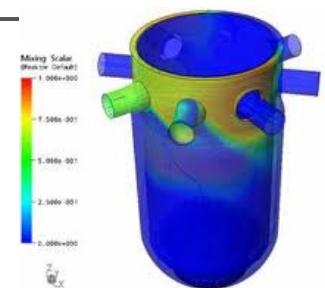


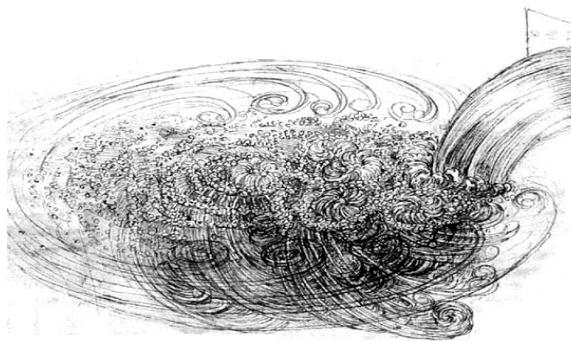
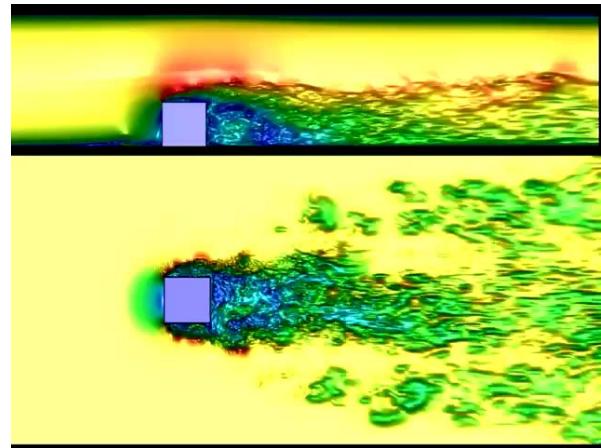
SIMULATION NUMÉRIQUE DIRECTE & RÉSOLUTIONS MULTIPHYSIQUES



Olivier DOCHE (McF Grenoble-INP/PHELMA/LEPMI)

La problématique de la turbulence

- **Définition ?** Comportement **imprévisible et désordonné, mélange amélioré** et **expression sur une large gamme d'échelles caractéristiques**
- $Re > 1$ (effet inertiel > effet visqueux) $Re = [\text{fluid velocity}] \times [\text{size of the obstacle}] / \nu$
- Les équations de Navier-Stokes (non-linéaires) gouvernent la dynamique d'un écoulement turbulent

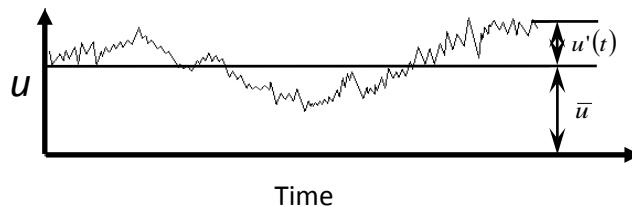
15^{ème} siècle21^{ème} siècle

Modélisation de la turbulence

- Navier-Stokes :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j}$$

- Décomposition :



Quantité moyennée
en temps

$$u(\vec{x}, t) = \bar{u}(\vec{x}) + u'(\vec{x}, t)$$

↑

Fluctuation

- Équations de Reynolds (moyenne temporelle de NS):

$$\cancel{\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t}} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \cancel{\frac{\partial \bar{u}'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}}$$



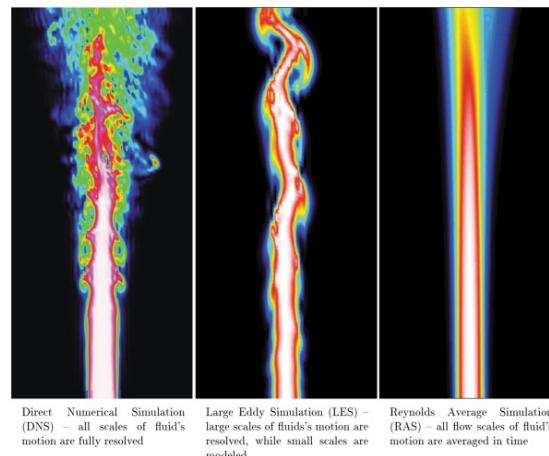
Requiert une FERMETURE
Pas de résolution des Fluct.
Ex: Modèles $k-\varepsilon$ ou $k-\omega$ etc.

Contraintes de Reynolds

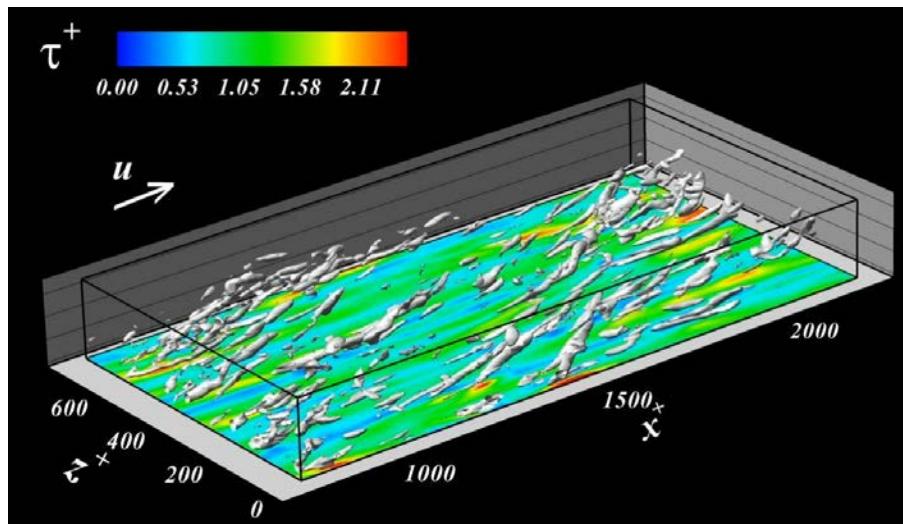
Modélisation numérique de la turbulence

Différents types de méthodes numériques

- **RANS** : Reynolds Average Navier Stokes = résolution des moyennes temporelles ou spatiales des équations de Navier-Stokes. Modélisation d'inconnues → Equations différentielles partielles (*équations de Reynolds*).
- **LES** : Large Eddy Simulation = simulation des grandes échelles. Résout les grandes échelles de l'écoulement → petites échelles modélisées.
- **DNS** : Direct Numérical Simulation = simulation numérique directe. Résout l'intégralité des échelles dans un domaine de calcul discréte.



