

Simulation numérique des écoulements de suspension à l'aide d'une méthode de pénalisation des équations de Navier-Stokes

J.C. Brändle de Motta^a, S. Vincent^b, J.-L. Estivalezes^a, E. Climent^c

a. ONERA, 2 av. Edouard Belin, 31055 TOULOUSE

b. Université de Bordeaux, I2M, 16 av. Pey-Berland, 33607 PESSAC

c. IMFT, 1 allé du Professeur Camille Soula, 31400 TOULOUSE

Résumé :

Une méthode de simulation des écoulements particulaires avec des particules de taille finie est proposée. Il s'agit d'une méthode à un fluide pour laquelle la partie solide est représentée par une viscosité très élevée. Le calcul se réalise sur un maillage cartésien décalé. Les particules sont repérées de façon lagrangienne. Cette méthode de domaines fictifs a comme particularité que l'effet des particules sur le fluide est implicitement incorporé au travers d'une force d'interaction dans les équations de Navier-Stokes. Malgré le rapport des viscosités, la résolution des équations du mouvement converge en assurant les contraintes solide et incompressible.

Abstract :

A finite-size particle simulation for particulate flow model is presented. A one fluid model is used in which the solid character of the particles is treated by a high viscosity. The simulations are carried out on a staggered Cartesian grid. Particles are tracked in a Lagrangian manner. The particularity of this fictitious domain approach is that the effect of particles on the fluid is implicitly taken into account in the Navier-Stokes equations. The momentum equation solving ensures at the same time the solid and incompressible constraints.

Mots clefs : turbulence, particle flow, finite-size, VOF, fictitious domain

1 Introduction

Les écoulements particulaires sont présents dans des nombreux domaines. Selon différents régimes d'écoulements, on remarque que certaines particules sont utilisées comme traceurs alors que d'autres se placent de façon préférentielle dans un écoulement [1]. Afin de répondre aux besoins industriels, beaucoup des codes de calcul intègrent des modèles capables de simuler la présence de particules dans des écoulements. Ces modèles ne sont valables que pour des particules qui satisfont la séparation d'échelle entre leur diamètre et l'échelle de Kolmogorov. Une meilleure compréhension des écoulements près de ces limites permettrait d'améliorer ces modèles macroscopiques en fournissant des lois empiriques (par exemple la loi de traînée, lois de paroi) et des quantités statistiques (par exemple, des fonctions d'autocorrélation) et d'évaluer l'erreur commise en utilisant les modèles classiques. Il est donc nécessaire de réaliser des simulations numériques directes de ce type d'écoulement.

L'utilisation de la simulation numérique directe DNS semble adaptée, néanmoins, il est nécessaire d'avoir un code capable de simuler l'écoulement autour des particules ainsi que le transport de celles ci. Afin de réaliser ces DNS, il faut résoudre l'écoulement autour de la particule. Les particules sont donc plus grandes que les cellules du maillage utilisé pour résoudre l'écoulement. Plusieurs méthodes sont possibles dont la plus répandue actuellement est la méthode de frontière immergée, par exemple [2]. Dans cet exposé on va expliquer une approche différente basée sur le code numérique Thétis [3].

La première partie de cette communication consiste à expliquer les modèles et méthodes numériques. Une seconde partie est dédiée à illustrer les validations. Une dernière aux applications réalisées avec le code.

2 Modélisation des domaines fictifs pour des écoulements particuliers

Le domaine de calcul est séparé en deux sous domaines fictifs, un fluide et un solide, qui sont déterminés grâce aux positions des particules. Les équations de Navier-Stokes incompressibles en formulation 1-fluide sont résolues sur un maillage fixe. Elles sont valables dans le fluide et dans le solide. Afin de forcer le comportement solide, on pénalise les mailles intérieures à la particule avec une viscosité très élevée. Grâce à cette viscosité, le champ de vitesses à l'intérieur des particules a un comportement de solide très faiblement déformable. Dans l'implémentation actuelle de la pénalisation, le tenseur des contraintes visqueuses est divisé en trois contributions [4] : une pour l'élongation, une pour le cisaillement pur et une pour la rotation.

