

Intérêt et limite d'une approche cinétique pour prédire le tenseur de perméabilité par simulation numérique à l'échelle du pore

Yann JOBIC¹, Frederic TOPIN¹, René OCCELLI¹

¹Laboratoire IUSTI, -CNRS UMR 7343 - Polytech Marseille
5 rue Enrico Fermi
13453 Marseille cedex 13

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. Il est nécessaire de pouvoir déterminer les propriétés macroscopiques (conductivité, diffusivité, perméabilité, ...) intrinsèques à ces matériaux par des méthodes numériques fiables sur ces géométries réelles. L'approche de simulations numériques à l'échelle du pore est devenue de plus en plus standard avec le développement de la puissance de calcul. Ce travail fait suite à des études numériques menées avec des méthodes de type Lattice Boltzmann (LBM). Cependant certaines limitations sont apparues dans les milieux à faible porosité, notamment dues à la précision des conditions limites (bounce-back). Nous avons alors exploré d'autres méthodes cinétiques, et nous présentons ici une méthode cinétique vectorielle, qui a l'avantage d'être non diffusive, explicite, parallèle, et d'utiliser uniquement des moments et non des vitesses discrètes. Nous validons cette méthode en comparant la perméabilité de géométries réelles : grès de fontainebleau et mousses métalliques, avec des données expérimentales et numériques.

Nomenclature

μ	viscosité dynamique, $Pa.s^{-1}$	L	Longueur du milieu, m
$\langle a \rangle$	valeur moyenne de a dans le milieu	f	densité de probabilité
$\langle a \rangle_f$	valeur moyenne de a dans le fluide	v	vitesse cinétique $m.s^{-1}$
u	vitesse, $m.s^{-1}$	c_s	vitesse du son $m.s^{-1}$
P	pression, Pa	i	indice de position sur les mailles discrètes
\underline{K}	tenseur de perméabilité, m^2	j	indice sur les directions des vitesses discrètes
ε	porosité		
ε_s	porosité surfacique		

1. Introduction

Les phénomènes de transport en milieux poreux sont étudiés depuis près de deux siècles, cependant les travaux concernant les milieux fortement poreux sont encore relativement peu nombreux et récents. Les modèles couramment utilisés pour les poreux classiques (lits de grains par exemple) sont peu applicables pour les mousses, un certain nombre d'études ont été entreprises pour combler ce manque. De plus, les résultats expérimentaux et numériques caractérisant les pertes de charge dans les mousses sont fortement dispersés. Du fait des progrès de l'imagerie 3D, une tendance émergente est la détermination des paramètres des lois d'écoulement à partir de simulations directes sur des géométries reconstruites, le plus souvent en utilisant des outils commerciaux. Nous présentons ici l'utilisation d'une nouvelle approche cinétique pour résoudre ces équations locales et déterminer les propriétés d'écoulement (perméabilité, coefficient inertiels, ...).

2. Méthode numérique

La méthode numérique, appelé « FVS-BGK » est issue d'une utilisation rigoureuse de la théorie cinétique [4]. Elle est basée sur des opérateurs collisionnels de type BGK [1], et est de la forme suivante :

$$\partial_t f + \frac{1}{\epsilon_{adv}} \mathbf{v}(\xi) \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\epsilon_{coll}} (M[W] - f) \quad (1)$$

Ce BGK est vectoriel, avec une composante par inconnues (densité, vitesses). L'espace des vitesses a été discrétisé, en utilisant $2D$ directions, D étant la dimension du problème, et $\xi \in [0, 2D], x \in \mathbb{R}^D$. ϵ_{adv} et ϵ_{coll} sont des petits paramètres que l'on fera tendre vers zéro. De plus, W sont les moments de la maxwellienne M . Cette équation est résolue sous forme d'un problème de loi de conservation :

$$\partial_t W + \sum_{j=1}^D \frac{\partial}{\partial x_j} F_j(W) = 0 \quad (2)$$

