



Apport des méthodes cinétiques à la simulation d'écoulements dans les milieux poreux

Thèse encadrée par **J-L. Rouet**¹ et **B. Izrar**²

Financement : Bourse de la Région Centre

Léonard de Izarra

ISTO, Orléans

Le 13 Janvier 2012

¹Pr., ISTO Orléans

²Pr., ICARE Orléans

- 1 Contexte et objectifs
- 2 Présentation de la méthode
- 3 Résultats et validation de la méthode
- 4 Conclusion et Perspectives

Proposer une méthode pour simuler des écoulements de gaz en milieux poreux

■ Échelle de description :

- Échelles des pores

■ Qualités :

- Valide du régime hydrodynamique jusqu'au régime transitionnel ($0 < K_n \sim 1$)
- Applicable dans des géométries complexes

■ Limites de validité :

- Écoulements de faible Mach ($M_a < 0.1$)
- Gaz parfaits

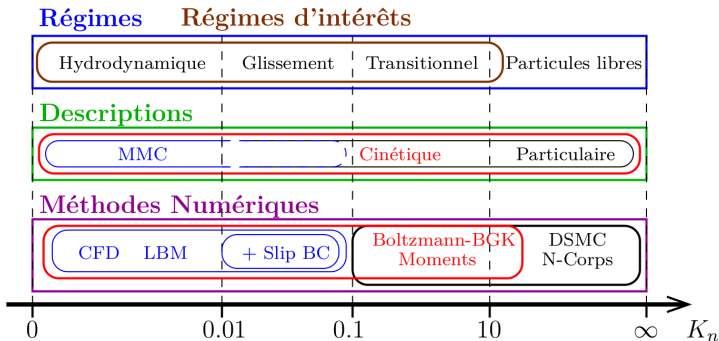
■ Applications :

- Injection/stockage du CO_2 ou de l'hydrogène en milieu poreux
- Piles à combustibles
- Systèmes micro-électro-mécaniques (MEMS)

Régime d'un écoulement micrométrique \Rightarrow Nombre de Knudsen

$$K_n = \frac{\text{Libre parcours moyen des particules du fluide}}{\text{Dimension caractéristique de l'écoulement}} = \frac{\lambda}{L}$$

$$\text{avec } \lambda \propto \frac{1}{n}$$



- Paroi en \mathbf{x}_W de normale \mathbf{n}
 - U_W et T_W : vitesse tangentielle et température de la paroi
- Vitesse de glissement à la paroi

$$u_{\text{slip}} = u(\mathbf{x}_W) - U_W = C_1 K_n \mathbf{n} \left. \frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}_W} + C_2 K_n^2 \mathbf{n} \mathbf{n} : \left. \frac{\partial^2 u}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}_W}$$

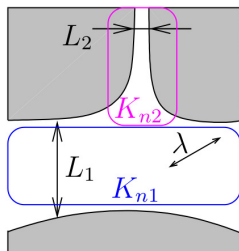
- Coefficients $C_1 = 1$ et $C_2 = 0.13$
- Saut de température à la paroi

$$T_{\text{jump}} = T(\mathbf{x}_W) - T_W = \frac{D + 2}{D + 1} \frac{K_n}{P_r} \mathbf{n} \left. \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}_W}$$

- D : Dimension de l'espace
 - P_r : Nombre de Prandtl
- Dans la limite hydrodynamique ($K_n \rightarrow 0$) : $u_{\text{slip}} \rightarrow 0$ et $T_{\text{jump}} \rightarrow 0$

Plusieurs régimes d'écoulements peuvent coexister au sein d'un même domaine

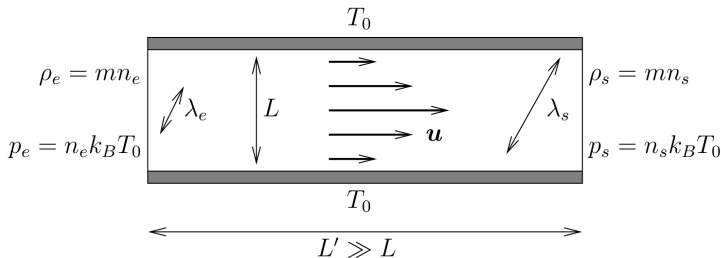
- Pour des raisons géométriques de confinement : plusieurs tailles caractéristiques L
- Pour des raisons thermodynamiques : variations de λ



$$\lambda = C^{te} \text{ et } L_1 > L_2 \Rightarrow K_{n1} < K_{n2}$$

Plusieurs régimes d'écoulements peuvent coexister au sein d'un même domaine

- Pour des raisons géométriques de confinement : plusieurs tailles caractéristiques L
- Pour des raisons thermodynamiques : variations de λ



$$\lambda = \frac{1}{n\sigma} \Rightarrow \text{si } n \searrow \text{ alors } \lambda \nearrow$$
$$n_e > n_s \Rightarrow \lambda_e < \lambda_s$$

