



**Ajout à l'outil Trio_U de plusieurs fonctionnalités
concernant le transport de marqueurs**
Note technique

N° Identification : CS SI/311-1/AB07B026/AV1/PRO/1.0
Date : 17/09/2008

Rédigé par : M. Elmo	Le : 17/09/08	Signature :
Vérificateur technique : P. Ledac	Le : 17/09/08	Signature :
Vérificateur qualité : B. Gonzalez	Le : 17/09/08	Signature :
Approuvé par : C. Pernot	Le : 17/09/08	Signature :

LISTE DE DIFFUSION

Diffusion Externe

Nom des destinataires	Adresse	Nb. Ex.
O. Lebaigue	CEA / DEN / DTP / SSTH / LMDL Av. des Martyrs 38054 GRENOBLE CEDEX	1

Diffusion Interne

Nom des destinataires	Adresse	Nb. Ex.
M. Elmo	CS-SI Fontaine 6, Rue de l'Arcelle ZI des Plan 38600 Fontaine	1

SOMMAIRE

1. MODELISATION D'UNE INCLUSION.....	2
1.1 Parametres physiques de modelisation.....	2
1.1.1 Caractérisation des particules.....	2
1.1.2 Bilan de quantité de mouvement d'une particule (« one way coupling »).....	2
1.1.3 Bilan de quantité de mouvement du fluide (« two way coupling »).....	2
1.1.4 Transformation d'une inclusion en particule.....	3
1.1.5 Conditions limites.....	3
1.2 Conception et mise en oeuvre.....	3
1.2.1 Description de la conception.....	3
1.2.2 Discretisation du bilan de q.d.m. des particules.....	6
1.2.3 Algorithme de transformation d'une inclusion.....	7
1.2.4 Terme source pour l'équation de Navier Stokes	7
1.2.5 Algorithme de résolution.....	9
2. CAS TESTS DE VALIDATION.....	11
2.1 Test de resolution des bilans de q.d.m.....	11
2.1.1 Bilan de q.d.m. des particules (« one way coupling »).....	11
2.1.2 Bilan de q.d.m. du fluide (« two way coupling»).....	15
2.2 Test de transformation des bulles en particules et réciproquement.....	19
3. SPECIFICATIONS D'UTILISATION DES FONCTIONNALITES DE MARQUEURS.....	23

Une première prestation de développement a permis de doter le logiciel de simulation en thermohydraulique Trio_U d'une fonctionnalité d'intégration de trajectoires de marqueurs ponctuels. Dans le cadre de diverses études concernant des procédés de génie chimique, des évolutions de cette fonctionnalité s'avèrent nécessaires pour modéliser des inclusions dans un milieu continu par des particules matérielles. Dans cette approche affinée, les particules sont caractérisées par des propriétés physiques qui leur sont propres : densité, volume, diamètre, vitesse, différence de vitesse par rapport à celle du fluide, température et par leurs positions.

Les développements présentés dans cette note visent à atteindre les trois objectifs suivants. D'une part, le bilan de quantité de mouvement d'une particule peut être résolu pour calculer sa vitesse propre. D'autre part un terme source dans le bilan de quantité de mouvement du fluide peut être activé pour modéliser l'action en retour des particules. Enfin, un critère de taille ou de position relatif à une inclusion placée dans un milieu continu est susceptible d'être retenu pour déclencher la transformation de celle-ci en une particule matérielle de « propriétés équivalentes ».

Dans la suite de ce document, on présente premièrement la modélisation physique d'une inclusion par une particule. Ensuite on expose la conception et la mise en œuvre des développements réalisés. Les cas tests de validation sont alors présentés. Enfin on décrit les spécifications d'utilisation des fonctionnalités de marqueurs.

Les développements présentés dans cette note sont réalisés dans une version v1.5.4 de Trio_U, dans laquelle ont été intégrés les développements réalisés dans le cadre du contrat « Evolution des fonctionnalités IBC ».

1.MODELISATION D'UNE INCLUSION

1.1PARAMETRES PHYSIQUES DE MODELISATION

1.1.1Caractérisation des particules

La modélisation d'une inclusion au sein d'un fluide principal peut être réalisée en la remplaçant par une particule matérielle sphérique qui est caractérisée par :

- la position x_p , barycentre de la particule
- le diamètre d_p (et volume associé $v_p = \pi / 6 d_p^3$)
- la masse volumique moyenne ρ_p
- la vitesse u_p du barycentre
- la température T_p
- la différence \mathcal{S}_v entre la vitesse du fluide et celle de la particule (à la position de la particule)

1.1.2Bilan de quantité de mouvement d'une particule (« one_way_coupling »)

L'intégration des trajectoires des particules implique la connaissance de leur champ de vitesse. Celui-ci est obtenu par résolution du bilan de quantité de mouvement (q.d.m.) que l'on peut écrire, pour une particule p :

$$\rho_p v_p \frac{du_p}{dt} = F_T + F_F + F_{MA} + F_P$$

où F_T , F_F , F_{MA} et F_P désignent respectivement les forces de trainée, de flottabilité, de masse ajoutée et de portance qu'exerce le fluide sur la particule. Ces forces sont exprimées en fonction des propriétés du fluide et de celles de la particule. L'expression détaillée de ces différentes forces est fournie dans l'annexe 1.

Notons que dans le cadre des développements présentés dans cette note, la force de portance est négligée et une expression simplifiée du coefficient de trainée est retenue.

1.1.3Bilan de quantité de mouvement du fluide (« two_way_coupling »)

En application du principe d'action et de réaction, les particules matérielles exercent une action sur le fluide que l'on prend en compte par un terme source S_{TWC} dans son bilan de q.d.m. Ce bilan peut alors s'écrire de façon schématique :

$$\frac{\partial u_f}{\partial t} = \text{inertie} + \text{diffusion} + \text{sources} + S_{TWC} \quad \text{où } u_f \text{ désigne la vitesse du fluide}$$

1.1.4 Transformation d'une inclusion en particule

La présence d'une particule matérielle dans le milieu continu pourra résulter d'une distribution en condition initiale, d'une injection périodique au cours du temps ou de la transformation d'une inclusion.

La fonctionnalité de transformation d'une inclusion est déclenchée par l'application des critères géométriques suivants :

- la position du centre de gravité de l'inclusion se trouve dans une sous zone.

- le diamètre caractéristique de l'inclusion est inférieur à un diamètre seuil, ou à une dimension caractéristique construite par rapport au volume de contrôle local.

La localisation des sous zones et le diamètre seuil sont des données fixées par l'utilisateur.

1.1.5 Conditions limites

En conditions limites, les particules sont gérées de la façon suivante :

- elles sortent du domaine (suppression) sur les bords où une condition limite de « frontière ouverte » s'applique au fluide.

- leur vecteur vitesse est réfléchi sur les bords où une condition limite de « paroi_fixe » ou de « symetrie » s'applique au fluide.

1.2 CONCEPTION ET MISE EN OEUVRE

1.2.1 Description de la conception

On présente ci-dessous deux diagrammes de conception, le premier est relatif à l'équation de transport des particules ainsi qu'à leurs propriétés physiques, le second est relatif aux termes sources des bilans de q.d.m. respectifs des particules et du fluide.



La description des particules se résume à la connaissance de leur position, ici caractérisée par l'attribut *maillage_interface*, et à celle de leurs propriétés physiques désignées par l'attribut *proprietes_particules*.