Dans la méthode de pénalisation, on travaille sur une grille décalée de type MAC généralisée, [5], en prenant en compte les différents termes de viscosité sur un maillage adapté (contributions sphériques de la viscosité sur les noeuds pression et contributions extradiagonales sur des noeuds localisés au centre des cellules du maillage). Cette approche permet une meilleure description de la zone solide et améliore la robustesse du solveur.

À chaque itération on résout la dynamique des particules et du fluide simultanément. Les étapes principales sont : I. L'actualisation des caractéristiques physiques ; II. Le traitement de interactions entre les particules par un modèle de collision ; III. La résolution des équations de Navier-Stokes ; IV. L'actualisation des positions des particules. Nous les décrivons ces étapes maintenant.

- I. Avec les positions des particules issues de l'itération précédente ou de l'initialisation, on doit pénaliser les mailles solides. On utilise pour ceci une fonction couleur ou indicatrice C , qui vaut 1 dans les cellules entièrement solides et 0 dans celles entièrement fluides. Dans les cellules coupées par l'interface fluide/solide, on place une grille de points fictifs et on vérifie combien sont à l'intérieur de la particule. Ceci nous permet de maîtriser la précision du calcul de la fraction solide, C . Dans notre cas on utilise une grille de 25 points par direction, ce qui assure une bonne précision de C , ce qui est largement suffisant pour avoir une bonne estimation de la fraction solide.

La masse volumique de chaque maille, ρ , est définie à l'aide des masses volumiques du fluide et du solide ρ_f et ρ_s au travers d'une moyenne arithmétique pondérée : $\rho = C\rho_s + (1 - C)\rho_f$.

Comme nous l'avons vu précédemment, la viscosité dynamique à l'intérieur des particules est très élevée. Le choix de la moyenne dans les cellules telles que $C \neq \{0, 1\}$ va s'avérer essentiel pour la consistance et la précision de la méthode de pénalisation.

Tout d'abord, il faut définir une fonction couleur \tilde{C} pour les noeuds de viscosité par interpolation des valeurs sur les noeuds voisin de pression car ceux-ci sont décalés sur le maillage.

Dans l'idéal cette méthode utilise des viscosités solides extrêmement grandes. On peut retrouver ces viscosités à partir du coefficient de Poisson et le module de Young. Dans la pratique, le conditionnement des matrices du solveur est lié à ce saut de viscosité. On utilise donc un saut de l'ordre de 100 à 1000 fois la viscosité du fluide, ce qui impose des déformations très faibles des sous-domaines solides lors de la résolution des équations de conservation de la quantité de mouvement. En plus, notre solveur permet de converger assez vite pour ces sauts de viscosité.

Pour définir la viscosité dans les mailles coupées par l'interface fluide/solide, on ne peut pas utiliser une moyenne arithmétique. En effet, vu que l'on définit une viscosité solide, μ_f comprise entre 100 et 1000 fois celle du fluide, une moyenne arithmétique surestime la viscosité de ces mailles. Cela revient à rendre entièrement solide les noeuds associés. Dans le cas de la sédimentation, utilisant une moyenne arithmétique, on trouve de vitesses limites correspondant à des particules plus grandes.

Après des études de convergence, la moyenne harmonique s'est montrée comme la plus précise : $\frac{\mu_f \mu_s}{C\mu_f + (1-C)\mu_s}$. Certains auteurs justifient ce choix qui assure la continuité du tenseur des contraintes au travers de l'interface [6].