Plusieurs régimes d'écoulements peuvent coexister au sein d'un même domaine

- Pour des raisons géométriques de confinement : plusieurs tailles caractéristiques L
- Pour des raisons thermodynamiques : variations de λ

Les deux effets peuvent se cumuler

- Description cinétique valable pour tout $K_n \rightarrow$ Équation de Boltzmann

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$$

- $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$: Fonction de distribution à une particule
 - Probabilité de trouver une particule avec la vitesse \mathbf{v} à la position \mathbf{x} à l'instant t
 - $\mathbf{g} = \mathbf{F}/m$: Accélération extérieure
 - $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$: Effets des collisions entre particules sur f
- L'opérateur de collision BGK sera retenu pour sa simplicité

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = -\frac{1}{\tau} (f - f^{eq})$$

- $f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$: Fonction de *distribution* d'équilibre de *Maxwell-Boltzmann*
 - τ : Temps de relaxation de f vers l'équilibre f^{eq}
- Représente un gaz de viscosité cinématique $\nu = \theta\tau$ et de diffusivité thermique $\alpha = \theta\tau$ en régime hydrodynamique ($\tau \ll 1$)

- Description cinétique valable pour tout $K_n \rightarrow$ Équation de Boltzmann

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$$

- $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$: Fonction de distribution à une particule
 - Probabilité de trouver une particule avec la vitesse \mathbf{v} à la position \mathbf{x} à l'instant t
 - $\mathbf{g} = \mathbf{F}/m$: Accélération extérieure
 - $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$: Effets des collisions entre particules sur f
- L'opérateur de collision BGK sera retenu pour sa simplicité

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = -\frac{1}{\tau} (f - f^{eq})$$

- $f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$: Fonction de *distribution* d'équilibre de *Maxwell-Boltzmann*
 - τ : Temps de relaxation de f vers l'équilibre f^{eq}
- Représente un gaz de viscosité cinématique $\nu = \theta\tau$ et de diffusivité thermique $\alpha = \theta\tau$ en régime hydrodynamique ($\tau \ll 1$)

■ Équation BGK

$$\underbrace{\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f}_{\text{Transport}} = \underbrace{-\frac{1}{\tau}(f - f^{eq})}_{\text{Collisions (BGK)}}$$

■ Distribution d'équilibre

$$f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{(2\pi\theta(\mathbf{x}, t))^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2}{2\theta(\mathbf{x}, t)}\right)$$

■ f et f^{eq} partagent leurs trois premiers moments :

$$\text{Densité : } \rho = \int f \, d\mathbf{v} = \int f^{eq} \, d\mathbf{v}$$

$$\text{Impulsion : } \rho \mathbf{u} = \int \mathbf{v} f \, d\mathbf{v} = \int \mathbf{v} f^{eq} \, d\mathbf{v}$$

$$\text{Énergie Totale : } D\rho\theta + \rho u^2 = \int \mathbf{v}^2 f \, d\mathbf{v} = \int \mathbf{v}^2 f^{eq} \, d\mathbf{v}$$

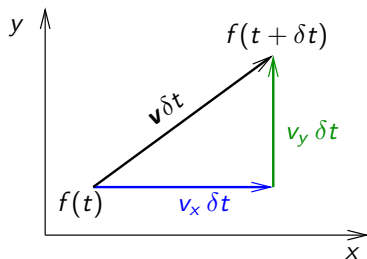
Méthode de résolution de l'équation de Boltzmann-BGK