La classe *Transport_Interface_FT_Disc* (classe mère de *Transport_Marqueur_FT*) porte ces deux attributs ainsi que *maillage_inject* et *proprietes_inject* qui jouent le même rôle que celui décrit précédemment mais pour des particules à injecter au cours du temps.

Rq :

-Les positions des particules sont répertoriées dans le tableau *sommets* porté par *maillage_interface*.

-La notion de propriétés physiques n'intervient que pour des particules matérielles et non pour des particules ponctuelles.

On décrit ci-dessous les classes *Proprietes_part_vol* et *Transport_Marqueur_FT* qui jouent un rôle majeur dans la gestion des particules

La nouvelle classe *Proprietes_part_vol* porte les différentes propriétés physiques caractérisant une particule (cf. §1.1.1), ainsi que le nombre de ces particules.

-Lecture : La lecture des propriétés suivantes : *vitesse_p*, *temperature_p*, *masse_volumique_p*, *diametre_p* est faite soit dans un fichier soit par spécification utilisateur dans le jeu de données pour le cas d'une distribution uniforme (*lire_distribution()*).

-Complément : Les propriétés *delta_v* et *volume_p* sont initialisées dans *completer()*.

-Actualisation :

ajouter_proprietes() : assure la prise en compte de propriétés pour de nouvelles particules.

nettoyer() : les propriétés associées à des particules supprimées sont éliminées.

fixer_nb_particules() : permet à un objet extérieur d'actualiser l'attribut *nb_particules*.

Rq :

Chaque opération modifiant le nombre de particules matérielles doit être suivie de l'actualisation de l'attribut *nb_particules*. Les opérations actuellement susceptibles de modifier cette quantité sont : la lecture, l'injection, la transformation (par injection ou nettoyage), le nettoyage et le passage d'une particule d'un sous domaine à un autre dans le cas d'un calcul parallèle.

La nouvelle classe *Transport_Marqueur_FT* déclenche, ou réalise, la plupart des opérations de lecture, d'actualisation ou de post-traitement concernant les attributs *maillage_interface* et *proprietes_particules* ou encore *maillage_inject* et *proprietes_inject*. Notons en outre que cette classe porte l'attribut *source_stockage* qui stocke le contribution des forces d'interaction fluide-particules, et les attributs représentant les propriétés physiques du fluide interpolées aux positions des particules, ces dernières sont en effet nécessaires au calcul des forces.

Lecture :

lire_cond_init() déclenche la lecture de *maillage_interface* et *proprietes_particules* ainsi que le temps de début d'intégration.

lire_cl() : surcharge vide de la méthode pour ne pas spécifier de conditions limites.

lire() : lecture des attributs *methode_calcul_vp* pour choisir entre vitesse interpolée et résolution du bilan de q.d.m., *methode_couplage* pour sélectionner le type de couplage entre fluide et particules, *nb_it* pour fixer le nombre de sous pas de temps de résolution du bilan de q.d.m., *implicite* pour sélectionner la méthode de résolution du terme de masse ajoutée, *phase_marquee* pour un fluide diphasique, et des informations spécifiques à l'injection (*lire_injection()*) et la transformation (*lire_transformation()*).

Complément :

-*discretiser()* : discrétisation du champ inconnu *champ_bidon*.

-*completer()* : déclenche les opérations nécessaires pour finaliser la construction de la structure *maillage_interface* (et *maillage_inject*) ainsi que celles nécessaires pour finaliser la construction de *proprietes_particules* (et *proprietes_inject*).

-*preparer_calcul()* : initialise *delta_v* et dimensionne *source_stockage*.

CS SI/311-1/AB07B026/AV1/PRO/1.0	Ajout à l'outil Trio_U de plusieurs fonctionnalités concernant le transport de marqueurs	Page :5
----------------------------------	--	---------

Actualisation :

-initTimestep() :

- déclenche les opérations d'injection (*injecter()*) et de transformation (*transformer()*)
- dans le cas où la vitesse des particules est calculée à partir de leur bilan de q.d.m., on réalise :
 - l'évaluation des propriétés du fluide aux positions des particules (calcul de *vit_fluide_som_*, *visco_dyn_fluide_som_*, *rho_fluide_som_*, *grad_P_som_* par *calculer_proprietes_fluide_pos_particules()*).
 - la vitesse des particules positionnées sur les bords est modifiée par une réflexion si les conditions limites de l'hydraulique sont de type paroi ou symétrie (*imposer_cond_lim()*).
 - dimensionnement de l'attribut *source_stockage_* en fonction du nombre de particules à cet instant et stockage dans ce tableau de la contribution des termes sources intervenant dans le bilan de q.d.m.
 - actualisation de *delta_v_*.

-mettre_a_jour() :

- déclenche l'intégration des trajectoires des particules par les étapes suivantes :
 - calcul de la vitesse des particules (*calcul_vitesse_p()*) soit par interpolation de la vitesse du fluide (*methode_calcul_vp_=INTERPOLEE*) soit par résolution du bilan de q.d.m. (*methode_calcul_vp_=BILAN_QDM*, *resoudre_edo()*) puis du déplacement.
 - transport des particules (calcul des nouvelles positions) et actualisation de leurs propriétés (*preparer_tableau_avant_transport()* et *update_tableaux_apres_transport()*) dans le cas d'un calcul parallèle.

Post-traitement :

- creer_champ()* : discrétisation des champs *densite_particules_* et (ou) *volume_particules_*.
- get_champ()* : actualisation des valeurs du champ *densite_particules_* (*calculer_valeurs_densite()*) ou *volume_particules_* (*calculer_valeur_volumes()*).
- get_noms_champs_postraitables()* : impression du nom des champs post-traitables de l'équation.
- get_champ_post_FT()* : post-traitement des quantités lagrangiennes.

Les termes sources traduisant l'action du fluide sur les particules sont estimés dans la méthode *ajouter()* des nouvelles classes suivantes : *Source_Trainee*, *Source_Flottabilite* et *Source_Masse_Ajoutée*. La classe *Source_Portance* a été créée mais sa méthode *ajouter()* n'est actuellement pas implémentée. Ces classes héritent de *Source_Action_Particules* qui centralise les méthodes d'accès aux propriétés des particules et du fluide.

1.2.2 Discrétisation du bilan de q.d.m. des particules

Dans le cas d'une résolution explicite du terme source de masse ajoutée, la discrétisation du bilan de q.d.m. est la suivante :

$$\rho_p v_p \frac{u_p^{n+1} - u_p^n}{dt_p} = -0.5 C_d \rho_f S_d \left\| \vec{u}_p^n - \vec{u}_f^n \right\| (u_p^n - u_f^n) + \rho_p v_p g - \nabla P^n v_p + C_{MA} \rho_f v_p (u_f^n - u_p^n - \delta_v^n) / dt_p$$

avec $\delta_v^n = u_f^{n-1} - u_p^{n-1}$ et $dt_p = dt / nb_it$

où dt est le pas de temps de la simulation et nb_it le nombre de sous pas de temps.

Dans le cas d'une résolution implicite du terme source de masse ajoutée, la discrétisation du bilan de q.d.m. est la suivante :

$$(\rho_p + C_{MA}\rho_f)v_p \frac{u_p^{n+1} - u_p^n}{dt_p} = -0.5C_d\rho_f S_d \|\vec{u}_p^n - \vec{u}_f^n\| (u_p^n - u_f^n) + \rho_p v_p g - \nabla P^n v_p + C_{MA}\rho_f v_p (u_f^n - \delta_v^n) / dt_p$$

avec $\delta_v^n = u_f^{n-1}$

dt_p est le pas de temps de résolution du bilan de q.d.m. des particules et constitue un sous pas de temps de celui du calcul principal, sa valeur dépendant du nombre d'itérations ($nb_it=1$ par défaut) fixés par l'utilisateur.