- II. Afin d'éviter le chevauchement entre les particules il faut inclure des modèles de choc solide-solide. Si l'on veut avoir des rebonds représentatifs de la physique, on a tout intérêt à inclure des modèles qui prennent en compte la couche de lubrification car celle-ci n'est pas résolue par les équations de Navier-Stokes pour les maillages utilisés. Une force d'interaction entre particules répondant à ces besoins a été incluse dans le code. Le détail de sur cette force fait objet d'une autre présentation dans ce même congrès [7]. Dans nos simulations cette force est incluse comme force volumique dans le second membre des équations de Navier-Stokes.
- III. Le saut de viscosité requiert un solveur robuste qui maintient les contraintes d'incompressibilité et de déformation nulle. La méthode du lagrangien augmenté s'est avérée la plus efficace pour nos simulations [8]. Elle consiste en une étape de résolution de l'équation de la quantité de mouvement et une étape pour actualiser la pression. Pour la résolution du système linéaire un solveur BICG avec préconditionnement ILU est utilisé.
- IV. Une fois le champ de vitesse connu, la position des particules est actualisée par un transport lagrangien. Il est donc nécessaire de connaître la vitesse des particules au temps donné, \mathbf{V}_i^{n+1} . Plusieurs approches sont possibles. La plus naturelle est de faire la moyenne de la vitesse des noeuds intérieurs à la particule. Cette approche a un défaut majeur : le calcul de la vitesse est dépendant de la position de la particule par rapport au maillage. Ceci peut se voir quand on considère une particule dans un champ de cisaillement. Si on fait varier la position de la particule dans la direction de l'évolution du cisaillement, lorsque qu'un noeud solide devient fluide, c'est à dire quand celui-ci n'est plus à l'intérieur de la particule, on observe un saut dans le calcul de vitesse lagrangienne. La solution qui s'est avérée être la plus précise est d'utiliser 2 points par direction, positionnés à mi-rayon. On interpole les vitesses en ces points et on réalise une moyenne. Le choix d'utiliser 2 points par direction permet d'accéder à la vitesse de rotation de la particule.

Une méthode semi-implicite est utilisée pour actualiser la position des particules : $\mathbf{X}_i^{n+1} = \mathbf{X}_i^n + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{V}_i^n + \mathbf{V}_i^{n+1})$

3 Validations

Plusieurs validations ont été faites. Par manque de place, on ne présente ici que deux d'entre elles. Selon les validations, on a trouvé que l'ordre de convergence empirique de la méthode est entre 1.2 et 1.8.

3.1 Sédimentation d'une particule

Les résultats ici présentés correspondent à la comparaison avec les expériences de Ten Cate [9]. Il s'agit de la chute d'une particule à faible nombre de Reynolds.

La figure 1 compare les résultats de deux maillages différents avec les expériences. On retrouve la bonne vitesse limite, même pour 8 mailles par diamètre. Comme pour les résultats présentés par [4], on trouve un décalage à l'arrivée. Ceci peut provenir d'une différence de la position initiale de la particule qui diffère entre l'expérience [9] et les simulation (un demi diamètre) .

Afin de valider une large gamme de Reynolds, nous avons aussi traité la chute bidimensionnelle d'un disque. On a pu ainsi vérifier que pour des faibles nombres de Stokes, la méthode vérifie l'écoulement de Faxen. De même on s'est intéressé aux nombres de Reynolds plus grands. Avec 16 mailles par diamètre, on reproduit la chute d'une particule à $Re = 280$ dans une cube infini [10].

3.2 Rotation d'une particule

Dans la sous-section précédente, nous avons validé le déplacement d'une particule en sédimentation. Il est important aussi de valider la rotation et le cisaillement autour de la particule. On réalise donc