- Splitting en temps des opérateurs de transport et de collision
- Transport
 - Splitting d'espace
 - Schéma limiteur de flux
- Méthode spectrale en vitesses : projection sur la base des polynômes d'Hermite
 - Développement implicite de f selon l'ordre de la quadrature
 - Développement explicite de f^{eq} à un ordre limité (ordre 2 en pratique)
- Quadrature de Gauss-Hermite pour le calcul des moments de f
 - Induction de la discrétisation de l'espace des vitesses
- Force extérieure appliquée lors des collisions par modification de f^{eq}
- Conditions aux limites (2 types)
 - Conditions aux bords **de Maxwell avec accommodation totale**
 - Conditions aux limites pour les **frontières ouvertes**
 - Densité (ρ) constante, température (θ) constante, pression ($p = \rho\theta$) constante etc.
 - **Extrapolation de Richardson** pour les champs libres

Algorithme :

- 1: **Transport de $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ sans collisions**
- 2: Calcul des moments de $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$
- 3: Détermination de $f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$
- 4: Relaxation de $f \rightarrow \hat{f}^{eq}$ (Collisions + Force extérieure)
- 5: **go to 1**

$$\frac{\delta f}{\delta t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = 0$$



Algorithme :

- 1: Transport de $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ sans collisions
- 2: Calcul des moments de $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$
- 3: Détermination de $f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$
- 4: Relaxation de $f \rightarrow \hat{f}^{eq}$ (Collisions + Force extérieure)
- 5: **go to 1**

$$\text{Densité : } \rho = \int f d^D \mathbf{v}$$

$$\text{Impulsion : } \rho \mathbf{u} = \int \mathbf{v} f d^D \mathbf{v}$$

$$\text{Énergie Totale : } D \rho \theta + \rho u^2 = \int \mathbf{v}^2 f d^D \mathbf{v}$$

$$\Rightarrow \rho, \mathbf{u}, \theta$$

Algorithme :

- 1: Transport de $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ sans collisions
- 2: Calcul des moments de $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$
- 3: Détermination de $f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$
- 4: Relaxation de $f \rightarrow \hat{f}^{eq}$ (Collisions + Force extérieure)
- 5: **go to 1**

$$\text{Densité : } \rho = \int f d^D \mathbf{v}$$

$$\text{Impulsion : } \rho \mathbf{u} = \int \mathbf{v} f d^D \mathbf{v}$$

$$\text{Énergie Totale : } D \rho \theta + \rho u^2 = \int \mathbf{v}^2 f d^D \mathbf{v}$$

$$\Rightarrow \rho, \mathbf{u}, \theta$$

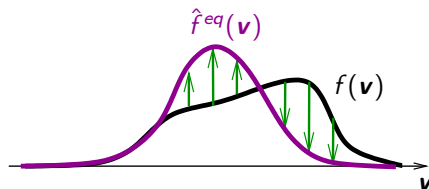
$$f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{(2\pi \theta(\mathbf{x}, t))^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2}{2\theta(\mathbf{x}, t)}\right)$$

Algorithme :

- 1: Transport de $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ sans collisions
- 2: Calcul des moments de $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$
- 3: Détermination de $f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$
- 4: Relaxation de $f \rightarrow \hat{f}^{eq}$ (Collisions + Force extérieure)
- 5: **go to 1**

\hat{f}^{eq} : f^{eq} calculée avec $\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \mathbf{g}\delta t$

$$\frac{\delta f}{\delta t} = -\frac{1}{\tau}(f - \hat{f}^{eq})$$



- Les fonctions de distribution f et f^{eq} sont développées sur la base des polynômes d'Hermite $\mathcal{H}_n^{[\theta_0]}$ à des ordres respectifs N et N^{eq}

$$f(x, v, t) = w^{[\theta_0]}(v) \sum_{n=0}^N \frac{a_n(x, t)}{n!} \mathcal{H}_n^{[\theta_0]}(v)$$

$$f^{eq}(x, v, t) = w^{[\theta_0]}(v) \sum_{n=0}^{N^{eq}} \frac{a_n^{eq}(x, t)}{n!} \mathcal{H}_n^{[\theta_0]}(v)$$

- Avec $w^{[\theta_0]}(v) = 1/\sqrt{2\pi\theta_0} \exp(-v^2/2\theta_0)$
- Les coefficients a_n et a_n^{eq} sont les coefficients d'Hermite des développements
 - Ils sont donnés par la **relation d'orthogonalité** des polynômes d'Hermite généralisés :

$$a_n(x, t) = \theta_0^n \int_{-\infty}^{\infty} f(x, v, t) \mathcal{H}_n^{[\theta_0]}(v) dv$$

$$a_n^{eq}(x, t) = \theta_0^n \int_{-\infty}^{\infty} f^{eq}(x, v, t) \mathcal{H}_n^{[\theta_0]}(v) dv$$