1.2.3 Algorithme de transformation d'une inclusion

Les étapes pour procéder à la transformation d'une inclusion en particule sont les suivantes :

-identification des groupes connexes par l'équation d'interface.

eq_interf.identifie_composantes_connexes()

-calcul des propriétés géométriques équivalentes pour ces groupes connexes (position du centre de gravité, volume et diamètre)

calcul_proprietes_geometriques()

-détection des groupes à supprimer en fonction de critères spécifiés par l'utilisateur

detection_groupes_a_supprimer()

-construction de la structure de positions des particules (maillage) et des propriétés (proprietes) à injecter en remplacement des groupes connexes

construction_ensemble_proprietes()

-calcul de la vitesse des particules à injecter (vitesse du fluide interpolée aux positions des particules)

eq_interf.calculer_vitesse_transport_interpolee()

-suppression des groupes connexes remplacés par des particules

eq_interf.supprimer_composantes_connexes()

1.2.4 Terme source pour l'équation de Navier-Stokes

La prise en compte des efforts exercés par les particules sur le fluide est faite au travers d'un terme source dans l'équation de Navier-Stokes. La procédure d'évaluation de ce terme source doit lui assurer une distribution continue en espace. Nous présentons ici la méthode adoptée pour atteindre cet objectif.

La force $F_p(x_p)$ exercée par le fluide sur la particule p, et estimée à la position du centre de gravité x_p de celle-ci, est interpolée aux sommets de l'élément eulérien *elem* qui la contient.

L'expression de la source « élémentaire » S_{TWC_p} en un sommet *som* de position x_s appartenant à l'élément *elem* s'écrit :

$$S_{TWC_p}(som) = -F_p(x_p) * coord_bary(x_p, x_s)$$

où $coord_bary(x_p, x_s)$ désigne la coordonnée barycentrique du point de coordonnées x_p , par rapport au sommet de coordonnées x_s .

Finalement l'expression du terme source au niveau du sommet som s'écrit :

$$S_{TWC}(som) = \sum_{p=1}^{nbp_s} S_{TWC_p}(som)$$

où nbp_s désigne le nombre total de particules appartenant aux éléments possédant le sommet som .

Le terme source ainsi évalué aux sommets du maillage eulérien est alors distribué aux faces, en sommant pour une face donnée d'un élément, la contribution de chacun des sommets de la face, pondérée par le nombre de sommets de la face.

L'expression de la source S_{TWC} au centre de gravité x_v de la face fac est la suivante :

$$S_{TWC}(fac) = \frac{1}{nbsom_{fac}} * \sum_{i=1}^{nbsom_{fac}} S_{TWC}(som_i)$$

où $nbsom_{fac}$ désigne le nombre de sommets par face et som_i désigne le $i^{ème}$ sommet de la face.

L'évaluation de ce terme source est réalisée dans la méthode *ajouter()* des nouvelles classes *Source_Reaction_Particules_VDF* et *Source_Reaction_Particules_VEF*.

Rq :

Les méthodes de calcul des coordonnées barycentriques ont été étendues au cas d'éléments réguliers (Rectangle en 2D et Hexaedre en 3D) et factorisées dans la classe *Champ_P1_implementation*. Ces méthodes ont été dupliquées dans *Champ_Q4_implementation*.

Post-traitement des propriétés physiques des particules (pour des particules matérielles)

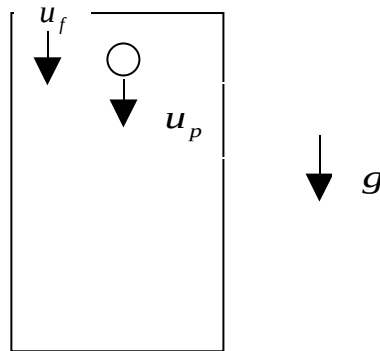
2. CAS TESTS DE VALIDATION

2.1 TEST DE RESOLUTION DES BILANS DE Q.D.M.

Le cas test présenté a pour but de valider d'une part, la résolution du bilan de q.d.m. des particules (« one_way_coupling ») et d'autre part, l'action en retour des particules sur le fluide (« two_way_coupling ») au travers de la résolution de l'équation de Navier-Stokes incluant un terme source spécifique à ce type de couplage.

La situation considérée est la suivante :

Une particule est lâchée avec une vitesse nulle dans un domaine 3D où circule un fluide avec une vitesse $u_f = U$.



2.1.1 Bilan de q.d.m. des particules (« one_way_coupling »)

Pour tester la résolution du bilan de q.d.m. des particules dans une situation de couplage du type « one_way_coupling », on détermine la solution analytique du champ de vitesse de la particule lâchée ainsi que sa position au cours du temps. La position temporelle de la particule obtenue par la simulation est alors comparée à celle déterminée analytiquement. Dans un premier temps, la solution analytique est établie dans une situation où seules les forces trainée et de flottabilité sont conservées dans le bilan de q.d.m., la vitesse du fluide étant pour sa part uniforme en espace et en temps. Dans un second temps, la solution est déterminée en ne considérant que l'action de la force de masse ajoutée, la vitesse du fluide étant cette fois-ci uniforme en espace mais instationnaire.

2.1.1.1 Expression des solutions analytiques

L'expression des forces considérées dans ces tests ainsi que la nomenclature associée est fournie dans l'annexe 1.

2.1.1.1.1 Test des forces de trainée et de flottabilité

Dans cette partie seules les forces de trainée et de flottabilité sont conservées dans le bilan de q.d.m. de la particule et la vitesse du fluide est uniforme en espace et en temps ($u_f(x, t) = U$). Dans cette situation, le bilan s'écrit :

$$\rho_p v_p \frac{du_p}{dt} = -0.5 C_d \rho_f \pi \frac{d_p^2}{4} \left\| \vec{u}_p - \vec{u}_f \right\| \left(\vec{u}_p - \vec{u}_f \right) + \left(\rho_p - \rho_f \right) v_p \vec{g} - v_p \vec{\nabla} P^*$$

avec $\nabla P = \nabla P^* + \rho_f g$, $C_d = \frac{24}{Re_p}$ et $\nabla P^* = 0$

Après projection sur l'axe de vecteur unitaire e_z ($g = -ge_z$), l'équation peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{du_p}{dt} = -\alpha u_p + \alpha u_f + \gamma g \text{ avec } \alpha = \frac{18\mu_f}{\rho_p d_p^2} \text{ et } \gamma = \frac{\rho_f - \rho_p}{\rho_p}$$

L'expression de la vitesse de la particule est alors :

$$u_p(t) = Ae^{-\alpha t} + u_f(t) + \frac{\gamma}{\alpha} g \text{ où } A \text{ est une constante d'intégration.}$$

Dans le cas où la particule est lâchée avec une vitesse nulle ($u_p(0) = 0$), on a :

$$u_p(t) = (u_f + \frac{\gamma}{\alpha} g)(1 - e^{-\alpha t})$$

L'expression de la cote Z de la particule est donnée par la relation :

$$z(t) = (u_f + \frac{\gamma}{\alpha} g)(t + \frac{1}{\alpha} e^{-\alpha t}) + B \text{ où } B \text{ est une constante d'intégration.}$$

Dans le cas où la particule est initialement à $z(0) = 1$, on a :

$$z(t) = (u_f + \frac{\gamma}{\alpha} g)(t + \frac{1}{\alpha} (e^{-\alpha t} - 1)) + 1$$