On appelle F_j le flux de W . Pour que (2) soit consistant avec (1), il faut :

$$\int M[W](\xi) d\xi = 0 \quad (3)$$

$$\int v_j(\xi) M[W](\xi) d\xi = F_j(W) \quad (4)$$

Le plus dur est de définir M afin que le modèle conserve une entropie cinétique η , aussi bien au niveau continu qu'au niveau discret. La forme choisie de M est une forme linéaire suivant W et F_j , qui donne une condition sur l'existence de η . Celle-ci sera une des deux conditions de stabilité (condition sous-caractéristique). La discrétisation en temps est faite par un algorithme de transport/projection [2], qui nous assure que résoudre (2) par une décomposition des flux est équivalent à résoudre (1), équation cinétique. L'étape de projection consiste à remplacer f dans (1) par $M[W]$ à chaque pas de temps:

$$f(t_n, x, \xi) = M[W^n(x)](\xi) \quad (5)$$

De cette manière, le RHS de (1) est nul. Cette étape importante impose à f une forme maxwellienne, qui permet d'écrire le schéma numérique final uniquement sur les moments physique macro (densité, vitesses). La discrétisation en espace est alors imposée par la décomposition des flux, ce qui permet de conserver l'entropie sous la condition sous-caractéristique.

En revenant à (1), nous cherchons sa limite, quand dans un premier temps on fait tendre ϵ_{coll} vers zéro, en fixant $\epsilon_{adv} \approx \sqrt{\epsilon_{coll}}$ (voir [3]), ce qui donne de manière simplifiée :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho u) = 0 \\ \partial_t (\rho u) + \nabla_x \cdot \left(\rho u \otimes u + \frac{P(\rho)}{\epsilon^2} I \right) = 0 \end{cases} \quad (6)$$

On remplacera désormais ϵ_{adv} par ϵ . Le nombre de Mach est alors de l'ordre de ϵ , (limite à bas nombre de Mach). Par passage à la limite, et en considérant une température fictive constante, on peut écrire :

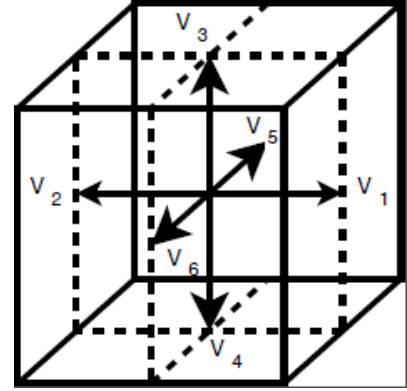


Figure 1 discrétisation 3D

$$\rho \rightarrow \bar{\rho}, \frac{P(\rho) - P(\bar{\rho})}{\epsilon^2} \rightarrow \bar{\rho}P \quad (7)$$

Avec $\bar{\rho}$ densité de référence (= 1). On choisira $P(\rho) = c_s^2 \rho$. En faisant tendre ϵ vers zéro, on obtient alors Euler incompressible. Il reste à ajouter le terme diffusif. Pour ce faire, l'idée est de définir parfaitement la diffusion numérique issue du schéma de la résolution discrète de (2), et de fixer en conséquence les paramètres libres du schéma actuel à la diffusion physique que l'on souhaite. Il en résulte la formule suivante :

$$\epsilon = \frac{c\Delta x}{2\nu} \quad (8)$$

Avec $c > 0$, provenant de la maxwellienne. Comme le schéma est explicite en temps, nous avons la CFL suivante :

$$2D \frac{\nu\Delta t}{\Delta x^2} \leq 1 \quad (9)$$

Le schéma numérique écrit en termes de densité et de vitesses physiques dimensionnées est:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_i^{n+1} = \left(1 - 2D \frac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}\right) \rho_i^n + \frac{\nu\Delta t}{\Delta x^2} \sum_j^D \rho_{i-e_j}^n + \frac{\Delta x}{2\nu} (\rho u_j)_{i-e_j}^n + \rho_{i+e_j}^n - \frac{\Delta x}{2\nu} (\rho u_j)_{i+e_j}^n \\ (\rho u)_i^{n+1} = \left(1 - 2D \frac{\nu\Delta t}{\Delta x^2}\right) (\rho u)_i^n \\ + \frac{\nu\Delta t}{\Delta x^2} \sum_j^D \left((\rho u)_{i-e_j}^n + \frac{\Delta x}{2\nu} (\rho u)_{i-e_j}^n + \frac{2\nu P(\rho_{i-e_j}^n)}{\Delta x c^2} e_j \right. \\ \left. + (\rho u)_{i+e_j}^n + \frac{\Delta x}{2\nu} (\rho u)_{i+e_j}^n + \frac{2\nu P(\rho_{i+e_j}^n)}{\Delta x c^2} e_j \right) \end{array} \right. \quad (10)$$

On remarque une somme de termes sur les directions de vitesses discrètes (sur j). Cela correspond à la projection de f sur la maxwellienne à chaque pas de temps. Finalement, la condition de stabilité sous-caractéristique s'écrit alors :

$$\frac{c_s}{1 - \frac{\Delta x}{2\nu} \max_{i,j=1..D} |u_{ij}|} \leq c \quad (11)$$

La stratégie d'initialisation des paramètres est la suivante : on fixe $\epsilon = 1$, ce paramètre n'ayant pas d'influence dans le schéma final, on fixe le rapport $c_s/c = 1$, les tests ayant montré que l'on a alors une bonne précision, et c provient de (8) et c_s du rapport précédent.