- **Modèles imparfaits**
- **DNS : Les équations de Navier Stokes sont TOTALEMENT résolues sur le domaine de calcul => Simulations Spatio-Temporelle**
 - (+) => Pas de fermeture (modèles), **physique intégralement résolue**
 - (-) => Cout numérique important / Nombre de Reynolds modérés



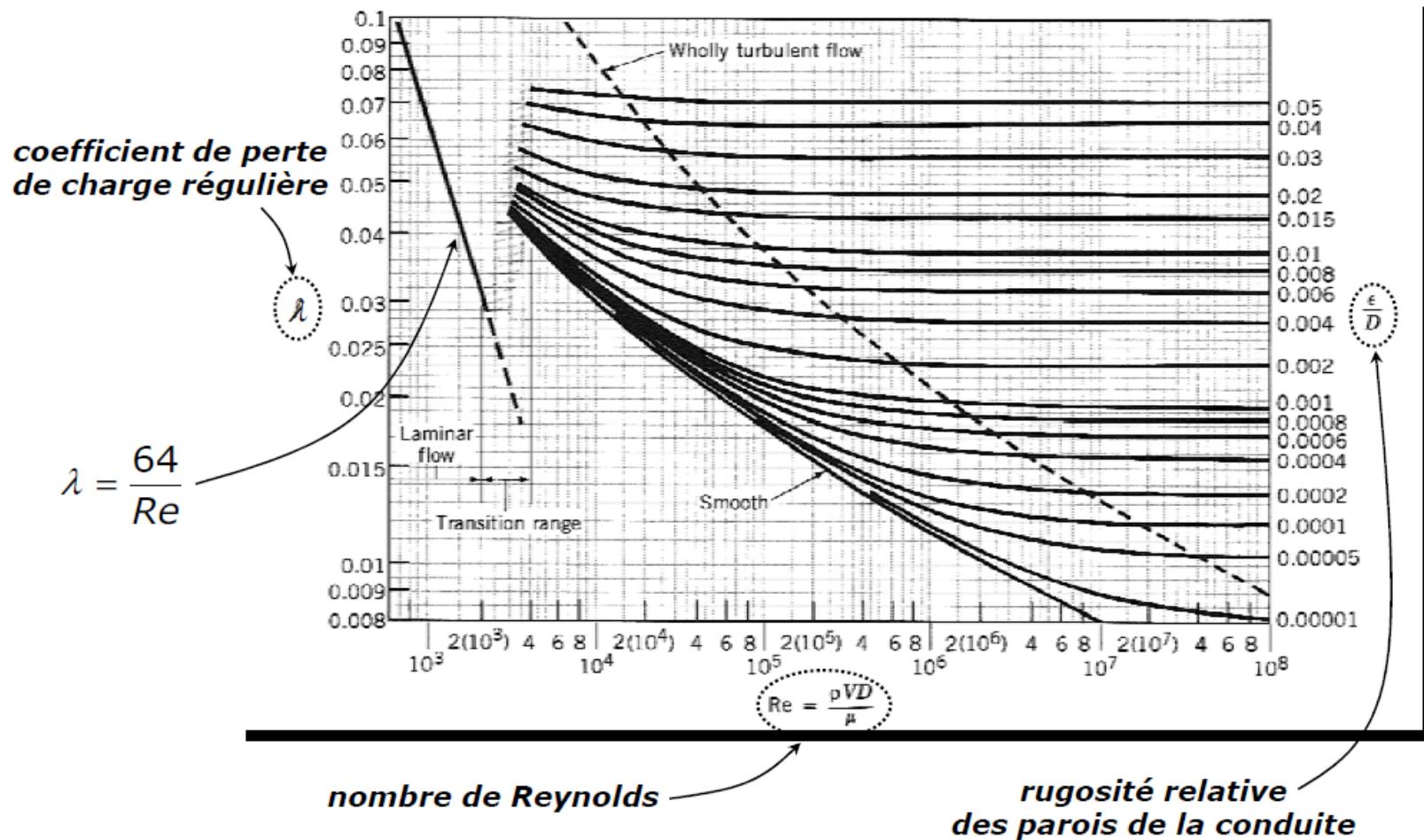
Re = 3000 → 20.000

$\left. \begin{array}{l} \text{Nx=129} \\ \text{Ny=257} \\ \text{Nz=513} \end{array} \right\}$

Approx. **20 millions de points à résoudre en temps**

La cascade d'énergie

Diagramme de Moody :



Pourquoi une DNS coûte si chère

Les plus petites échelles de l'écoulement sont alors déterminées par :

$$\left. \begin{aligned} \ell_0 &\sim (\nu^3 / \varepsilon_L)^{1/4} = \eta \\ u_0 &\sim (\nu \varepsilon_L)^{1/4} = u_\eta \end{aligned} \right\} \text{échelles de Kolmogorov}$$

On peut alors montrer que le rapport des échelles dépend du **Nombre de Reynolds** :

$$L/\eta \sim Re_L^{3/4}$$

Et un calcul DNS coûte : $N \sim Re_L^{11/4} \sim \textcolor{red}{Re_L^3}$

Différence entre coût de calcul entre un écoulement autour d'une boule de pétanque ($Re = 10^4$) et un avion ($Re = 10^8$) : $\sim \textcolor{red}{10^{12}}$