2.1.1.1.2 Test de la force de masse ajoutée

Dans cette partie seule la force de masse ajoutée est conservée dans le bilan de q.d.m. de la particule et la vitesse du fluide est uniforme en espace et instationnaire ($u_f(x, t) = U(t)$). Dans cette situation, le bilan s'écrit :

$$\rho_p v_p \frac{du_p}{dt} = C_{MA} \rho_f v_p \frac{d}{dt} (\vec{u}_f - \vec{u}_p)$$

L'équation peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{\beta}{1 + \beta} \frac{du_f}{dt} \text{ avec } \beta = C_{MA} \frac{\rho_f}{\rho_p}$$

L'expression de la vitesse de la particule s'écrit alors :

$$\vec{u}_p(t) = \frac{\beta}{1 + \beta} \vec{u}_f(t) + A \text{ où } A \text{ est une constante d'intégration}$$

Dans le cas où la particule est lâchée avec une vitesse nulle ($u_p(0) = 0$), on a :

$$\vec{u}_p(t) = \frac{\beta}{1 + \beta} (\vec{u}_f(t) - \vec{u}_f(t=0))$$

En retenant l'expression suivante $w_f(t) = \sin(\omega t)$ pour la composante de v_f dirigée suivant le vecteur e_z , la composante w_p de u_p s'écrit :

$$w_p(t) = \frac{\beta}{1+\beta} \sin(\omega t)$$

Dans le cas où la particule est initialement à la côte $z(0) = z_0$, on a :

$$z(t) = \frac{1}{\omega} \left(\frac{\beta}{1+\beta} \right) (1 - \cos(\omega t)) + z_0$$

2.1.1.2 Calculs en « one_way_coupling »

2.1.1.2.1 Forces de trainée et de flottabilité

Les principaux paramètres du calcul sont :

Géométrie :

dimension : 0.2x0.2x1

maillage : 21x21x51 (cas VDF)

6x6x21 + tetraedriser_homogene (cas VEF)

Milieu :

Fluide_Incompressible

mu Champ_Uniforme 1 3.7 10⁻⁵

rho Champ_Uniforme 1 2

Gravité :

gravite 3 0. 0. -9.81

Equation d'hydraulique :

convection et diffusion négligeable, seuil pression 1 10¹²

vitesse imposée sur les bords haut et bas : 0. 0. -1, paroi_fixe pour les bords latéraux

Equation particules :

Position : (nb_particules=1) 0.105 0.105 1

Propriétés : vitesse 3 0. 0. 0., temperature 1 273, masse_volumique 1 3., diametre 1 0.01

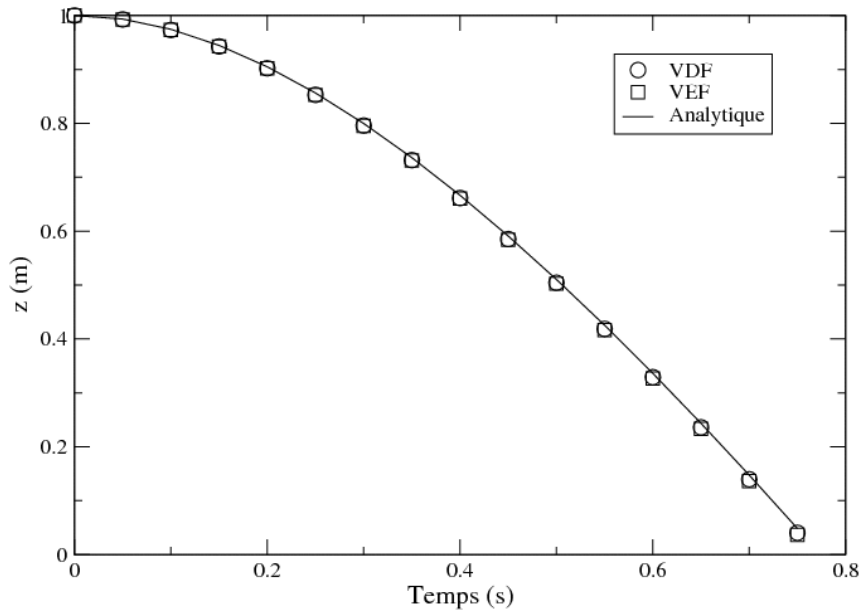
sources { Trainee , Flottabilite }

Solution analytique pour les paramètres ci-dessus :

$$z(t) = -2.4729715 * (t + 0.45045 * (e^{-2.22t} - 1)) + 1$$

On présente ici l'évolution de la position de la particule au cours du temps, dans le cas où celle-ci est soumise aux efforts de trainée et de flottabilité, pour les deux discrétisations VDF et VEF. Le résultat de la simulation est comparé à la solution analytique. On observe que la position calculée est quasiment identique à celle prévue analytiquement.

Evolution de la position (z) de la particule au cours du temps



2.1.1.2.2 Force de masse ajoutée

Les principaux paramètres du calcul sont :

Géométrie :

dimension : 0.2x0.2x1

maillage : 21x21x51 (cas VDF)

6x6x21 + tetraedriser_homogene (cas VEF)

Milieu :

Fluide_Incompressible

mu Champ_Uniforme 1 3.7 10⁻⁵

rho Champ_Uniforme 1 2

Gravité :

gravite 3 0. 0. -9.81

Equation d'hydraulique :

convection (quick pour VDF et muscl pour VEF) + diffusion , seuil pression 1 10⁻⁶

vitesse imposée sur les bords haut, bas et latéraux : 0. 0. sin(2 π)

Equation particules :

Position : (nb_particules=1) 0.105 0.105 0.5

Propriétés : vitesse 3 0. 0. 0., temperature 1 273, masse_volumique 1 1., diametre 1 0.01

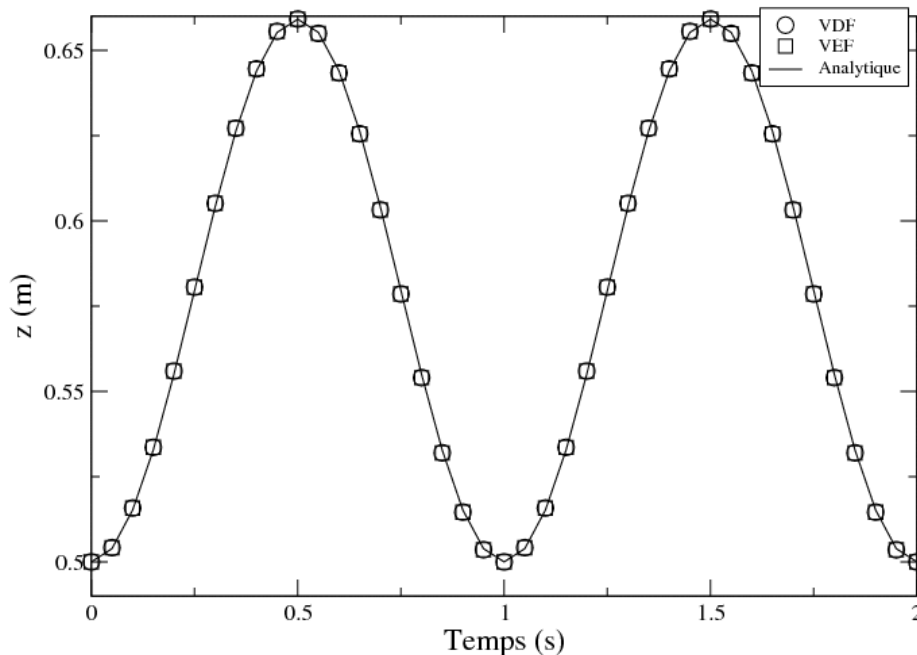
sources { Masse_ajoutee }

Solution analytique pour les paramètres ci-dessus :

$$z(t) = 0.079577472 * (1 - \cos(2 * \pi t)) + 0.5$$

On présente ici l'évolution de la position de la particule au cours du temps, dans le cas où celle-ci est soumise aux efforts de masse ajoutée, pour les deux discrétisations VDF et VEF. Le résultat de la simulation est comparé à la solution analytique. On observe que la position calculée est identique à celle prévue analytiquement.

