		
	Note Technique DEN	Page 1/77

DIRECTION DE L'ENERGIE NUCLEAIRE
DIRECTION DES ACTIVITES NUCLEAIRES DE SACLAY
DEPARTEMENT DE MODELISATION DES SYSTEMES ET STRUCTURES
SERVICE DE THERMOHYDRAULIQUE ET DE MECANIQUE DES FLUIDES

Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025

Pierre-Emmanuel Angeli
Ulrich Bieder
Erell Jamelot
Nikos Leterrier
Pascal Omnes
Maria Adela Puscas


DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF/NT/2019-65759/A

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
 Centre de Saclay - DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF - BAT 454 - PC 47
 Tel. : 33 - 1 69 08 91 10 Fax : 33 - 1 69 08 96 96
 Courriel : evelyne.macanda@cea.fr
 Établissement public à caractère industriel et commercial
 RCS PARIS B 775 685 019



Réf du formulaire : F1-DM2S/DIR/PR/003 classe L^AT_EX DocDM2S version C

Document propriété du CEA - Reproduction et diffusion externe au CEA soumises à l'autorisation de l'émetteur

		Note Technique DEN	Page 2/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			


NIVEAU DE CONFIDENTIALITÉ				
DO	DR	CCEA	CD	SD
x				

PARTENAIRES/CLIENTS	ACCORD	TYPE D'ACTION

RÉFÉRENCES INTERNES CEA			
DIRECTION D'OBJECTIFS	DOMAINE	PROJET	EOTP
DISN	SIMULATION	SITHY	A-SITHY-03-03-05
JALON	INTITULÉ DU JALON	DÉLAI CONTRACTUEL DE CONFIDENTIALITÉ	CAHIERS DE LABORATOIRE
SEL	Plan de développement du code TrioCFD.		

SUIVI DES VERSIONS			
INDICE	DATE	NATURE DE L'ÉVOLUTION	PAGES & CHAPITRES MODIFIÉS
A	27/11/2019	Document initial	

	NOM	FONCTION	VISA	DATE
RÉDACTEUR	Pierre-Emmanuel Angeli	INGÉNIEUR-CHERCHEUR		
RÉDACTEUR	Ulrich Bieder	INGÉNIEUR-CHERCHEUR		
RÉDACTEUR	Erell Jamelot	INGÉNIEUR-CHERCHEUR		
RÉDACTEUR	Nikos Leterrier	INGÉNIEUR-CHERCHEUR		
RÉDACTEUR	Pascal Omnes	INGÉNIEUR-CHERCHEUR		
RÉDACTEUR	Maria Adela Puscas	INGÉNIEUR-CHERCHEUR		
VÉRIFICATEUR	Jérôme Garcin	INGÉNIEUR-CHERCHEUR		
APPROBATEUR	Nicolas Dorville	CHEF DE LABORATOIRE		
AUTRE VISA	Sylvie Naury	CHEF DE PROJET SITHY		
EMETTEUR	Pierre Gavoille	CHEF DE SERVICE		

		Note Technique DEN	Page 3/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

MOTS CLEFS


Plan de développement, TrioCFD, thermohydraulique, monophasique, mécanique des fluides

RESUME/CONCLUSIONS

Ce plan de développement décrit les actions de développement et R&D en lien avec le code TrioCFD à réaliser sur la période 2020-2025.

Il fait suite au plan de développement établi en 2016 [4] et décrit le programme technique à réaliser ainsi que les ressources associées. Il concerne le code de CFD monophasique aux échelles RANS et LES et non pas le module de CFD diphasique moyennée décrit dans [17], ni les baltiks FT et (i, j, k) qui feront l'objet de documents séparés.

Ce plan de développement couvre les actions souhaitables pour les cinq prochaines années. Il est à prévoir que certaines actions de R&D qui sont longues à réaliser par nature seront initiées durant cette période et s'acheveront au-delà de ce terme.


	Note Technique DEN	Page 4/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

DIFFUSION INITIALE

(Diffusion par email si document en DO)

Diffusion interne CEA

Xavier RAEPSAET,	DEN/DISN/SIMU
Stéphanie MARTIN,	DEN/DISN/SIMU
Patrick DUMAZ,	DEN/DISN/ GEN2-3
Jean Claude GARNIER,	DEN/DISN/R4G
Xavier AVERTY,	DEN/DISN/VALO
Franck CARRE,	DEN/DS
Anne NICOLAS,	DEN/DS
Pascal YVON,	DEN/DANS/DIR
Marc SERRE,	DEN/DANS/DIR
Jean Pierre CHAUVIN,	DEN/SRJH
Marc DELPECH,	DEN/DEC
Mireille BAUER,	DEN/DEC/SESC
Nicolas DEVICTOR,	DEN/DER
Gérard MIGNOT,	DEN/DER/SESI
Manuel SAEZ,	DEN/DER/SESI
Claire VAGLIO-GAUDARD,	DEN/DER/SESI
Christophe DELLIS,	DEN/DTN
Vincent FAUCHER,	DEN/DTN
Olivier GASTALDI,	DEN/DTN/STCP
Dominique PECHEUR,	DEN/DTN/SMTA
Philippe PRENE,	DEN/DMRC
Stéphane GRANDJEAN,	DEN/DMRC/SPDS
Nathalie HERLET,	DEN/DMRC/SA2I
Sophie CHARTON,	DEN/DMRC/SA2I
Murielle BERTRAND,	DEN/MAR/DMRC/DIR
Luc PARADIS,	DEN/DE2D
Florence BART,	DEN/DE2D/SEVT
Christophe PERRAIS,	DEN/DE2D/SEAD
Severine JOUANNEAU,	DRT/LITEN/DEHT
Didier JAMET,	DRT/LITEN/DEHT/SAMA
Patrice TOCHON,	DRT/LITEN/DTHB
Daniel CARUGE,	DEN/DANS/DM2S/DIR
Catherine SANTUCCI,	DEN/DANS/DM2S/DIR
Sylvie NAURY,	DEN/DANS/DM2S/DIR
Frederic DAMIAN,	DEN/DANS/DM2S/DIR
Jean Luc FAYARD,	DEN/DANS/DM2S/DIR
Christine POINOT-SALANON,	DEN/DANS/DM2S/DIR
Thomas LAPORTE,	DEN/DANS/DM2S/DIR
Valerie VANDENBERGHE,	DEN/DANS/DM2S/SEMT
Loic DECARLAN,	DEN/DANS/DM2S/SERMA
Pierre GAVOILLE,	DEN/DANS/DM2S/STMF

		Note Technique DEN	Page 5/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

Tous les salariés du STMF,
Eric BENSO,
Eric ROYER,
Hervé GOLFIER,
Richard LENAIN
Claire GAUTHIER,
Laurent SAAS,
Mathieu PEYBERNES,

DEN/DANS/DM2S/STMF
DMNP
DPN
STXN
STXN
DEN/DANS/DM2S/SEMT/DYN
DEN/CAD/DTN/SMTA/LMAG
DEN/CAD/DTN/SMTA/LMAG

Diffusion externe

"sans objet"

Diffusion résumé

DEN/DANS/DM2S/DIR
DEN/DANS/DM2S/SEMT/DIR
DEN/DANS/DM2S/SERMA/DIR
DEN/DANS/DM2S/STMF/DIR




	Note Technique DEN	Page 6/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

Table des matières

1	Stratégie de développement	8
1.1	Présentation du code TrioCFD	8
1.1.1	Modèles	8
1.1.2	Équations	10
1.1.3	Méthode de résolution	12
1.2	Axes de progrès	14
1.3	Ressources et charge de travail	16
1.4	Synthèse du programme de travail	17
2	évolutions des schémas et techniques existants	19
2.1	Compressibilité artificielle	19
2.2	Amélioration de la stabilité du schéma VEF	20
2.2.1	Méthode de projection	20
2.2.2	Méthode d'élimination des vitesses	21
2.2.3	Éléments finis $\vec{P}_1 \times P_0$ stabilisés	21
2.3	Discrétisation des termes de convection non linéaire	22
2.3.1	Revue des discrétisations des termes de convection disponibles dans TrioCFD	22
2.3.2	Conservation de l'énergie cinétique	23
2.4	Discrétisation des termes de diffusion	24
2.4.1	Analyse des méthodes de TrioCFD	24
2.4.2	Implémentation d'un schéma de diffusion adapté aux maillages très déformés	25
2.5	évolution du modèle quasi-compressible	25
2.5.1	Rajout du terme source de dilatabilité	25
2.5.2	Introduction de nouvelles lois d'état	26
2.5.3	Introduction de la capacité thermique variable	27
2.6	Revue et développement des intégrateurs temporels	27
2.7	Amélioration du couplage fluide/solide	28
2.8	Post-traitement	29
3	Modélisation de la turbulence	30
3.1	État des lieux	30
3.2	Modélisation RANS de la turbulence	31
3.2.1	Amélioration des modèles bas Reynolds et non linéaires	31
3.2.2	Modèles $k-\omega$ et $k-\omega$ SST	34
3.2.3	Modèles de tensions de Reynolds	35
3.2.4	Production de turbulence liée à la poussée d'Archimède	35
3.2.5	Modélisation RANS à partir de réseaux de neurones	36
3.3	La simulation des grandes échelles	37
4	Nouveaux schémas de discrétisation spatiale	39
4.1	Schémas d'ordre élevé pour les polyèdres quelconques	39
4.1.1	Introduction	39
4.1.2	Schémas VEM et HHO	40

	Note Technique DEN		Page 7/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019		Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

4.1.3	Autres schémas	40
4.1.4	Nombre d'inconnues	41
4.2	Modélisation précise des milieux encombrés	42
4.2.1	Rappel de l'objectif : calcul "CFD" d'une cuve complète de REP	42
4.2.2	Mise en œuvre d'une méthode multiéchelles	42
5	Maillage adaptatif, HPC et QI	43
5.1	Estimateurs d'erreurs <i>a posteriori</i>	43
5.1.1	Description de la méthode	43
5.1.2	Dans TrioCFD	44
5.2	Décomposition de domaine	45
5.2.1	Rappels sur les méthodes de DD	46
5.2.2	DD en espace à chaque pas de temps	46
5.2.3	DD en espace-temps	47
5.2.4	DD en temps	48
5.2.5	Travail théorique	48
5.3	Analyse de sensibilité	49
5.3.1	état d'avancement en 2019	49
5.3.2	Objectifs pour 2020	50
6	Nouvelles fonctionnalités	51
6.1	Mise en œuvre d'une méthode ALE pour le couplage fluide-structure	51
6.1.1	Discrétisation spatiale	52
6.1.2	Discrétisation temporelle	53
6.2	Modélisation polydisperse de particules solides	55
6.3	Modélisation des écoulements compressibles	56
6.3.1	Schéma de type Galerkin discontinu	56
6.3.2	Schéma implicite de type Rosenbrock	57
6.4	Couplage avec la chimie via SCORPIO	58
7	V&V et documentation	60
7.1	Base de tests de vérification et de validation	60
7.2	Documentation	62
7.3	Domaine de validation	62
	Références	63
	Annexes	69
A	Schéma de discrétisation spatiale VEF	70
A.1	Problème modèle continu	70
A.2	Notations	71
A.3	Problème discrétisé	71
A.4	Termes de convection non-linéaires	74
B	Découplage des opérateurs transport et chimie	77

		Note Technique DEN	Page 8/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

Glossaire

<i>ALE</i>	Arbitrary Lagrangian Eulerian
<i>EDP</i>	Équation aux Dérivées Partielles
<i>DD</i>	Décomposition de Domaine
<i>DNS</i>	Direct Numerical Simulation
<i>GD</i>	Galerkin Discontinu
<i>LES</i>	Large Eddy Simulation
<i>RANS</i>	Reynolds Averaged Navier Stokes
<i>URANS</i>	Unstationary RANS
<i>VDF</i>	Volumes Différences Finies
<i>VEF</i>	Volumes Eléments Finis
<i>QI</i>	Quantification des incertitudes
<i>VER</i>	Volumes élémentaires Représentatifs

1 Stratégie de développement

Le code TrioCFD est le code de thermohydraulique monophasique de la DEN [23]. Depuis 2015, TrioCFD est adossé à la base logicielle TRUST [24] dans la plateforme logicielle thermohydraulique multiéchelles MeTaPHor (Multi Thermal Hydraulics) [17] développée au STMF.

Ce plan de développement, qui fait suite au plan de développement établi en 2016 [4], décrit le programme technique à réaliser et les ressources associées. Il concerne le code de CFD monophasique aux échelles RANS et LES et non pas le module de CFD diphasique moyennée décrit dans [17], ni les baltiks FT et (i, j, k) qui feront l'objet de documents séparés.

Cela ne préjuge pas des moyens qui seront alloués annuellement. Dans le cas où toutes les ressources nécessaires ne seraient pas disponibles sur tout ou partie de la période le contenu technique du présent plan de développement sera revu en conséquence et mis à jour.

La section 1.1 présente le code TrioCFD. La section 1.2 décrit la stratégie de développement. Les ressources ainsi que les échéances sont présentées dans la section 1.3. Les développements à réaliser sont précisés dans les sections 2 à 7.


Enfin, une synthèse du programme de travail est présentée dans la section 1.4.

1.1 Présentation du code TrioCFD

On rappelle succinctement les modèles disponibles ainsi que les équations qui sont résolues. La présentation du schéma VEF utilisé pour les maillages non structurés est détaillée en Annexe A.

1.1.1 Modèles

Les modèles disponibles dans le code sont les suivants :

		Note Technique DEN	Page 9/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

- **Pour les milieux décrits :**

- les fluides newtoniens incompressibles (hypothèse de Boussinesq),
- les fluides newtoniens dilatables (modèles asymptotiques, gaz parfait, gaz réel),
- les fluides non newtoniens incompressibles,
- les milieux solides,
- les milieux poreux (modèles de Darcy, de Forchheimer, Ergun).

Notons qu'il est possible de résoudre des problèmes couplés entre domaines fluides et solides et à l'intérieur des domaines poreux.

- **Pour les éléments de discrétisation en 2D :**

- les Volumes Différences Finies structurés (VDF) en coordonnées cartésiennes, cylindriques et axi-symétriques ;
- les Volumes Eléments Finis (VEF) non structurés en coordonnées cartésiennes en triangles ;

- **Pour les éléments de discrétisation en 3D :**

- les Volumes Différences Finies structurés (VDF) en coordonnées cartésiennes et cylindriques ;
- les Volumes Eléments Finis (VEF) non structurés en coordonnées cartésiennes en tétraèdres¹ ;

- **Pour les modèles de turbulence :**

- les modèles RANS et URANS :
 - le modèle (k, ε) standard ;
 - le modèle (k, ε) bas Reynolds ;
- les modèles LES :
 - Smagorinsky ;
 - WALE

- **Pour le schéma de convection :**

- schéma amont (ordre 1) ;
- schéma centré (VDF), de type Mac-Cormack (VEF), MUSCL (VEF), EFstab (VEF) ;
- schéma QUICK d'ordre 3 ;
- schéma centré d'ordre 4 (VDF) ;

- **Pour les schémas en temps :**

- schémas semi-implicites (SIMPLE, SIMPLER, PISO, Uzawa, Crank-Nicholson itératif) ;
- schémas explicites (Euler d'ordre 1, Runge-Kutta et prédicteur-correcteur d'ordre 2, Adams-Bashforth d'ordre 2, Runge-Kutta d'ordre 3) ;


- **Pour la résolution du solveur en pression :**

- méthode directe de Cholesky ;
- méthode itérative du Gradient Conjugué (avec pré-conditionnement SSOR) ;

- **Modèle de rayonnement :**

- modèle simplifié de rayonnement dans un milieu transparent ;
- modèle de rayonnement dans un milieu semi - transparent ;

1. Une version VEF pour les hexaèdres a été implémentée par le passé mais ce travail n'a pas été validé.

		Note Technique DEN	Page 10/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

- **Pour le couplage fluide-structure :**

- couplage thermique (via des flux de chaleur à l'interface) ;
- couplage mécanique (via des forces de pression à l'interface).

1.1.2 Équations

Les équations résolues dans le code TrioCFD sont les équations de Navier-Stokes incompressibles. Notons que le code offre la possibilité de traiter des écoulements faiblement dilatables mais il n'en sera pas fait mention dans cette section.

Les inconnues du problème sont la vitesse \mathbf{u} , la pression P et la température T . On peut éventuellement modéliser la présence de certaines espèces dans l'écoulement en introduisant une équation pour leur fraction massique. On note Y_k la fraction massique de l'espèce k .

- **Hypothèses :**

La masse volumique est constante $\rho = \rho_0$. On considère l'approximation de Boussinesq, valable pour de faibles variations de densité. La force gravitationnelle est écrite pour un mélange d'espèces non isotherme comme

$$\mathbf{F} = \rho_0 \mathbf{g} + \rho_0 \beta_{th} (T - T_0) \mathbf{g} + \rho_0 \beta_Y (Y - Y_0) \mathbf{g} \equiv \rho_0 \mathbf{g} + \mathbf{f}, \quad (1.1)$$

avec β_{th} le coefficient de dilatation thermique, β_Y le coefficient de dilatation massique, \mathbf{g} la gravité, T_0 et Y_0 des température et fraction massique de référence.

- **équations résolues pour un écoulement laminaire ou pour une simulation numérique directe de la turbulence**

Conservation de la masse :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.2)$$


Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla P_0 + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f}. \quad (1.3)$$

La pression calculée prend en compte la gravité :

$$P_0 = \frac{P}{\rho_0} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{z} \quad (1.4)$$

et $\boldsymbol{\tau} = \nu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})$ désigne le tenseur des contraintes visqueuses, avec ν la viscosité cinématique du fluide.

	Note Technique DEN		Page 11/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019		Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

Conservation de l'énergie

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) + \frac{S_e}{\rho_0 C_p}, \quad (1.5)$$

avec $\alpha = \frac{\lambda}{\rho_0 C_p}$, λ la conductivité thermique, C_p la capacité thermique à pression constante et S_e un terme source (typiquement un dépôt de puissance).

Conservation des espèces : Il est possible de compléter ce système par des équations de conservation des espèces :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = \nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k) + S_{Y_k}, \quad (1.6)$$

où Y_k est la fraction massique de la k^{ime} espèce et D_k le coefficient de diffusion binaire de la k^{ime} espèce.

