

Projet de thèse :

Simulations des grandes échelles du transport d'un scalaire

Unité de recherche : Laboratoire des Ecoulements Géophysiques et Industriels (LEGI)

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

Equipe de Recherche : Modélisation et Simulation de la Turbulence

Contact: Guillaume Balarac, guillaume.balarac@grenoble-inp.fr

Financement : La rémunération est d'environ 1650 € net / mois.

Ce projet est soutenu par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) à travers le projet SCALES « Simulation of **SCA**lar by **L**arge **E**ddy **S**imulation: development and application ».

Les connaissances et compétences requises :

Le candidat pour ce sujet de thèse devra posséder des compétences solides concernant **la modélisation et la simulation de la turbulence**. Il devra également avoir un **intérêt pour les mathématiques appliquées**. Dans le cadre d'une collaboration avec le LJK (le laboratoire de Mathématiques Appliquées et d'Informatique de Grenoble), des cours du master « Recherche en Mathématiques Appliquées » pourront éventuellement être suivis par le candidat pour avoir les pré-requis nécessaires.

Résumé du projet :

La puissance des calculateurs actuels nous permet désormais des simulations instationnaires de la turbulence pour des écoulements de plus en plus complexes. On doit donc être capable de proposer des outils de simulation instationnaire performants. La SGE est un de ces outils. Elle permet d'accéder aux instationnarités de l'écoulement dans des configurations réalistes. Cependant, elle nécessite un effort de modélisation pour fermer les équations résolues. La prise en compte d'une plus grande complexité dans l'écoulement passe souvent par la simulation de l'évolution d'un scalaire représentant la température ou la concentration. C'est le cas par exemple des études de thermohydraulique en sûreté nucléaire, de la dispersion de polluant pour les études de qualité de l'air ou de la qualité du mélange en combustion. Ainsi, dans le cas de SGE, un effort supplémentaire est à fournir pour la modélisation de l'équation du scalaire. Cette modélisation doit tenir compte des propriétés moléculaire du fluide. C'est l'objectif de ce projet. Il s'agit ainsi de mettre au point une procédure de modélisation systématique permettant de développer des SGE pour une grande variété de problèmes.

Description détaillée :

La problématique du transport d'un scalaire : De nombreuses applications liées à la mécanique des fluides nécessitent de coupler l'analyse de la dynamique de l'écoulement à l'évolution d'un scalaire. Selon les cas, le scalaire transporté peut représenter la température pour les études de sûreté des circuits de refroidissement de réacteurs nucléaires, la concentration d'un polluant pour les études de qualités de l'air ou la qualité du mélange entre le combustible et le comburant dans des problématiques de combustion... Même si les équations sont similaires, le rôle joué par le scalaire conditionne le nombre de Schmidt moléculaire¹. Par exemple, le sodium liquide utilisé dans les réacteurs nucléaires de génération IV a un nombre de Schmidt de l'ordre de 0,001 traduisant ses fortes propriétés calorifiques. Par contre, lorsque le scalaire représente la concentration d'un polluant constitué de fines particules (0,02 micromètre) dans l'air, le nombre de Schmidt est de l'ordre de 1000. Il existe donc une large plage de valeurs du nombre de Schmidt dont il faut tenir compte lors de l'analyse du champ scalaire. Par exemple, il est établi que le comportement du scalaire au niveau des plus petites échelles de l'écoulement sera différent pour des nombres de Schmidt supérieurs ou inférieurs à 1. Ces effets doivent donc être pris en compte dans les modélisations. Si des corrections sont établies au sens de la modélisation statistique (méthodes RANS), des efforts restent à fournir en ce qui concerne la technique de simulation des grandes échelles (SGE). Ce projet a pour ambition de participer à ces efforts.