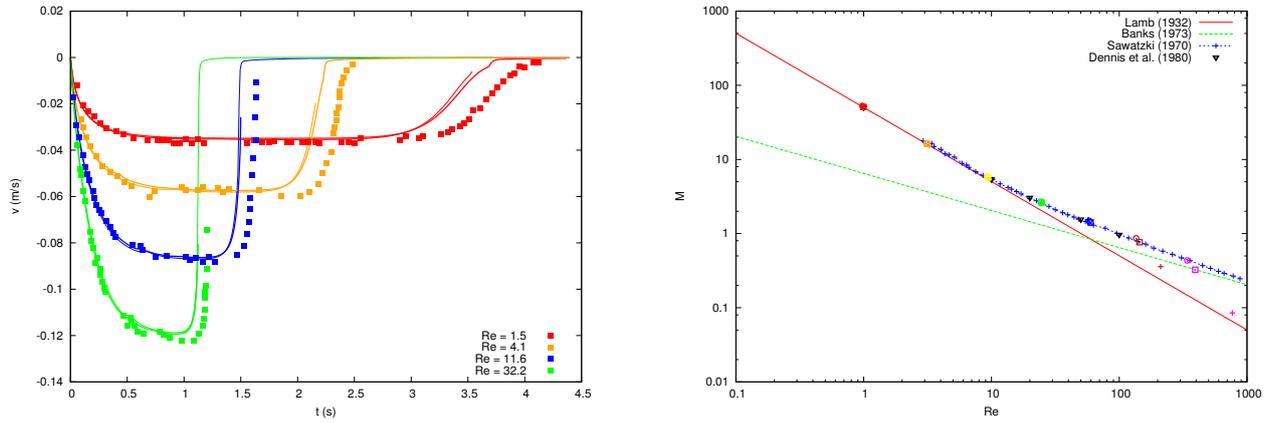


FIGURE 1 – A gauche : Vitesse de chute pour la sédimentation. Trait épais : 16 cellules par diamètre - Trait fin : 8 mailles par diamètre. Carrés [9]. A droite : Rotation, corrélation entre le moment adimensionné et le nombre de Reynolds. Les lignes correspondent aux références. Les symboles correspondent à nos simulations pour différents maillages (croix, rond et carré pour 10,20 et 40 cellules par diamètre). Les différents couleurs (rouge, orange, jaune, vert, bleu, magenta et rose) correspondent respectivement à des viscosités différentes $\mu = 10^b$, $b = \{0, 0.5, \dots, 3\}$.

l'analogie de la sédimentation (c'est à dire la comparaison entre la force volumique du poids et la vitesse de chute) mais en rotation : on a un couple distribué dans le volume, noté T , à l'intérieur de la particule et on évalue la vitesse de rotation ω . Le cas traité ici est celui d'une particule dont la masse volumique est égale à celle du fluide.

Dans la littérature, on trouve plusieurs corrélations entre le couple adimensionné, $M = \frac{2T}{\rho_f R^3 \omega^2}$ et le Reynolds de rotation $Re_\omega = \frac{R^2 \omega \rho}{\mu_f}$. Lamb [11] donne la relation $Re_\omega = \frac{16\pi}{M}$ pour de faibles Reynolds. Plusieurs articles donnent des corrélations pour des grands Reynolds, par exemple [12] donne $Re_\omega = 2.381^{-2} M^2$. Pour des Reynolds intermédiaires, on trouve également les expériences de [13] et les calculs de [14].

Afin d'éviter les effets de bord, on utilise une boîte de longueur $24R$ avec des conditions de glissement sur les limites du domaine de calcul. Le rayon et la masse volumique sont unitaires, soit $R = 1$ et $\rho = 1$. On introduit un couple volumique dont l'intensité est choisie de sorte à avoir une vitesse de rotation proche de l'unité : $T = 8\pi\mu_f$. On fait varier la viscosité du fluide pour balayer les différents nombres de Reynolds.

Sur la figure 1, on montre les vitesses de rotation à l'état stabilisé pour différents maillages. On constate que pour des Reynolds inférieurs à 10, la méthode est précise avec seulement 10 cellules par diamètre. Pour des Reynolds supérieurs, on a besoin d'un maillage plus fin.

De plus, l'écoulement autour de la particule a été validé à l'aide des résultats donnés dans [14].

4 Applications

4.1 Turbulence homogène et isotrope (THI)

Un calcul d'une simulation directe de la turbulence homogène et isotrope a été réalisé. Le premier cas traité est une turbulence décroissante dont le Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor est de $Re_\lambda = 39$. Le maillage utilisé afin de résoudre toutes les échelles est de 256^3 . On introduit 222 particules dont la masse volumique est deux fois plus grande que celle du fluide. Les particules occupent 3% du volume total. Ce calcul permet la comparaison de la décroissance de l'énergie cinétique du fluide visqueux seul, avec celle du fluide visqueux contenant des particules. Sur 512 processeurs, le calcul prends environ 3 heures par temps de retournement de la turbulence.