• équations résolues pour un écoulement turbulent

On précise ici les équations résolues lorsque l'on utilise un modèle de turbulence. Celui-ci peut-être de type RANS ou de type LES (voir section 3). Le formalisme des équations est le même dans les deux cas. Seuls diffèrent la définition de la quantité calculée (notée dans ce qui suit $\tilde{\cdot}$ et définie plus loin) et les termes à modéliser pour fermer le système. Soit donc le système :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} &= 0 \\ \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}) &= -\nabla \tilde{P}_0 + \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}} + \nabla \cdot \tilde{\overline{\overline{T}}} + \tilde{\mathbf{f}} \\ \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \tilde{T}) &= \nabla \cdot (\alpha \nabla \tilde{T}) + \nabla \cdot \Theta \end{cases} \quad (1.7)$$

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = \nu (\nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla^T \tilde{\mathbf{u}})$$

Approche RANS : On décompose le champ instantané Φ comme


$$\Phi(x_i, t) = \langle \Phi(x_i) \rangle + \Phi'(x_i, t), \quad (1.8)$$

avec

$$\langle \Phi(x_i) \rangle = \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \Phi(x_i, \alpha) d\alpha \quad (1.9)$$

On calcule donc une moyenne en temps de la solution $\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}(x_i) = \langle \Phi(x_i) \rangle$. Le champ moyenné est insensible aux conditions aux limites et initiales. Les termes à fermer sont

$$\overline{\overline{T}}_{ij}^{RANS} = -\langle u'_i u'_j \rangle$$

		Note Technique DEN	Page 12/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
	Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

et

$$\Theta_i^{RANS} = -\langle T' u_i' \rangle.$$

Approche LES : elle repose sur une séparation entre les grandes et petites échelles. Formellement, la séparation d'échelles s'exprime sous la forme d'un filtre. Ainsi, on décompose le champ instantané Φ comme

$$\Phi(x_i, t) = \bar{\Phi}(x_i, t) + \Phi''(x_i, t), \quad (1.10)$$

avec

$$\bar{\Phi}(x_i, t) = \int \int_{-\infty}^{+\infty} F(\bar{\Delta}(x_i, t), x_i - \gamma, t - \alpha) \Phi(x_i, t) d\gamma d\alpha. \quad (1.11)$$

Dans (1.11), F est le noyau de convolution caractéristique du filtre utilisé, qui est associé à l'échelle de coupure $\bar{\Delta}$. On calcule donc une partie du contenu spectral de la solution $\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}(x_i) = \bar{\Phi}(x_i, t)$, qui dépend des conditions initiales et aux limites. Les termes à fermer sont

$$\overline{\overline{T}}_{ij}^{LES} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \overline{\bar{u}_i} \overline{\bar{u}_j}$$

et

$$\Theta_i^{LES} = \overline{\bar{T} \bar{u}_i} - \overline{\bar{T}} \overline{\bar{u}_i}.$$

1.1.3 Méthode de résolution

Pour un problème instationnaire, il convient de rajouter l'évolution en temps de la solution. Les équations semi-discrétisées en espace s'écrivent sous la forme matricielle :

$$\begin{aligned} M \frac{dU}{dt} &= AU - L(U)U - B^T P + S \\ BU &= 0, \end{aligned} \quad (1.12)$$

avec :

- M la matrice de masse,
- U le vecteur inconnu contenant les degrés de liberté en vitesse,
- A l'opérateur discret de diffusion,
- $L(U)$ l'opérateur discret de convection non linéaire,
- B^T l'opérateur de gradient discret,
- B l'opérateur de divergence discret.

Différents schémas en temps sont disponibles dans TrioCFD (explicite, semi-implicite,...). La pression n'étant régie par aucune équation, elle est obtenue à partir de la contrainte d'incompressibilité. Cela implique que le champ de pression

		Note Technique DEN	Page 13/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
	Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

s'établit instantanément et doit nécessairement être intégré implicitement en temps.
Décrivons la méthode de résolution, pour le système suivant :

$$\begin{cases} M \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} = AU^{n+1} - L(U^n)U^{n+1} - B^T P^{n+1} + S^n, \\ BU^{n+1} = 0. \end{cases} \quad (1.13)$$

Elle est basée sur un découplage entre l'équation sur la vitesse et l'équation de continuité. On utilise une méthode de projection, qui consiste à prédire un champ de vitesse, puis à le corriger pour imposer la contrainte d'incompressibilité.

1. **Etape de prédiction** : calcul d'une vitesse U^* solution de

$$M \frac{U^* - U^n}{\Delta t} = AU^* - L(U^n)U^* - B^T P^n + S^n. \quad (1.14)$$

2. **Etape de correction** :

La vitesse en fin de pas de temps vérifie les équations suivantes :

$$M \frac{U^{n+1} - U^*}{\Delta t} + B^T (P^{n+1} - P^n) = 0 \quad (1.15)$$

$$BU^{n+1} = 0. \quad (1.16)$$

En appliquant l'opérateur de divergence discret à l'équation (1.15) et en injectant la contrainte d'incompressibilité (1.16) on obtient une équation de Poisson discrète qui nous permet de calculer $P' = P^{n+1} - P^n$:

$$BM^{-1}B^T P' = \frac{1}{\Delta t} BU^*. \quad (1.17)$$

3. **Mise à jour des champs** : finalement $P^{n+1} = P^n + P'$, $U^{n+1} = U^* - \Delta t M^{-1} B^T P'$.


Une méthode itérative doit être introduite car le champ de vitesse U^{n+1} obtenu ne satisfait pas nécessairement le système (1.13). Elle se résume ainsi :

Initialisation : $k = 0$, $U^0 = U^n$, $P^0 = P^n$;

$$\frac{U^{*,k+1} - U^k}{\Delta t} = AU^{k+1} - L(U^n)U^{k+1} - B^T P^k + S^n,$$

$$\frac{U^{k+1} - U^{*,k+1}}{\Delta t} + B^T (P^{k+1} - P^k) = 0, \quad BU^{k+1} = 0,$$

$$BM^{-1}B^T (P^{k+1} - P^k) = \frac{1}{\Delta t} BU^{*,k+1}.$$

	Note Technique DEN		Page 14/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

1.2 Axes de progrès

Les missions, les objectifs, les ambitions et les attentes autour du code TrioCFD sont les suivantes :

- Continuer à développer des compétences d'experts en calcul scientifique pour la thermohydraulique monophasique
- Progresser significativement dans notre compréhension de la physique mise en jeu dans la thermohydraulique monophasique des réacteurs
- Garder la maîtrise des modèles physiques et numériques et mener des activités de recherche
- Revisiter les méthodes de résolution pour améliorer les performances du code
- Positionner la CFD dans une démarche de sûreté
- étendre l'utilisation du logiciel en général et au sein du CEA en particulier
- élargir le champ d'applications, en introduisant de nouvelles méthodes de discrétisation et de nouveaux modèles physiques
- être en mesure de répondre aux besoins actuels et futurs des programmes du CEA, de la DAM et des partenaires externes au CEA.
- être cohérent avec la stratégie du STMF en thermohydraulique [17] et la stratégie de la DEN autour d'un système intégré de l'énergie.

C'est selon ce point de vue que la stratégie du présent plan de développement a été pensée. Nous décrivons ci-dessous, les principaux axes de progrès identifiés et retenus afin de répondre aux attentes listées ci-dessus :

- **Amélioration de la robustesse et de la précision :**

Il n'existe pas de code de calcul dépourvu de problèmes de robustesse. Un travail continu doit permettre d'améliorer la précision et la stabilité des schémas numériques. Il doit s'appuyer sur les travaux de la littérature ouverte et des collaborations scientifiques.

- **Amélioration des performances :**

Il s'agit d'un axe de progrès majeur, à mettre en regard du coût très élevé des calculs CFD². Deux leviers, utilisés conjointement, peuvent améliorer la performance du code : une meilleure exploitation de l'architecture informatique et l'optimisation des schémas numériques et solveurs.

- **Permettre une plus grande souplesse au niveau du maillage :**

Les phénomènes de mélanges turbulents seront d'autant mieux décrits que

- le calcul prendra en compte la géométrie réelle (par exemple les courbures des crayons combustibles cylindriques), avec une description des structures la plus précise possible ;
- le maillage sera localement adapté à l'écoulement (par exemple en adoptant des hexaèdres ou des prismes en proche paroi) ;


Les maillages à réaliser sont d'une grande complexité, et les échelles à considérer varient fortement. L'élaboration du maillage sera grandement facilitée par la possibilité d'utiliser des mailles de topologies quelconques, des maillages hybrides, avec éventuellement des non-conformités.

Un effort important doit porter sur le développement d'un schéma numérique adapté à ces maillages.

- **L'amélioration de la modélisation des phénomènes turbulents**

La modélisation de la turbulence (en proche paroi, en présence d'obstacles, dans des coudes, avec effets

2. La notion de performance concerne ici le temps de restitution du résultat.

			Note Technique DEN	Page 15/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025				

thermiques) nécessite d'être améliorée. Il s'agit d'un axe de progrès hautement prioritaire eu égard aux problèmes physiques étudiés. Elle passe :

- par la mise en œuvre de nouveaux modèles de turbulence,
- par l'amélioration des méthodes numériques.

- **Modélisation de l'interaction fluide-structure :**

Pour certaines configurations (typiquement les écoulements dans les assemblages), on souhaite modéliser finement les interactions entre le fluide et la structure. Actuellement, la méthode adoptée consiste à chaîner le calcul thermohydraulique et le calcul solide. A terme, on souhaiterait prendre en compte le déplacement des crayons ou plaques combustibles dans le code TrioCFD afin d'accéder directement à l'effet que produit le déplacement du solide sur le fluide.

- **Amélioration de la modélisation du cœur :**

La modélisation du cœur à l'échelle CFD, en maillant les structures explicitement (raisonnablement d'une partie du cœur) pourra fournir des solutions de référence comme aide à la validation des codes poreux.

- **Prise en compte des échanges thermohydrauliques à l'interface libre/poreux :**

L'interface entre un milieu libre modélisé en CFD et un milieu poreux³ doit permettre les bons échanges thermohydrauliques.

- **Prédiction des incertitudes :**

Il est nécessaire de mettre en place un cadre méthodologique rigoureux permettant d'évaluer la crédibilité de résultats de simulations. Le volet prédiction des incertitudes concerne différents aspects, parmi lesquels l'estimation des erreurs, l'analyse de sensibilité, et est couvert en grande partie par la plateforme URANIE.

- **Décomposition de domaine :**

Par la mise en place d'une méthode de décomposition de domaine dans TrioCFD, un double objectif est visé : l'amélioration des performances du code et la mise en œuvre d'une méthode de parallélisme hybride adaptée aux futures architectures des ordinateurs.

- **Nouvelles fonctionnalités :**

Afin d'étendre le domaine d'applications du code, des nouvelles fonctionnalités doivent être mise en place, telles que : un modèle Lagrangien de suivi de particules d'abord sous une forme monodisperse puis polydisperse, le développement d'un modèle compressible et le couplage avec la chimie.


- **V&V et documentation :**

La V&V fait partie intégrante du projet de développement d'un code. Elle repose sur une base de tests unitaires et intégraux, qui doivent couvrir le domaine d'applications du code du point de vue de la physique et des options de calculs, également une documentation complète du code.

Les deux options VEF et VDF ne possèdent pas les mêmes modèles de turbulence, un effort plus important a été porté par le passé sur le VDF qui dispose d'une plus grande variété de modèles.

Le présent plan de développement concerne principalement le VEF. Cependant, il peut être intéressant de commencer

3. On introduit "artificiellement" une interface dans les modélisations multiéchelles couplant deux niveaux de modélisation (microscopique et macroscopique).

	Note Technique DEN		Page 16/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019		Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

par tester une nouvelle méthode numérique ou un modèle de turbulence en VDF. En effet, l'utilisation d'un maillage constitué de parallélépipèdes rectangles permet en général de nombreuses simplifications au niveau du schéma et facilite l'analyse.

Les axes de progrès ayant été rappelés, il s'agit maintenant de spécifier les méthodes et modèles à mettre en œuvre et l'état d'avancement de leur implémentation au moment de cette version révisée. **Notons que pour un objectif donné, différentes voies pourront être étudiées et réorientées si les résultats s'avéraient décevants ou au contraire très encourageants.**

La stratégie de développement repose sur les ressources et les compétences disponibles et les échéances que l'on se fixe pour l'obtention de résultats. L'échéancier des développements à réaliser repose, outre sur les besoins identifiés dans la feuille de route, sur une veille bibliographique dans la littérature ouverte et sur les compétences disponibles au sein du laboratoire.

Par ailleurs en 2019, une IHM pour le code TrioCFD a été réalisée et le site internet a été mis à jour. Des actions en continu, prévues pour répondre aux besoins des utilisateurs, ne sont pas reprises dans ce document. Seuls les besoins utilisateurs en terme de développement ou de V&V sont précisés au fil des différentes sections.

1.3 Ressources et charge de travail

Le LMSF dispose de cinq personnes ayant la capacité de participer au développement du code⁴ et trois personnes à sa validation. A elles huit, ces personnes réunissent

- des compétences d'expert⁵ en analyse numérique et développement de codes de calculs ;
- des compétences dans les nouveaux axes de développement identifiés.

Bien que ce plan soit établi sur cinq ans, toutes les actions ne seront pas terminées à cette échéance. En effet, afin d'anticiper l'avenir, certaines études doivent être initiées aujourd'hui mais n'aboutiront à une exploitation en production qu'à long terme. Ainsi, on distingue quatre types d'actions :

1. Développement et R&D court terme :

ces actions visent à améliorer le schéma de calcul actuel utilisé en production, du point de vue de sa précision, sa robustesse et ses performances. Leur durée de réalisation est relativement courte (environ six mois-un an). Les développements informatiques à réaliser sont modestes et les méthodes à implémenter bien documentées dans la littérature.

2. R&D moyen terme :


ces actions visent à introduire dans le code de nouvelles options, en particulier de nouveaux schémas numériques. Leur durée de réalisation est de deux à trois ans pour arriver à une méthode mature, sachant que des thèses pourront contribuer à leur réalisation. Les développements à entreprendre sont conséquents mais sans impact majeur sur l'architecture logicielle.

3. R&D long terme :

ces actions visent à se préparer aux futures architectures informatiques et à introduire plus de flexibilité et de précision au niveau des méthodes. Elles nécessitent des développements majeurs qui auront vraisemblablement beaucoup d'impacts sur l'architecture logicielle. Ces développements profiteront aux autres applications adossées à TRUST.

4. On mentionne ici les ressources disponibles, indépendamment du budget attribué au projet.

5. Cette équipe est constituée d'ingénieurs-chercheurs qui bénéficient tous d'une thèse et d'une expérience de plusieurs années dans le calcul scientifique.

	Note Technique DEN	Page 17/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

4. **Continu** : ces actions doivent être poursuivies en continu.

Il est difficile de chiffrer des activités de R&D. Les échéances données dans le présent document seront à revoir chaque année, en fonction des résultats obtenus, des travaux de la littérature ouverte, et des ressources humaines et financements disponibles.


1.4 Synthèse du programme de travail

Nous avons priorisé les tâches suivant la classification suivante :

- A : tâches incontournables à mener
- B : tâches qui sont essentielles, dont le niveau de priorité est juste inférieur au tâches identifiées en priorité A
- C : tâches qu'il faudrait aussi idéalement mener

Cette classification est à revoir chaque année en fonction des résultats obtenus, des différentes collaborations et des ressources humaines et financements disponibles.

Lot		Numéro de tâche	état/Priorité	Perspective	
1	Schéma VEF	Compressibilité artificielle	Tâche 1.1	C	Envisagé en 2021
		Stabilité du schéma	Tâche 1.2.a	Réalisée partiellement	Finalisation en 2021
			Tâche 1.2.b	C	Lot 1.2.a achevé
			Tâche 1.2.c	C	Lot 1.2.a achevé
		Convection non-linéaire	Tâche 1.3	C	Lot 3.1 achevé
		Conservation énergie cinétique	Tâche 1.4	C	Lot 3.1 achevé
		Schéma de diffusion	Tâche 1.5.a	C	Lot 3.1 achevé
			Tâche 1.5.b	C	Lot 3.1 achevé
		Modèle QC	Tâche 1.6.a	En cours	Intégration en 2020
			Tâche 1.6.b	A	Lot 1.6.a achevé
			Tâche 1.6.c	A	Lot 1.6.a achevé
		Discretisation temporelle	Tâche 1.7	B	Lot 1.6 achevé
Couplage fluide-solide	Tâche 1.8	B	Lot 1.7 achevé		
Post-traitement	Tâche 1.9	C	Lot 1.8 achevé		
2	Modélisation de la turbulence	RANS	Tâche 2.1.a	A	Finalisation en 2020
			Tâche 2.1.b	A	Lot 2.1.a achevé
			Tâche 2.1.c	B	Lot 2.1.a achevé
			Tâche 2.1.d	En cours	Finalisation en 2020
			Tâche 2.1.e	En cours	Poursuivre en 2020
		Modèles de sous-maille	Tâche 2.2.a	B	Envisagé en 2021
			Tâche 2.2.b	En cours	Finalisation en 2019
			Tâche 2.2.c	B	Envisagé en 2021
3	Discretisation spatiale	Polyèdres quelconques	Tâche 3.1	En cours	Finalisation en 2025
		EF Multiéchelles	Tâche 3.2	Réalisée partiellement	Poursuivre en 2020
	Maillage adaptatif,	Estimation d'erreurs <i>a posteriori</i>	Tâche 4.1.a	En cours	Poursuivre en 2020
			Tâche 4.1.b	En cours	Poursuivre en 2020

		Note Technique DEN	Page 18/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			


4	HPC,	Décomposition de domaine	Tâche 4.2.a	C	Lot 4.2.b achevé
			Tâche 4.2.b	En cours	Poursuivre en 2020
			Tâche 4.2.c	C	Lot 4.2.b achevé
	QI	Analyse de sensibilité	Tâche 4.3.a	En cours	Intégration en 2020
			Tâche 4.3.b	B	Envisagé en 2020
			Tâche 4.3.c	B	Lot 4.3.b achevé
5	Nouvelles fonctionnalités	Méthode ALE pour ISF	Tâche 5.1.b	En cours	Finalisation en 2019
			Tâche 5.1.c	En cours	Intégration en 2020
			Tâche 5.1.d	B	Lot 5.1.c achevé
			Tâche 5.1.e	B	Lot 5.1.g achevé
			Tâche 5.1.f	A	Envisagé en 2020
			Tâche 5.1.g	A	Envisagé en 2020
		Modélisation polydisperse de particules solides	Tâche 5.2	En cours	Finalisation en 2020
		écoulements compressibles	Tâche 5.3.a	C	-
			Tâche 5.3.b	C	-
		Couplage avec SCORPIO	Tâche 5.4	Préliminaires en cours	Poursuivre en 2020
6	V&V et domaine de validation du code	V&V	Tâche 6.1.a	Continu	Continu
			Tâche 6.1.b	Continu	Continu
		Documentation	Tâche 6.2	Continu	Continu
		Domaine de validation	Tâche 6.3	Continu	Continu

Le rythme des sorties des versions de TrioCFD est de 1 à 2 par an, associées aux sorties de la base logicielle TRUST. Les versions de 2020 et 2021 se verront enrichis principalement :

- de la documentation
- des travaux sur le modèle quasi compressible
- d'améliorations des modèles de turbulence à l'échelle RANS
- de la possibilité de réaliser les premiers calculs RANS sur maillage mobile (ALE)

Les travaux de R&D moyen et long termes (discrétisation spatiales, maillage adaptatif et amélioration du schéma VEF) seront disponibles dans les versions suivantes.

Plan du document : La section 2 présente le Lot 1, qui concentre des axes d'amélioration de l'existant. Les travaux concernant les modèles de turbulence font l'objet du Lot 2 et sont décrits dans la section 3. La section qui suit concerne le développement des nouveaux schémas numériques de discrétisation en espace, à savoir un schéma de type Galerkin Discontinu (section 4.1, Lot 3.1) ainsi que le développement d'un modèle fin pour les assemblages combustibles (section 4.2, Lot 3.2). La section 5, est dédiée aux travaux concernant l'estimateur d'erreurs *a posteriori* (section 5.1, Lot 4.1), la décomposition de domaine (section 5.2, Lot 4.2) ainsi que la quantification des incertitudes (section 5.3, Lot 4.3). Le lot 5 est consacré à la mise en œuvre de nouvelles fonctionnalités, avec une composante ALE pour la réalisation de calculs d'interaction fluide-structure (section 6.1, Lot 5.1), un modèle compressible (section 6.3,

			Note Technique DEN	Page 19/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025				

Lot 5.2), la modélisation polydisperse de particules solides (section 6.2, Lot 5.3) et le couplage avec une librairie de transport chimique (section 6.4, Lot 5.4). Enfin, le travail de validation et de documentation à réaliser en continu est décrit dans la section 7, Lot 6.