La SGE en présence d'un scalaire : La simulation des grandes échelles (SGE) est une technique employée pour la simulation d'écoulements turbulents qui permet de prendre en compte les instationnarités de l'écoulement avec des coûts de calcul abordables. La philosophie de cette technique consiste à résoudre uniquement les échelles les plus significatives de l'écoulement (les grandes échelles du mouvement). Cette sélection d'échelles est formalisée par une opération de filtrage. L'application de cette opération de filtrage aux équations qui gouvernent la mécanique des fluides, les équations de Navier-Stokes, fait apparaître des quantités, dites sous-maille, qui ne sont plus directement accessibles et qu'il faut donc modéliser pour fermer le système. De nouveaux besoins ont rapidement émergé en SGE. L'un des plus persistant a été de pouvoir résoudre l'équation de transport d'un scalaire afin de pouvoir traiter des problèmes de thermohydraulique, de transport de polluant ou d'écoulements compressibles. Des modèles développés à l'université Stanford (Moin et al., Phys. Fluids, 1991) et récemment au LEGI (Brun et al., Phys. Fluids, 2008) ont montré que la modélisation sous-maille du transport d'un scalaire dépendait des propriétés moléculaires du scalaire et du fluide. Ces résultats récents confirment que des recherches pour la SGE en présence d'un scalaire sont nécessaires. Pour poursuivre ces recherches, des techniques visant à mesurer la performance des modèles ont été proposées. Ainsi, Moreau et al. (Phys. Fluids, 2006) définissent un estimateur optimal qui permet de calculer l'erreur minimale que l'on peut espérer d'un modèle sous-maille. Cet estimateur optimal est défini en fonction du jeu de paramètre d'entrée du modèle. Il permet ainsi de comprendre si l'erreur de modélisation est principalement due à un jeu de paramètres d'entrée mal choisi ou à une mauvaise relation algébrique dans le modèle sous-maille (Balarac et al., Phys. Fluids, 2008a et b). Dans cette idée, l'objectif du projet est d'utiliser des estimations non-paramétriques pour réduire de façon systématique l'erreur des modèles sous-maille.

Régression non-paramétrique en SGE : L'un des objectifs de ce projet est donc d'utiliser des techniques avancées de mathématiques appliquées pour la détermination des modèles sous-maille. D'un point de vue mathématique, le problème se résume à déterminer une relation algébrique entre une sortie, i.e. la quantité sous-maille à modéliser, et des entrées, i.e. le jeu de paramètres d'entrée du modèle. Cette détermination sera réalisée à partir des bases de données issues de simulations de références. Ce problème n'est pas nouveau, il est connu sous le nom de modélisation « boîte-noire » en théorie des systèmes ou « régression non-paramétrique » en statistique. Dans ce travail, il s'agit donc de déterminer la meilleure estimation qui deviendra alors le modèle sous-maille. Dans le cadre de la SGE, il y a plusieurs aspects particuliers pour la mise en place de cette méthode. Il faut s'attendre à une dimension de régression relativement élevée, impliquant une approximation paramétrique complexe. De plus, des algorithmes d'estimation sous contraintes devront être utilisés. En effet, si l'estimation doit approcher au mieux le flux sous-maille, elle doit également reproduire certaines de ses fonctions essentielles comme son rôle dissipatif. Enfin, le nombre de données à traiter est très important et nécessitera une algorithmique adaptée.

¹ représentant la valeur de la viscosité moléculaire du fluide par rapport à la diffusivité moléculaire du scalaire.

Structuration du projet : Le projet a un objectif précis. Il s'agit de mieux comprendre la dynamique du scalaire afin de développer des modèles sous-maille adaptés à une large gamme de propriétés moléculaires. Ces modèles permettront de traiter une grande variété de thématiques nécessitant la résolution d'un champ scalaire. Pour atteindre ces objectifs, le projet a été découpé en 4 tâches principales couvrant les 3 ans de thèse :

- **L'étude de la physique du flux scalaire sous-maille.** Lors de cette étape, des simulations de référence à très haute résolution seront réalisées et traitées pour avoir une compréhension fine de la physique du flux scalaire sous-maille.
- **Analyse de performance des modèles sous-maille existants.** Une nouvelle procédure permettant de mesurer la performance des modèles sous-maille sera appliquée aux modèles existants pour étudier leur performance.
- **Amélioration de la modélisation sous-maille.** Sur la base des résultats de l'étape précédente, les techniques de régression seront appliquées aux simulations de référence afin d'améliorer la modélisation sous-maille.
- **Tests *a posteriori* des modèles sous-maille.** Le nouveau modèle sera implémenté et des SGE seront effectuées pour valider les performances des nouveaux modèles sous-maille.

Bibliographie :

G. Balarac, H. Pitsch, and V. Raman, Development of a dynamic model for the subfilter scalar variance using the concept of optimal estimators, Phys. Fluids 20, 2008.

G. Balarac, H. Pitsch, and V. Raman, Modeling of the subfillter scalar dissipation rate using the concept of optimal estimators, Phys. Fluids 20, 2008

C. Brun, G. Balarac, C. B. da Silva, and O. Métais, Effects of molecular diffusion on the subgrid-scale modeling of passive scalars, Phys. Fluids 20, 2008.

P. Moin, K. Squires, W. H. Cabot, and S. Lee, A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport, Phys. Fluids A, 3, 1991.

A. Moreau, O. Teytaud, and J. P. Bertoglio, Optimal estimation for large-eddy simulation of turbulence and application to the analysis of subgrid models, Phys. Fluids, 18, 2006