Evolution de la position (z) de la particule au cours du temps



Le parallélisme des fonctionnalités testées précédemment est vérifié sur quelques pas de temps au travers de cas de non régression en utilisant un découpage du domaine pour lequel les particules passent d'un sous domaine à un autre.

2.1.2 Bilan de q.d.m. du fluide (« two_way_coupling »)

Pour tester la résolution du bilan de q.d.m. du fluide dans une situation de couplage du type « two_way_coupling », on ne retient que la force de trainée. En effet, le terme source initialement calculé aux positions des particules est interpolé pour être récupéré aux faces des éléments et pris en compte dans le bilan de q.d.m. du fluide. Ces opérations ne dépendent pas des forces considérées dans les bilans de q.d.m., par conséquent nous ne retenons que la force de trainée pour réaliser notre test.

La démarche de validation retenue dans cette partie est la suivante. Dans un premier temps, on teste l'effort des particules sur le fluide. Cet effort est désigné ici par « reverse_way ». Ensuite on considère une véritable situation de « two_way_coupling » dans laquelle le fluide agit sur les particules et celles-ci agissent en retour sur le fluide.

2.1.2.1 Test qualitatif de « reverse_way »

La situation considérée pour tester l'effort des particules sur le fluide est la suivante :

Une particule située à mi-hauteur dans la colonne de fluide est initialement animée d'une vitesse donnée. D'une part, l'effort du fluide sur la particule est estimé mais n'est pas appliqué à celle-ci et d'autre part, l'intégration de sa trajectoire n'est pas effectuée. Ainsi la position et la vitesse de la particule sont figées au cours du temps. Le fluide est pour sa part initialement au repos et soumis aux effets de convection, diffusion ainsi qu'à la force de trainée exercée par la particule de façon continue au cours du temps au point où celle-ci est localisée. On vérifie alors que le vecteur vitesse du fluide s'aligne avec celui de la particule mais avec une norme plus faible. On vérifie aussi la présence de recirculation au voisinage de la particule.

Les principaux paramètres du calcul sont :

Géométrie :

dimension : 0.2x0.2x1

maillage : 21x21x51 (cas VDF)

6x6x21 + tetraedriser_homogene (cas VEF)

Milieu :

Fluide_Incompressible

mu Champ_Uniforme 1 3.7×10^{-3}

rho Champ_Uniforme 1 2

Gravité :

gravite 3 0. 0. 0.

Equation d'hydraulique :

convection (quick en VDF et muscl en VEF) + diffusion, seuil pression 10^{-8}

vitesse imposée sur le bord bas : 0. 0. 0., sortie libre sur le bord haut, paroi sur les bords latéraux

Equation particules :

Position : (nb_particules=1) 0.105 0.105 0.5

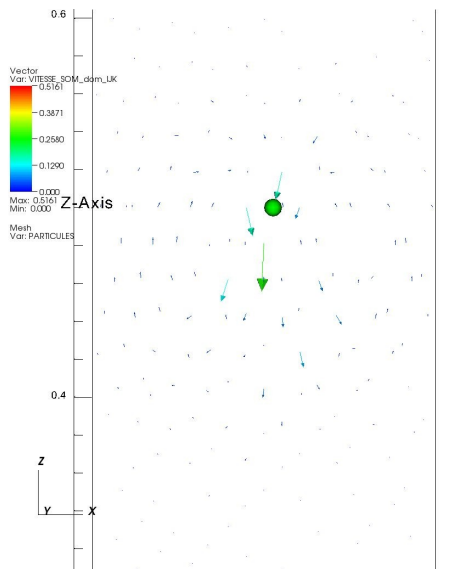
Propriétés : vitesse 3 0. 0. -1, temperature 1 273, masse_volumique 1 3., diametre 1 0.07

sources { Trainee }

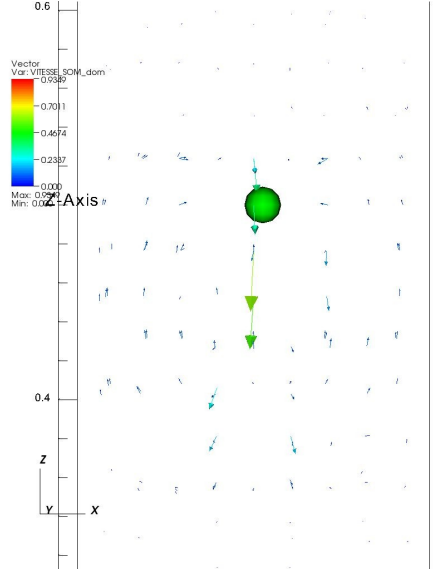
methode_couplage two_way_coupling

contribution_one_way 0

On présente un agrandissement sur le champ de vitesse du fluide dans la zone localisée autour de la particule pour les discrétisations de type VDF et VEF. Dans les deux cas, on observe que le fluide localisé dans le voisinage immédiat de la particule est effectivement entraîné dans le sens du vecteur vitesse de celle-ci. D'autre part des recirculations du fluide sont observées dans un voisinage latéral de la particule.



Cas VDF



Cas VEF

2.1.2.2 Test qualitatif de « two_way_coupling »

Le cas du «two_way_coupling», incluant l'action du fluide sur les particules et l'action retour de celles-ci est considéré en effectuant un « lâcher » d'un nombre important de particules (10000) dans un fluide descendant dans une colonne. La vitesse initiale des particules est nulle et seule la force de trainée est activée. On vérifie alors que les particules descendent dans la colonne. Notons que les particules ne sont pas lâchées dans un champ de vitesse stationnaire, ceci afin que le coût du solveur en pression ne soit pas trop faible et ainsi pouvoir estimer le coût de la prise en compte d'un nombre élevé de particules. La simulation est réalisée uniquement pour une discrétisation de type VEF.

Les principaux paramètres du calcul sont :

Géométrie :

dimension : 0.2x0.2x1

maillage : 3x3x11 + tetraedriser_homogene (cas VEF)

Milieu :

Fluide_Incompressible

mu Champ_Uniforme 1 $3.7 \cdot 10^{-3}$

rho Champ_Uniforme 1 2

Gravité :

gravite 3 0. 0. 0.

Equation d'hydraulique :

convection (muscl) + diffusion, seuil pression 10^{-8}

conditions initiales : 0. 0. -1.

vitesse imposée sur le bord haut : 0. 0. -1, sortie libre sur le bord bas, paroi_fixe sur les bords latéraux

Equation particules :

Position : (nb_particules=10000) distribution aléatoire sur sous zone (origine : 0. 0. 0.8 ; côtes 0.2 0.2 0.2)

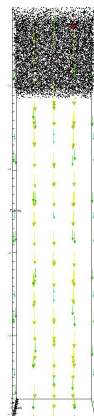
Propriétés : vitesse 3 0. 0. 0., température 1 273, masse_volumique 1 3., diametre 1 0.01

sources { Trainee }

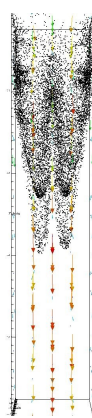
methode_couplage two_way_coupling

On présente ci-dessous une visualisation des positions des particules, ainsi que le vecteur vitesse du fluide, à différents instants ($t=0$; $t=0.25$; $t=0.75$). On observe que les particules sont entraînées par le fluide. On présente aussi un agrandissement du vecteur vitesse sur la partie haute de la colonne ($0.5 < z < 1$) à l'instant $t=0.1$. On observe que le champ de vitesse n'est pas aligné avec l'axe e_z ce qui montre l'action des particules sur le fluide.