Developed continuously since 2003

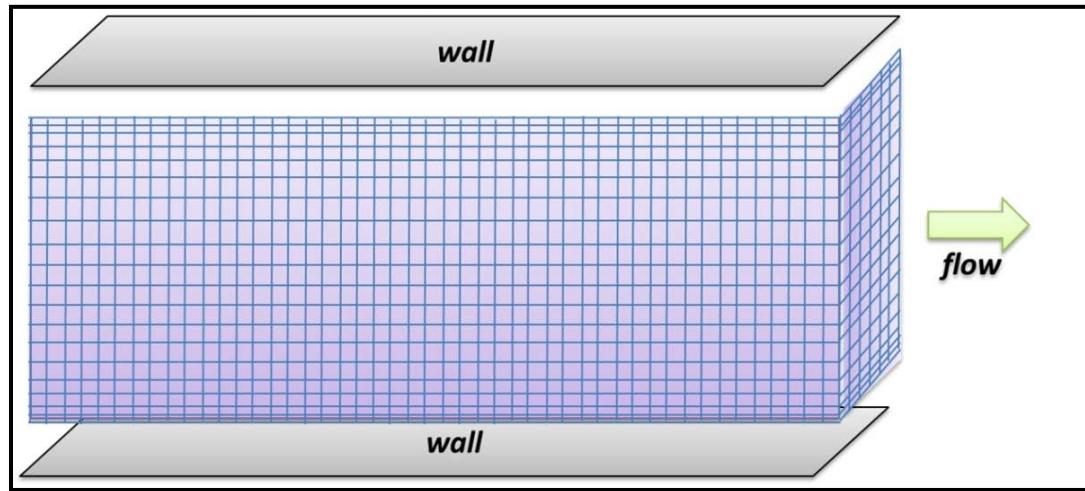
Written in Fortran 90 language (≈ 100.000 lines) and compiling with xlf90 & Intel Fortran on IBM and Intel architectures.

Parallelized with MPI => Great improvement for code efficiency with large speed-up ratio. Capable to run simulations on thousands of computational node (processors) on Scientific Supercomputers (HPC High Performance Computing)

Turbulent flow simulation in simple geometries (Time and Space dependencies)

Post processing : Huge amount of data produced. Ability to perform various visualizations (3D, 2D) and statistics.

⇒ 150 Go per field with 3079/789/2075 (Re = 30.000)

*Domaine de calcul***Configuration****Motivation**

LES and RANS: Rapides mais moins précises

DNS: Toutes les échelles de l'écoulement sont résolues. Plus coûteuse mais plus fiables.

Stratégies DNS:

- *) *Méthodes Spectrales*: Précision parfaite mais pas de généricité possible
- *) *Méthodes Différences Finies*: Plus génériques mais moins précises

Objectif: Développer un algorithme de résolution permettant de combiner la précision des méthodes spectrales et la généricité des Différences Finies.

Equations mises en œuvre

Dynamique de l'écoulement

Equations de Navier-Stokes :

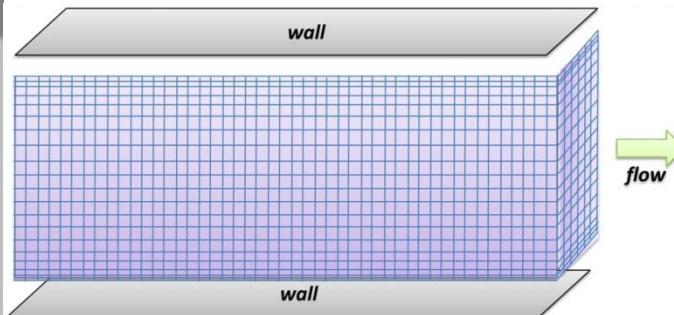
$$\frac{\partial u_j^*}{\partial t^*} + \frac{\partial u_i^* u_j^*}{\partial x_j^*} = - \frac{\partial P^*}{\partial x_j^*} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_j^*}{\partial x_j^{*2}}$$

Divergence locale nulle :

$$\frac{\partial u_j^*}{\partial x_j^*} = 0$$

- $\mathbf{Re} = \frac{u_{cp} h}{\nu}$: nombre de Reynolds [-]
- \mathbf{u}_{cp} : vitesse centrale du profil de Poiseuille [m.s^{-1}]
- \mathbf{h} : demi hauteur du canal [m]
- $\mathbf{\nu}$: viscosité cinématique du fluide [$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$]

A : terme temporel**B** : termes advectifs**C** : termes de pression**D** : termes diffusifs



Fractional Step Method

Streamwise & spanwise directions (x, z) : **Periodic BC**
 Wall normal direction (y) : **Dirichlet ($U_{\text{wall}}=0$)**

Stretching in the wall normal direction

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial x} - \left(\frac{\partial UU}{\partial x} + \frac{\partial UV}{\partial y} + \frac{\partial UW}{\partial z} \right) + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right)$$

$$\operatorname{div}(U) = 0$$

Time integration

1

First estimation of velocity field \mathbf{U}^* :

$$U^* = U^k + \alpha_k F^{(k)} + \beta_k F^{(k-1)} \quad \text{Runge-Kutta 3 for convective and diffusive terms (F)}$$

2

$\mathbf{P}^{(k+1)}$ is solved to ensure continuity equation

$$\frac{\delta^2 p^{(k+1)}}{\delta x^2} = \operatorname{div}(U^*)$$

3

$$U^{(k+1)} = U^* + \frac{\delta p^{(k+1)}}{\delta x}$$

The velocity field $\mathbf{U}^{(k+1)}$ fullfill $\operatorname{div}(\mathbf{U})=0$

Features recently developed (PhD F. Bauer)

- A) **Accuracy improved** (Compact Scheme and Explicit Optimized Schemes up to 6th order)
- B) **Genericity of boundary conditions.** “Special FFT” (Lemballais et al.), the Poisson equation arising from the second step of the fractional step method can be generalized to **free shear flows but also open boundary simulation**.
- C) **Open-Boundary conditions => Turbulent inflow generator** is required. Independent physical turbulent inlet – velocity profile- in the channel.
- D) **Immersed Boundary Method.** Allow to put into the flow objects with different shapes. Should be very useful when combined with open boundary condition and turbulent inflow generator (flow over cylinders etc.)
- E) In progress : **Multiphysical coupling** with other transport equations (MHD, Mass transport, Heat Transfer, Chemical Reacting flows, Neutronic diffusion, etc. ?)