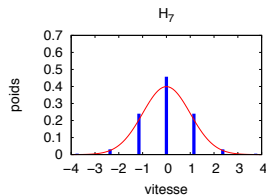
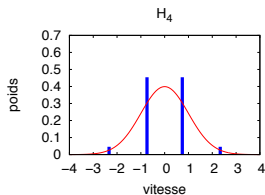
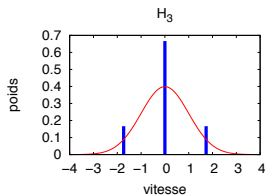
- Ils sont essentiellement les moments de f et f^{eq}

- Une quadrature de **Gauss-Hermite à q points** permet de calculer **exactement** les q premiers coefficients a_n de f :

$$a_n = \theta_0^n \int_{-\infty}^{\infty} w^{[\theta_0]}(v) \frac{f \mathcal{H}_n^{[\theta_0]}(v)}{w^{[\theta_0]}(v)} dv = \theta_0^n \sum_{i=1}^q f_i \mathcal{H}_n^{[\theta_0]}(v_i)$$

$$\text{avec } f_i = \omega_i \frac{f(x, v_i, t)}{w^{[\theta_0]}(v_i)}$$

- Les v_i ($i = 1 \dots q$) sont les **q racines** du polynôme $\mathcal{H}_q^{[\theta_0]}$
- Les ω_i ($i = 1 \dots q$) sont les **q poids** de la quadrature
- f_i est une fonction de distribution discrète transportée à la vitesse v_i



- Une quadrature de **Gauss-Hermite à q points** permet de calculer **exactement** les q premiers coefficients a_n de f :

$$a_n = \theta_0^n \int_{-\infty}^{\infty} w^{[\theta_0]}(v) \frac{f \mathcal{H}_n^{[\theta_0]}(v)}{w^{[\theta_0]}(v)} dv = \theta_0^n \sum_{i=1}^q f_i \mathcal{H}_n^{[\theta_0]}(v_i)$$

$$\text{avec } f_i = \omega_i \frac{f(x, v_i, t)}{w^{[\theta_0]}(v_i)}$$

- Les v_i ($i = 1 \dots q$) sont les **q racines** du polynôme $\mathcal{H}_q^{[\theta_0]}$
- Les ω_i ($i = 1 \dots q$) sont les **q poids** de la quadrature
- f_i est une fonction de distribution discrète transportée à la vitesse v_i
- Les moments conservés de f_i sont :

$$\rho = \sum_{i=1}^q f_i \quad \rho u = \sum_{i=1}^q v_i f_i \quad \rho \theta + \rho u^2 = \sum_{i=1}^q v_i^2 f_i$$

- Exact si le nombre de vitesses discrètes $q \geq 3$

Pour une troncature de f^{eq} à l'ordre $N^{eq} = 2$

$$f_i^{eq} = \omega_i \frac{f^{eq}(x, v_i, t)}{w(v_i)} = \omega_i \sum_{n=0}^2 \frac{a_n(x, t)}{n!} \mathcal{H}_n^{[\theta_0]}(v_i)$$

s'exprime explicitement :

$$f_i^{eq} = \omega_i \rho \left(1 + \frac{u v_i}{\theta_0} + \frac{(u v_i)^2}{2 \theta_0^2} + \frac{(\theta - \theta_0)}{2 \theta_0} \left(\frac{v_i^2}{\theta_0} - 1 \right) - \frac{u^2}{2 \theta_0} \right)$$

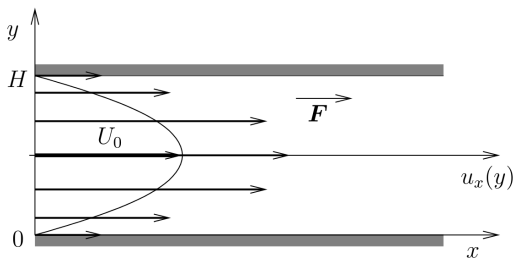
avec :

$$\rho = \sum_{i=1}^q f_i \quad \rho u = \sum_{i=1}^q v_i f_i \quad \rho \theta + \rho u^2 = \sum_{i=1}^q v_i^2 f_i$$