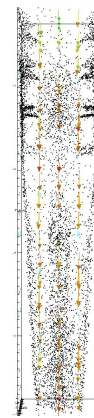
Notons que la présence d'un grand nombre de particules présente un coût de calcul important en terme d'estimation des propriétés du fluide aux positions des particules (appel de la méthode *coord_barycentrique_P1()*) notamment par la méthode *valeur_aux_elems()* mais ce point est à relativiser par rapport au nombre de mailles du domaine eulerien. En effet le coût du solveur en pression serait plus important pour un nombre de maille plus élevé.



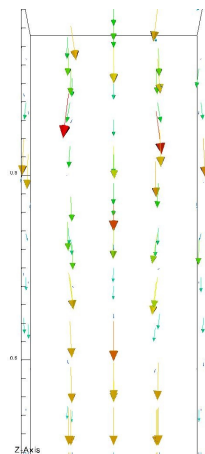
$t=0$. (s)



$t=0.25$ (s)



$t=0.75$ (s)



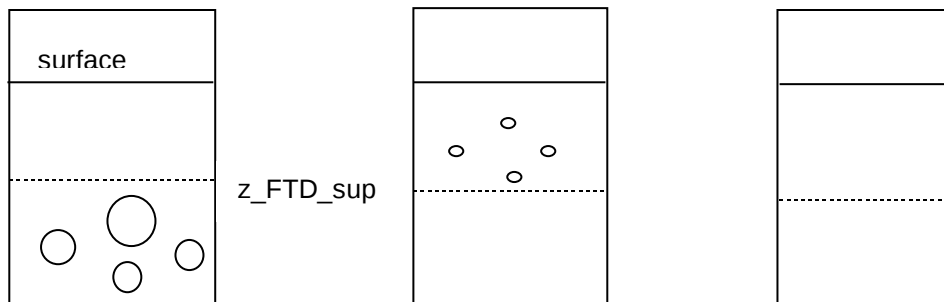
$t=0.1$ ($0.5 < z < 1$)

2.2 TEST DE TRANSFORMATION DES BULLES EN PARTICULES ET RÉCIPROQUEMENT

Le cas test considéré a pour but de valider la transformation de bulles décrites par un maillage Front_Tracking en particules, en fonction de critères de taille ou de position spécifiés par l'utilisateur. L'autre objectif de ce cas test est de vérifier la suppression de particules lorsque celles-ci se trouvent dans la phase non marquée.

La situation est la suivante :

Des bulles de tailles différentes décrites par un maillage Front Tracking (FTD) sont placées initialement dans la partie basse (sous la côte z_FTD_sup) d'un domaine 3D rempli au trois quarts d'eau au repos. La côte z_FTD_sup est située à la moitié de la hauteur d'eau. Le test consiste à vérifier que les bulles FTD sont transformées en particules lorsque leur centre de gravité atteint la côte z_FTD_sup puis que les particules ainsi générées sont supprimées lorsqu'elles arrivent au niveau de la surface libre.



Les principaux paramètres du calcul sont :

Géométrie :

dimension : 0.025x0.025x0.06

maillage : 53x53x75 (cas VDF)

11x11x19 + tetraedriser_homogene (cas VEF)

Milieu :

Fluide_Incompressible liquide

mu Champ_Uniforme 1 10^{-3}

rho Champ_Uniforme 1 1000

Fluide_Incompressible gaz

mu Champ_Uniforme 1 $1.985 \cdot 10^{-5}$

rho Champ_Uniforme 1 1.177

Fluide_Diphasique fluide

fluide0 liquide, fluide1 gaz, sigma constant 0.05

Gravité :

gravite 3 0. 0. -9.81

Equation d'hydraulique :

Convection (quick pour VDF et muscl pour VEF) + diffusion, seuil pression 10^{-8}

Sortie libre sur le bord haut, paroi pour les autres bords

Equation d'interface

interface plane liquide-gaz située à $z=0.033$

+ bulles localisées sous le plan $z_FTD_sup=0.026$

Equation particules :

nb_particules initial =0

sous zone de transformation origine : 0. 0. 0.026 ; côtes : 0.025 0.025 0.007

sources { Trainee , Flottabilite , Masse_ajoutee }

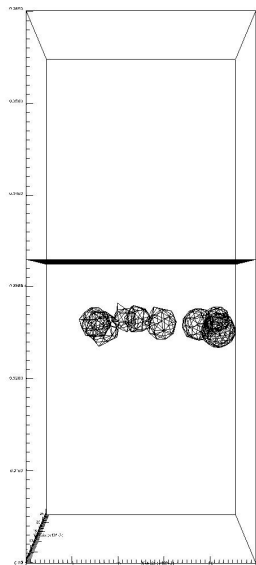
phase_marquee_0 (liquide)

nb_ iterations 50

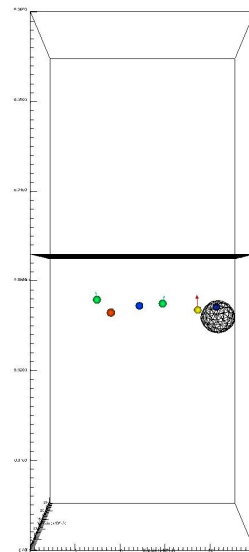
implicite 1

On présente ci-dessous une visualisation des bulles et des particules à différents instants ($t=0$; $t=0.01$; $t=0.035$ et $t=0.05$) pour les deux discrétisations respectives VDF et VEF.

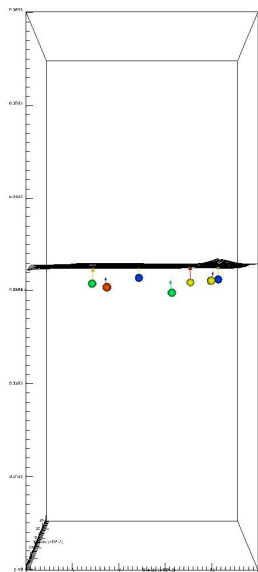
Cas VDF :



