guenoun P., Beysens D., Anomalous heat transport by the piston effect in supercritical fluids under zero gravity, *Phys. Rev. A*, 41, 2264-2267, 1990.
- [12] Paolucci, S., On the filtering of sound from the Navier-Stokes equations, Technical report, Sandia National Laboratories USA, SAND82-8257, 1982.
- [13] Ouazzani J., Garrabos Y., A new numerical algorithm for Low Mach number supercritical fluids, *Computers & Fluids*, soumis (aussi disponible sur <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00142988>), 2008.
- [14] Hugues S., Randriamampianina A., An improved projection scheme applied to pseudospectral methods for the incompressible Navier-Stokes equations, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 28, 501-521, 1998.
- [15] Accary G., Raspo I., Bontoux P., Zappoli B., An adaptation of the Low Mach number approximation for supercritical fluid buoyant flows, *C. R. Mécanique*, 333, 397-404, 2005.
- [16] Raspo I., Hugues S., Serre E., Randriamampianina A., Bontoux P., A spectral projection method for the simulation of complex three - dimensional rotating flows, *Computers & Fluids*, 31, 745-767, 2002.
- [17] Accary G., Raspo I., A 3D finite volume method for the prediction of a supercritical fluid buoyant flow in a differentially heated cavity, *Computers & Fluids*, 35, 1316-1331, 2006.

Remerciements. Les auteurs remercient le Centre National d'Etudes Spatiales pour son soutien financier et le centre de calcul IDRIS pour les heures de calcul allouées à ce projet.