2 évolutions des schémas et techniques existants

2.1 Compressibilité artificielle

Dans TrioCFD, les solutions stationnaires sont calculées via la résolution d'un transitoire. Cette phase instationnaire est dans certains cas très coûteuse en temps CPU.

L'approche multi-pas implique la résolution d'une équation de Poisson pour la pression (l'étape 2) à chaque pas de temps, ce qui peut s'avérer très coûteux en temps de calcul. Afin de s'affranchir de la résolution de l'équation de Poisson pour la pression, une méthode de type compressibilité artificielle est envisageable. L'idée de la méthode consiste à introduire un paramètre de "pénalisation" ε et à remplacer la contrainte $\nabla \cdot \vec{u} = 0$ par :

$$\varepsilon \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{u} = 0.$$

La contrainte d'incompressibilité est satisfaite seulement à la convergence. Le paramètre ε est arbitraire. Il doit être choisi de manière optimale afin d'assurer une convergence rapide mais également à assurer l'existence d'une solution numérique stationnaire.

Ainsi, (1.13) s'écrit :

- **Etape 1 :**


$$\left(\frac{1}{\Delta t} M - A + L(U^n) - \frac{\Delta t}{\varepsilon} B^T M^{-1} B \right) U^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} M U^n - B^T P^n + S^n,$$

- **Etape 2 :**

$$P^{n+1} = P^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon} M^{-1} B U^{n+1}.$$

C'est une discrétisation à l'ordre 1 en temps mais comme on s'intéresse à l'obtention d'un état stationnaire cela ne pose pas de problème de précision. Néanmoins, une généralisation de la méthode permettant de monter en ordre est proposée dans l'article [68] .

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.1 : compressibilité artificielle	
Objectif	développement d'un algorithme stationnaire efficace.
Références	[68] et autres à définir
Tâches à réaliser	implémentation dans TrioCFD et validation
Risques identifiés	- méthode de résolution différente de celle de TrioCFD ; - implémentation informatique conséquente ;
Conditionnement de l'action	aucun
Charge de travail	Développement et R&D court terme

	Note Technique DEN		Page 20/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

Remarque 1. Des réflexions sur le développement de la méthode de compressibilité artificielle ont eu lieu. La mise en œuvre dans TrioCFD peut se faire sans un impact majeur sur les autres parties du code, la difficulté réside dans le fait que c'est une méthode de résolution différente de celle de TrioCFD.

2.2 Amélioration de la stabilité du schéma VEF

La méthode VEF permet une discrétisation polynomiale d'ordre 1 avantageuse du problème de Stokes, car la matrice de masse de la vitesse est diagonale. Mais si on se contente d'une pression P_0 , ce schéma manque de précision lorsque le terme source de l'équation de quantité de mouvement est raide [48]. Une analyse mathématique montre que ce problème est lié à la dimension de l'espace des vitesses, trop grande par rapport à celle de l'espace des pression. Pour améliorer la précision du schéma de base, il a donc été proposé dans [62] pour le 2D et [52] pour le 3D d'augmenter le nombre de degrés de liberté en pression. Cette technique est efficace mais fait augmenter le nombre d'inconnues, ce qui peut être pénalisant pour passer de gros cas-tests. Il existe des méthodes alternatives (en gardant une pression P_0) pour obtenir une bonne approximation d'ordre 1 du champ de vitesse à divergence nulle :


- En utilisant les éléments finis de Crouzeix-Raviart non conformes et en projetant la vitesse discrète sur un espace approprié (Linke et al [87, 74]).
- En réduisant algébriquement l'espace des vitesses [61].
- En utilisant les éléments finis de Taylor-Hood d'ordre 1 stabilisés, tels que $(\vec{u}_h, p_h) \in \vec{P}_1 \times P_0$, et post-traités [13, 2].

Dans [54], les auteurs montrent qu'il est crucial d'approcher précisément l'espace des vitesses à divergence nulle, en particulier dans les cas où le terme source de l'équation de quantité de mouvement est raide. Il est donc important de poursuivre les travaux en cours concernant la recherche d'un schéma d'ordre 1 précis et peu gourmand en nombre d'inconnues.

2.2.1 Méthode de projection

Récemment, Linke et al [87, 74] ont proposé d'utiliser des méthodes de projection pour supprimer les vitesses parasites. La méthode de projection sur l'espace des éléments finis de Raviart-Thomas [106] a été évoluée dans la version 1.7.8, et présente des résultats intéressants [70]. Actuellement, cette méthode est fonctionnelle dans TrioCFD dans le cas stationnaire, avec des conditions aux limites de Dirichlet. Notons que la projection sur les éléments finis de Raviart-Thomas ne permet pas de traiter les schémas explicites en temps car la matrice de masse projetée n'est pas de rang maximal. Pour cela, il faut implémenter la projection sur les éléments finis de Brezzi-Douglas-Marini [21] (les BDM). La matrice de masse projetée sera alors de rang maximal, mais elle ne sera pas diagonale. Ceci implique qu'on a besoin d'un solveur de pression (de la forme $BM^{-1}B^T$) général pour lequel la matrice de masse ne soit pas nécessairement diagonale. Il faut donc poursuivre la phase d'industrialisation.

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.2 : Amélioration de la stabilité du schéma VEF	
Tâche 1.2.a : Méthode de projection	
Objectif	Industrialiser la méthode de projection.
Étapes	Mettre à jour les développements. Coder le traitement de toutes les conditions limites. Inclure dans le schéma la projection de la matrice de masse.

		Note Technique DEN	Page 21/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

	Tester différents schémas de discrétisation de la convection. Appliquer la projection sur les BDM. Traiter le schéma explicite en temps.
Références	Linke et al [87, 74]
Risques	travail de recherche, complexité de la mise en œuvre informatique dans un code existant
Prérequis	Solveur de pression général pour traiter le cas explicite
Charge de travail	R&D moyen terme : action en cours


2.2.2 Méthode d'élimination des vitesses

Dans l'article [61], Hecht propose un algorithme pour construire une base de fonctions \vec{P}_1^{NC} à divergence nulle. La méthode utilise des résultats de la théorie des graphes sur les arbres maximaux et le résultat final semble simple à programmer. On peut résoudre le problème de Stokes en éliminant la variable de pression, ce qui rend inutile dans ce cas l'algorithme prédiction-correction. Il serait intéressant de tester l'efficacité de méthode, et de déterminer si elle est compatible avec le parallélisme du code actuel.

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.2 : Amélioration de la stabilité du schéma VEF	
Tâche 1.2.b : Méthode d'élimination des vitesses	
Objectif	Evaluer l'intérêt de la méthode.
Etapes	Implémenter et tester la méthode dans une maquette. Stokes 2D puis 3D puis Oseen puis Navier-Stokes. Etudier l'intégration dans TrioCFD. Décider de l'industrialisation.
Références	Hecht [61]
Risques	travail de recherche, complexité de la mise en œuvre informatique dans un code existant
Prérequis	Architecture de code souple et Lot 1.2.a achevé.
Charge de travail	R&D court terme.

2.2.3 Éléments finis $\vec{P}_1 \times P_0$ stabilisés

Il est connu que les éléments finis de Taylor-Hood d'ordre 1, tels que $(\vec{u}_h, p_h) \in \vec{P}_1 \times P_0$, ne sont pas stables car le nombre de simplexes devient rapidement plus important que la dimension multipliée par le nombre de sommets. Cependant, on peut stabiliser le système linéaire en ajoutant à la contrainte de divergence nulle un terme de pénalisation des sauts de pression. Cette méthode est particulièrement économe en nombre d'inconnues. De plus la matrice de masse P_1 est équivalente à une matrice diagonale. Dans [13, 2], les auteurs proposent de calculer un relèvement des sauts de pression avec les éléments finis de Raviart-Thomas pour reconstruire un champ de vitesse à divergence nulle ponctuelle. Cette méthode est à mettre en concurrence avec les deux autres méthodes citées

	Note Technique DEN		Page 22/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019		Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

précédemment. C'est à ce jour la méthode la plus économe en nombre d'inconnues pour résoudre le problème de Stokes sur maillage de simplexes.

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.2 : Amélioration de la stabilité du schéma VEF	
Tâche 1.2.c : Eléments finis $\vec{P}_1 \times P_0$ stabilisés	
Objectif	Evaluer l'intérêt de la méthode.
Étapes	Implémenter et tester la méthode dans une maquette. Stokes 2D puis 3D puis Osen puis Navier-Stokes. Etudier l'intégration dans TrioCFD. Décider de l'industrialisation.
Références	Barranechea et al [13, 2]
Risques	travail de recherche, complexité de la mise en œuvre informatique dans un code existant
Prérequis	Architecture de code souple et Lot 1.2.a achevé.
Charge de travail	R&D court terme.

2.3 Discrétisation des termes de convection non linéaire


2.3.1 Revue des discrétisations des termes de convection disponibles dans TrioCFD

On s'intéresse aux termes de convection non-linéaire, dont la discrétisation agit significativement sur la robustesse des simulations. En effet, les solutions produites par les techniques de discrétisation centrées sont instables, et les méthodes décentrées standards conduisent à une diffusion numérique excessive. Le code TrioCFD dispose d'une dizaine de mot-clés permettant de préciser le schéma pour les termes de convection. En pratique, trois options sont principalement utilisées (AMONT, MUSCL, EF_STAB). Elles sont décrites en Annexe (section A.4).

Les études montrent une très forte sensibilité des calculs au schéma de convection choisi.

Cette action vise à revoir ces méthodes de discrétisation, les éprouver sur des maillages quelconques et des simulations LES, les améliorer en tirant profit d'une veille bibliographique.

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.3 : discrétisation des termes de convection non linéaires	
Objectif	disposer d'un schéma stable pour les termes de convection, dont la dissipation numérique est adaptée aux calculs LES (c'est à dire négligeable par rapport à la dissipation du modèle de sous-maille)
Références	à définir
Tâches à réaliser	- revoir les méthodes de discrétisation disponibles, se les réapproprier ; - faire des tests sur des écoulements turbulents et avec des maillages quelconques ; - améliorer l'existant si nécessaire
Conditionnement de l'action	Lot 3.1 achevé
Risques identifiés	travail de recherche, complexité de la mise en œuvre informatique dans un code existant
Charge de travail	R&D court terme

	Note Technique DEN	Page 23/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

2.3.2 Conservation de l'énergie cinétique


Il est établi depuis longtemps que des temps d'intégration longs des termes de convection non linéaires conduisent à l'arrêt des simulations numériques en raison de l'amplification d'instabilités numériques. De nombreux travaux montrent que de telles instabilités peuvent être évitées si le schéma permet de conserver le carré de la quantité advectée (l'énergie cinétique ou l'ensrophie par exemple). Il s'agit de satisfaire au niveau discret une propriété physique bien connue, à savoir qu'en l'absence de forces externes et de viscosité, les équations contiennent des invariants, comme l'énergie cinétique.

Les méthodes de discrétisation standards ne garantissent pas la conservation de ces invariants. Or, d'un point de vue physique, la conservation de l'énergie cinétique discrète est importante, en particulier pour les écoulements turbulents et des approches de type DNS ou LES. Dans ces cas, la reproduction précise du spectre d'énergie est essentielle pour reproduire la cascade énergétique associée à l'écoulement. Cela n'est pas possible lorsque la diffusion numérique domine la diffusion moléculaire en DNS ou la contribution du modèle de sous maille en LES. Les discrétisations qui conservent l'énergie cinétique assurent que toute la diffusion est modélisée, et ne provient pas des erreurs de discrétisation. Pour ces raisons, beaucoup d'auteurs ont montré qu'il est essentiel que les schémas utilisés en DNS ou LES préservent l'énergie cinétique [97].

Travail à réaliser :

- étude pour déterminer dans quelle mesure les différents schémas de convection de TrioCFD préservent ou non l'énergie cinétique ;
- Le cas échéant, réécriture du terme de convection sous forme antisymétrique et écriture d'un schéma adapté ; deux pistes au moins peuvent être évoquées :
 - l'écriture $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \nabla \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{u}$, avec incorporation du terme $\frac{|\mathbf{u}|^2}{2}$ dans la pression de Bernoulli
 - l'égalité sous forme variationnelle $\int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{v} d\Omega = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{v} d\Omega - \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v}) \cdot \mathbf{u} d\Omega$ lorsque $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ sur le bord du domaine et lorsque \mathbf{u} est à divergence nulle.
- Validation : a minima test de "Taylor Green" et tests de [97]. Test de turbulence homogène isotrope sur un cube.

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.4 : un schéma VEF qui conserve l'énergie cinétique	
Objectifs	- Modifier le schéma VEF pour qu'il préserve l'énergie cinétique - Améliorer la robustesse des calculs LES
Références	[97] et les références de l'article ; étude bibliographique sur discrétisations "Skew-symmetric"
Tâches à réaliser	R&D pour définir la méthode (pas d'existant dans la littérature avec schéma VEF)
Conditionnement de l'action	Lot 3.1 achevé
Risques identifiés	Travail de recherche. Succès non garanti (les articles dans la littérature portent sur des schémas numériques autres que le VEF)
Charge de travail	R&D court terme

			Note Technique DEN	Page 24/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025				

2.4 Discrétisation des termes de diffusion

Cette action concerne la discrétisation des termes de diffusion. Certaines études réalisées récemment ont laissé apparaître une grande sensibilité de la solution par rapport au maillage. Il s'agit de comprendre l'origine de ce mauvais comportement et de le corriger. Notons qu'un traitement soigné des dérivées secondes est crucial pour la réalisation de simulations en LES.

De façon générale, la difficulté principale concerne la non positivité de certaines discrétisations. Plus précisément, on cherche à construire une approximation de la solution exacte du problème elliptique :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(D\nabla u) = f, & \Omega \\ u = 0, & \partial\Omega. \end{cases} \quad (2.1)$$

On veut que si u solution de (2.1) et $f \geq 0$ alors $u \geq 0$. On dit alors que u vérifie un principe du maximum. Si cette propriété n'est pas satisfaite au niveau discret, cela peut conduire à l'apparition d'oscillations parasites et l'obtention de solutions non physiques (concentration négative, énergie négative,...). Sur des maillages non structurés, on veut que la solution du problème de diffusion vérifie un principe du maximum discret sans contrainte sur le maillage.


2.4.1 Analyse des méthodes de TrioCFD

Il y a principalement deux méthodes de discrétisation des dérivées secondes dans TrioCFD. La première méthode découle directement du schéma rappelé dans la section A. On peut vérifier que la matrice de diffusion (notée A en section 1.1.3) obtenue est une M -matrice uniquement sous certaines conditions sur le maillage (conditions sur les angles et les rapports d'aspects des éléments). Un post-traitement est prévu dans le code pour analyser la qualité d'un maillage par rapport à ces contraintes.

Une autre méthode, basée sur les travaux de Dmitri Kuzmin, est disponible dans le code. Elle vérifie un principe du maximum discret.

Les deux méthodes seront étudiées. On vérifiera leur implémentation et réalisera des tests numériques sur des maillages quelconques, en y incluant des calculs RANS avec modèle (k, ε) et LES avec modèle de Smagorinsky.

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.5 : analyse du schéma de diffusion	
Tâche 1.5.a :	
Objectifs	<ul style="list-style-type: none"> - Analyser la discrétisation des termes de diffusion - étudier la dépendance du schéma de diffusion par rapport à la forme et au rapport d'aspect des mailles - Vérifier l'implémentation du schéma, en particulier au niveau des coins et des conditions aux limites où des traitements particuliers sont susceptibles d'avoir été faits.

			Note Technique DEN	Page 25/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025				

Références	travaux de D. Kuzmin [78, 79], site web de l'auteur http://www.mit.jyu.fi/kuzmin
Tâches à réaliser	analyse des sources, modifications éventuelles
Conditionnement de l'action	Lot 3.1 achevé
Risques identifiés	aucun
Charge de travail	R&D court terme

2.4.2 Implémentation d'un schéma de diffusion adapté aux maillages très déformés

Cette action vise à développer dans TrioCFD un schéma de diffusion qui vérifie un principe du maximum discret sans contrainte sur le maillage, dans l'éventualité où l'étude précisée dans la section 2.4.1 n'aura pas donné complète satisfaction.

On s'intéresse ici aux travaux de C. Le Potier, premier auteur à proposer des schémas non-linéaires pour la diffusion. De façon non exhaustive, on pourra étudier


- la référence [82], consacrée à une méthode de diffusion sur des maillages déformés. La matrice associée à ce schéma est monotone sans condition géométrique sur le maillage et sans condition sur le rapport d'anisotropie ;
- les travaux plus récents de Cancès, Cathala et Le Potier [26], qui proposent une méthode générique pour corriger un schéma de diffusion quelconque de sorte à garantir la propriété de maximum local.

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.5 : schéma de diffusion pour maillages très déformés	
Tâche 1.5.b :	
Objectif	disposer d'un schéma de diffusion monotone sur des maillages fortement anisotropes
Références	travaux de C. Le Potier [26, 82] et autres références
Tâches à réaliser	veille bibliographique, implémentation informatique et validation
Conditionnement de l'action	Lot 3.1 achevé
Risques identifiés	travail de recherche, complexité de la mise en œuvre informatique dans un code existant
Charge de travail	R&D court/moyen terme

2.5 évolution du modèle quasi-compressible

2.5.1 Rajout du terme source de dilatabilité

Il s'agit ici de rendre compte de petites variations de densité dans l'équation de quantité de mouvement, à travers le tenseur des contraintes sous la forme d'un terme source [96], représenté en bleu ci-dessous. En écoulement laminaire

			Note Technique DEN	Page 26/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025				

on aura :

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})] - \frac{2}{3} \nabla [\mu \nabla \cdot \mathbf{u}] + \rho \mathbf{g} \quad (2.2)$$

et en écoulement turbulent :

$$\frac{\partial \rho \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot [(\mu + \mu_t) (\nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla^T \tilde{\mathbf{u}})] - \frac{2}{3} \nabla [(\mu + \mu_t) \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}] + \rho \mathbf{g} \quad (2.3)$$

Cette modification utilisera un nouveau terme source dans l'équation de Navier-Stokes. La prise en compte du terme de dilatabilité est notamment utile pour la simulation de phénomènes d'expansion gazeuse. Plus proche des applications actuelles de TrioCFD, ce terme source permet d'être plus en accord avec la réalité expérimentale lorsqu'on mélange deux fluides de densité différente, par exemple un fluide froid et un fluide chaud.


Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.6 : Modèle quasi-compressible	
Tâche 1.6.a : Rajout du terme source de dilatabilité dans le modèle quasi-compressible	
Objectif	- améliorer la modélisation quasi-compressible
Référence	[96]
Tâches à réaliser	- implémentation - validation du modèle
Charge de travail	R&D moyen terme : action en cours

2.5.2 Introduction de nouvelles lois d'état

Les loi d'état relient la densité d'une matière à la température et la pression thermodynamique. Initialement développées uniquement pour les gaz, deux types de loi d'état sont disponible à ce jour : une pour des gaz parfaits et une pour les gaz réels de type Sutherland. Pour les analyses de sûreté des réacteurs nucléaires, il serait souhaitable d'étendre le champ d'application aux écoulements gazeux multi-espèces dans l'enceinte des réacteurs et liquides dans le circuit primaire des réacteurs.