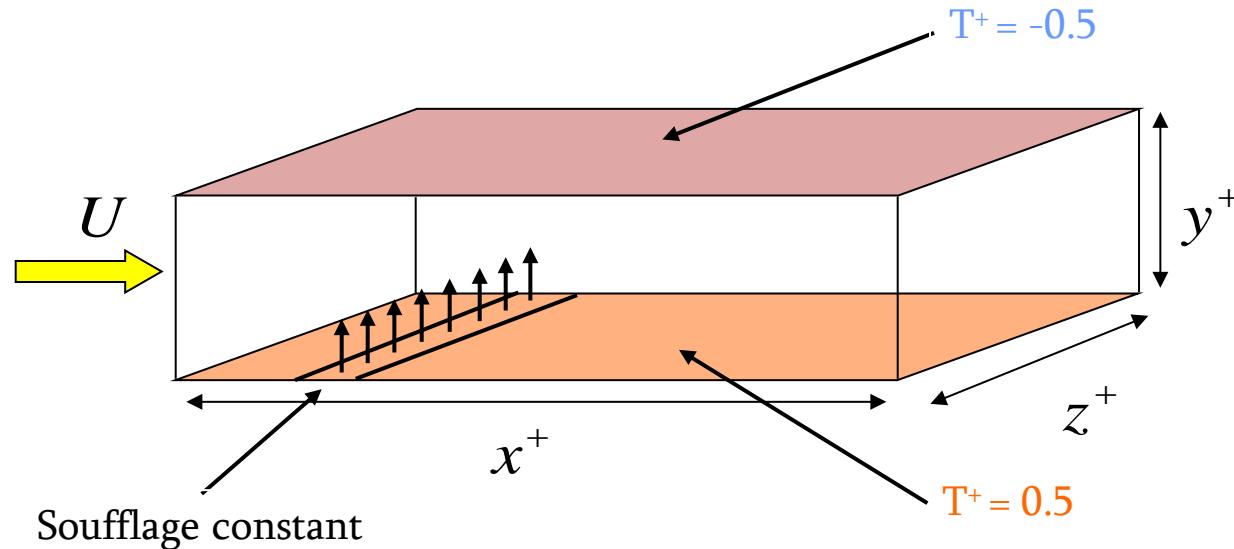
- **Very good parallel performances** up to 32000 cores (2D decomposition strategy) => TURING system (IDRIS)*
- **High degree of « genericity » for an academic code:**
Channel flow, Open flow, Immersed boundary flow, Different schemes configuration
- Data export: **use of HDF5** for portability and survaviblity of datas
- **Modular and accessible** implementation
- **In a near future : Open source code made available to academic community**

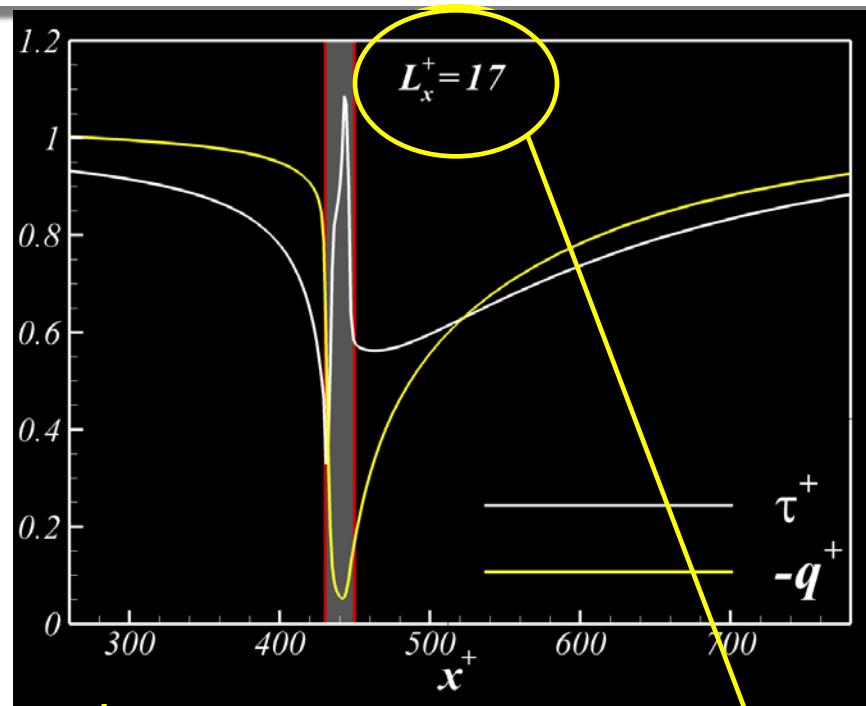
Exemples d'applications multiphysiques :

- A) Couplage **Turbulence/ Transfert Thermique**
 - B) Couplage **Turbulence/ Electro-Chimie**
 - C) Couplage **Ecoulements** autours d'objets + **Transfert thermique**
 - D) En cours : **Ecoulements Diphasiques + scalaire actif « fort » type Convection Naturelle**
- Ancienne Version

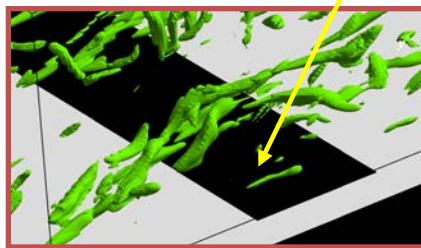
Contrôle d'écoulement turbulent et échanges thermiques

- **Contexte** : Stratégie passive de contrôle par soufflage
- Etude de l'effet du contrôle sur l'échange thermique en paroi
- **Température traitée comme un scalaire passif**. Paramètre de sévérité fixe.