Exacts si le nombre de vitesses discrètes $q \geq 3$

Résultats et validation de la méthode

Écoulement de Poiseuille – Force extérieure



- U_0 : vitesse maximale du champ de vitesse en régime hydrodynamique
- **Ligne continue** : champ de vitesse en régime hydrodynamique
- **Flèches** : champ de vitesse avec glissement

$$\text{Champ de vitesse : } u_x(y) = \underbrace{4 U_0 \left(\frac{y}{H} - \frac{y^2}{H^2} \right)}_{\text{Composante hydrodynamique}} + \underbrace{4 U_0 (C_1 K_n + 2 C_2 K_n^2)}_{\text{Glissement}}$$

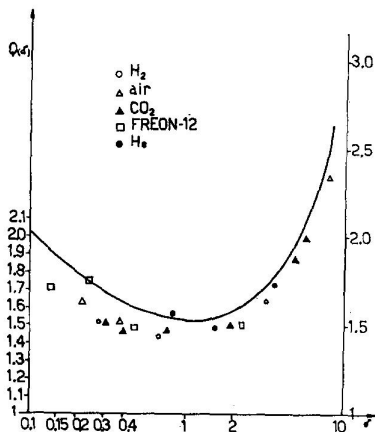
$$\text{Débit : } Q = 4 U_0 \left(\frac{1}{6} + C_1 K_n + 2 C_2 K_n^2 \right)$$

Résultats et validation de la méthode

Écoulement de Poiseuille avec glissement

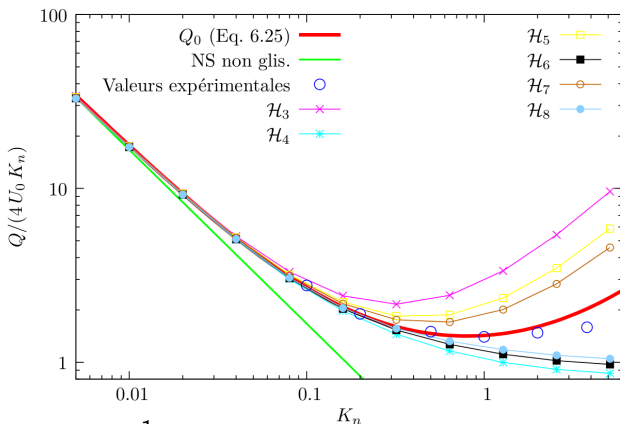
■ Débits expérimentaux pour le Poiseuille plan

- Les abscisses sont $\delta = (K_n)^{-1}$ et les ordonnées le débit normalisé $Q/(4 U_0 K_n)$
- On remarque que les résultats ne dépendent que très peu du gaz



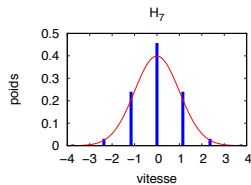
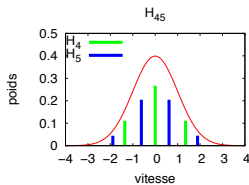
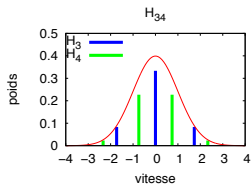
■ Convergence alternée

- Schémas d'ordres impairs \Rightarrow Surestimation du débit
- Schémas d'ordres pairs \Rightarrow Sous-estimation du débit



— $Q_0 = \frac{1}{6 K_n} + C_1 + 2 C_2 K_n$ avec $C_1 = 1$, $C_2 = 0.13$

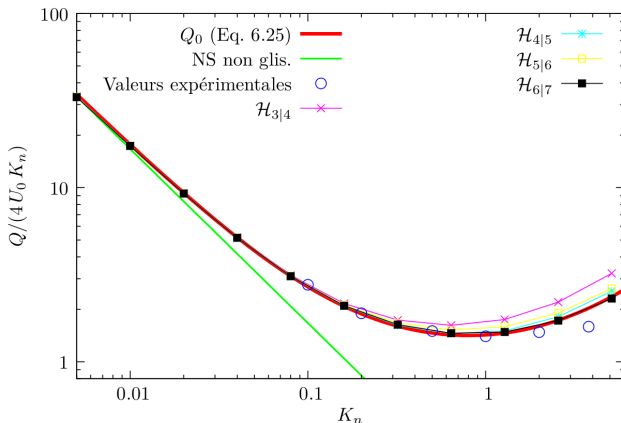
- Convergence alternée
 - Schémas d'ordres **impairs** \Rightarrow Surestimation du débit
 - Schémas d'ordres **pairs** \Rightarrow Sous-estimation du débit
- Idée : **Compenser** la **surestimation** des schémas d'**ordres impairs** par la **sous-estimation** des schémas d'**ordres pairs** en **combinant** des schémas d'ordres successifs
 - Introduction de **schémas composites**
- Vitesses et poids des quadratures composites $\mathcal{H}_{3|4}$, $\mathcal{H}_{4|5}$ et \mathcal{H}_7 (pour comparaison) :