Pour mieux traiter la présence de la vapeur d'eau et de l'Hydrogène dans l'enceinte, une loi de type van der Waals sera implémentée à long terme. Dans les REP, la dilatabilité de l'eau liquide est un facteur important dans les accidents de type choc froid pressurisé monophasique et dilution inhérente de bore. Dans les réacteurs à sel fondus, la neutronique est fortement dépendante de la densité du sel. Pour analyser le comportement thermohydraulique de ce type de réacteur, il est indispensable de prendre en compte la dilatabilité du refroidissant dans lequel les radionucléides sont dissous.

Il est donc prévu à moyen terme d'implémenter une simple loi d'état de type $\rho = f(T)$ comme la densité d'un liquide n'est pas une fonction de la pression. Un Baltik de ce type de loi d'état existe déjà, qui a été utilisé pour les analyses TOPFLOW et le benchmark OCDE de l'expérience choc froid de TAMU. Néanmoins, une généralisation du codage est nécessaire pour prendre en compte tous types de conditions aux limites.

	Note Technique DEN		Page 27/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.6 : Modèle quasi-compressible	
Tâche 1.6.b : nouvelles lois d'état	
Objectif	augmenter le champ d'application
Références	à définir
Tâches à réaliser	veille bibliographique, implémentation informatique et validation
Conditionnement de l'action	Lot 1.6.a achevé
Risques identifiés	aucun
Charge de travail	R&D court/moyen terme

2.5.3 Introduction de la capacité thermique variable


Tous les modèles physiques de TrioCFD sont basés sur l'hypothèse que la capacité thermique à pression constante (C_p) est constante. Cette hypothèse n'est pas justifiée pour certains transitoires accidentels dans les REP avec des très fortes variations de température ainsi que pour certains transitoires dans les réacteurs à fluide supercritique dans les réacteurs chimique.

Il est envisagé à long terme de surmonter cette limitation pour augmenter le champ d'application de TrioCFD, particulièrement pour les analyses thermohydraulique fines des réacteurs à fluide supercritique. Comme l'hypothèse $C_p = f(T, P)$ n'est pas compatible avec une grande partie du codage du modèle quasi-compressible une analyse profonde de l'implémentation du modèle est prévue d'abord. L'évaluation des travaux nécessaires pour modifier le C_p sera faite après. Un plan de développement précis sera réalisé ultérieurement.

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.6 : Modèle quasi-compressible	
Tâche 1.6.c : capacité thermique variable	
Objectif	augmenter le champ d'application
Références	à définir
Tâches à réaliser	veille bibliographique, implémentation informatique et validation
Conditionnement de l'action	Lot 1.6.a achevé
Risques identifiés	aucun
Charge de travail	R&D court/moyen terme

2.6 Revue et développement des intégrateurs temporels

Les intégrateurs actuellement présents dans TrioCFD sont d'ordre 1 ou plus élevé, soit explicites soit partiellement implicites, et reposent sur une approche prédiction-correction [32]-[113]. L'adaptabilité du pas de temps est gérée en fonction des contraintes liées à la discrétisation spatiale (condition CFL etc...). Cependant, à mesure que les modèles

		Note Technique DEN	Page 28/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

implémentés dans TrioCFD gagnent en complexité, des raideurs temporelles peuvent apparaître, nécessitant la prise en compte de critères d'évolution d'ordre et de pas de temps différents, ou d'autres schémas prédicteurs-correcteurs. Des utilisateurs ont également demandé à pouvoir s'affranchir tout à fait de l'étape de prédiction-correction.

Afin d'appréhender d'éventuelles évolutions en ce sens, une première étape consistera à reprendre de façon exhaustive l'ensemble des intégrateurs existants actuellement dans TrioCFD. Cette revue préliminaire permettra d'identifier des axes de progression et d'améliorer l'adaptabilité de l'intégration temporelle, selon des critères plus précis et plus pertinents, en fonction du problème à résoudre, afin d'obtenir de meilleures performances de calcul et d'éviter une limitation excessive du pas de temps, dans le même esprit que la mise en place d'un algorithme stationnaire, réalisée en 2017 [103].

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.7 : Revue et développement des intégrateurs temporels	
Objectif	- améliorer l'adaptabilité de la discrétisation temporelle
Références	[103], [83]
Tâches à réaliser	- documentation - implémentation de nouveaux intégrateurs
Conditionnement de l'action	Lot 1.6 achevé
Charge de travail	R&D moyen/long terme.


2.7 Amélioration du couplage fluide/solide

Dans de nombreuses applications de la CFD pour la sûreté des réacteurs nucléaires, l'estimation correcte de l'échange thermique entre fluide et solide est primordiale. Deux exemples pour cela sont la prédiction du début de l'ébullition nucléée et la fatigue thermique.

Le couplage de la thermique solide/fluide est réalisé actuellement explicitement ou par une procédure itérative, basée sur deux équations d'énergie et donc deux matrices de Jacobi. Ce type de couplage ralentit significativement le calcul puisque des critères de stabilité doivent être respectés. Afin de surmonter cette limitation, il est souhaitable de coupler étroitement la thermique du solide à celle du fluide.

Dans ce but, une seule équation d'énergie sera résolue et une seule matrice de Jacobi sera assemblée. Nous attendons une forte amélioration de la performance du code pour traiter ainsi des problèmes couplés solide/fluide.

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.8 : Amélioration du couplage fluide/solide	
Objectif	amélioration de la performance
Références	à définir
Tâches à réaliser	implémentation informatique et validation
Conditionnement de l'action	Lot 1.7 achevé
Risques identifiés	aucun
Charge de travail	R&D court/moyen terme

		Note Technique DEN	Page 29/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

2.8 Post-traitement

La méthode de discrétisation VEF de TrioCFD, non conforme, produit des champs très irréguliers, ce qui pose un problème lors de la visualisation ou le tracé des sondes. Pour améliorer l'aspect visuel des résultats, on peut mettre en œuvre diverses techniques de lissage des solutions :


- Pour l'écriture des champs, on peut faire des interpolations en diverses localisations : aux faces (c'est par exemple la localisation naturelle des points de vitesse, dans ce cas aucune interpolation n'est faite), aux éléments ou aux sommets.
- Pour l'écriture des sondes, on peut soit ne spécifier aucune option (dans ce cas il y a une interpolation du champ aux points définissant la sonde, sauf ci ceux-ci correspondent exactement aux points de localisation naturelle du champ), soit utiliser l'option `nodes` (chaque point de la sonde est déplacé vers le centre de face le plus proche), `grav` (chaque point de la sonde est déplacé vers le centre de la cellule le plus proche) ou `chsom` (une interpolation est faite, applicable seulement pour les champs P1 non conformes). Cependant, les options `nodes` et `grav` ne sont pas vraiment satisfaisantes dans la mesure où elles ne permettent que de déplacer des points sans effectuer de lissage, tandis que l'option `chsom` lisse certes le champ mais de manière encore perfectible.
- On peut aussi définir de nouveaux champs interpolés et les utiliser dans les sondes par l'intermédiaire d'une `definition_champs`, par exemple :

```
vitesse_som interpolation { localisation som source refchamp { pb_champ
                          pb vitesse } }
```
- On peut enfin utiliser une solution externe à TrioCFD, comme la librairie Medcoupling de Salome, afin de lisser les solutions, par exemple en interpolant le champ solution de TrioCFD sur un maillage hexaédrique.

La figure 1 illustre différentes options : en noir, la sonde d'origine provient d'une LES (configuration AGATE à grilles décalées) et est très bruitée. Sur le graphe de gauche, on voit en rouge la même sonde mais pour le champ interpolé aux sommets, et en bleu la même sonde mais avec l'option `chsom` : ces deux méthodes permettent de lisser le profil et de le rendre plus présentable, bien qu'il demeure un peu bruité. Sur le graphe de droite, on a utilisé Medcoupling pour interpoler le champ solution. P0P0 (resp. P0P1) signifie que l'on a interpolé le champ écrit au centre des éléments du maillage tétraédrique de TrioCFD vers le centre des éléments (resp. vers les sommets) d'un maillage hexaédrique. La méthode P0P1 est très efficace et donne les champs les plus lisses, mais elle est lourde à mettre en place : en effet, il faut écrire le champ TrioCFD, générer un nouveau maillage sur lequel interpoler, exécuter Medcoupling (ce qui peut être long selon la taille des maillages) et enfin extraire les profils voulus.

On propose donc d'écrire par défaut dans TrioCFD des champs déjà lissés (par une méthode à spécifier, la plus adéquate et la moins coûteuse en temps de calcul) de façon invisible pour l'utilisateur, tout en laissant la possibilité à l'utilisateur expert de manipuler les interpolations. Cela permettrait une utilisation plus facile du code, notamment pour l'utilisateur débutant qui souhaite généralement obtenir une solution visuellement présentable sans nécessairement se soucier des détails d'interpolation des champs.

Lot 1 : évolutions de l'existant	
Sous-Lot 1.9 : Post-traitement	
Objectif	écrire par défaut dans TrioCFD des champs déjà lissés - conserver la possibilité de manipuler les interpolations

		Note Technique DEN	Page 30/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

Références	à définir
Tâches à réaliser	implémentation informatique et validation
Conditionnement de l'action	Lot 1.8 achevé
Risques identifiés	ralentissement du code
Charge de travail	R&D court/moyen terme

3 Modélisation de la turbulence

3.1 État des lieux

Aujourd'hui, TrioCFD dispose d'un nombre limité de modèles de turbulence de type RANS, à savoir :

- le modèle $k-\varepsilon$ standard, avec loi de fermeture linéaire du tenseur de Reynolds (l'approximation de Boussinesq) ;
- le modèle $k-\varepsilon$ avec corrections bas Reynolds en proche paroi : plusieurs formulations ont été implémentées en 2016 [99] ;
- le modèle $k-\varepsilon$ réalisable, implémenté en 2018 [6] ;
- le modèle $k-\varepsilon$ avec une loi de fermeture non linéaire particulière (quadratique) du tenseur de Reynolds : le modèle de Baglietto [12].

En RANS, les axes d'amélioration proposés concernent d'une part l'amélioration de certains modèles existants, et d'autre part l'ajout de nouveaux modèles. TrioCFD est peu performant sur la résolution explicite de la totalité de la couche limite, car il ne possède pas de modèle pleinement opérationnel pour cela. Or il s'agit pourtant d'un besoin essentiel dans beaucoup d'applications, pour lesquelles on est actuellement limité soit à l'utilisation de la loi de paroi standard avec l'inconvénient du domaine d'applicabilité, soit au passage à la LES résolue en paroi avec l'inconvénient du coût de calcul.

Des modèles bas Reynolds ont été implémentés en 2016 pour améliorer la situation, mais ils n'ont pas complètement pallié le problème. On souhaite donc améliorer les modèles bas Reynolds existants, et en même temps ajouter les modèles $k-\omega$ et $k-\omega$ SST, ces deux derniers étant d'autres modèles de type bas Reynolds couramment employés dans le monde industriel. On souligne de plus que l'utilisation de modèles résolvant finement la couche limite doit être associée à la possibilité de gérer les maillages hybrides prismes/tétraèdres, afin de ne pas faire exploser le nombre de mailles dans la couche limite.

Il semble également intéressant d'implémenter un modèle de transport des tensions de Reynolds, dits RSM (« Reynolds Stress Model »), afin d'améliorer les simulations d'écoulements dans les assemblages de réacteurs nucléaires. En LES, les deux modèles actuellement disponibles et opérationnels sont le modèle de Smagorinsky standard et le modèle WALE. On propose d'implémenter dans le code également le modèle de Smagorinsky dynamique.

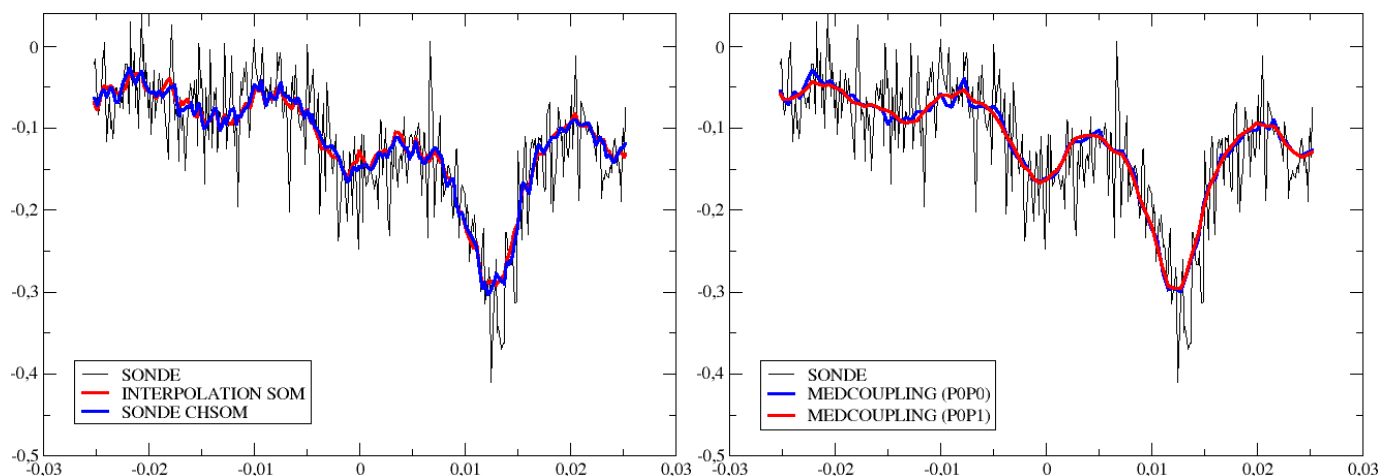


FIGURE 1 – Différentes options de lissage d'un champ.

3.2 Modélisation RANS de la turbulence

3.2.1 Amélioration des modèles bas Reynolds et non linéaires

Les modèles bas Reynolds disponibles dans TrioCFD sont récapitulés dans le tableau 17. Le modèle de Baglietto est un modèle à fermeture non linéaire, mais qui peut être utilisé dans une version « haut Reynolds » ou dans une version « bas Reynolds ».

Modèle	Fermeture	Discrétisation	Thermique
Launder-Sharma	Linéaire	VDF+VEF	Oui
Jones-Launder	Linéaire	VDF+VEF	Oui
Lam-Bremhorst	Linéaire	VEF	Oui
Baglietto	Non linéaire	VEF	Oui

TABLE 17 – Modèles bas Reynolds disponibles dans TrioCFD.

Un certain nombre de problèmes et difficultés liés à ces modèles ont été identifiés :

- On observe assez souvent (presque systématiquement en VEF), que les grandeurs turbulentes (k , ε ainsi que la viscosité turbulente $\nu_t = C_\mu k^2 / \varepsilon$) finissent par s'annuler. Quelques tests montrent que pour obtenir une solution turbulente non nulle, il faut que :
 - le nombre de Reynolds de l'écoulement soit suffisamment élevé ;
 - la viscosité turbulente initiale soit suffisamment grande.

Ces conditions semblent être nécessaires et suffisantes en VDF, mais pas en VEF. En plus de la valeur initiale de ν_t , les valeurs initiales de k et ε , ainsi que la taille du maillage en proche paroi pourraient également avoir une influence sur ce phénomène. La figure 2 illustre la situation dans le cas d'un canal carré. Les tests montrés ont été menés avec le modèle de Launder-Sharma mais les autres modèles se comportent de manière similaire. En VDF, en partant d'une condition initiale telle que $\nu_t / \nu = 90$, on obtient une solution turbulente pour un Reynolds de 6000, mais pas de 2000 ni de 4000. Il existe un seuil sur la valeur initiale de ν_t / ν (ici entre 10 et 20 en

VDF) en dessous duquel la turbulence finit par s'annuler complètement. En VEF, il est presque impossible de capturer une solution turbulente non nulle, y compris avec des nombres de Reynolds élevés et une condition initiale élevée. Cela rend l'utilisation de ces modèles très difficile en VEF. Ces difficultés ont déjà été relevées dans la note [99].

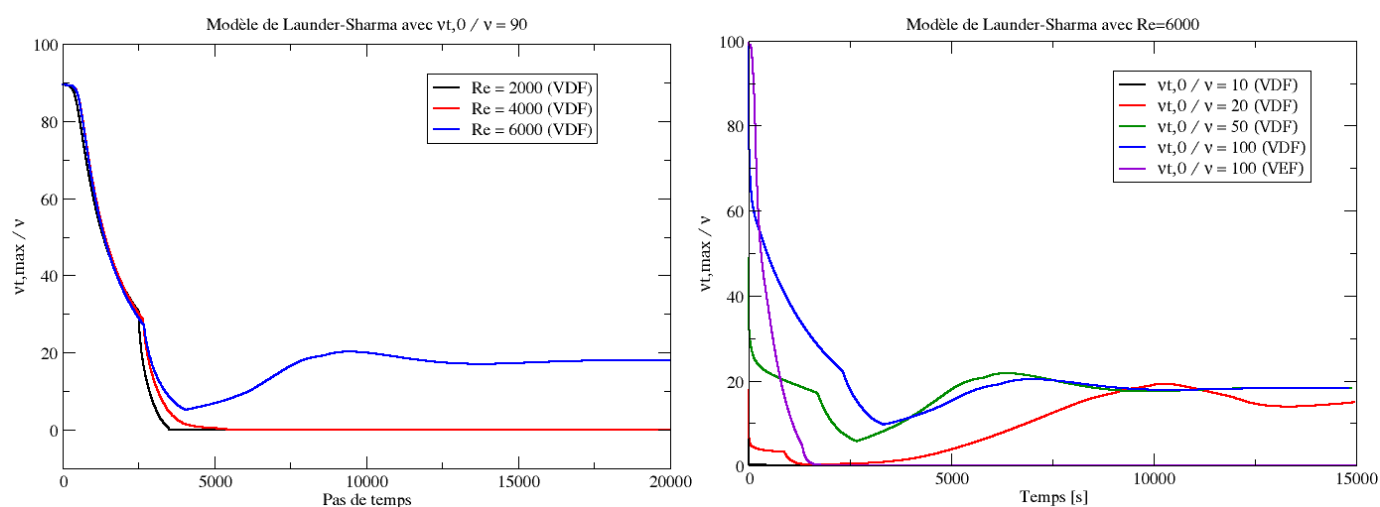



FIGURE 2 – Illustration du comportement des modèles bas Reynolds. à gauche : convergence de la viscosité turbulente en fonction du nombre de Reynolds de l'écoulement, en VDF. à droite : convergence de la viscosité turbulente en fonction de sa valeur initiale, en VDF et VEF.

- L'utilisation de ces modèles est parfois complexe notamment en raison des mots-clés associés susceptibles de provoquer des confusions. Le tableau 18 résume les mots-clés dans chaque cas. On note que le modèle de Lam-Bremhorst [81] nécessite un fichier supplémentaire à générer séparément, de même que le modèle de Baglietto utilisé dans sa version bas Reynolds.