3. Equations macroscopiques

3.1. Méthodologie de calcul de paramètres macroscopiques

Une approche 1D (par direction) de la perte de charge est adoptée à ce stade du travail (e.g. Figure 2). Nous utilisons des conditions aux limites périodiques en vitesse avec gradient de pression imposé le long de l'axe d'écoulement choisi et des conditions de symétrie ailleurs.

Bien que les effets inertiels puissent être significatifs dès les bas Reynolds dans ce type de milieux, il est nécessaire de déterminer la perméabilité au sens de Darcy [9] pour définir les lois d'écoulements de manière cohérente. Nous utilisons l'approche proposée par [7] pour tracer les éventuelles déviations à la loi de Darcy et vérifier le régime d'écoulement sur la plage de vitesse explorée.

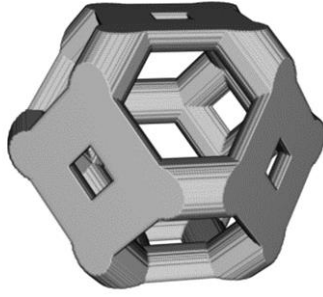


Figure 2 : Mousse de Kelvin, taille de cellule : 4mm, résolution 160^3

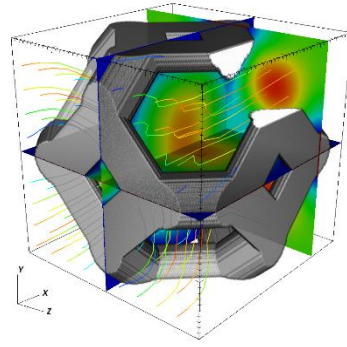


Figure 3 : Ecoulement dans la mousse, magnitude de vitesse sur les plans de coupes, une partie de la mousse a été masquée

L'équation de Stokes peut être moyennée (en négligeant la correction de Brinkman) pour obtenir la loi de Darcy :

$$-\bar{K}\nabla\langle P \rangle = \mu_f \langle U \rangle_f \quad (12)$$

On définit $\nabla\langle P \rangle$ comme étant le gradient de la pression moyenne sur tout l'échantillon, et $\langle U \rangle_f$ la vitesse moyenne sur tout le volume fluide. Le gradient de pression est la somme de deux termes, la moyenne des gradients de pression locaux et la somme des forces de pressions sur les interfaces solide-fluide

$$\nabla\langle P \rangle = \langle \nabla P \rangle - \int P n_{sf} dA = a \frac{\Delta P}{L} \quad (13)$$

Le gradient de pression moyen peut être déterminé de deux façons différentes : par moyenne volumique des gradients de pression sur tout l'échantillon et mesure de la résultante des forces pressions à la surface du solide. La seconde en utilisant la différence de pression (moyenne) entre les faces d'entrée et de sortie du fluide [5]. L'utilisation de la pression fluide (macroscopique) impose une correction due à la porosité surfacique de ces faces.