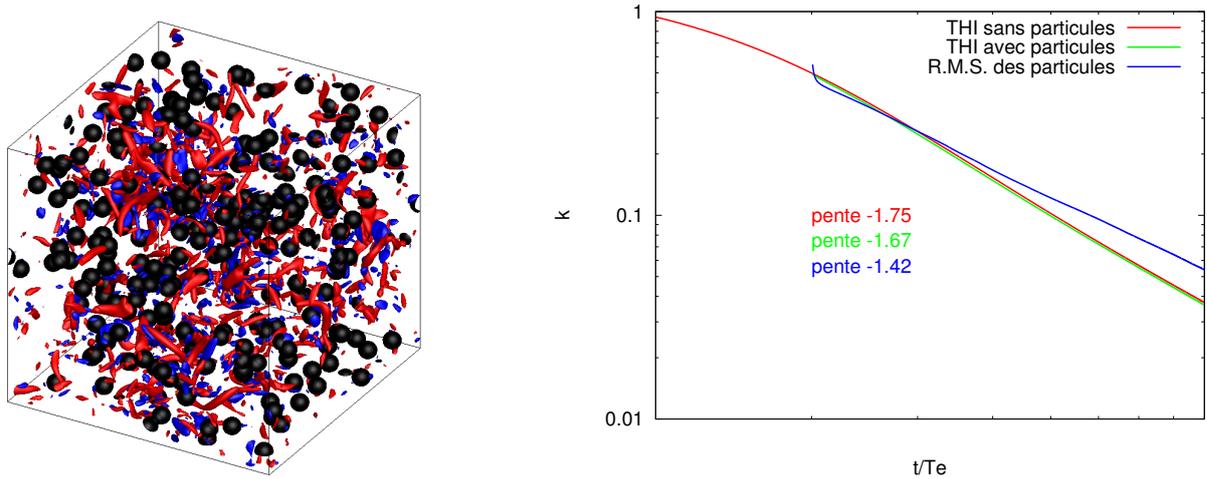


FIGURE 2 – Instant de la THI, à gauche. Décroissance de la THI, à droite.

Sur ce cas, les résultats sont encore préliminaires. En effet, le but principal est de faire une étude paramétrique, ce qui impose une quantité de simulations non négligeable. Pour le cas cité plus haut, on montre dans la figure 2 la décroissance de la THI avec et sans particules ainsi que la décroissance de la vitesse des particules. On peut constater que l'influence du milieu dilué sur la turbulence n'est pas prédominante.

4.2 Lit fluidisé

Une simulation d'un lit fluidisé contenant 2133 particules a été réalisée, conformément aux expériences de [15]. La fraction solide en régime de fluidisation est supérieure à 20% dans le lit, pour une vitesse débitante fluide de 0.12 m/s . Cette simulation pousse les modèles au maximum car ici l'influence des particules sur l'écoulement est essentielle. En plus, le nombre de chocs est très important.

Dans la figure 3 on montre la variance du déplacement divisée par le temps. Le coefficient d'autodiffusion est déterminé par la limite qui prend cette variable quand le temps tend vers l'infini. On retrouve dans le tableau suivant ces coefficients d'autodiffusion. Les simulations montrent un bon accord avec l'expérience. Connaissant les trajectoires complètes on peut maintenant accéder à des grandeurs non mesurables lors des expériences, comme par exemple, le taux de collisions.

TABLE 1 – Comparaison entre la simulation et l'expérience de [15]

| $D_{ii} = \lim_t \frac{Var_{ii}}{t}$ | Numérique | Experimental |
|--------------------------------------|---------------------|---------------------|
| $D_{xx} [m^2/s]$ | $7.7 \cdot 10^{-5}$ | $5.4 \cdot 10^{-5}$ |
| $D_{yy} [m^2/s]$ | $8.6 \cdot 10^{-5}$ | $5.1 \cdot 10^{-5}$ |
| $D_{zz} [m^2/s]$ | $9.5 \cdot 10^{-4}$ | $6.8 \cdot 10^{-4}$ |

5 Conclusion

La méthode de pénalisation tensorielle permet de réaliser des simulations directes et complètement résolues des écoulements particulaires. Les temps de calcul restent raisonnables pour les simulations d'une THI particulaire (moins d'un jour) et sont plus prohibitifs pour le lit fluidisé (de l'ordre de 15 jours) devant les temps physiques requis pour mener des statistiques lagrangiennes.

La modélisation numérique proposée est en plus extensible à des particules de tailles différentes et formes variées.