Modèle	mots-clés
Launder-Sharma	<code>modele_fonc_bas_Reynolds Launder_Sharma { }</code>
Jones-Launder	<code>modele_fonc_bas_Reynolds_Jones_Launder { }</code>
Lam-Bremhorst	<code>modele_fonc_bas_Reynolds Lam_Bremhorst { fichier_distance_parois ... }</code>
Baglietto version « bas Reynolds »	<code>modele_fonc_bas_Reynolds EASM_Baglietto { Reynolds_stress_isotrope 0 fichier_distance_parois ... }</code>
Baglietto (version « haut Reynolds »)	<code>modele_fonc_bas_Reynolds standard_keps { Reynolds_stress_isotrope 0 }</code>

TABLE 18 – Mots-clés associés à chacun des modèles.

L'activation de la relation de fermeture linéaire ou non linéaire du tenseur de Reynolds se fait avec le mot-clé `Reynolds_stress_isotrope 0|1`, qui n'est cependant pas requis (le code ne renvoie pas d'erreur si ce mot-clé n'est pas spécifié) et dont l'effet n'est pas toujours évident pour l'utilisateur. Par exemple, dans les mots-clés suivants : `Launder_Sharma { Reynolds_stress_isotrope 0 }`, il est difficile de savoir si l'on utilise le modèle non linéaire (donc de Baglietto) avec la correction bas Reynolds de Launder-Sharma, ou si `Reynolds_stress_isotrope 0` n'a pas d'effet. Autre exemple, est-ce que `standard_keps {`

			Note Technique DEN	Page 33/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025				

`Reynolds_stress_isotrope 1` } signifie que l'on utilise le modèle $k-\epsilon$ standard ? De plus, il existe une confusion sur le mot-clé à spécifier pour définir les conditions aux limites turbulentes aux parois : est-ce `paroi` ou `paroi_fixe`, et quelle est la différence entre les deux ? Enfin, selon que le modèle est « bas Reynolds » ou non, il faut spécifier l'activation ou non de la loi de paroi, ce qui ajoute à la complexité. Par exemple en bas Reynolds, il faut la désactiver en utilisant le mot-clé `turbulence_paroi` `negligeable`.


- Des bugs ont été reportés dans le modèle de Lam-Bremhorst, notamment dans les conditions aux limites.
- Ces modèles sont tous utilisables en thermique mais cette partie n'a probablement pas été complètement validée.

On propose donc les réalisations suivantes :

- comprendre pourquoi les grandeurs turbulentes s'annulent (surtout en VEF) et trouver un moyen de remédier à ce problème ;
- implémenter les modèles de Lam-Bremhorst et de Baglietto en VDF ;
- vérifier et corriger si nécessaire le codage du modèle de Lam-Bremhorst ;
- simplifier les mots-clés appelant les modèles bas Reynolds non linéaires, supprimer les incohérences et uniformiser les mots-clés pour les conditions aux limites turbulentes ;
- valider ces modèles en thermique.

Dans les modèles à loi de fermeture non linéaire, le tenseur de Reynolds s'écrit comme une combinaison linéaire de tenseurs [101]. Ces tenseurs sont eux-mêmes une somme de termes polynomiaux en S et R (respectivement le tenseur des taux de déformation et le tenseur des taux de rotation), et sont d'ordre un à cinq. Ainsi, la valeur des coefficients de la combinaison détermine si le modèle est linéaire (ordre un), quadratique (ordre deux), cubique (ordre trois), ... Dans la littérature, il existe de nombreux modèles non linéaires qui diffèrent essentiellement par la valeur de ces constantes. Par exemple, le modèle de Baglietto implémenté dans TrioCFD est un modèle quadratique avec une modification des constantes initialement proposées par Shih *et al.* [107]. Le modèle de Craft [40] est cubique. Pour généraliser l'implémentation, on pourrait donc envisager de pouvoir rentrer manuellement dans le jeu de données les constantes de la combinaison linéaire.

Lot 2 : Modélisation de la turbulence	
Sous-Lot 2.1 : modèles de type RANS.	
Tâche 2.1.a Modèles bas Reynolds et non linéaires	
Tâches à réaliser	<ul style="list-style-type: none"> - comprendre et solutionner le problème de l'annulation des grandeurs turbulentes - implémenter les modèles de Lam-Bremhorst et de Baglietto en VDF - vérifier (et corriger) le codage du modèle de Lam-Bremhorst - simplifier et uniformiser les mots-clés - valider ces modèles en thermique - spécifier les constantes du modèle non linéaire
Références	[107, 40, 12, 101, 81, 99]
Risques identifiés	Aucun
Charge de travail	Court terme : action en cours

	Note Technique DEN		Page 34/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

3.2.2 Modèles $k-\omega$ et $k-\omega$ SST

Bien que le modèle $k-\varepsilon$ soit encore très populaire dans l'industrie, il possède de nombreux inconvénients connus. Parmi eux, il apparaît que ce modèle n'est pas bien posé en très proche paroi : ainsi un raffinement croissant du maillage en proche paroi conduira à une erreur de modélisation de plus en plus grande. On a alors le choix d'utiliser des lois de paroi (mais qui ne sont pas toujours valides), ou des corrections bas Reynolds (avec les difficultés mentionnées en 3.2.1). On peut aussi changer de modèle : le modèle $k-\omega$ en particulier, dont la formulation de référence a été proposée dans [119], ainsi que sa version « Shear-Stress Transport » (SST) [89], sont généralement reconnus comme donnant de meilleurs résultats que le $k-\varepsilon$ pour les écoulements avec décollement de couche limite, et sont devenus également très populaires. Disposer de tels modèles dans TrioCFD est devenu un réel besoin pour nos applications [3].

Le modèle $k-\omega$ est également un modèle à deux équations : une équation de transport pour l'énergie cinétique turbulente k , et une équation de transport pour le taux de dissipation turbulente spécifique ω . Ce dernier se définit comme $\omega = \varepsilon / (k C_\mu)$, où $C_\mu = 0,09$ (ω^{-1} est donc une échelle de temps caractéristique de la turbulence). La viscosité turbulente devient donc $\nu_t = k / \omega$. Ce modèle peut être utilisé avec une loi de paroi, mais a aussi l'avantage de pouvoir être utilisé sur toute la couche limite sans correction supplémentaire, et s'apparente dans ce cas à un modèle bas Reynolds, car la grandeur ω se comporte asymptotiquement correctement à l'approche de la paroi (contrairement à ε). On n'a donc pas besoin de loi de paroi, mais d'un maillage suffisamment résolu en proche paroi ($y^+ = 1$ ⁶). De plus, ce modèle ne nécessite pas le calcul des distances à la paroi, comme le modèle de Lam-Bremhorst. Le modèle $k-\omega$ est également plus performant que le modèle $k-\varepsilon$ pour prédire les interactions en proche paroi. Il a cependant quelques défauts :

- convergence plus difficile qu'avec le $k-\varepsilon$;
- sensibilité plus grande aux conditions initiales et aux limites ;
- précision inférieure au $k-\varepsilon$ pour les écoulements libres.


Le modèle $k-\omega$ SST, proposé par Menter [89], est une association des deux modèles de turbulence en fonction de la distance à la paroi : en proche paroi, il se comporte comme le modèle $k-\omega$, et loin de la paroi comme le modèle $k-\varepsilon$, avec un raccordement lisse par le biais de fonctions en tangente hyperbolique. Il n'a de sens que s'il est utilisé en tant que modèle bas Reynolds : il combine alors les avantages de ces deux modèles en éliminant leurs inconvénients.

On propose donc de réaliser le travail suivant dans TrioCFD :

- Compléter l'implémentation du modèle $k-\omega$. Actuellement dans TrioCFD, il est disponible sous la forme d'un BALTIK, mais un travail de nettoyage des sources et de validation reste à réaliser afin de le rendre vraiment fonctionnel.
- Implémenter et valider le modèle $k-\omega$ SST.

Lot 2 : Modélisation de la turbulence

6. $y^+ = y^* u_\tau / \nu$ où y est la distance du premier point de maillage à la paroi, ν la viscosité cinématique et u_τ la vitesse de frottement ($u_\tau = \sqrt{\tau_p / \rho}$ avec τ_p la contrainte de cisaillement pariétale)

	Note Technique DEN		Page 35/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

Sous-Lot 2.1 : modèles de type RANS.	
Tâche 2.1.b Modèles $k-\omega$ et $k-\omega$ SST	
Tâches à réaliser	- compléter l'implémentation du modèle $k-\omega$ - implémenter et valider le modèle $k-\omega$ SST
Références	[119, 89]
Risques identifiés	Aucun
Conditionnement de l'action	Lot 2.1.a achevé
Charge de travail	Court terme


3.2.3 Modèles de tensions de Reynolds

Le code TrioCFD monophasique ne dispose pas à l'heure actuelle de modèles de tensions de Reynolds (RSM). Ces modèles ne sont pas basés sur une hypothèse de viscosité turbulente, mais sur des équations de transport des six composantes du tenseur de Reynolds. Ils permettent donc une représentation plus complète de la turbulence, au prix cependant d'un niveau de modélisation élevé et d'un coût de calcul important. Ils sont efficaces dans le cas d'écoulements tournants (effet de « swirl »), comme c'est le cas dans les assemblages de REP avec grilles de mélange, et présentent donc un intérêt évident pour nos applications. L'implémentation de tels modèles doit être envisagée, mais nécessite une phase bibliographique préliminaire et une évaluation plus approfondie des difficultés de mise en œuvre.

Lot 2 : Modélisation de la turbulence	
Sous-Lot 2.1 : modèles de type RANS.	
Tâche 2.1.c Modèles de tensions de Reynolds (RSM)	
Tâches à réaliser	- réaliser une étude bibliographique sur les modèles RSM - implémenter et valider un modèle RSM
Références	À rechercher
Risques identifiés	Difficultés de modélisation et de convergence
Conditionnement de l'action	Lot 2.1.a achevé
Charge de travail	Long terme

3.2.4 Production de turbulence liée à la poussée d'Archimède

Le modèle (k, ϵ) dit "réalisable" [108, 107, 109], a été développé dans TrioCFD courant 2018. Ce modèle permet une meilleure évaluation de la viscosité tourbillonnaire. Il repose sur les contraintes de positivité de la composante normale des tensions de Reynolds et l'inégalité de Schwartz pour les contraintes turbulentes transverses. Ce modèle propose une nouvelle formulation de la viscosité tourbillonnaire et une nouvelle équation du taux de dissipation, en se fondant sur l'équation dynamique des fluctuations de la vorticit  (et non de la vitesse, comme c'est le cas dans le modèle k -epsilon standard). La nouvelle équation du taux de dissipation a l'avantage d'être plus stable numériquement et le

	Note Technique DEN		Page 36/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

modèle réalisable fournit de meilleurs résultats sur de nombreux cas d'écoulement, lorsque l'effet de la rotation sur les tensions de Reynolds est important.


De la même manière que pour le modèle (k, ε) dit « réalisable », on souhaite pouvoir prendre en compte dans l'équation d'évolution du taux de dissipation turbulente ε l'effet des variations de densité liées au caractère anisotrope du fluide, que ce soit thermiquement ou dans sa composition, voire les deux à la fois.

Lot 2 : modélisation de la turbulence	
Sous-Lot 2.1 : modèles de type RANS.	
Tâche 2.1.d : Production de turbulence liée à la poussée d'Archimède : application au modèle (k, ε) réalisable	
Objectif	- améliorer la modélisation RANS de la turbulence anisotrope
Référence	[88, 116]
Tâches à réaliser	- implémentation - validation du modèle
Charge de travail	R&D moyen terme : action en cours

3.2.5 Modélisation RANS à partir de réseaux de neurones

Dans le domaine du calcul scientifique, les méthodes actuelles utilisant l'apprentissage machine (Machine Learning) sont aujourd'hui examinées pour modéliser des phénomènes complexes. Plus particulièrement, le travail envisagé porte sur l'apprentissage d'un modèle pour les tensions de Reynolds (généralisation de l'hypothèse de Boussinesq), et sur sa validation via son intégration dans TrioCFD. La mise en œuvre de la méthodologie a débuté par le biais de deux stages s'étant déroulés conjointement avec le LGLS courant 2019 et ayant conduit à des résultats très prometteurs. Nous avons utilisé des réseaux de neurones entraînés par apprentissage sur des calculs DNS de référence, en utilisant l'architecture neuronale proposée par Ling [86], qui permet notamment de prendre en compte des contraintes de nature physique sur le tenseur de Reynolds (par exemple, l'invariance galiléenne). Les DNS de référence menées avec TrioCFD sont celles du canal à section carrée et rectangulaire, qui sont des cas simples d'écoulement monophasique, mais on souhaite élargir ces bases d'apprentissage. L'action future concerne la poursuite de la mise en œuvre de l'apprentissage machine (hyper-paramètres, prétraitements et post-traitements des données) avec la bibliothèque TensorFlow, ainsi que la validation a posteriori des modèles générés par le réseau de neurones : il s'agira donc de les intégrer dans le code TrioCFD, puis de comparer les calculs RANS incluant ces modèles avec les DNS de référence.

Lot 2 : modélisation de la turbulence	
Sous-Lot 2.1 : modèles de type RANS.	
Tâche 2.1.e : Modélisation RANS à partir de réseaux de neurones	
Objectif	apprentissage d'un modèle pour les tensions de Reynolds
Référence	[86]
Tâches à réaliser	- implémentation - validation
Charge de travail	R&D moyen terme : action en cours

			Note Technique DEN	Page 37/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025				

3.3 La simulation des grandes échelles

L'idée maîtresse est d'identifier, par résolution directe, les caractéristiques de grande taille de l'écoulement en ne modélisant que des mouvements de petite taille. Une caractéristique très importante des méthodes LES est que la résolution spatiale dépend de la taille des mailles. Contrairement aux modèles en un point, la variation de la taille des mailles aura, tout le temps, une influence sur les résultats, même avec une discrétisation et une résolution numérique idéale. A la taille de la maille correspond un filtrage spatial dont il faut définir les caractéristiques. Pour simuler les phénomènes de taille inférieure à celle de la maille, il faut utiliser un modèle de sous-maille.

Les modèles de sous-mailles sont classiquement classés en deux catégories : les modèles fonctionnels et les modèles structurels.

- Les modèles fonctionnels reposent sur l'hypothèse essentielle que l'interaction entre les échelles résolues et les échelles modélisées est principalement de type énergétique. Ils cherchent ainsi à reproduire les transferts énergétiques entre les échelles résolues et les échelles modélisées. L'exemple le plus connu est le modèle de Smagorinsky. Le mécanisme de transfert direct d'énergie est supposé similaire à un mécanisme de diffusion piloté par une viscosité artificielle ou viscosité sous-maille, dont la formulation est donnée par l'expression de Boussinesq. Ce modèle est le plus couramment utilisé. Il est disponible dans TrioCFD. Un deuxième modèle fonctionnel (modèle de WALE) est disponible.
- Les modèles structurels ont quant à eux pour but de reproduire le plus fidèlement possible les composantes des termes sous-maille. Leurs méthodes de construction se basent sur différents principes de développement mathématique. Par exemple, les modèles de similarité d'échelles sont construits sur différents niveaux de filtrage parmi les échelles résolues. Plus récemment, des outils de mathématiques appliquées tels que les réseaux de neurones commencent à être utilisés. Aucun modèle structurel n'a été étudié jusqu'à présent par les équipes de développement de TrioCFD.


Remarque 2. *Les méthodes LES nécessitent l'emploi de méthodes numériques très précises, avec peu de viscosité numérique et dissipation.*

Plus spécifiquement à la composante VEF du code, les deux modèles de sous-maille suivants sont disponibles :

1. le modèle de SMAGORINSKY, dans sa version de base : il introduit une constante dont il faut ajuster la valeur à chaque configuration d'écoulement. Il présente les autres limitations principales suivantes : il n'a pas le bon comportement au voisinage des parois (viscosité turbulente non nulle), ne s'annule pas pour un écoulement laminaire, et est trop dissipatif dans les régions de transition laminaire/turbulent.
2. le modèle WALE⁷ [94] présente des avantages par rapport au modèle de Smagorinsky. En effet, sa viscosité turbulente tend à s'annuler au voisinage de la paroi. Il produit une viscosité turbulente nulle pour un écoulement laminaire, et est invariant par translation et rotation du système de coordonnées.

En LES, les modèles actuellement implémentés sont le modèle de Smagorinsky standard [110] et le modèle WALE [95]. Ces deux modèles sont de nature statique : la viscosité turbulente sous-maille est égale à une constante multipliée par le carré de la taille de maille et par une fonction de l'écoulement moyen. L'idée des modèles dynamiques est d'adapter la « constante » à la structure locale de l'écoulement et à la géométrie, en la rendant variable en espace et en temps.

7. Wall-adapting local eddy-viscosity model.

		Note Technique DEN	Page 38/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			


Germano [58] et Lilly [85] ont proposé des procédures à cette fin, donnant naissance au modèle de Smagorinsky dynamique. Ce modèle conduit à des prédictions plus physiques de l'écoulement en palliant en partie les limitations bien connues du modèle de Smagorinsky standard (mauvais comportement asymptotique de la viscosité turbulente au voisinage des parois, pas d'annulation de la viscosité turbulente pour un écoulement laminaire, forte dissipation dans les régions de transition laminaire/turbulent).

On propose les réalisations suivantes :

1. Analyses comparatives des modèles de SMAGORINSKY et WALE sur des configurations d'assemblages combustibles, des zones de décollement, avec des maillages quelconques.
2. Modélisation fonctionnelle : implémentation d'un modèle de SMAGORINSKY dynamique, selon la procédure Germano-Lilly [57]. Il s'agit d'une adaptation du modèle de Smagorinsky par un ajustement automatique de la constante en chaque point et à chaque pas de temps. Cela permet de mieux adapter le modèle à la structure locale de l'écoulement.
3. Mise en œuvre et étude comparative d'une méthode récente de LES, dite "Entropy Viscosity Method", [69, 60, 118], dans laquelle le coefficient de viscosité turbulente est proportionnel au défaut de bilan discret d'énergie (obtenu en prenant le produit scalaire de l'équation de quantité de mouvement discrète par le champ de vitesse) localement en chaque maille. C'est une méthode qui dissipe moins d'énergie que la méthode de SMAGORINSKY dans les zones bien résolues, puisque dans celles-ci le bilan discret d'énergie est quasiment nul.

La réalisation de simulations LES se heurte à une difficulté concernant la création du maillage. En effet, celui-ci doit vérifier certains critères qui dépendent de la solution à calculer. Par exemple, la taille des mailles est fonction de l'échelle de Kolmogorov (plus petite échelle dissipative de l'écoulement). Dans le cadre d'études réalistes pour lesquelles on ne connaît pas la solution a priori, il est nécessaire de réaliser une étude préalable (qui repose souvent sur des calculs RANS) pour construire le maillage adapté à la LES.

