### Projet de Thèse:

# Simulation du mélange turbulent par algorithmes hybrides

### Unités de recherche :

Laboratoire des Ecoulements Géophysiques et Industriels (LEGI, UMR5519), équipe MOST Laboratoire Jean Kuntzmann (LJK, UMR5224), équipe PDE

Adresse: Domaine Universitaire, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9

## Contact:

Guillaume Balarac, <u>guillaume.balarac@legi.grenoble-inp.fr</u> Georges-Henri Cottet, <u>georges-henri.cottet@imag.fr</u>

## Connaissances et compétences requises :

La thèse concerne le calcul scientifique en mécanique des fluides. Le candidat pour ce projet devra posséder des pré-requis sur la connaissance et l'implémentation des méthodes de type « Volumes Finis ». Des connaissances de bases en mécanique des fluides et en parallélisation MPI seront nécessaires.

# Contexte du projet :

Dans le domaine de la mécanique des fluides, pour de nombreuses problématiques scientifiques et pour de nombreuses applications, l'un des verrous majeurs reste la prédiction de la dynamique d'un scalaire transporté par un écoulement turbulent. Le champ scalaire peut être utilisé pour décrire un champ de température pour des problèmes thermohydrauliques. Il peut aussi représenter la concentration d'une espèce chimique ou d'un polluant lorsque l'on traite des applications liées à la combustion ou à la qualité de l'air, ou encore un marqueur de l'interface entre les phases d'un écoulement multi-phasique. La dynamique du mélange est dépendante du nombre de Schmidt moléculaire qui représente le rapport entre la viscosité du fluide et la diffusivité du scalaire. Le nombre de Schmidt contrôle le développement des échelles du mélange. Ainsi, un scalaire peu diffusif aura un nombre de Schmidt important est génèrera du mélange à petite échelle, inversement, un scalaire diffusif (avec un faible nombre de Schmidt), ne développera pas le mélange à petite échelle. La prédiction fine du mélange et sa dépendance avec le nombre de Schmidt restent cruciales pour de nombreuses applications. Par exemple, dans le domaine de la sureté nucléaire, différents fluides caloporteurs sont envisagés pour les centrales de quatrième génération. Or, ces fluides ont des propriétés de transfert thermique très différentes : le sodium est fortement diffusif alors que les sels fondus sont faiblement diffusifs.

Lorsque la simulation numérique est utilisée pour prédire la dynamique du scalaire, les configurations à hauts nombres de Schmidt sont particulièrement délicates à traiter. En effet, le développement du mélange à des échelles plus fines que la dynamique tourbillonnaire contraint fortement la discrétisation spatiale. Notre approche consiste à dissocier la discrétisation spatiale du scalaire et de la vitesse, ce qui permet ainsi de réduire le coût de la simulation. Nous avons proposé dans [Lagaert et al., 2012] une approche hybride combinant deux types de solveurs. L'évolution du scalaire est calculée par une méthode particulaire d'ordre élevé. La résolution du scalaire est alors couplée à un code pseudo-spectral pour la résolution du champ de vitesse, la discrétisation spatiale entre le champ scalaire et le champ de vitesse étant ainsi distinctes. La nature lagrangienne de la méthode particulaire permet d'utiliser les pas de temps donnés par la résolution du champ de vitesse, ce qui accélère considérablement la simulation et distingue cette approche d'autres méthodes hybrides récemment proposées dans la littérature [Gotoh et al., 2012]. Le développement d'un code massivement parallèle, associé aux ressources allouées par le GENCI, nous a permis de réaliser des

simulations directes pour des valeurs élevées des nombres de Reynolds et de Schmidt. Cela nous a permis d'avoir une description fine du mélange aux plus petites échelles (figure 1). En particulier, l'étude du comportement spectral du mélange a permis de corroborer certains résultats théoriques [Batchelor, 1959 ; Donzis et al, 2010].