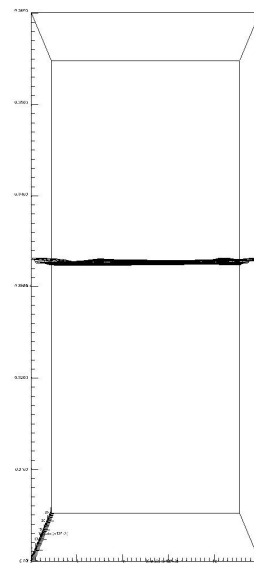
$t=0. (s)$



$t=0.01 (s)$

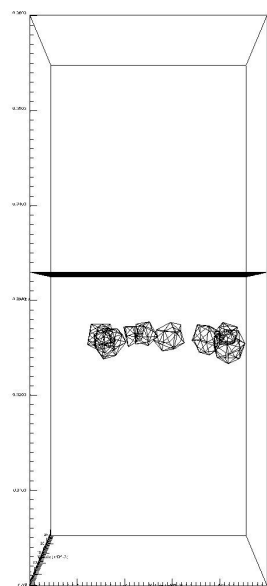


$t=0.035 \text{ (s)}$

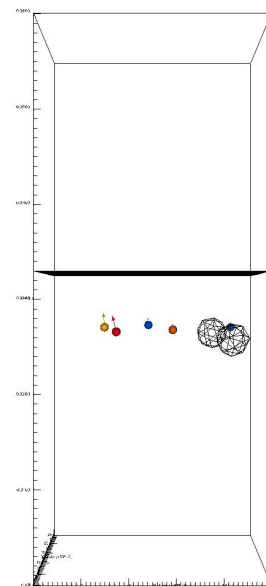


$t=0.05 \text{ (s)}$

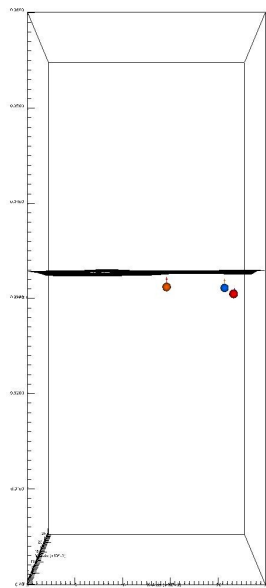
Cas VEF :



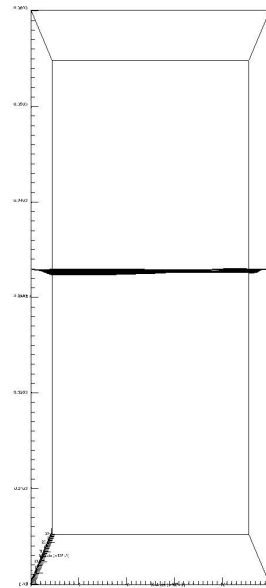
$t=0. \text{ (s)}$



$t=0.01 \text{ (s)}$



t=0.035 (s)



t=0.05 (s)

On observe dans les deux cas que les bulles sont transformées en particule lorsque leur centre de gravité est au dessus du plan $z=0.026$ (m) et que ces particules remontent vers l'interface liquide-gaz. Dans le cas du calcul avec une discrétisation de type VDF, toutes les particules sont passées au dessus de l'interface à l'instant $t=0.04$ (s) et ont par conséquent été supprimées, alors que dans le cas du calcul mené avec une discrétisation de type VEF, seules une partie des particules ont atteint l'interface à cet instant.

Le parallélisme du développement concernant la fonctionnalité de transformation est testé sur quelques pas de temps au travers de cas de non régression en utilisant un découpage du domaine pour lequel les bulles à transformer sont chacune localisées sur une partie de l'espace partagée sur plusieurs sous domaines. Notons que seuls les champs discrets (`densite_particules_` et `volumes_particules_`) peuvent être testés en terme de non régression.

3. SPECIFICATIONS D'UTILISATION DES FONCTIONNALITES DE MARQUEURS

Les étapes suivantes doivent être réalisées dans le jeu de données pour activer l'intégration de trajectoires de particules.

-déclaration d'un objet eq_marqueur de type Transport_Marqueur_FT
Transport_Marqueur_FT eq_marqueur

-association de l'objet eq_marqueur au problème pb
Associer pb eq_marqueur

-lecture de l'objet eq_marqueur
eq_marqueur
{
...
}

La lecture d'une équation implique

- la lecture d'un bloc pour les conditions initiales
- la lecture d'un bloc pour les conditions limites
- la lecture optionnelle d'un bloc pour les sources

Pour l'équation de type *Transport_Marqueur_FT*, les blocs optionnels suivants peuvent être ajoutés

- la lecture d'un bloc pour une injection
- la lecture d'un bloc pour la transformation de bulles en particules

D'autre part des spécifications d'options peuvent être précisées pour le choix de :

- la méthode de transport des particules
- la méthode de couplage entre fluide et particules
- le choix de la phase marquée dans le cas d'un fluide diphasique
- la désactivation des efforts exercés sur les particules

Lecture des conditions initiales

La lecture des conditions initiales se présente sous la forme suivante :

conditions_initiales
{
[**ensemble_points** { ... }]
[**proprietes_particules** { ... }]
[**t_debut_integr** *t_deb_integr*]
}

La lecture des positions se fait par la syntaxe suivante :

ensemble_points { **sous_zones** *nb_sz* *nom_sz1* **aleatoire** *nb_marqueurs*
... *nom_szi* **uniforme** *nb_dir1* *nb_dir2* ... }

ou

ensemble_points { **fichier** *nom_fichier* }

Cas de la spécification des points par sous zones :

nb_sz : nombre de sous zones

nom_sz1, ...*nom_szi* : nom de chacune des sous zones

- si distribution aléatoire :

nb_marqueurs : nombre total de particules sur une sous zone

- si distribution uniforme :

nb_diri : nombre de particules dans la direction i

Rq : le nombre de « nb_dir » spécifiés doit correspondre à la dimension du problème

Cas de la spécification par fichier :

nom_fichier : nom du fichier dans lequel on lit les coordonnées des particules

Le format dans ce fichier est le suivant :

nb_dim (nombre d'entrée du tableau)

ni nj (nombre d'éléments pour chaque entrée)

size (nombre d'éléments total du tableau)

...

...val_ij... (coordonnées de la position de la particule i)

...

La lecture de l'ensemble des propriétés se fait de la façon suivante :

```
proprietes_particules {
    distribution nb_part
    vitesse      nb_compo val_1 val_2 ...
    temperature  1 val_temp
    masse_volumique 1 val_rho
    diametre     1 val_d
}
```

ou

```
proprietes_particules { fichier nom_fichier }
```

Cas de la spécification des points par distribution :

nb_part : nombre de particules matérielles

vitesse : lecture de la vitesse

nb_compo : nombre de composantes

val_i : valeur de la ième composante

temperature : lecture de la température ; *val_temp* : valeur lue

masse_volumique : lecture de la masse volumique ; *val_rho* : valeur lue

diametre : lecture du diamètre ; *val_d* : valeur lue

Cas de la spécification des points par fichier :

nom_fichier : nom du fichier dans lequel on lit les propriétés

L'ordre de lecture des propriétés dans ce fichier est le suivant :

vitesse, température, masse_volumique, diamètre

Le format d'une quantité donnée dans ce fichier est le suivant :

nb_dim (nombre d'entrée du tableau)

ni nj (nombre d'éléments pour chaque entrée)

size (nombre d'éléments total du tableau)

...

...val_ij... (valeurs de la quantité)

...

t_debut_integration : temps de début de l'intégration des trajectoires des particules ; *t_deb_integr* : valeur fixée par l'utilisateur ou fixée à *t_init* par défaut

Lecture des conditions limites

La lecture des conditions limites se réduit à la lecture d'un bloc vide car les conditions limites considérées pour la gestion du vecteur vitesse des particules sont celles de l'équation d'hydraulique.

La syntaxe à respecter est la suivante :

```
conditions_limites { }
```

Lecture des termes sources

La syntaxe à respecter pour la lecture des termes sources est celle classiquement utilisée pour les sources d'une équation dans le logiciel Trio_U :

[**sources** { ..., *force_i*, ... }]

force_i indique le type d'une force.

Les forces actuellement lues sont : **Trainee**, **Flottabilite** et **Masse_ajoutee**

Rq : L'activation d'une force de type **Portance** déclenche un message d'arrêt indiquant à l'utilisateur que cette force n'est actuellement pas codée.