■ Schémas "composites"

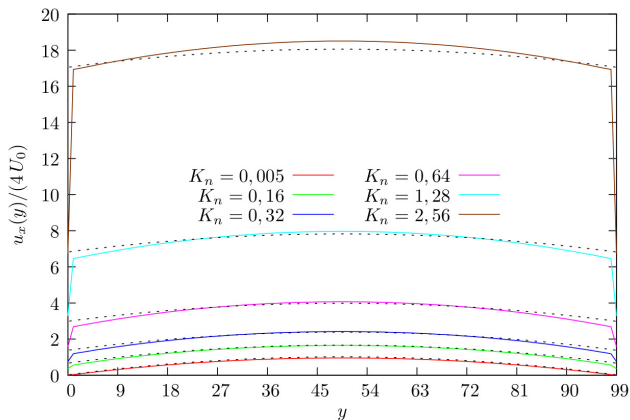
■ $\mathcal{H}_{3|4}$ surestime encore le débit

■ Convergence vers les valeurs expérimentales pour $\mathcal{H}_{4|5}$, $\mathcal{H}_{5|6}$, ... pour $K_n \lesssim 2$



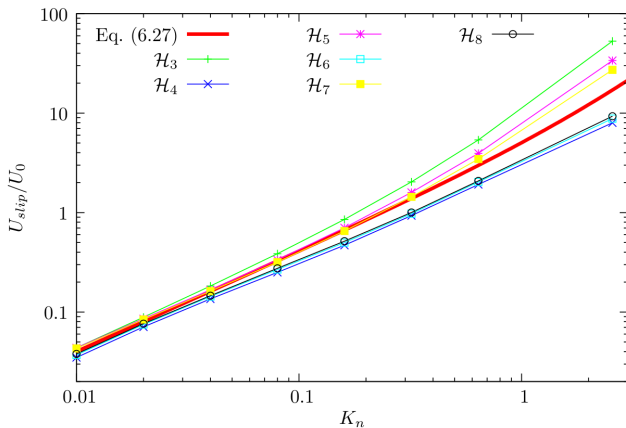
$$- Q_0 = \frac{1}{6 K_n} + C_1 + 2 C_2 K_n \text{ avec } C_1 = 1, C_2 = 0.13$$

$$\text{--- } u_x(y)/(4 U_0) = \underbrace{\left(\frac{y}{H} - \frac{y^2}{H^2} \right)}_{\text{Composante hydrodynamique}} + \underbrace{(C_1 K_n + 2 C_2 K_n^2)}_{\text{Glissement}}$$



Profils obtenus par $\mathcal{H}_{4|5}$

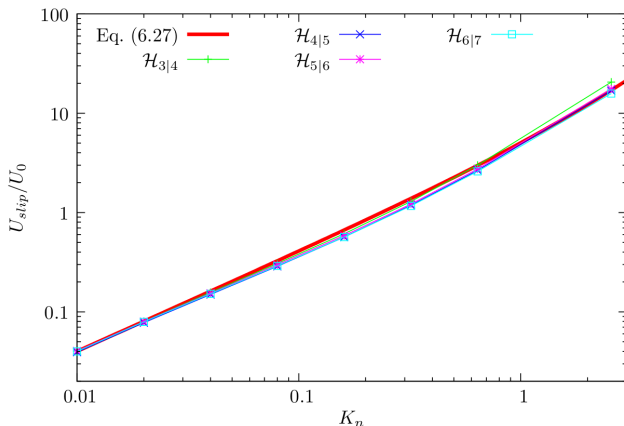
- Schémas "purs" \Rightarrow Convergence alternée
 - Schémas d'ordres impairs \Rightarrow Surestimation du glissement
 - Schémas d'ordres pairs \Rightarrow Sous-estimation du glissement