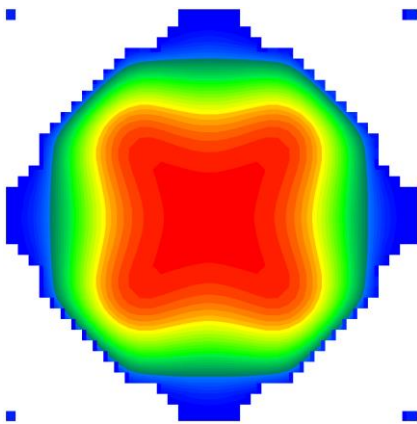


Figure 4 : champs de vitesse dans le plan médian. Résolution 40^3 points

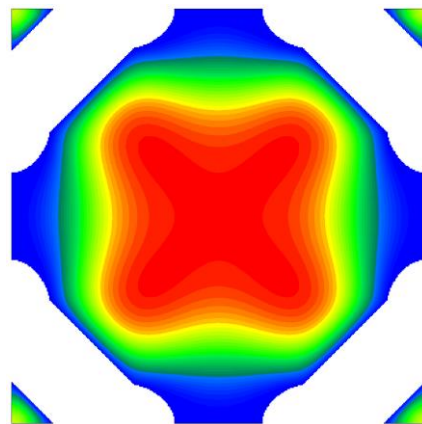


Figure 5 : champs de vitesse dans le plan médian. Résolution 320^3 points

Plusieurs échantillons de typologie très différente ont été analysés. En premier lieu, une cellule représentative périodique (cellule de Kelvin) constituée de brins cylindriques a été choisie, et pour laquelle il est facile de changer la géométrie (taille de cellule, diamètre de brin et compression anisotrope).

Le deuxième cas test est constitué par une géométrie obtenue par tomographie d'un échantillon de mousse commerciale (Recemat NC 1723) d'une dizaine de pores d'arrête [8]. Les dimensions du volume élémentaire représentatif dans ce cas (> 5 cellules) nous imposent de n'utiliser qu'un nombre limité de mailles par cellule.

Enfin, nous travaillons sur un échantillon de Grès de Fontainebleau de porosité plus faible et de structure différente (pores nettement plus fermés formant des chemins définis).

3.2. Cellule de Kelvin à brins cylindriques

3.2.1. Influence de la résolution du maillage

Vous avons d'abord vérifié l'impact de la discrétisation géométrique sur la perméabilité.

voxel (m)	Nb mailles	Porosité	Porosité surf	Perméabilité (m ²)
0.00011	40 ³	0.7656	0.5789	1.3764e-07
5.13e-05	80 ³	0.774	0.6358	1.2729e-07
2.53e-05	160 ³	0.7863	0.6735	1.2710e-07
1.26e-05	320 ³	0.7921	0.691	1.2722e-07

Table 1 : influence du maillage sur la perméabilité. Erreur de discrétisation géométrique.

On peut observer en fonction de la résolution la dégradation des arrondis géométriques (figure 4), et les conséquences sur la perméabilité. Malgré la perte de définition, la topologie de l'écoulement principal est bien capturée et dès les résolutions modestes la perméabilité calculée converge. Nous avons retenu 160³ pour les études paramétriques.

La description classique des variations de perméabilité avec les paramètres morphologiques des échantillons est basée sur des déclinaisons de la loi d'Ergun. Celle-ci fait apparaître deux paramètres : la taille de « pores » et la porosité. Ceci est usuellement suffisant pour les milieux isotropes. Nous avons étudié séparément l'influence de ces deux grandeurs.

3.2.2. Vérification de la loi d'échelle

Nous avons réalisé une série d'échantillons homothétiques, comme attendu la perméabilité varie proportionnellement au carré de la taille de cellule (figure 6). Notons que pour les échantillons réels la porosité et la forme des pores varient usuellement avec leur taille ce qui rend difficile la comparaison avec des données expérimentales.