Création d'une structure transversale



U

U

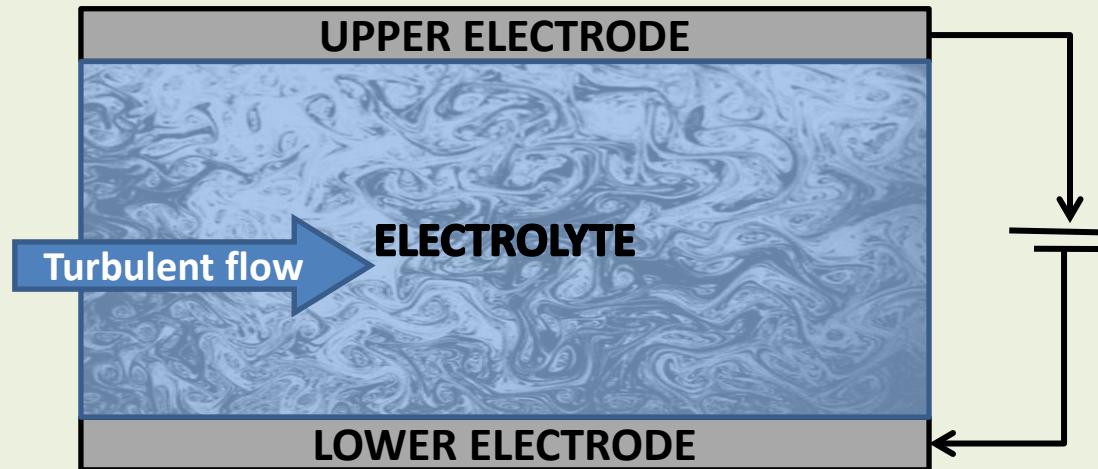
L'analogie de Reynolds n'est plus valide



MultiPhysical Simulation : Electrodeposition under a turbulent flow

Problem definition

Wall-reacting species transport in a turbulent binary electrolyte between two infinitely large electrodes



Purpose

Perform a complete simulation of the process

How the turbulence affects the deposition process ?

→ Identify key parameters governing the wall-deposition of a species in a turbulent field

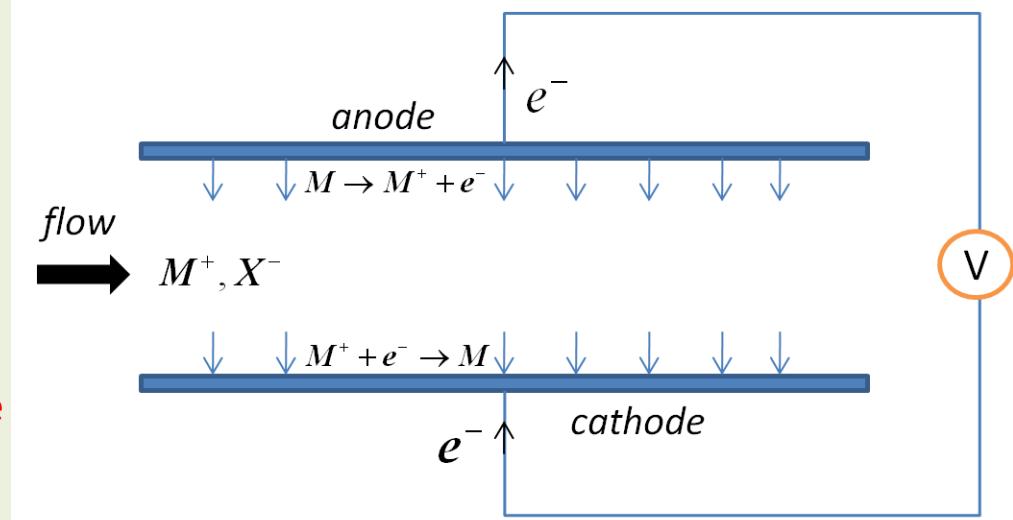
→ *Ex: Electroplating processes, softening of drinking water etc.*

Physical description

Multiphysics problem :

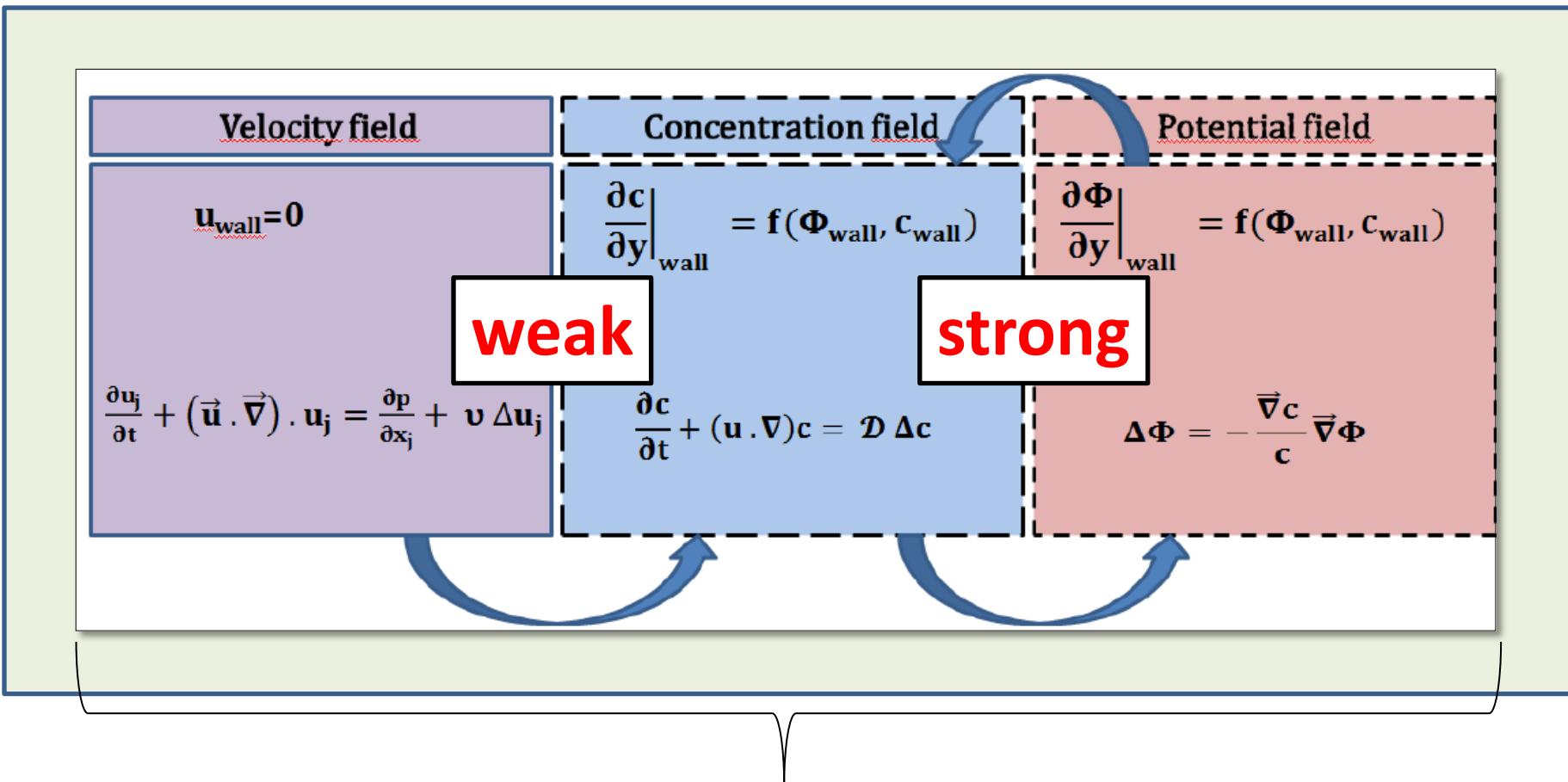
- Turbulence
- Mass transfer
- Potential distribution (bulk)
- Catalytic reactions (wall)