— $\frac{U_{\text{slip}}}{U_0} = 4 (C_1 K_n + 2 C_2 K_n^2)$ avec $C_1 = 1$, $C_2 = 0.13$

- Schémas "composites"

- Convergence vers les valeurs théoriques de tous les schémas

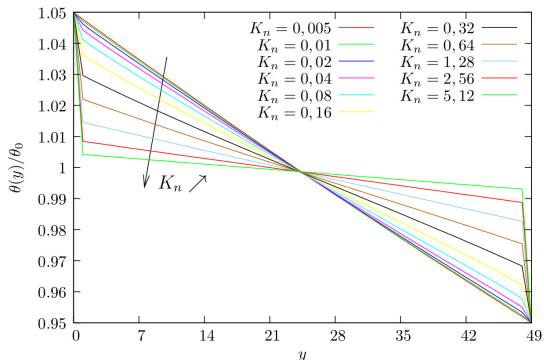


— $\frac{U_{slip}}{U_0} = 4 (C_1 K_n + 2 C_2 K_n^2)$ avec $C_1 = 1$, $C_2 = 0.13$

Résultats et validation de la méthode

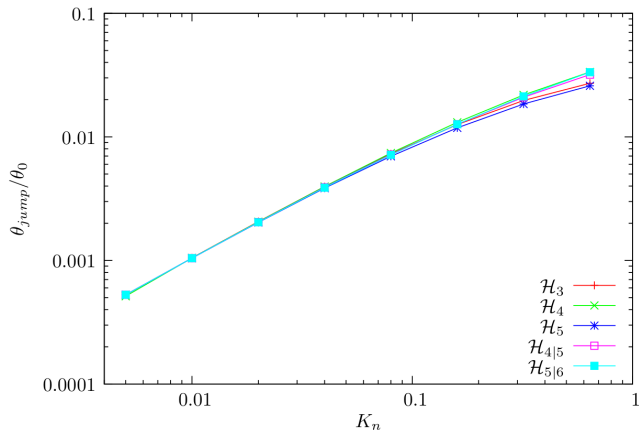
Validation de la thermique – Saut de température à la paroi

- Champs de température entre deux parois maintenues aux températures $\hat{\theta}_W \pm = 1 \pm 0.05$



- Validation : $[\hat{\theta}(y_W) - \hat{\theta}_W] = \frac{4}{3} K_n \left. \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \hat{y}} \right|_{\hat{y}_W} ?$

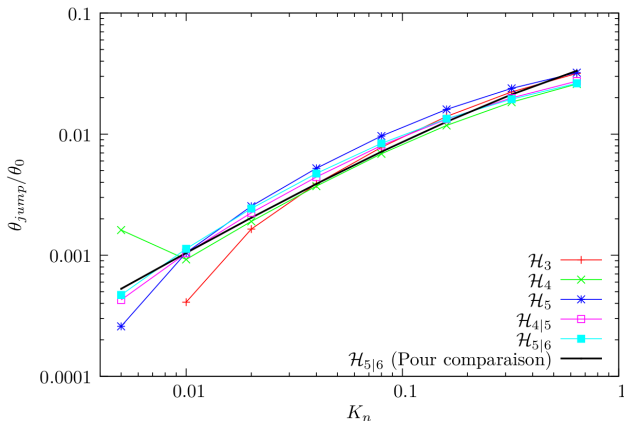
- Mesures de $[\hat{\theta}(\hat{y}_W) - \hat{\theta}_W]$ pour différentes valeurs de K_n



Résultats et validation de la méthode

Validation de la thermique – Saut de température à la paroi

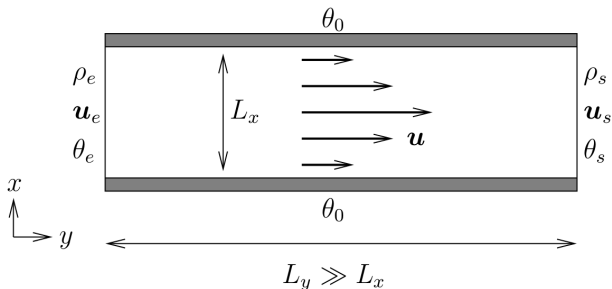
- Mesures de $\frac{4}{3} K_n \left. \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \hat{y}} \right|_{\hat{y}_W}$ pour différentes valeurs de K_n
- **Ligne noire** : Mesures de $[\hat{\theta}(y_W) - \hat{\theta}_W]$ obtenues grâce au schéma $\mathcal{H}_{5|6}$