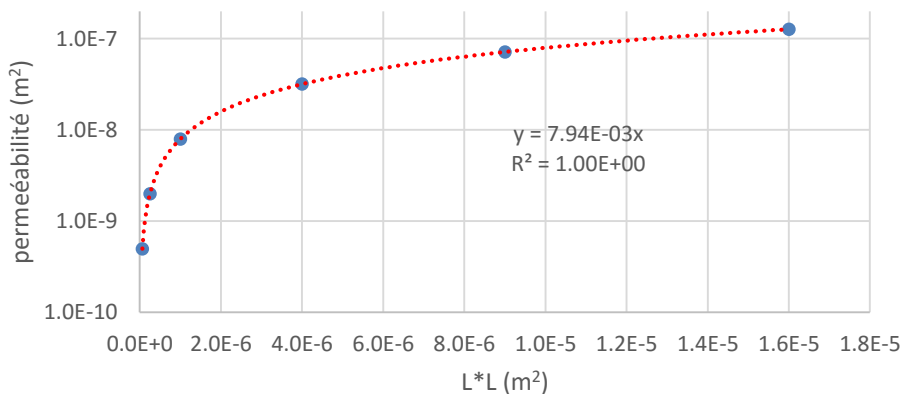


Figure 6 : perméabilité en fonction de la taille de la cellule au carré

3.2.3. Influence de la porosité à taille de cellule constante

On fait évoluer la taille des brins, tout en gardant la taille du pore constant. On a donc mécaniquement fait varier la porosité. Nous avons comparé deux types de calculs, VFS-BGK sur maillage structuré et le logiciel commercial Starccm+ sur maillage polyédrique qui permet de générer une très faible erreur géométrique. Les deux courbes se confondent parfaitement. Le décalage des points provient de la discrétisation différente de la géométrie. La discrétisation en escalier du VFS-BGK engendre des erreurs au niveau des parois selon la résolution. Celle-ci reste cependant très mineure à partir du moment où l'on a suffisamment d'éléments. Nous avons utilisé un maillage de 160^3 . Il y a un très bon accord avec le logiciel Starccm+ (figure 7).

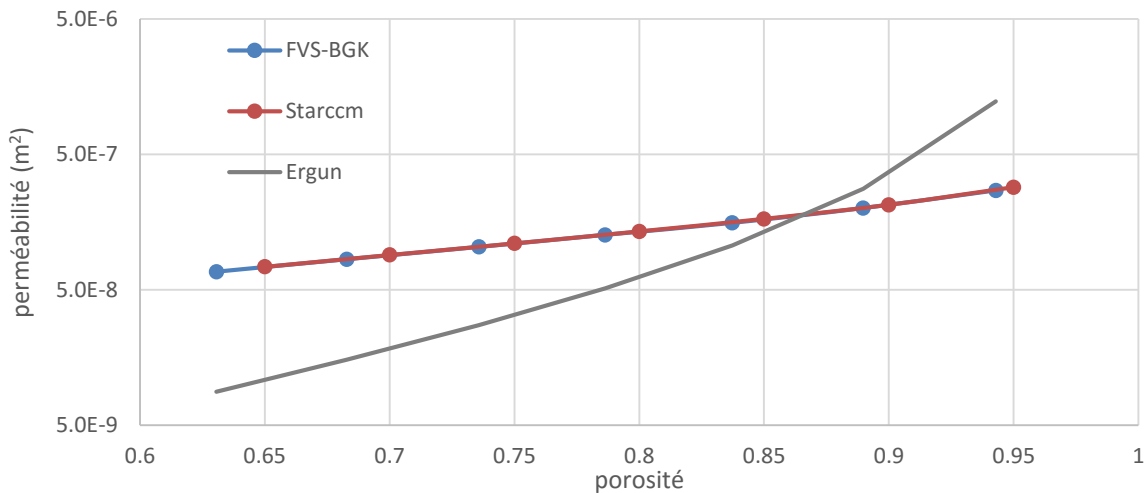


Figure 7 : K en fonction de ϵ . Très bon accord entre les deux codes numériques. La loi d'Ergun n'est pas adaptée à ce type de milieu.

La formulation de type Ergun ne suit clairement pas la même tendance sur cette plage de porosité. Cependant un accord apparent peut être obtenu sur une plage réduite (ex 0.85-0.92) de porosité ce qui explique son utilisation courant la majorité des mousses commerciales étant dans cette gamme.

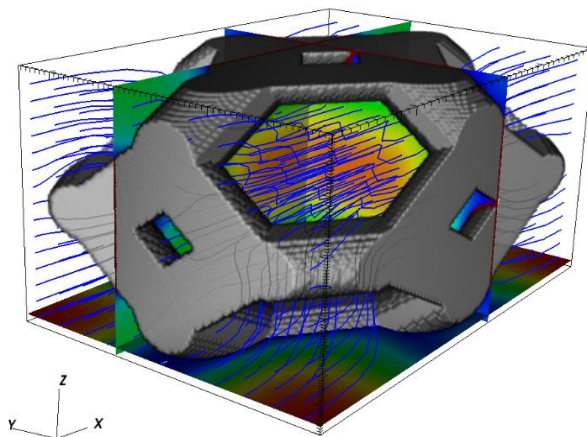


Figure 8 : Mousse orthotrope. Géométrie et champs de vitesse

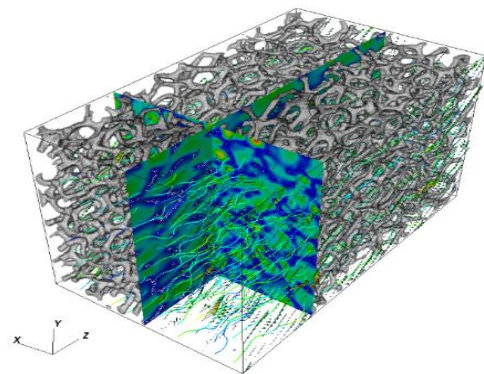


Figure 9: NC1723, mousse métallique de porosité 0.87. Géométrie et champs de vitesse