Lot 2 : modélisation de la turbulence	
Sous-Lot 2.2 : modèles de sous-maille.	
Tâche 2.2.a Comparaison des modèles SMAGORINSKY, WALE et Entropy Viscosity Method	
Objectif	- se réapproprier et valider sur des maillages quelconques les modèles de sous-maille existants et les comparer à un nouveau modèle
Référence	[69, 60, 118] et autres à définir
Tâches à réaliser	<ul style="list-style-type: none"> - Mise en œuvre du modèle "Entropy Viscosity Method" ; - simulations LES avec les trois modèles SMAGORINSKY et WALE et Entropy Viscosity Method sur différentes configurations, intégrant des calculs de Turbulence Homogène Isotrope ; - développement des post-traitements nécessaires pour calculer des spectres en espace ; - révision des sources du code pour vérification de l'implémentation informatique et des schémas numériques utilisés. - tests de Turbulence Homogène Isotrope avec construction des spectres en espace ; - définition d'une base de tests pertinents pour les applications en lien avec les réacteurs ;
Charge de travail	R&D moyen terme
Tâche 2.2.b Méthodologie de création des maillages adaptés à la LES	
Objectif	- développer une méthodologie pour construire les maillages adaptés aux contraintes de l'approche LES
Référence	à définir

	Note Technique DEN	Page 39/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

Tâches à réaliser	Réalisation des fiches de validation
Charge de travail	R&D moyen terme
Tâche 2.2.c Modèle de SMAGORINSKY dynamique	
Objectif	-améliorer le modèle de SMAGORINSKY
Référence	[57] et autres à définir
Tâches à réaliser	- implémentation du modèle de SMAGORINSKY dynamique
Charge de travail	R&D moyen terme

4 Nouveaux schémas de discrétisation spatiale

4.1 Schémas d'ordre élevé pour les polyèdres quelconques

4.1.1 Introduction

Pour la simulation de régimes turbulents, il est souhaitable de se servir d'un schéma d'ordre élevé afin de mieux capturer les tourbillons. De plus, pour le problème de Stokes, il a été montré dans [56] que la montée en ordre permet de réduire l'erreur de consistance, et ainsi de mieux satisfaire la contrainte de divergence nulle en réduisant le nombre de modes parasites pour la vitesse. Pour modéliser plus finement les écoulements en proche paroi, il faudrait également utiliser un maillage constitué de prismes près de la paroi, et de tétraèdres au centre de l'écoulement. Ainsi, il serait judicieux de disposer d'un schéma numérique d'ordre élevé, adapté aux maillages polygonaux (polyédriques en 3D). De nombreuses méthodes de Galerkin discontinues sont disponibles pour implémenter un tel schéma [71].


Quels que soient les schémas envisagés, les étapes d'évaluation sont les suivantes :

- Implémenter l'algorithme sur une maquette indépendante du code TrioCFD.
- Analyser l'intégration dans le code TrioCFD.
- Industrialiser le schéma selon son périmètre d'utilisation.

Afin de qualifier rigoureusement les nouveaux développements, il est nécessaire de les tester de façon précise sur des cas académiques. Ainsi, il faudrait disposer dans la base logicielle TRUST d'un solveur réellement stationnaire ; et de schémas de résolution de problèmes non linéaires. Cela permettrait a minima de discerner les différentes sources d'erreurs. Il faut donc :

- Disposer de solveurs linéaires pour matrices de type $BA^{-1}B^T$, avec une matrice A non nécessairement diagonale.
- Disposer de solveurs non linéaires de type algorithmes de Newton.
- Disposer d'une architecture de code souple, permettant d'autres schémas que l'algorithme prédiction-correction.

Le solveur PolyMAC [59] propose un schéma d'ordre 1 adapté aux maillages polyédriques. L'intégration de ce solveur à la plateforme TRUST est prévue pour fin 2019. Le modèle de données de ce solveur pourra être utilisé pour l'implémentation d'une méthode d'ordre élevé sur maillages polyédriques, ce qui nécessitera une étape de formation à ce nouvel outil.

	Note Technique DEN		Page 40/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019		Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

4.1.2 Schémas VEM et HHO

Nous proposons une montée en compétence progressive, en commençant par coder les éléments finis de Taylor-Hood d'ordre 2, tels que $(\vec{u}_h, p_h) \in \vec{P}_2 \times P_1$, ce qui permettrait de disposer un solveur d'ordre 2 de référence pour les développements plus complexes ; et serait utile pour les travaux concernant les éléments finis multiéchelle. En terme de nombre d'inconnues, ces éléments sont aussi coûteux que les éléments finis $\vec{P}_1^{NC} \times (P_0 + P_1)$ codés dans TrioCFD et fortement employés par nos utilisateurs.

Puis nous prévoyons d'implémenter la méthode de Galerkin discontinue SIPG pour des polynômes d'ordre 1 et 2, tels que $(\vec{u}_h, p_h) \in \vec{P}_k^{disc} \times P_{k-1}^{disc}$, sur maillages de simplexes, avant de passer aux maillages généraux. Parallèlement, il est important d'étudier les méthodes modernes VEM [8] et HHO [100] associées aux logiciels académiques Vem++ (F. Dassi, Milan) ou Disk++ [35]. L'ouvrage [27] fournit des références et indique des directions à suivre pour une implémentation efficace.


Lot 3 : Nouveaux schémas de discrétisation spatiale	
Sous-Lot 3.1 : Schéma d'ordre élevé pour les polyèdres quelconques	
Tâche 3.1.a : Schémas VEM et HHO	
Objectif	Montée en ordre de précision
étapes	Bibliographie, tester les logiciels académiques. Implémenter une méthode DG dans une maquette. Organiser le code pour le calcul parallèle. Stokes 2D puis 3D puis Osen puis Navier-Stokes. Etudier l'intégration dans TrioCFD. Décider de l'industrialisation.
Références	Méthodes VEM [8] et HHO [100]
Risques	travail de recherche, complexité de la mise en œuvre informatique dans un code existant
Prérequis	Architecture de code souple. Résolution de systèmes linéaires par blocs. Parallélisme hybride. Méthode d'intégration numériques sophistiquées (tesselation).
Charge de travail	R&D long terme.

4.1.3 Autres schémas

Dans ce paragraphe, on fait une liste bibliographique non-exhaustive de schémas numériques récents pour résoudre le problème de Stokes sur lesquels il n'est pas prévu de travailler à ce stade sur la période 2020-2025. Idéalement, il faudrait disposer d'une architecture de code suffisamment souple pour qualifier rapidement ces schémas sur un certain nombre de cas-tests représentatifs.

A stable enriched Galerkin element for the Stokes problem [29]

L'espace des vitesses de la discrétisation $\vec{P}_1 - P_0$ est enrichi en ajoutant les fonctions \vec{P}_0 de sorte que $(\vec{u}_h, p_h) \in (\vec{P}_1 + \vec{P}_0) \times P_0$. La formulation variationnelle est stabilisée par une pénalisation des sauts de la partie \vec{P}_0 de

	Note Technique DEN		Page 41/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

la vitesse.

A finite element method by patch reconstruction for the Stokes problem using mixed formulation [84].

Les auteurs utilisent une méthode des moindres carrés pour reconstruire une solution d'ordre élevé patch par patch, à partir d'une approximation P_0 sur les éléments. La méthode s'applique à des maillages polygonaux.

A Divergence Free Weak Virtual Element Method for the Stokes Problem on Polytopal Meshes [31]

La pression est approchée par des éléments finis discontinus et la vitesse est discrétisée par des éléments finis virtuels conformes dans $\vec{H}(\text{div})$. Cette méthode permet de calculer une vitesse discrète à divergence nulle. L'estimation d'erreur sur la vitesse est alors indépendante de l'estimation d'erreur sur la pression. La méthode est adaptée à une discrétisation d'ordre élevé sur maillages généraux.

D'autres méthodes plus anciennes pourraient présenter un intérêt pour obtenir un schéma numérique économique en terme d'empreinte mémoire :

A stable finite element for the Stokes equations [9]

La vitesse est discrétisée avec les éléments finis \vec{P}_1 enrichis par des bulles volumiques $\vec{P}_{BV}|_T = \{\prod_{i=1}^{d+1} \lambda_{i,T}\}^d$ et la pression est discrétisée avec les éléments finis P_1 , de sorte que $(\vec{u}_h, p_h) \in (\vec{P}_1 + \vec{P}_{BV}) \times P_1$. Ainsi, cette méthode est économe en nombre d'inconnues. La conservation de la masse n'est pas locale, mais cela peut être amélioré par des techniques de post-traitement, comme indiqué dans [74]. Ces éléments finis sont appelés les *mini-éléments*.

Analysis of some finite elements for the Stokes problem [18]


La vitesse est discrétisée avec les éléments finis \vec{P}_1 enrichis par des bulles surfaciques $\vec{P}_{BF}|_F = \{\prod_{i=1}^d \lambda_{i,F}\}^d$ et la pression est discrétisée avec les éléments finis P_1 , de sorte que $(\vec{u}_h, p_h) \in (\vec{P}_1 + \vec{P}_{BF}) \times P_1$. Cette méthode est économe en nombre d'inconnues (plus que la méthode précitée). La conservation de la masse n'est pas locale, mais cela peut être amélioré par des techniques de post-traitement, comme indiqué dans [74]. Ces éléments finis sont appelés les *éléments finis de Bernardi-Raugel*.

4.1.4 Nombre d'inconnues

On donne le nombre approximatif d'inconnues en dimension 2 et 3 pour les schémas sur simplexes, N_T représentant le nombre de simplexes du maillage. Dans la dernière colonne, on indique si on peut remplacer la matrice de masse de la vitesse par une matrice de masse diagonale.

Eléments finis	(\vec{u}_h, p_h)	2D	3D	M_{diag}
Stabilisés	$\vec{P}_1 \times P_0$ stabilisés	$2N_T$	$1.5N_T$	oui
Bernardi-Raugel	$(\vec{P}_1 + \vec{P}_{BF}) \times P_1$	$3.5N_T$	$4N_T$?
Mini	$(\vec{P}_1 + \vec{P}_{BV}) \times P_1$	$3.5N_T$	$4.3N_T$?
Enrichis	$(\vec{P}_1 + P_0) \times P_1$	$4N_T$	$5N_T$?
Crouzeix-Raviart	$\vec{P}_1^{NC} \times P_0$	$4N_T$	$7N_T$	oui
Taylor-Hood	$\vec{P}_2 \times P_1$	$4.5N_T$	$7N_T$	non
TrioCFD	$\vec{P}_1^{NC} \times (P_1 + P_0)$	$4.5N_T$	$7.3N_T$	oui

TABLE 26 – Nombre approximatif d'inconnues.

			Note Technique DEN	Page 42/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025				

4.2 Modélisation précise des milieux encombrés

4.2.1 Rappel de l'objectif : calcul "CFD" d'une cuve complète de REP

La simulation de l'écoulement du fluide caloporteur dans l'ensemble du circuit primaire avec une approche CFD est aujourd'hui irréalisable avec les moyens de calcul actuels. Néanmoins, on peut calculer précisément la solution du système fluide en isolant un volume du circuit primaire, typiquement le plénum inférieur ou le plénum supérieur. La limite principale concerne le calcul de l'écoulement dans le cœur, composé de nombreux assemblages, eux-mêmes constitués d'un grand nombre de crayons combustibles. L'objectif est de mettre en œuvre une modélisation de la cuve complète avec la précision la plus fine possible, à savoir une approche CFD pour le domaine complet, à l'exception du cœur pour lequel on mettra en œuvre une nouvelle modélisation [22].

à ce jour, les méthodes développées au STMF pour modéliser la thermohydraulique du cœur sont basées sur les équations d'Euler, complétées par une modélisation homogène des structures solides, c'est-à-dire par un modèle poreux et des pertes de charges directionnelles : on mentionnera par exemple

- l'approche en maillage structuré développée pour le cœur d'ASTRID où la section de passage axiale de chaque sous-canal d'un assemblage est traitée avec six mailles et les effets des crayons sur l'écoulement sont pris en compte par des corrélations empiriques issues d'expériences ;
- l'approche à l'échelle composant pour les cœurs de REP où le maillage ne suit ni la géométrie des sous-canaux ni celle des assemblages, qui permet de simuler l'écoulement du fluide caloporteur à l'échelle de l'assemblage ou du sous-canal. Même à l'échelle sous-canal, il est alors difficile de prendre en compte la complexité des écoulements transverses et le niveau de modélisation reste très grossier.

L'objectif long terme est de développer un modèle cœur beaucoup plus précis que ceux mentionnés ci-dessus.


4.2.2 Mise en œuvre d'une méthode multiéchelles

Le travail a commencé dans le cadre d'une thèse([49]) consacrée à la mise en œuvre d'une méthode basée sur les éléments finis multiéchelles [1, 46, 65].

Dans cette approche, le nombre de degrés de liberté à calculer est comparable à celui issu des méthodes d'homogénéisation, ce qui rend les temps de calcul accessibles. Les informations locales (présence ou absence d'obstacles solides) sont prises en compte au travers des fonctions de base qui doivent être calculées et qui contiennent, entre autres, les informations géométriques du milieu considéré. Cette approche est souvent appliquée pour les milieux poreux naturels en ingénierie pétrolière. Le principe de la méthode est, sur un maillage à l'échelle grossière, d'écrire une formulation de Galerkin sur l'espace engendré par les fonctions de base locales, celles-ci résolvant un problème similaire avec des conditions aux limites particulières, sur un sous-maillage fin prenant en compte la géométrie précise des obstacles.

Des travaux existent sur des milieux dits "perforés" [34], c'est-à-dire qui tiennent compte d'inclusions solides dans lesquelles l'écoulement n'est pas considéré. Néanmoins, à ce jour, peu de littérature existe sur une application de type écoulements dans les cœurs des réacteurs qui peuvent s'apparenter à un "milieu perforé".

Des résultats encourageants ont été obtenus dans le cadre de la thèse de Q. Feng. Des gains de temps de calcul importants ont été observés avec des pertes de précision limitées à une dizaine de pourcents par rapport à des calculs DNS sur le maillage issu de la réunion de tous les maillages fins des cellules grossières ; par ailleurs, des

	Note Technique DEN		Page 43/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

calculs trop coûteux en DNS ont pu être menés à bien avec cette approche. Un programme de travail pluriannuel, en collaboration avec le monde académique (G. Allaire), est en cours de définition pour poursuivre cette action. Quatre points principaux sont à développer :

- L'enrichissement de l'espace des fonctions de base locales par des fonctions d'ordre plus élevé, et le calcul précis de celles-ci, éventuellement par des méthodes d'éléments finis d'ordre plus élevé également sur les maillages fins : analyse théorique, implémentation et estimation du gain effectif.
- L'extension de la méthodologie au calcul de cas-tests instationnaires.
- La réalisation d'un ensemble de cas-tests plus complets en trois dimensions d'espace ; se pose en particulier une question délicate d'intersection et d'absence de tangence entre les cellules grossières et les obstacles, en sorte que les domaines ainsi obtenus restent connexes et facilement maillables.
- L'optimisation de l'ensemble de la chaîne de calculs dans le but d'industrialiser cette approche : génération du maillage grossier ; génération des sous-maillages fins prenant en compte les obstacles ; calculs de fonctions de base sur ces maillages fins ; assemblage et résolution du problème sur le maillage grossier à l'aide des fonctions de base calculées ; post-traitement de la solution ainsi obtenue.


Lot 3 : Nouveaux schémas de discrétisation spatiale	
Sous-Lots 3.2 : Modélisation fine des écoulements en milieux encombrés	
Tâche 3.2.a : éléments finis multiéchelles	
Objectif	Développer une modélisation intermédiaire entre la CFD et la modélisation à l'échelle composant
Références	[72, 92, 49]
Tâches à réaliser	R&D et travail de thèse
Risques identifiés	complexité de la mise en œuvre informatique dans un code existant
Charge de travail	R&D long terme

5 Maillage adaptatif, HPC et QI

5.1 Estimateurs d'erreurs *a posteriori*

5.1.1 Description de la méthode

Des progrès significatifs dans le domaine de la simulation en général passeront par la quantification des incertitudes associées aux résultats de simulation. Un préalable (mais ce n'est pas le seul) à la maîtrise des incertitudes est la quantification de l'erreur entre la solution numérique et la solution exacte. L'estimation de cette erreur contribue également à la mise en œuvre de méthodes adaptatives, qui permettent d'optimiser le rapport "précision / coût" en adaptant localement la finesse du maillage, ainsi que le pas de temps, en fonction des caractéristiques de la solution.

	Note Technique DEN		Page 44/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

Les théories disponibles pour quantifier l'erreur sont très inégalement avancées selon les schémas numériques concernés. La discrétisation par éléments finis a l'avantage de mettre à disposition de nombreux outils théoriques et pratiques pour obtenir des estimations d'erreurs *a priori* et *a posteriori*.

Les estimations d'erreurs *a priori* permettent de déterminer si la solution numérique issue d'une discrétisation converge vers la solution continue (qui en général ne peut pas être estimée analytiquement), et surtout à quelle vitesse, ceci en fonction de la qualité de l'approximation (typiquement du degré des polynômes pour une méthode d'éléments finis) et de la régularité de la solution. Ces méthodes permettent donc de déterminer un ordre de convergence mais ne donnent pas accès à l'erreur effective sur un maillage donné. De telles estimations sont qualifiées d'*a priori* car elles ne dépendent pas de la solution approchée calculée.

A contrario, les estimations d'erreurs *a posteriori*, basées sur la solution discrète obtenue, permettent de majorer l'erreur de discrétisation de façon explicite par des quantités locales et calculables à partir de la solution discrète approchée calculée ; ainsi il est possible d'adapter la discrétisation (raffinement local du maillage, pas de temps adaptatif, éventuellement degré des polynômes) pour réduire l'erreur globale. La théorie des estimations *a posteriori* fait partie des outils mathématiques qui permettent de donner des indications sur une stratégie optimale d'amélioration des résultats (au sens du meilleur rapport précision / coût du calcul) si la précision recherchée n'est pas atteinte par le calcul qui vient d'être effectué.


Supposons par exemple que le modèle continu revienne à résoudre un système d'équations, d'inconnues $U : M(U) = 0$ et que son approximation numérique revienne à résoudre un système approché, d'inconnues $U_h : M_h(U_h) = 0$, la théorie des estimations *a posteriori*, dont on peut faire remonter l'origine aux travaux de Babuska et Rheinboldt [11, 10], peut répondre (au moins partiellement) aux souhaits formulés ci-dessus. En effet, ce type d'estimation est en général une majoration de l'erreur du type $\|U - U_h\| \leq E(U_h, \mathcal{T}_h, f)$, où E est une expression entièrement calculable qui dépend de la solution calculée U_h (mais jamais de la solution exacte U), du maillage \mathcal{T}_h (maillage espace-temps pour les problèmes instationnaires), et des données f du problème (termes sources, conditions aux limites, conditions initiales, coefficients des équations...), toutes choses qui sont connues une fois le calcul effectué (d'où le nom d'estimations *a posteriori*). Plus encore, l'estimateur E est en général une somme de contributions locales (maille par maille) et, dans les travaux les plus récents, permettant de distinguer différentes sources d'erreurs (discrétisation spatiale, discrétisation temporelle, résolution approchée de systèmes non-linéaires...), ce qui permet de savoir où faire porter l'effort supplémentaire (adaptation du maillage et/ou du pas de temps, meilleure résolution du système non-linéaire...) en cas de précision insuffisante du calcul.

Remarque 3. Si l'on ne sait pas estimer correctement les erreurs numériques dans un solveur déterministe, il peut être difficile, voire impossible d'interpréter la propagation des incertitudes dans ce solveur, en raison de la dépendance de la précision du solveur aux données. Il est donc crucial de passer du temps à établir ces estimations d'erreur, et de déterminer comment elles influencent la propagation des incertitudes.

5.1.2 Dans TrioCFD

La R&D proposée ici sur les estimateurs d'erreurs concernera principalement les estimateurs *a posteriori* et portera sur les schémas numériques développés dans TrioCFD.