Charge
balance



- **DNS (Direct Numerical Simulation)** => BEST WAY to study a coupling with turbulence
- **Question** : Do we need to resolve the **WHOLE physics** to get a good prediction of the deposition process ?

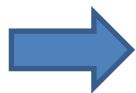
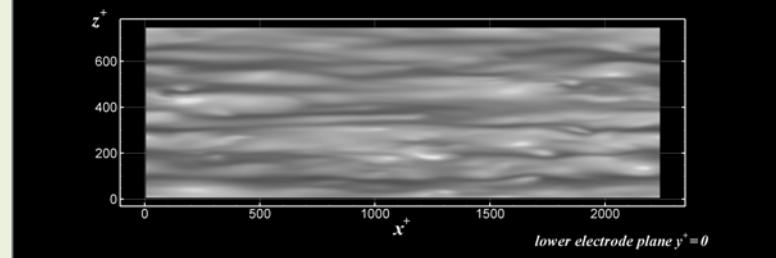
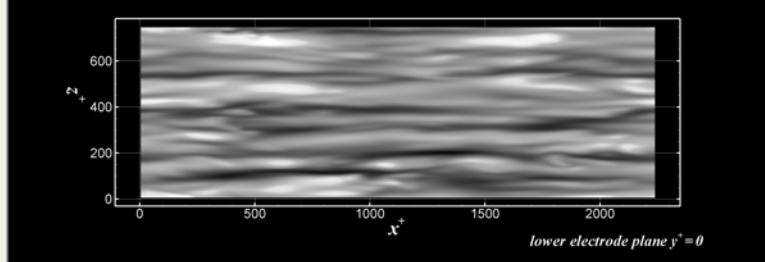
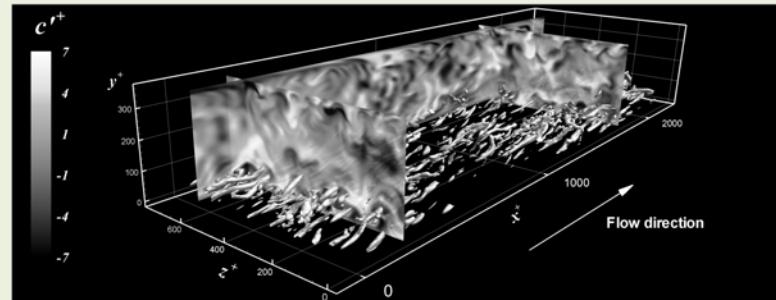
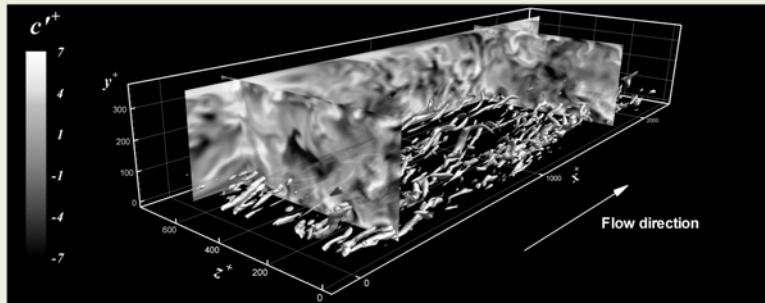
System of equations



**COUPLED AT THE BOUNDARY
BY Butler-Volmer equation**

3D Snapshots

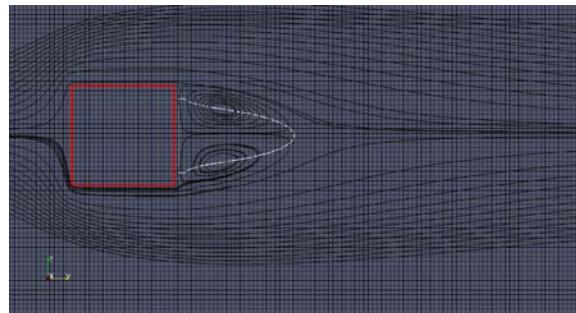
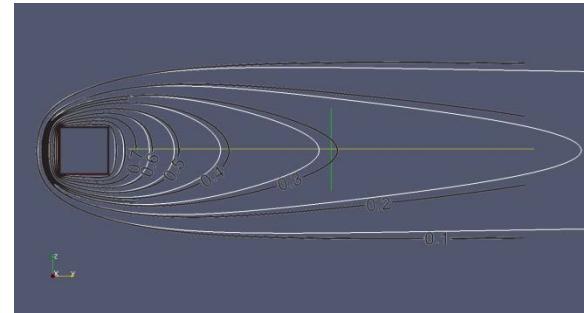
Increased electrochemical activity i_0