Nous avons vérifié que nous pouvions évaluer la perméabilité d'un milieu orthotrope par trois calculs chacun dans une des directions principales. Nous avons comprimé un échantillon

de cellule de Kelvin (porosité 80%) de manière différentielle suivant le vecteur $(\sqrt{2}, 1, 1/\sqrt{2})$ (figure 8). Les composantes diagonales du tenseur sont :

$$K_{xx} = 8.28 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2, K_{yy} = 5.93 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2, K_{zz} = 3.75 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 \quad (14)$$

Les valeurs obtenues sont dans les ordres de grandeurs de la version isotrope, avec des perméabilités qui sont réduite comme les facteurs de déformations. Il est difficile de conclure sur la qualité des résultats, la géométrie étant très différente.

3.3. Application à un milieu réel à forte porosité

Une mousse (figure 9), dont on possède des études expérimentales et numériques, a été utilisée. La géométrie a été reconstruite à partir d'images tomographiques. On a utilisé $198 \times 198 \times 342$ voxels. Le domaine utilisé est identique à [8]. L'échantillon possède $5 \times 5 \times 10$ pores, dimension supérieure à celle du VER. On dégrade ici le nombre de maille par pore, pour des raisons d'efficacité numérique.

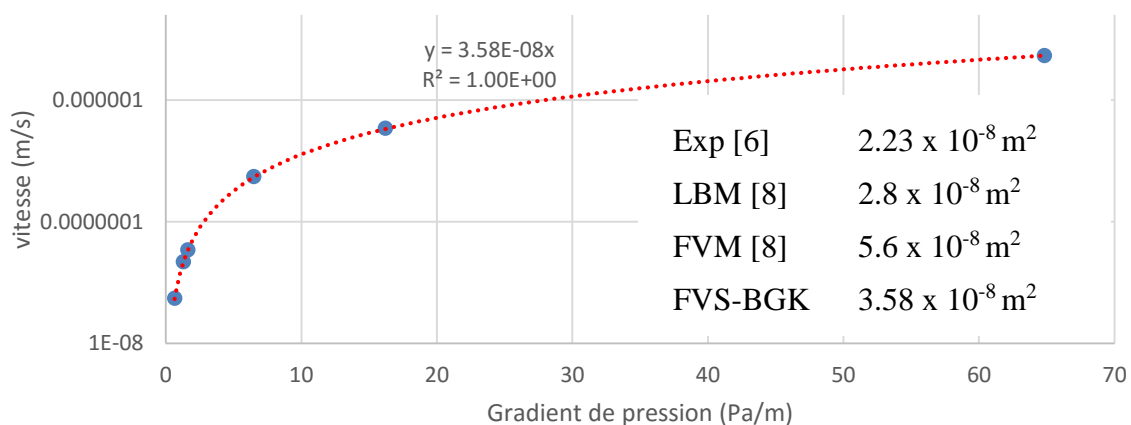


Figure 10 : vitesse en fonction du gradient de pression.

Nous avons une bonne comparaison avec les résultats expérimentaux et numérique de ces auteurs. Notons que ceux-ci reporte une perméabilité au sens de Forchheimer, et qu'il est difficile d'évaluer précisément le biais. On trouve une parfaite linéarité entre la relation vitesse/gradient de pression (figure 10, $R^2 = 1.0$), qui donne une perméabilité de $3.58 \times 10^{-8} \text{ m}^2$.

3.4. Application à un milieu réel à faible porosité

La dernière partie de ce travail concerne l'application à une autre topologie de milieu, le grès de fontainebleau a été utilisé (figure 11). Sa porosité est de 15% et sa taille moyenne de pore est de 20 microns environ. La perméabilité calculée est de $6.34 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$ (figure 12). Les valeurs de la littérature pour ce type de grès sont comprises entre 10^{-11} m^2 et 10^{-15} m^2 . Les résultats sont satisfaisants.