- $\hat{\theta}(y_W) - \hat{\theta}_W = \frac{4}{3} K_n \left. \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \hat{y}} \right|_{\hat{y}_W}$ est bien respectée par les différents schémas

Résultats et validation de la méthode

Écoulement de Poiseuille – Gradient de densité



■ Entrée

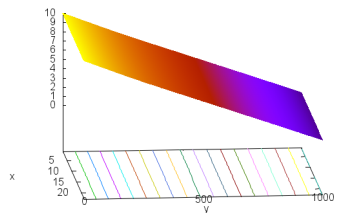
- $\rho_e = 10$ constante
- u_e extrapolée depuis le fluide
- θ_e extrapolée depuis le fluide
- $K_{ne} = K_{ns}/\rho_e = 0.1$
- Régime de glissement

■ Sortie

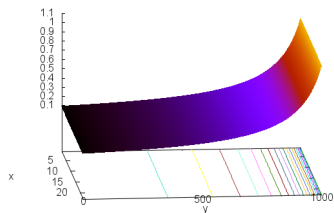
- $\rho_s = 1$ constante
- u_s extrapolée depuis le fluide
- θ_s extrapolée depuis le fluide
- $K_{ns} = 1$
- Régime transitionnel

Résultats et validation de la méthode

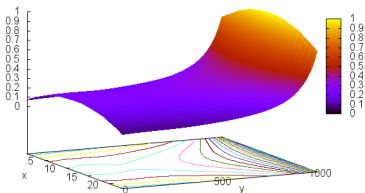
Écoulement de Poiseuille – Gradient de densité



$\rho(x, y)$



$Kn(x, y)$



$u_y(x, y)/u_y \max$

Résultats et validation de la méthode

Effort numérique

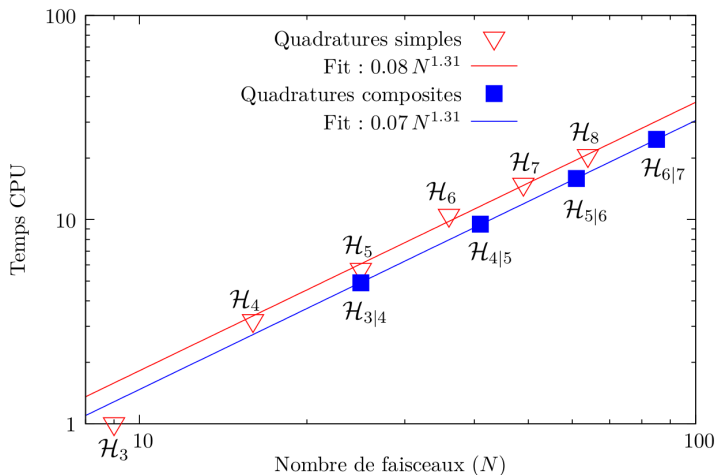


Figure: Temps de calcul en fonction du nombre de faisceaux (échelles Log-Log) pour les schémas basés sur les quadratures pures \mathcal{H}_n et composites $\mathcal{H}_{n|n+1}$. Ces temps de calculs ont été normalisés par le temps de calcul du schéma basé sur \mathcal{H}_3 .

- Deux familles de modèles ont été construites
 - Les schémas simples (\mathcal{H}_n) convergent quand $n \nearrow$ de façon alternée
 - Les schémas composites ($\mathcal{H}_{n|n+1}$) accélèrent nettement la convergence
- Le schéma le plus simple prenant en compte le hors équilibre est $\mathcal{H}_{4|5}$
- De nouvelles conditions aux bords ont été introduites durant cette thèse
 - Prise en compte du hors équilibre sur les frontières ouvertes
- La méthode a été mise en œuvre en 1D, 2D et 3D
 - Code écrit en langage C++
 - Possibilité de traiter des écoulements dans des géométries complexes
- + Étude de milieux poreux (effet Klinkenberg en géométries complexes)
- + Introduction de parois adsorbantes
- + Ajustement du Prandtl
- + Étendre les modèles aux écoulements multi-espèces
- + Écoulements réactifs

Merci de votre attention