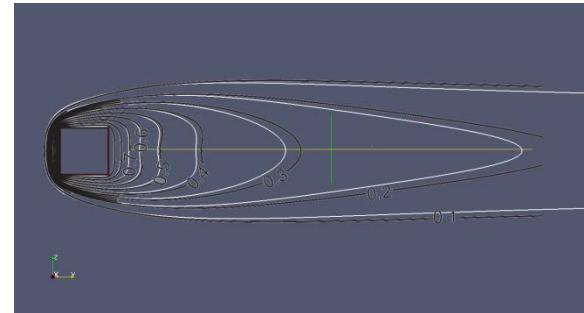
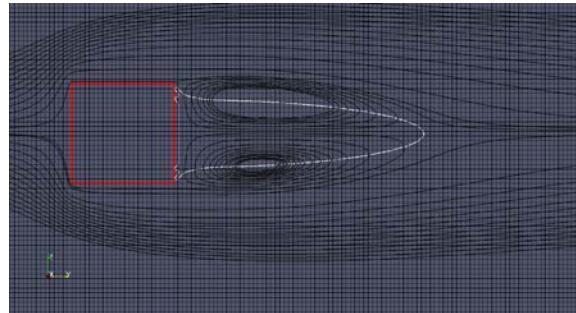
+ Full Coupling : V_0 (Cell Potential) governs mainly the mean AND the fluctuating part of the concentration => Regularity of the Deposition Process

*Premier test de couplage physique avec frontières immergées*Test Case*Ecoulement uniforme autour d'un cylindre (base carrée) isotherme***Lignes de courant**

→ **Re =20**

**Iso-valeurs de température**

→ **Re =40**



Equation Lagrangienne

Equation de mouvement d'une bulle

Hypothèses :

- Bulle = petite ($\approx mm$) => indéformable ($We < 1$)
- Force d'histoire négligée (Basset), pas de changement de phase
- Vitesse pariétale de bulle nulle, pas de collisions
- Régime de Stokes : Reynolds bulle $Re_b < 1$, pas de sillage turbulent



Equation Lagrangienne (Maxey and Riley 1983)



Calcul de la trajectoire de chaque bulle
(approximation de « force localisée »)

Equation Lagrangienne

Equation de mouvement d'une bulle

Equation Lagrangienne (Maxey and Riley 1983) :

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = \boxed{A} + \boxed{B} + \boxed{C} + \boxed{D} + \boxed{E}$$

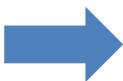
$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = \frac{3}{4} \frac{C_d}{d} \frac{\rho_c}{\rho_d} |\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}| (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) + \frac{1}{2} \frac{\rho_c}{\rho_d} \left(\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} - \frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} \right) + \frac{\rho_c}{\rho_d} \frac{D\boldsymbol{u}}{Dt} + C_L \frac{\rho_c}{\rho_d} (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}) \times \boldsymbol{\omega} + \left(1 - \frac{\rho_c}{\rho_d} \right) \boldsymbol{g}$$

- ρ_c & ρ_d : masse volumique de la phase continue et de la phase dispersée [kg.m⁻³]
- C_d & C_L : coefficient de drag et de lift [-]
- d : diamètre de la bulle [m]
- \boldsymbol{u} : vitesse du fluide [m.s⁻¹]
- \boldsymbol{v} : vitesse de la bulle [m.s⁻¹]
- $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \boldsymbol{u}$: vorticité [s⁻¹]
- \boldsymbol{g} : l'accélération gravitationnelle [m.s⁻²]

A : force de traînée de Stokes**B** : force de masse virtuelle**C** : force due au gradient de pression du liquide**D** : force de portance de la bulle**E** : poussée d'Archimède

Méthodes numériques**Résolution de l'équation d'une bulle**

Etape 2: Equation de mouvement de la bulle → vitesse de la bulle au pas de temps suivant.
 Position de la bulle → $x(t + dt) = x(t) + v \cdot dt$


Schéma de Crank-Nicholson

Intégration de l'équation de mouvement de la bulle :

$$v_i^{n+1} - v_i^n = \Delta t \int_t^{t+\Delta t} F_i dt \xrightarrow{\text{ordre 2}} v_i^{n+1} - v_i^n = \Delta t \frac{F_i^{n+1} + F_i^n}{2}$$

avec $F_i = A + B + C + D$

A : Terme de traînée

B : Terme contenant les forces de masse virtuelle du fluide

C : Poussée d'Archimède

D : Terme de portance (Lift)

Méthodes numériques

Couplage multi-physique

Etape 3: Déterminer et intégrer termes associés à la bulle → équations de Navier-Stokes au point i

→ Méthode itérative

$$u_i^{n+1} = u_i^n + RHS_i + \text{grad}(P) + \sum F_{i,B/F}$$

RHS : termes diffusifs et convectifs

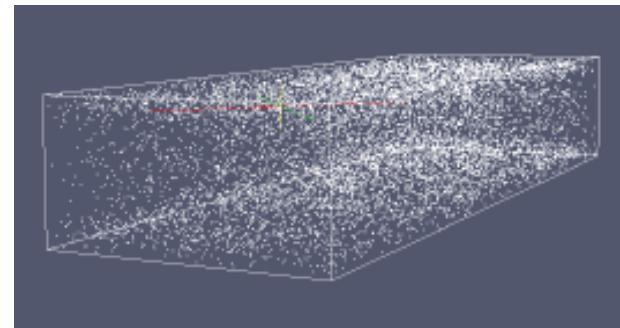
$\sum F_{i,B/F}$: Force d'interaction entre les bulles et l'écoulement au pas de temps n
grad(P) : gradient de pression de l'écoulement

Démarche:

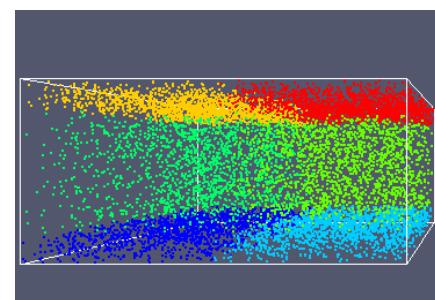
1. Première estimation de la vitesse du fluide $[u_i^{n+1}]^{(0)}$
2. Résolution de l'équation de la bulle
3. Mise à jour de Navier-Stokes avec les termes F^n des bulles
4. Nouvelle estimation de la vitesse du fluide $[u_i^{n+1}]^{(1)}$