Lot 4 : Maillage adaptatif, HPC et QI
Sous-Lot 4.1 : estimations d'erreurs <i>a posteriori</i>
Tâche 4.1.a : analyses théoriques

	Note Technique DEN	Page 45/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

Objectif	Développer une méthode d'estimation d'erreur <i>a posteriori</i> exploitable en vue de la mise en oeuvre d'une méthode adaptative dans TrioCFD
Références	[117, 41, 28]
Tâches à réaliser	Obtenir un estimateur et l'adapter selon la discrétisation et le modèle.
Risques identifiés	Les estimateurs dépendent des modèles physiques et des méthodes numériques. En cas de changement de ceux-ci, les estimateurs doivent être changés.
Charge de travail	R&D moyen terme
Tâche 4.2.b : mise en œuvre	
Objectif	Mettre en œuvre un estimateur d'erreur <i>a posteriori</i> en vue de simulations adaptatives dans TrioCFD
Références	
Tâches à réaliser	Implémentation des différents termes des estimateurs
Risques identifiés	Une fois que l'estimateur a déterminé quelles zones du maillage sont à raffiner prioritairement, une phase de remaillage est nécessaire si l'on souhaite améliorer la qualité de la solution, et un nouveau calcul doit être exécuté sur ce nouveau maillage. Un couplage itératif avec un logiciel de maillage est donc nécessaire. Dans le cas de problèmes instationnaires, des changements de maillage <i>en cours</i> de calcul sont nécessaires, ce qui complique le processus.
Conditionnement de l'action	Lot 4.2.b achevé
Charge de travail	R&D moyen terme

Remarque 4. Cette action est engagée par P. Omnes via le co-encadrement de la thèse de G. Nassreddine (démarrée en octobre 2017, financée intégralement par l'Université Paris 13), en co-direction avec Toni Sayah (Université Saint-Joseph de Beyrouth, Liban). Il s'agit de prendre en compte deux sources d'erreur dans les estimations *a posteriori* pour Navier-Stokes incompressible : celle liée à la discrétisation (spatiale et temporelle), et celle liée à l'ajout du modèle de turbulence, en deux dimensions puis en trois dimensions.


Remarque 5. L'implémentation d'un estimateur *a posteriori* pour les équations de Navier-Stokes stationnaires est prévue en 2019 ; l'ajout du terme lié à la dépendance temporelle et de celui lié au modèle de turbulence est prévu pour 2020.

5.2 Décomposition de domaine

Un effort important portera sur l'implémentation d'une méthode de décomposition de domaine dans TrioCFD. L'objectif visé est double : (i) l'amélioration des performances du code et (ii) la mise en œuvre d'une méthode de parallélisme hybride adaptée aux futures architectures des ordinateurs.

Après avoir rappelé les principes généraux des méthodes de Décomposition de Domaine (DD), on propose deux actions concernant :

- la mise en œuvre d'une méthode de DD en espace pour la résolution de grands systèmes linéaires,
- une méthode de DD en espace-temps.

	Note Technique DEN		Page 46/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

5.2.1 Rappels sur les méthodes de DD

Les méthodes de DD constituent un outil intéressant pour les simulations mettant en œuvre un grand nombre de degrés de liberté. Le principe général est rappelé ici, à partir des références [16] et [36].

On entend par DD la décomposition de l'espace vectoriel dans lequel on cherche la solution d'une équation aux dérivées partielles (EDP) en la somme d'espaces vectoriels de cardinal plus petit, dans lesquels la solution est plus facile à trouver. La solution de l'EDP initiale est donnée par la composition de l'ensemble des solutions partielles. En d'autres termes, l'idée de base consiste à séparer un grand problème en petits sous-problèmes qui peuvent être traités en parallèle. C'est une forme de parallélisme. Ce formalisme permet

- de traiter des phénomènes physiques de plus en plus compliqués modélisés par des EDP,
- de traiter des problèmes de plus grande taille,
- d'accélérer la méthode et d'obtenir une solution plus rapidement pour les simulations qui tournent déjà hors formalisme DD.

L'efficacité d'une méthode de DD dépend directement de la méthode utilisée pour décomposer le domaine. Il existe un large spectre d'algorithmes de DD selon le type du problème à résoudre (linéaire, non-linéaire, hyperbolique, elliptique,...). Différents niveaux de parallélismes peuvent être considérés. Nous en considérons trois dans le présent plan de développement :


- le parallélisme en espace basé sur la méthode de Schwarz à chaque pas de temps,
- le parallélisme en espace-temps connu sous le nom de relaxation d'ondes,
- le parallélisme en temps, connu sous le nom d'algorithme pararéel.

Remarque 6. La méthode de DD en espace-temps est déjà en cours d'étude, avec une thèse qui a commencée en octobre 2016 et financée par le projet ANR CINEPARA. Des travaux préliminaires ont également été réalisés à l'occasion du CEMRACS 2016.

5.2.2 DD en espace à chaque pas de temps

Dans TrioCFD, on doit à chaque pas de temps résoudre un problème en espace, dont la discrétisation mène à des systèmes linéaires de grande taille. On résout ces derniers par des méthodes itératives (de type Gradient conjugué, GMRES, ...). La vitesse de convergence de ces méthodes itératives est liée au conditionnement du système linéaire, qui se dégrade rapidement lorsque le pas du maillage devient petit ; ceci a pour conséquence que le nombre d'itérations des solveurs itératifs augmente avec le nombre d'inconnues.

Le parallélisme actuel de TrioCFD est une forme de décomposition de domaine, au sens où les tâches à faire pour calculer les différents éléments de la matrice finale sont réparties sur différents processeurs. Néanmoins, in fine on résout un système ayant la taille du problème global. Répartir ainsi le travail des méthodes itératives en le partageant entre différents sous-domaines est certes utile mais ne résout pas le problème du mauvais conditionnement et du nombre d'itérations nécessaires à obtenir la convergence des méthodes itératives. En outre, on peut montrer que les méthodes de décomposition de domaine de type Schwarz avec ou sans recouvrement des sous-domaines jouent un rôle de préconditionneur permettant de limiter l'augmentation (lorsque le pas du maillage décroît) du nombre d'itérations nécessaires pour obtenir leur convergence. Ceci est d'autant plus vrai que l'on utilise des conditions de transmission d'ordre élevé, des coefficients optimisés à l'intérieur de celles-ci et une reformulation portant sur les

		Note Technique DEN	Page 47/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

seules inconnues d'interface. Un autre avantage est que les méthodes de DD permettent d'augmenter la mémoire distribuée disponible pour les simulations.

Cette action consiste à mettre en œuvre dans TrioCFD une méthode de type Schwarz pour la résolution d'une équation linéaire de type elliptique typique de celle de TrioCFD (étape de projection pour le calcul de la pression). La validation de la méthode reposera sur la résolution de grands problèmes et une comparaison avec les performances obtenues par appel à la librairie PETSC.


Remarque 7. Notons deux exemples de mises en œuvre d'une méthode DD dans les codes "maison" :

- le code de neutronique déterministe du CEA (APOLLO3) possède son propre solveur de systèmes linéaires basé sur une méthode de Schwarz ;
- comme mentionné dans son mémoire de HDR, M. Belliard a développé une méthode de DD de type Schwarz pour la résolution d'un problème elliptique (étape de projection du code GENEPI). Il a obtenu un gain significatif [16].

Lot 4 : Maillage adaptatif, HPC et QI	
Sous-Lot 4.2 : décomposition de domaine	
Tâche 4.2.a : méthode de Schwarz pour la résolution de systèmes linéaires	
Objectif	Disposer dans le code d'une méthode pour la résolution des systèmes linéaires de grande taille, comme alternative aux solveurs de PETSC actuellement utilisés.
Références	[16] et autres à préciser
Tâches à réaliser	- étude bibliographique ; - implémentation informatique et validation ;
Risques identifiés	La marge de progrès par rapport aux solveurs linéaires de PETSC n'est pas évidente à prévoir
Charge de travail	R&D moyen terme

5.2.3 DD en espace-temps

Pour des problèmes instationnaires, la dimension temporelle peut jouer un rôle important : au lieu de faire des itérations de Schwarz à tous les pas de temps, certaines méthodes dites de relaxation d'ondes (OSWR pour "Optimized Schwarz Waveform Relaxation") permettent de ne faire des échanges entre processeurs qu'à la fin des itérations temporelles : au lieu de faire N (nombre de pas de temps) fois des communications de taille P (nombre d'inconnues d'interfaces), on fait une seule fois des communications de taille $N \times P$, ce qui est nettement meilleur, à la fois parce qu'une seule synchronisation des processeurs est nécessaire, mais aussi parce qu'il est plus rapide d'effectuer une fois des communications de taille $N \times P$ que N fois des communications de taille P. De telles méthodes ont montré leur intérêt sur des problèmes d'écoulements régis par les équations de convection - diffusion [73].

		Note Technique DEN	Page 48/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

5.2.4 DD en temps

Par ailleurs, lorsque le "budget processeurs" n'est pas encore complètement dépensé par la parallélisation en espace (le nombre d'inconnues par processeur devenant trop faible et les communications prenant de ce fait un temps excessif par rapport aux calculs eux-mêmes), il existe des méthodes de parallélisation en temps qui permettent (sur certains problèmes en tout cas) de consommer de façon plus optimale ce budget supplémentaire : citons par exemple l'algorithme pararéel qui permet d'accélérer les calculs en utilisant un système prédicteur (sur grille temporelle – et éventuellement spatiale – grossière(s) et/ou avec un modèle plus simple), calculé séquentiellement (mais rapide d'exécution), puis correcteur calculé en parallèle avec toute la précision (temporelle, spatiale et de modèle) souhaitée.

Un travail de R&D "amont" est nécessaire. Les difficultés à traiter sont décrites dans la section suivante.

5.2.5 Travail théorique


On peut distinguer quatre niveaux de difficultés :

- on peut tout d'abord s'intéresser à l'approche la plus basique : Schwarz optimisé à chaque pas de temps pour l'équation sur la vitesse U^* , puis sur le Laplacien de pression à l'étape de projection.
- OSWR pour Stokes et Navier-Stokes : ce travail a été commencé au CEMRACS pour Stokes puis dans la thèse de Duc Quang Bui : les coefficients optimaux pour les conditions de transmission de Robin ont été obtenus en 2D d'espace ; il faut généraliser au 3D et au non-linéaire. Un aspect probablement très important est de savoir analyser ce qui se passe lorsque le Reynolds augmente.
- Utilisation de la méthode pararéelle seule pour Navier-Stokes : il existe quelques expériences dans la littérature [50, 112] ; il semble que des difficultés apparaissent à nombre de Reynolds élevé car le problème devient essentiellement convectif.
- Couplage avec le pararéel : il s'agit d'utiliser OSWR (avec peu d'itérations) comme solveur sur la grille temporelle fine et d'étudier quel est le meilleur compromis entre nombre d'itérations du pararéel et nombre d'itérations d'OSWR à l'intérieur des itérations de pararéel. Quelques publications traitent de ce problème dans d'autres contextes que celui de Navier-Stokes [64, 55]. Des essais pour Stokes sont en cours dans le cadre de la thèse de D.Q. Bui.

Mise en œuvre informatique La mise en œuvre informatique des méthodes ci-dessus citées sera très intrusive dans le code. Un bon moyen de procéder pourrait être de travailler d'abord dans une "maquette" pour isoler les choix les plus pertinents⁸ en s'affranchissant de la complexité informatique. Ensuite, un travail d'implémentation sera réalisé dans le code, sachant que la difficulté identifiée dès à présent est la suivante : la DD est reformulée comme un problème d'interface où les inconnues sur lesquelles on itère sont les seules inconnues aux interfaces entre les sous-domaines. Ainsi, au cours des itérations, on doit résoudre des petits problèmes locaux dans chacun des sous-domaines, qu'il s'agit ensuite de post-traiter.

Lot 4 : Maillage adaptatif, HPC et QI
Sous-Lot 4.2 : décomposition de domaine
Tâche 4.2.b. Travail théorique décrit en section 5.2.5.

8. On pourra se rapprocher de M. Belliard qui a développé sa propre maquette pour ses travaux en lien avec GENEPI.

	Note Technique DEN	Page 49/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

Objectif	Améliorer les performances du code
Références	[73, 55, 64, 50, 112]
Tâches à réaliser	analyse théorique
Risques identifiés	travail de recherche
Charge de travail	R&D long terme
Tâche 4.2.c. Programmation.	
Remarque	Tâche qui peut être divisée en plusieurs autres sous-tâches (à préciser ultérieurement)
Tâches à réaliser	- mise en œuvre informatique
Risques identifiés	travail de recherche
Conditionnement de l'action	Lot 4.2.b achevé
Charge de travail	R&D long terme

5.3 Analyse de sensibilité


L'analyse de sensibilité concerne la quantification des changements dans la solution d'un système d'équations aux dérivées partielles (EDP) dus aux variations des paramètres d'entrée du modèle [33, 45, 25, 66, 115]. Ce travail est le sujet du post-doctorat de C.Fiorini, commencé le 15 octobre 2018, et qui consiste à appliquer l'analyse de sensibilité aux problèmes de Navier-Stokes, en suivant deux axes, à savoir :

- dérivation du système d'équations par rapport aux paramètres d'entrée (par exemple conditions aux limites, propriétés physiques du fluide comme la viscosité) par rapport auxquels il est souhaitable de réaliser des études de sensibilité
- discrétisation des problèmes ainsi dérivés et résolution.

5.3.1 état d'avancement en 2019

Dans un premier temps nous avons écrit les équations de sensibilité en utilisant la méthode d'équation de sensibilité continue. Nous avons étudié la stabilité du système ainsi obtenu. Ensuite, le système de sensibilité a été discrétisé selon la méthode de type volumes éléments finis. La mise en œuvre de ce schéma dans le code de calcul TrioCFD a été réalisée pour le cas où le paramètre d'intérêt est l'amplitude de la vitesse en entrée. La mise en œuvre dans le cas où le paramètre d'intérêt est la viscosité du fluide est en cours. Les objectifs à court terme sont d'analyser les résultats des simulations et d'établir l'influence des paramètres sur la sortie du modèle. Un article est en cours de rédaction. Dans un second temps, une extension de ces travaux afin de considérer le couplage avec la température est prévue.

Lot 4 : Maillage adaptatif, HPC et QI	
Sous-Lot 4.3 : Analyse de sensibilité	
Tâche 4.3.a. : écoulement laminaire	
Objectif	établir l'influence des paramètres sur la sortie du modèle
Références	[33, 25, 66]

	Note Technique DEN		Page 50/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			


Tâches à réaliser	- étude bibliographique ; - implémentation informatique et validation ;
Risques identifiés	aucun
Charge de travail	R&D court/moyen terme : action en cours

5.3.2 Objectifs pour 2020

Les objectifs principaux pour 2020 sont la finalisation de l'analyse et la mise en œuvre du couplage avec la température, le passage en trois dimensions de l'espace et une deuxième publication.

Enfin, un dernier objectif est la prise en compte de modèles de turbulence.

Lot 4 : Maillage adaptatif, HPC et QI	
Sous-Lot 4.3 : Analyse de sensibilité	
Tâche 4.3.b. : Couplage avec la température	
Objectif	extension aux écoulements thermohydrauliques
Références	à préciser
Tâches à réaliser	- étude bibliographique ; - implémentation informatique et validation ;
Risques identifiés	aucun
Conditionnement de l'action	Lot 4.3.a achevé
Charge de travail	R&D court/moyen terme
Tâche 4.3.c. : Prise en compte de la turbulence	
Objectif	extension aux écoulements turbulents
Références	[115] et autres à préciser
Tâches à réaliser	- étude bibliographique ; - implémentation informatique et validation ;
Risques identifiés	aucun
Conditionnement de l'action	Lot 4.3.b achevé
Charge de travail	R&D moyen terme

	Note Technique DEN	Page 51/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

6 Nouvelles fonctionnalités

6.1 Mise en œuvre d'une méthode ALE pour le couplage fluide-structure

Il y a une attente forte concernant la mise à disposition dans TrioCFD d'une option ALE⁹ qui permettrait de simuler des problèmes d'interaction fluide-structure. En effet, le projet ASSEMBLAGE a d'une part exprimé le besoin de disposer d'un code pour les calculs d'interaction fluide-structure pour étudier la déformation des assemblages combustibles en cas de séisme. D'autre part, le projet MECAN souhaiterait disposer d'une option ALE dans le code TrioCFD pour ses études sur les risques vibratoires des générateurs de vapeur. Les déplacements solides à considérer sont d'amplitudes variées. Par exemple, pour l'étude du risque vibratoire des générateurs de vapeur, on s'intéresse à des déplacements faibles à hautes fréquences. En outre, pour l'étude du déplacement des assemblages combustibles en cas de séisme, les structures solides sont susceptibles d'être soumises à de grands déplacements.

La stratégie de couplage fluide-solide retenue porte sur une approche partitionnée. Le système couplé est résolu à chaque pas de temps, sous-système par sous-système¹⁰, successivement ou itérativement. Des variables sont échangées à l'interface fluide-solide. Nous avons fait le choix de cette approche en raison de sa flexibilité : différents modèles mathématiques, méthodes numériques et techniques de discrétisation adaptés à chaque milieu (fluide et solide) peuvent être utilisés séparément. Pour chaque milieu, un code de calcul spécifique est utilisé, et la difficulté consiste à faire transiter l'information d'un code à l'autre afin de faire communiquer les deux milieux.

Nous appelons le domaine commun Ω , le domaine fluide Ω_F et le domaine solide Ω_S . Le couplage est réalisé par des conditions aux limites à l'interface fluide-solide Γ_{FS} reliant les vitesses et les contraintes dans le solide et le fluide. Les conditions suivantes sont imposées sur Γ_{FS} :


$$\begin{cases} \vec{u}_F &= \vec{u}_S, \\ \vec{\sigma}_F \cdot \vec{n}_F &= \vec{\sigma}_S \cdot \vec{n}_S, \end{cases} \quad (6.1)$$

où \vec{u}_F et \vec{u}_S , $\vec{\sigma}_F$ et $\vec{\sigma}_S$, \vec{n}_F et \vec{n}_S sont respectivement la vitesse, le tenseur des contraintes et la normale extérieure sortante du fluide (variables indicées par F) et du solide (variables indicées par S).

Nous utilisons un formalisme classique dans lequel le fluide est traité dans le référentiel eulérien, tandis qu'un référentiel lagrangien est considéré pour le solide. Utilisant (6.1), les équations de Navier Stokes dans le référentiel

9. Il s'agit de prendre en compte dans la modélisation fluide le déplacement de la structure. Cela signifie que les nœuds du maillage n'ont pas une position fixe au cours du calcul.

10. Le sous-système en question est soit le domaine fluide soit le domaine solide.

		Note Technique DEN	Page 52/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
	Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

eulérien s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \nabla \cdot (\nu \vec{\nabla} \vec{u}) + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} p = \vec{S}, & \text{dans } \Omega_F, \\ \nabla \cdot \vec{u} = 0, & \text{dans } \Omega_F, \\ \vec{u} = \vec{u}_d, & \text{sur } \Gamma_D \setminus \Gamma_{FS}, \\ \vec{u} = \vec{u}_S, & \text{sur } \Gamma_{FS}, \\ (\nu \vec{\nabla} \vec{u} - p I_d) \cdot \vec{n} = \vec{g}, & \text{sur } \Gamma_N \setminus \Gamma_{FS}, \\ (\nu \vec{\nabla} \vec{u} - p I_d) \cdot \vec{n} = \vec{\sigma}_S \cdot \vec{n}, & \text{sur } \Gamma_{FS}, \end{array} \right. \quad (6.2)$$

où $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{FS}$, Γ_D est la partie de frontière où on applique les conditions de type Dirichlet et Γ_N celle où on applique les conditions de Neumann.