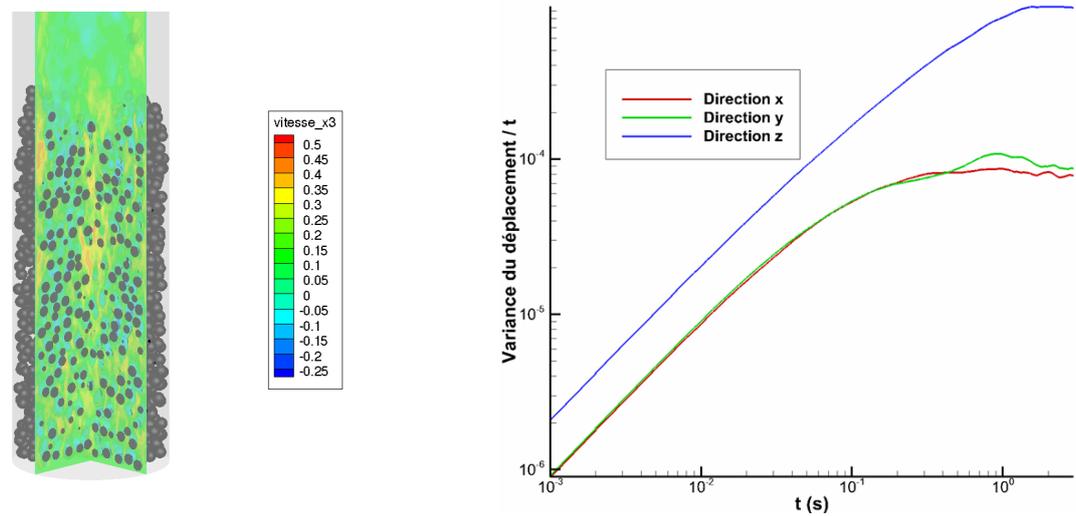


FIGURE 3 – Instant du lit fluidisé, à gauche. Variance du déplacement des particules divisée par le temps, à droite

Références

- [1] Squires K. D. and Eaton J. K. Preferential concentration of particles by turbulence. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3, 1169, 1991.
- [2] Uhlmann M. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 209(2), 448–476, November 2005.
- [3] <http://thetis.enscbp.fr>.
- [4] Randrianarivelo T. N., Pianet G., Vincent S., and Caltagirone J. P. Numerical modelling of solid particle motion using a new penalty method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 47(10-11), 1245–1251, 2005.
- [5] Harlow F. and Welsh J. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow with free surface. *Physics of Fluids*, 8, 2182–2189, 1965.
- [6] Ritz J. B. and Caltagirone J. P. A numerical continuous model for the hydrodynamics of fluid particle systems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30(8), 1067–1090, 1999.
- [7] Brändle de Motta J. C., Gazanion B., Estivalezes J.-L., Climent E., and Vincent S. Prise en compte des effets de lubrification lors de la simulation de la collision de deux particules dans un fluide. In *Congrès Français de Mécanique, Besançon, August 2011*.
- [8] Vincent S., Randrianarivelo T. N., Pianet G., and Caltagirone J. Local penalty methods for flows interacting with moving solids at high reynolds numbers. *Computers & Fluids*, 36(5), 902–913, 2007.
- [9] ten Cate A., Nieuwstad C. H., Derksen J. J., and den Akker H. E. A. V. Particle imaging velocimetry experiments and lattice-Boltzmann simulations on a single sphere settling under gravity. *Physics of Fluids*, 14(11), 4012, 2002.
- [10] Mordant N. and Pinton J. Velocity measurement of a settling sphere. *The European Physical Journal B*, 18(2), 343–352, 2000.
- [11] Lamb H. *Hydrodynamics*. Cambridge University Press, pages 588–589, 1932.
- [12] Banks W. H. H. *Acta Mechanica*, 24, 273, 1976.
- [13] Sawatzki O. *Acta Mechanica*, 9, 159, 1970.
- [14] Dennis S. C. R., Singh S. N., and Ingham D. B. The steady flow due to a rotating sphere at low and moderate reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, 101(02), 257–279, 1980.
- [15] Corona A. A. Fluctuations of particles in a fluidized bed. PhD thesis, INPT, 2008.