Etapes

1. Créer et exporter une bulle comme une particule libre dans un espace physique 3D

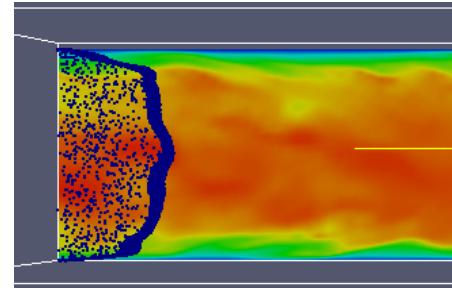


2. Associer un processus à chaque sous-domaine, distribuer les bulles à chaque processus



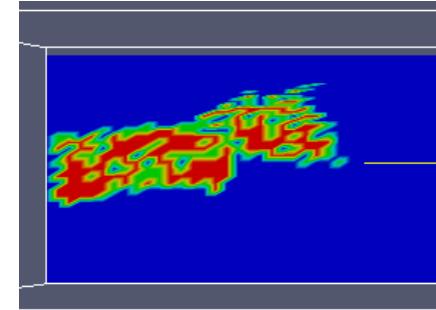
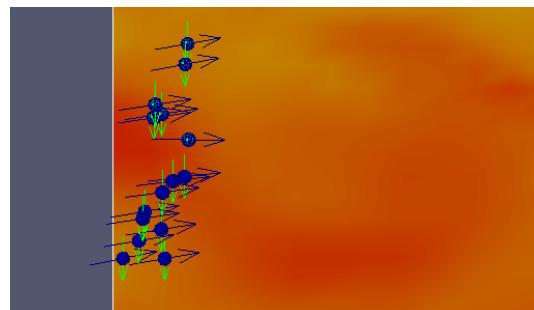
- Décomposition 6 sous-domaines, direction 1 complète
- Reconnaissance du processeur → déplacement des bulles

3. Entrainement des bulles par le fluide (équivalent scalaire passif)

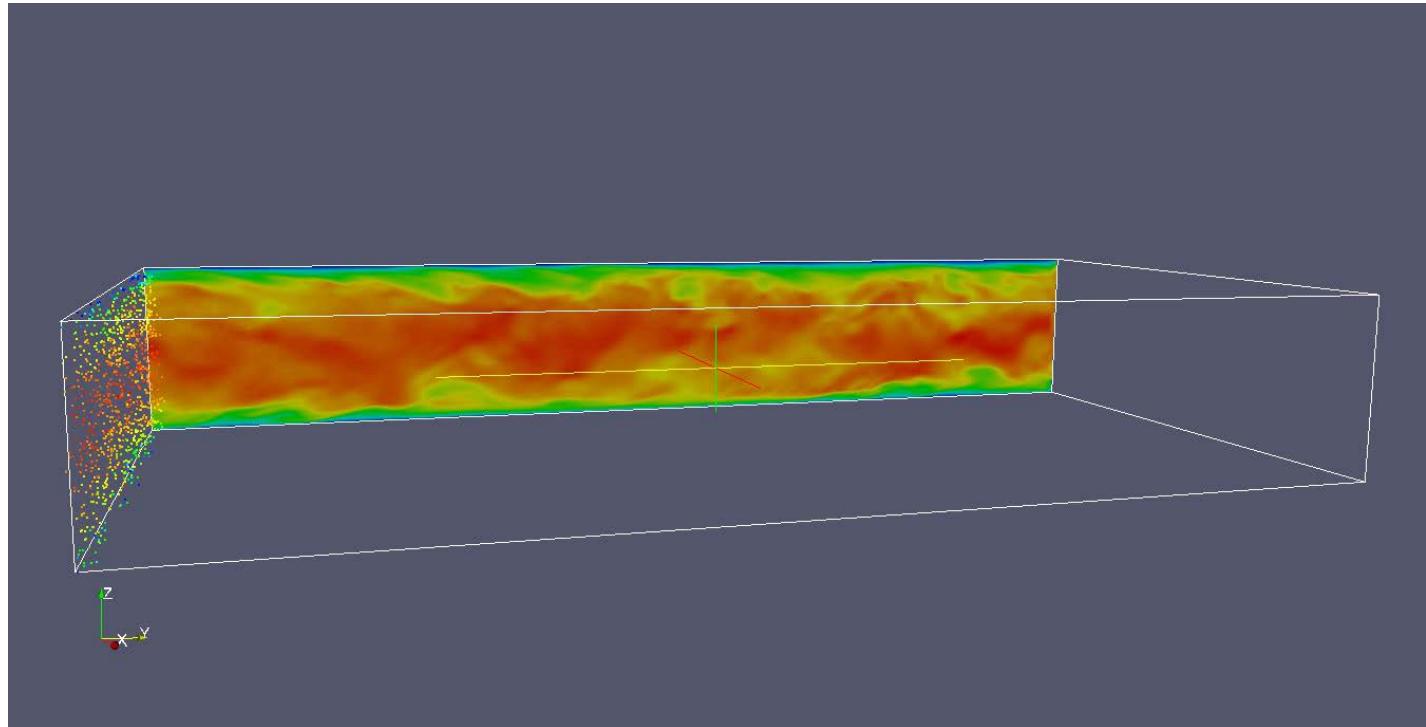


=> Interpolation de la vitesse du fluide sur la position de la bulle

4. Contributions des bulles sur écoulement, volumes de contrôle (nécessaire au Couplage retour)



5. Exemple de simulation



Application dans NEEDS

Contexte : Mieux comprendre/prédire la purification par bullage à hélium (extraction L/G en ligne). Possibilité de séparation des phases L/G par champ magnétique (Projet CLEF)

Objectif : Simuler le couplage entre la phase dispersée (bulles) et la phase continue (liquide) en milieu faiblement turbulent *avec le moins d'approximations possibles (outils DNS)*

+ **Champ magnétique**

- ⇒ Calcul complet du système impossible
- ⇒ Utile pour identifier « proprement » les caractéristiques d'un couplage multi physique

- ⇒ Extension potentielle à la thermique (convection forcée ou naturelle), la diffusion neutronique, réactions chimiques, transport de matière, MHD etc.