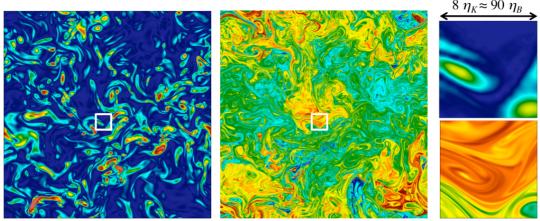


Figure 1 : Illustration de la séparation d'échelles entre la norme de la vorticité (gauche) et le champ scalaire (centre). Les zooms (droite) correspondent au cadre blanc d'une largeur de 8 fois l'échelle de Kolmogorov (correspondant environ à 90 fois l'échelle de Batchelor). Cette configuration correspond à un nombre de Schmidt de 128 et un nombre de Reynolds (basé sur l'échelle de Taylor) de 130. Le scalaire est résolu avec près de 29 milliards de points, sur plus de 8000 cœurs (IBM Blue Gene-P, « Babel », IDRIS).

# Objectif de la thèse :

Nos travaux antérieurs ont permis de démontrer la potentialité de la méthode. Ils ont également permis d'étudier le mélange dans des configurations académiques. Pour pouvoir s'orienter vers des configurations plus réalistes, cette méthode doit désormais être implémentée dans un code plus « généraliste » permettant de traiter des géométries diverses. C'est l'objectif de ce projet de thèse qui vise à implémenter notre méthode hybride dans le code YALES2, un code massivement parallèle, basé sur une approche de type « volumes finis » non-structurée permettant la réalisation de géométries réalistes (<a href="http://www.coria-cfd.fr/index.php/YALES2">http://www.coria-cfd.fr/index.php/YALES2</a>). Ce code développé par V. Moureau (CORIA) est désormais au centre du groupement d'intérêt scientifique (GIS) du CNRS « SUCCESS » (<a href="http://success.coria-cfd.fr">http://success.coria-cfd.fr</a>) qui réunit 8 laboratoires nationaux.

Précisons que l'implémentation de l'approche dans un solveur « volumes finis » nécessitera des développements algorithmiques spécifiques :

- 1) Une première question sera le couplage de la méthode particulaire avec une méthode volumes finis. Par rapport au code hybride déjà existant, il s'agira d'une part de revoir les techniques d'interpolation entre le maillage volumes finis et le maillage particulaire, d'autre part d'optimiser l'équilibrage des charges pour la parallélisation simultanée des deux solveurs.
- 2) Une deuxième question sera liée à l'application de la méthode aux écoulements diphasiques. L'interface sera capturée par une méthode « level set ». Il s'agit donc d'un scalaire advecté, mais qui rétroagit sur l 'écoulement via des termes de tension de surface. Si l'interface et l'écoulement ne sont pas résolus sur les mêmes échelles il sera nécessaire d'envisager des techniques de filtrage entre ces échelles.
- 3) Enfin, pour viser des écoulements réalistes, il sera nécessaire d'envisager le couplage de cette approche numérique avec une modélisation de la turbulence de type simulation des grandes échelles (SGE). La SGE permet de s'affranchir de certains efforts de discrétisation en modélisant une partie des échelles du mouvement. Il s'agira de voir l'influence de cette modélisation sur le transport du scalaire et de proposer des modélisations pour l'écoulement et pour la dynamique de l'interface (dans le cas d'écoulements diphasiques), cohérentes avec leurs discrétisations respectives.

# Références

[Batchelor, 1959] G.K. Batchelor, J. Fluid Mech., 5, 1959.

[Donzis et al., 2010] D. A. Donzis, K. R. Sreenivasan and P. K. Yeung, P. K., Flow, Turbulence and Combustion, 85, 2010 [Gotoh et al., 2012] T. Gotoh, S. Hatanaka and H. Miura, H., J. of Comp. Physics, 231 (21), 2012

[Lagaert et al., 2012] J.-B. Lagaert, G. Balarac, G.-H. Cottet and P. Bégou, Proceeding of the CTR summer program, Stanford Univ., 2012