Lecture de l'injection

Une injection de particules ponctuelles ou matérielles peut être effectuée périodiquement au cours du temps. La lecture d'un bloc d'injection est similaire à celle d'une condition initiale.

La syntaxe à respecter est la suivante :

```
[ injection {
    [ ensemble_points { ... } ]
    [ proprietes_particules { ... } ]
    [ t_debut_injection t_deb_inj ]
    [ dt_injection dt_inj ]
}]
```

ensemble_points voir description conditions_initiales

proprietes_particules voir description conditions_initiales

t_debut_injection : temps de début de l'injection; *t_deb_inj* : valeur fixée par l'utilisateur (fixée par défaut à 10^{32} et à *t_debut_integration* si bloc de lecture d'injection).

dt_injection : période d'injection; *dt_inj* : valeur fixée par l'utilisateur (fixée par défaut à -1 et à *dt_min* si bloc de lecture d'injection)

Lecture de la transformation

La lecture d'un bloc de transformation concerne la transformation d'une inclusion dans un milieu continu en particule.

La syntaxe à respecter est la suivante :

```
[ transformation_bulles {
    localisation nb_sz ..nom_szi...
    taille type_critere valeur
    interface nom_interf
    [ t_debut_transfo t_deb_tr ]
    [ dt_transfo dt_tr ]
}]
```

localisation : indique les sous zones dans lesquelles doivent être déclenchées la transformation

nb_sz : spécifie le nombre de sous zones

nom_szi : désigne le nom de la ième sous zone

taille : indique le diamètre minimum en dessous duquel les inclusions doivent être transformées

type_critere peut prendre deux valeurs différentes :

diametre_min : une inclusion de diamètre inférieur à *valeur* est supprimée

ou **beta_transfo** : une inclusion de diamètre inférieur à *valeur**vol est supprimée
(vol désigne ici le volume de l'élément contenant le centre de gravité de l'inclusion)

interface : indique l'interface séparant les deux phases

nom_interf : nom de l'interface (l'interface doit être préalablement déclarée)

t_debut_transfo : temps à partir duquel la transformation d'inclusion est déclenchée; *t_deb_tr* : valeur fixée par l'utilisateur (fixée par défaut à 10^{32} et à *t_debut_integr* si bloc de lecture de transformation).

dt_transfo : période de transformation ; **dt_tr** : valeur fixée par l'utilisateur (fixée par défaut à -1 et à **dt_min** si bloc de lecture de transformation).

Rq :

Dans le cas d'un milieu diphasique, la suppression des particules entrant dans la phase non marquée est automatiquement déclenchée à chaque pas de temps.

Lecture des options de gestion

[**methode_transport** *type_methode*] : méthode de transport des particules

type_methode=

« **vitesse_interpolee** » : la vitesse des particules est la vitesse du fluide interpolée (par défaut)

« **vitesse_particules** » : la vitesse résulte de la résolution du bilan de q.d.m. des particules

[**methode_couplage** *type_couplage*] : méthode de couplage entre fluide et particules

type_couplage=

« **suivi** » : pas d'interaction entre fluide et particules (par défaut)

« **one_way_coupling** » : prise en compte de l'action du fluide sur les particules

« **two_way_coupling** » : prise en compte de l'action du fluide sur les particules et de l'action en retour des particules sur le fluide

[**phase_marquee** *val_phase*] : indicateur de la phase marquée par les particules; 0 par défaut pour cas diphasique

[**nb_iterations** *val_nb_it*] : spécification du nombre de sous pas de temps (par rapport au pas de temps principal du calcul) pour résoudre le bilan de q.d.m. des particules ; *val_nb_it* : valeur lue (1 par défaut)

[**implicite** *val_imp*] : sélectionne le type de résolution en temps pour la force de masse ajoutée ; *val_imp* valeur lue : 0 résolution explicite (par défaut), 1 implicite

[**contribution_one_way** *val_contrib*] : désactivation des efforts du fluide sur les particules (*val_contrib*=0) dans le cas **one_way_coupling** ou **two_way_coupling** (*val_contrib*=1 par défaut : efforts activés).

Lecture du post-traitement

Les spécifications du post-traitement se font classiquement dans le bloc champs de l'objet de post-traitement de type *Postraitement* pour les champs discrets volumiques. Dans le cas de l'équation de type *Transport_Marqueur_FT*, les champs discrets post-traitables sont :

densite_particules : exprime le nombre de particules par maille

volume_particules : exprime le volume de l'ensemble des particules contenues dans une maille

Le post-traitement des quantités lagrangiennes se fait par l'intermédiaire d'un objet de type *Postraitement_ft_lata*.

Les positions et les propriétés volumiques sont post-traitées en utilisant la syntaxe :

interfaces *nom_eq_marq* { **champs_sommets** { ... *type_champ_i* ... } }

nom_eq_marq : désigne le nom de l'équation du marqueur

type_champ_i : désigne le ième type de champ à post-traiter (propriétés physiques)

type_champ=**vitesse, volume, diametre, temperature, masse_volumique**

Rq :

Les propriétés sont post-traitables uniquement pour des particules matérielles.

ANNEXE 1 : EXPRESSION DES FORCES D'INTERACTION FLUIDE-PARTICULES

On rappelle ici l'expression des forces exercées par le fluide sur les particules, fournie par le CEA (1), dans le cas où l'on néglige la force de portance. Rappelons que par principe d'action-réaction les particules exercent en retour des efforts sur le fluide.

La force de traînée a l'expression suivante :

$$F_T = -0.5C_D \rho_f \pi \frac{d_p^2}{4} \|\vec{u}_p - \vec{u}_f\| (\vec{u}_p - \vec{u}_f)$$

$$\text{avec } C_d = \max\left(\frac{24}{\text{Re}_p}, \min\left(\frac{2}{3} \sqrt{\frac{d_p^2 g |\rho_f - \rho_p|}{\sigma}}, \frac{8}{3}\right)\right) \text{ et } \text{Re}_p = \frac{\rho_f \|\vec{u}_p - \vec{u}_f\| d_p}{\mu_f}$$

L'expression de C_d finalement retenue diffère de celle initialement prévue ($\frac{24}{\text{Re}_p}$).

Rq : La valeur de g est fixée à 9.81 m.s^{-2} dans la méthode évaluant la force de traînée.

La force de flottabilité a l'expression suivante :

$$F_F = \rho_p v_p g - v_p \nabla P$$

ou encore

$$F_F = (\rho_p - \rho_f) v_p g - v_p \nabla P^*$$

La force de masse ajoutée a l'expression suivante :

$$\vec{F}_{MA} = C_{MA} \rho_f v_p \frac{d}{dt} (\vec{u}_f - \vec{u}_p) \text{ avec } C_{MA} = 0.5$$

u_f , P , μ_f et ρ_f désignent respectivement la vitesse, la pression, la viscosité dynamique et la densité du fluide.

u_p , d_p , v_p , ρ_p désignent respectivement la vitesse, le diamètre, le volume et la densité d'une particule.

g désigne la gravité, C_D le coefficient de traînée, Re_p le nombre de Reynolds caractérisant l'écoulement autour d'une particule et C_{MA} le coefficient de masse ajoutée.

Références

(1) Prestation concernant l'ajout à l'outil Trio_U de plusieurs fonctionnalités concernant le transport de marqueurs ponctuels.

O. Lebaigue et F. Ducros

Cahier des charges DER/SSTH/LMDL/2008-005

FIN DE DOCUMENT