Des analyses plus détaillées (anisotropie) et la comparaison avec les résultats d'autres codes de calcul est en cours, néanmoins la méthode semble tout à fait adaptée à ces milieux de faible porosité et de topologie complexe. L'étape suivante du travail consiste à développer l'analyse des réponses transitoires de milieux à des sollicitations hydrauliques pour tirer parti du caractère instationnaire inhérent à la méthode.

4. Conclusion

Historiquement, nous utilisons la méthode Lattice Boltzmann afin de caractériser les propriétés effectives de mousses. Afin de palier ses limitations, nous avons décidé de développer un autre outil cinétique, VFS-BGK. Celui-ci a montré que l'on caractérise correctement la perméabilité, montrant sa précision et sa robustesse. L'ensemble des résultats obtenus sont en total cohérence avec les résultats disponible, ce qui montre que l'outil est bien adapté pour ce genre de détermination.

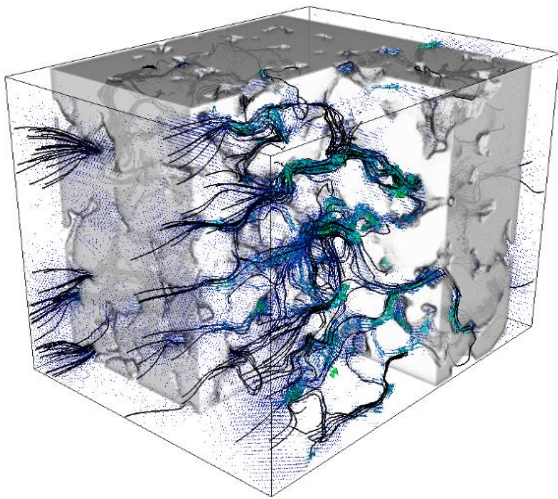


Figure 11 : Domaine de calcul avec ligne de courant

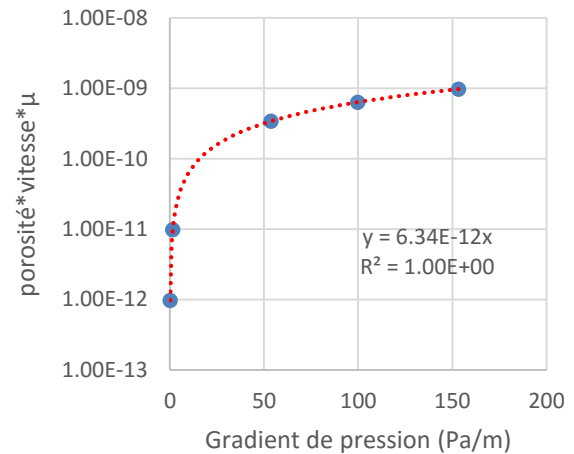


Figure 12 : vitesse en fonction du gradient de pression moyen.

Références

- [1] M. Krook P.L. Bhatnagar E.P. Gross, *A model for collision processes in gases*, Phys. Rev. 94 (1954), p. 511
- [2] F. Bouchut, *Entropy satisfying flux vector splittings and kinetic BGK models*, Numer. Math. 94, 623-672. (2003)
- [3] F. Bouchut, F.R. Guarguaglini, R. Natalini, *Diffusive bgk approximations for nonlinear multidimensional parabolic equations*, Indiana Univ. Math. J. 49, 723-749 (2000)
- [4] M. Carfora, R. Natalini, *A discrete kinetic approximation for the incompressible Navier-Stokes equations*, ESAIM: Math. Modelling Numer. Anal. 42, 93-112 (2008)
- [5] Renard, P., A. Genty, et al, *determination of the full permeability tensor*, Journal of geophysical research 106(B11): 26443-26452 (2001)
- [6] Bonnet, J.-P., F. Topin, et al., *Flow laws in metal foams: compressibility and pore size effects*, Transport in Porous Media 73(2): 233-254 (2008)
- [7] Firdaouss, M., J. L. Guermond, and al, *Nonlinear corrections to Darcy's law at low Reynolds numbers*, J Fluid Mech 343:331-50 (1997)
- [8] E. Brun, J. Vicente, F. Topin, R. Occelli, M. J. Clifton, *Microstructure and Transport Properties of Cellular Materials: Representative Volume Element*, Adv. Mat. Eng. 11(10): 805-810 (2009)
- [9] P. Kumar & F. Topin, *Micro-structural impact of different strut shapes and porosity on hydraulic properties of Kelvin like metal foams*, Transport in Porous Media, 105 (1), pp. 57-81, (2014)