6.1.1 Discrétisation spatiale du couplage fluide solide

Afin de suivre l'interface fluide-solide, la méthode Arbitraire Lagrange-Euler (ALE) est utilisée. Dans l'approche ALE, l'écoulement fluide est calculé sur un domaine qui est déformé de façon à suivre le mouvement de la frontière du solide. La vitesse de déformation ne suit pas nécessairement celle du fluide à l'intérieur du domaine. On note \vec{u}_{ALE} cette vitesse du maillage fluide. Si \vec{u}_{ALE} est nulle, alors la méthode se réduit à une approche Eulérienne. Dans le cas où \vec{u}_{ALE} est égal à la vitesse du fluide nous retrouvons l'approche Lagrangienne. \vec{u}_{ALE} peut varier arbitrairement d'une valeur à l'autre dans le domaine fluide. Le calcul dans un tel domaine implique une reformulation des équations fluides dans ce repère.


Considérons le référentiel du laboratoire dans lequel les coordonnées eulériennes sont notées \vec{x} et les coordonnées lagrangiennes liées au solide sont notées \vec{X} . Notons maintenant $\vec{\xi}$ les coordonnées dans le maillage mobile de la formulation ALE. On peut les exprimer dans les coordonnées lagrangiennes par $\vec{\xi} = \vec{\xi}(\vec{X}, t)$.

On définit alors le Jacobien J et la vitesse du maillage mobile par :

$$J(\vec{X}, t) = \det \left(\frac{\partial \vec{\xi}}{\partial \vec{X}} \right) (\vec{X}, t),$$

$$\vec{u}_{ALE}(\vec{X}, t) = \frac{\partial \vec{\xi}}{\partial \vec{X}} \Big|_{\vec{X}} (\vec{X}, t),$$

où l'indice dans les dérivées partielles indique les variables qui restent constantes lors de la dérivation.

			Note Technique DEN	Page 53/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
	Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

Soit g une grandeur scalaire suffisamment régulière, nous avons :

$$\left. \frac{\partial Jg}{\partial t} \right|_{\vec{X}} (\vec{X}, t) = J(\vec{X}, t) \left(\left. \frac{\partial g}{\partial t} \right|_{\vec{\xi}} + \nabla_{\vec{\xi}} \cdot (g \otimes \vec{u}_{ALE}) \right) (\vec{\xi}(\vec{X}, t), t). \quad (6.3)$$

En appliquant (6.3) aux équations de Navier Stokes (6.2) nous obtenons la formulation suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial J\vec{u}}{\partial t} - J(\nabla_{\vec{x}} \cdot (\nu \vec{\nabla} \vec{u})) + J(\nabla_{\vec{x}} \cdot ((\vec{u} - \vec{u}_{ALE}) \otimes \vec{u})) + J\vec{\nabla} p &= J\vec{S}, \\ \nabla_{\vec{x}} \cdot (\vec{u} - \vec{u}_{ALE}) &= 0. \end{cases} \quad (6.4)$$

La méthode ALE donne une formulation des équations de Navier-Stokes sous forme conservative avec une modification des vitesses de transport par la vitesse du maillage. Soit $g = 1$ dans (6.3), alors J est solution de l'équation différentielle :

$$\left. \frac{\partial J}{\partial t} \right|_{\vec{X}} (\vec{X}, t) = J(\vec{X}, t) \nabla_{\vec{\xi}} \cdot (\vec{u}_{ALE}) (\vec{\xi}(\vec{X}, t), t). \quad (6.5)$$

Le calcul de la vitesse du maillage doit vérifier (6.5) mais doit aussi assurer que le maillage reste peu déformé afin de garder des mailles non-retournées. Ceci peut être assuré, par exemple en résolvant l'équation :

$$\begin{cases} \Delta \vec{u}_{ALE} &= 0, & \text{dans } \Omega_F, \\ \vec{u}_{ALE} &= \vec{u}_S, & \text{sur } \Gamma_{FS}, \\ \vec{u}_{ALE} &= 0, & \text{sur } \partial\Omega_F \setminus \Gamma_{FS}. \end{cases} \quad (6.6)$$


D'autres méthodes plus sophistiquées pourront être testées si besoin, voir par exemple [15].

6.1.2 Discrétisation temporelle du couplage fluide solide

Les approches partitionnées peuvent être généralement divisées en méthodes faiblement couplées et fortement couplées. Dans les méthodes faiblement couplées, un seul calcul fluide et solide est effectué à chaque pas de temps. Dans les méthodes fortement couplées, des sous-itérations sont utilisées pour chacun des solveurs fluide et solide à chaque pas de temps.

Le couplage fluide solide basé sur un algorithme partitionné avec une discrétisation spatiale de type ALE peut être résumé comme suit :

1. Le calcul de la vitesse du maillage \vec{u}_{ALE} ,
2. Procédure de mise à jour du domaine fluide,
3. Le calcul du Jacobien J ,
4. Résolution des équations fluides dans le référentiel ALE,
5. Traitement des conditions aux limites à l'interface fluide-solide,
6. Interpolation des données lors du transfert d'un code à l'autre (pour la prise en compte des conditions aux limites) car généralement les deux milieux (fluide et solide) ont des maillages différents,


	Note Technique DEN	Page 54/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

7. Résolution des équations solides dans le référentiel lagrangien,
8. Transmission des grandeurs solide → liquide et liquide → solide suivant l'algorithme de couplage en temps choisi : explicite ou implicite.

Dans un premier temps, on développera la méthode pour des écoulements laminaires ou des écoulements turbulents pouvant être calculés avec une approche DNS (Lot 5.1.a). Dans un deuxième temps, il faudra prendre en compte la modélisation de la turbulence, en commençant par les modèles de type RANS (Lot 5.2.c) puis en considérant les modèles de sous-maille pour la LES (Lot 5.2.d).

Lot 5 : Nouvelles fonctionnalités	
Sous-Lot 5.1 : méthode ALE pour l'interaction fluide-structure	
Tâche 5.1.a : domaine fluide, écoulements laminaires	
Objectif	prendre en compte l'effet du mouvement de la structure sur le fluide
Références	[43, 44, 67, 111]
Tâches à réaliser	- implémentation informatique et validation pour : - déplacer les nœuds du maillage avec une vitesse imposée et mettre à jour les quantités géométriques ; - résoudre les équations fluides dans le référentiel mobile ;
Charge de travail	Action réalisée
Tâche 5.1.b : couplage du domaine fluide et du domaine solide	
Objectif	mise en œuvre de l'algorithme de couplage fluide-structure ;
Références	[102, 111] et autres à définir
Tâches à réaliser	- étude bibliographique pour définir la méthode de couplage la mieux adaptée aux applications d'intérêt ; - transmission des grandeurs solide → liquide et liquide → solide suivant l'algorithme de couplage en temps choisi ;
Charge de travail	R&D court/moyen terme : action en cours
Tâche 5.1.c : domaine fluide, ALE avec modèles RANS	
Objectif	pouvoir réaliser des calculs RANS sur maillages mobiles ;
Références	[77] et autres à définir
Tâches à réaliser	- écriture des équations RANS dans un référentiel mobile et adaptation du schéma ; - implémentation informatique et validation ;
Charge de travail	R&D court/moyen terme : action en cours
Tâche 5.1.d : domaine fluide, ALE avec modèles LES	
Objectif	pouvoir réaliser des simulations LES sur maillages mobiles ;
Références	à définir
Tâches à réaliser	- adaptation des modèles de sous-maille au cas d'un maillage mobile - implémentation informatique et validation ;
Conditionnement de l'action	Lot 5.1.c achevé

Remarque 8. Les actions du lot 5.1.a ont été réalisées en 2017, les détails sont présentés dans le rapport technique [105]. Les développements ont été intégrés dans la version 1.7.9 de TrioCFD en juillet 2019.

	Note Technique DEN	Page 55/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

Remarque 9. Des actions concernant le lot 5.1.b ont eu lieu en 2018 [98] et 2019. Des actions visant la finalisation du lot 5.1.b et la réalisation du lot 5.1.c sont en cours.


Par la suite, la résolution de l'équation de l'énergie dans le framework ALE doit être mise en place. Afin de s'affranchir des difficultés liés à la mauvaise qualité du maillage (qui impose un remaillage du domaine de calcul) suite à sa déformation imposé par le déplacement du solide, une technique plus efficace (plusieurs à disposition dans la littérature) doit être implémenter. Ces techniques consistent principalement à remplacer le calcul de la vitesse du maillage via l'équation 6.6 par des techniques plus sophistiquées mais beaucoup plus efficaces [114]. Enfin, l'évaluation des différents schémas de couplage en temps est un point essentiel afin de garantir les propriétés de stabilité et de consistance du schéma de couplage.

Lot 5 : Nouvelles fonctionnalités	
Sous-Lot 5.1 : méthode ALE pour l'interaction fluide-structure	
Tâche 5.1.e : équation de l'énergie	
Objectif	extension du domaine d'application
Références	à définir
Tâches à réaliser	-implémentation informatique et validation - résoudre l'équation de l'énergie dans le référentiel mobile ;
Conditionnement de l'action	Lot 5.1.c achevé
Charge de travail	R&D court/moyen terme
Tâche 5.1.f : technique de déformation du maillage	
Objectif	amélioration de la qualité du maillage déformé ;
Références	[114] et autres à définir
Tâches à réaliser	étude bibliographique, implémentation et validation
Conditionnement de l'action	Lot 5.1.b achevé
Charge de travail	R&D court/moyen terme
Tâche 5.1.g : évaluation des différents schémas de couplage en temps	
Objectif	assurer des propriétés de stabilité et consistance ;
Références	à définir
Tâches à réaliser	- analyse, implémentation informatique et validation ;
Conditionnement de l'action	Lot 5.1.b achevé
Charge de travail	R&D court/moyen terme

Remarque 10. Une thèse est proposée en 2020 autour de ces actions d'interaction fluide-structure dans le framework ALE.

6.2 Modélisation polydisperse de particules solides

Le code TrioCFD pourrait être exploité pour des études hydrodynamiques rattachées à des procédés intervenant dans le cycle du combustible nucléaire, plus particulièrement au niveau de la modélisation des procédés de précipitation. Par le passé, le code Trio_U a été utilisé par le CEA de Grenoble et de Cadarache pour la mise au point d'une modélisation CFD pour décrire l'hydrodynamique d'un précipitateur [19]. Un couplage avec la chimie avait été mis en place avec prise en compte des phénomènes de micromélange pour simuler des écoulements réactifs par représentation de

			Note Technique DEN	Page 56/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025				

l'état de ségrégation à l'intérieur d'une maille de calcul. La poursuite identifiée à l'époque de ces travaux concernait les développements polyphasiques permettant de prendre en compte la présence de particules solides de tailles différentes au sein du précipitateur. L'objectif était de pouvoir observer la distribution des cristaux formés au sein d'un réacteur à effet vortex au cours d'une réaction de précipitation, en fonction de leur taille et de la vitesse d'agitation et d'identifier éventuellement des zones d'accumulation.

On propose ici d'implémenter dans TrioCFD un modèle Lagrangien de suivi de particules d'abord sous une forme monodisperse puis polydisperse. On s'inspirera des travaux de C. Morel concernant la proposition d'une modélisation hydrodynamique appliquée au lit fluidisé [91].

Lot 5 : nouvelles fonctionnalités	
Sous-Lot 5.2 : Modélisation polydisperse de particules solides	
Objectif	disposition d'une méthode de suivi Lagrangien de particules solides
Références	[19, 91]
Tâches à réaliser	- compréhension du besoin (génie des procédés, CEA de Marcoule) - analyse bibliographique, - implémentation et validation.
Risques identifiés	Ces développements ciblent les applications en lien avec les procédés de précipitation. Bien identifier au préalable les équipes désireuses d'exploiter TrioCFD.
Charge de travail	R&D court/moyen terme : en cours

Remarque 11. Cette action a été lancée dans le cadre du post-doctorat de Elie Saikali en 2019. Un rapport sera rédigé en 2020.


6.3 Modélisation des écoulements compressibles

Afin d'élargir le champ d'applications du code, il pourrait être intéressant de développer un modèle compressible. Cela permettrait par exemple de traiter certaines situations accidentelles avant ébullition et le passage à un modèle diphasique envisagé dans le cadre de la stratégie présentée dans le document [17]. D'autres applications envisageables seraient les simulations des écoulements impliquant une large gamme de nombres de Mach, par exemple les écoulements à la brèche et les applications de l'amont du cycle du combustible nucléaire.

6.3.1 Schéma de type Galerkin discontinu

Dans l'éventualité d'un tel développement, un schéma de type Galerkin discontinu pourra être envisagé car :

1. largement étudié depuis une trentaine d'années, il est relativement bien maîtrisé aujourd'hui. C'est un argument fort en faveur d'une implémentation dans un code industriel ;
2. il est d'ordre de précision quelconque, et de bonnes propriétés de stabilité non linéaire peuvent s'obtenir grâce à une méthode de stabilisation ;
3. l'ordre de l'approximation polynomiale est défini sur chaque élément, c'est à dire localement. Il peut donc être adapté à l'écoulement, en choisissant un ordre élevé dans les régions de forte régularité de la solution, et un ordre faible au voisinage des discontinuités (typiquement en présence de chocs) ;

		Note Technique DEN	Page 57/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

4. il permet de traiter des polyèdres quelconques ;
5. il est particulièrement adapté au parallélisme.

L'implémentation d'un tel schéma sur base TRUST sera assez rapide. L'effort le plus significatif portera sur la mise en place de la base de tests de validation.

Les auteurs qui font référence pour les schémas GD en compressible sont :

- Bassi et Rebay [14] ;
- Cockburn et Shu [38], qui ont publié ensemble sur le sujet et aussi séparément.

On étudiera en particulier les variantes Hybridizable Discontinuous Galerkin (HDG) [37].

Lot 5 : nouvelles fonctionnalités	
Sous-Lot 5.3 : écoulements compressibles	
Tâche 5.3.a : schéma GD	
Objectif	simulation des écoulements compressibles
Références	[37] et autres à préciser
Tâches à réaliser	- analyse des méthodes HDG ; - implémentation informatique - construction d'une base de validation pour les écoulements compressibles.
Risques identifiés	- ressources disponibles ayant peu d'expérience sur les problèmes hyperboliques
Charge de travail	R&D moyen terme

Remarque 12. *A ce jour, aucune action n'est engagée sur ce lot.*


6.3.2 Schéma implicite de type Rosenbrock

L'approximation d'écoulements impliquant une grande hétérogénéité du nombre de Mach est un challenge pour la simulation numérique. Depuis que Klainerman et Majda [75, 76] ont formulé mathématiquement la transition des équations de Navier-Stokes compressible à incompressible, un nombre considérable de travaux ont été dédiés à la production de schémas numériques capables de capturer efficacement tous les régimes de compressibilité. Malgré des progrès notables dans ce domaine, des difficultés subsistent qui justifient de nombreuses publications récentes (par exemple [30, 42, 53, 90]).

Ce thème de recherche intéresse particulièrement le Commissariat à l'énergie Atomique (CEA), tant à la Direction de l'énergie Nucléaire (DEN) [30, 39, 42] qu'à la Direction des Applications Militaires (DAM) [80, 90], confronté à des applications impliquant des transitions violentes de régimes. Un exemple pour les applications de la DEN est la rupture de conduite ou de cuve d'un Réacteur à Eau Pressurisée (REP).

Un post-doctorat commun DEN/DAM est envisagé prochainement. L'objectif de ce post-doctorat est de concevoir une souche de schémas conservatifs et robustes permettant de simuler des écoulements dans tous les régimes de compressibilité. Pour cela, le candidat retenu bénéficiera de l'expertise du CEA DAM en hydrodynamique compressible, et de celle du CEA DEN dans le régime incompressible.

Après une première phase d'analyse numérique, il implantera, en 1D/2D, le schéma choisi dans la plateforme JERICO, dans laquelle sont déjà implémentés de nombreux schémas pour le compressible. Ce schéma sera ensuite

	Note Technique DEN		Page 58/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019		Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

testé sur des cas-tests académiques représentatifs des problèmes types à l'aide des moyens de calcul mis à disposition (TGCC). Le candidat s'inspirera du solveur de Poisson de TrioCFD pour la résolution du système linéaire. Après avoir convergé sur une méthode efficace, celle-ci sera reportée dans TrioCFD. Cela permettra une validation code à code.

Résultats attendus :

- méthodes numériques conservatives et robustes, capables de traiter les écoulements à tout nombre de Mach adaptées au contexte HPC
- extension incompressible de JERICHO et compressible de TrioCFD
- communications et publications de niveau international.


Lot 5 : Nouvelles fonctionnalités	
Sous-Lot 5.3 : écoulements compressibles	
Tâche 5.3.b : schéma Rosenbrock	
Objectif	simulation des écoulements compressibles
Références	[30, 42, 53, 90] et autres à préciser
Tâches à réaliser	<ul style="list-style-type: none"> - analyse de la méthode Rosenbrock ; - implémentation informatique - construction d'une base de validation pour les écoulements compressibles.
Risques identifiés	- ressources disponibles ayant peu d'expérience sur les problèmes hyperboliques
Charge de travail	R&D moyen terme

6.4 Couplage avec la chimie via SCORPIO

Certaines applications nécessitent la résolution d'un système de transport réactif complet, telles que le colmatage des générateurs de vapeur, les couplages entre turbulence et échange chimique dans les réacteurs agités ou le stockage souterrain de déchets nucléaires ou de CO₂. Dans un premier temps, on souhaite s'attaquer à la résolution d'un système de transport réactif en milieu aqueux, avec présence éventuelle d'une phase solide, dans le contexte de modélisation suivant :

- écoulement monophasique
- transport : convection et diffusion-dispersion
- chimie aqueuse
- réactions à l'équilibre ou sous cinétique
- si phase solide :
 - milieu poreux non-déformable à porosité variable ω
 - chimie interphasique : précipitation-dissolution, sorption
 - chimie solide : solutions solides, corrosion

On peut écrire un tel système sous la forme générale suivante :

	Note Technique DEN		Page 59/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019		Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

$$\begin{cases}
 \partial_t(\omega a_k) &= -\text{div}(a_k \vec{U} - \vec{D}_k(\vec{U}) \vec{\nabla} a_k) + \mathcal{R}_k & \forall i \in [1, N_a] \\
 \partial_t(\omega f_j) &= \mathcal{R}_j & \forall j \in [1, N_f] \\
 \omega &= \omega^0 \frac{1 + f_{mv}^0}{1 + f_{mv}} & \text{avec } f_{mv} = \sum_j \mathcal{V}_j^{\text{mol}} f_j \\
 \mathcal{R}_{k/j} &= \frac{1}{V_T} \sum_{r=1}^{N_r} v_{k/j}^r I_r & \forall i \in [1, N_a] \forall j \in [1, N_f] \\
 \mathcal{E}_r(a_k, F_j) &= 0 & \forall r \in \text{équilibres} \\
 I_r &= \mathcal{K}_r(a_k, F_j) & \forall r \in \text{cinétiques}
 \end{cases}$$

Les paramètres de transport et la température seront déduits d'une simulation thermohydraulique réalisée par TrioCFD. On observe que ce système associe des phénomènes de transport qui sont **globaux et linéaires** à des transferts chimiques qui sont à l'inverse **locaux et non-linéaires**. La résolution numérique de ce genre de système pose un certain nombre de problèmes :


- fonction chimiques non-linéaires (lois d'action de masse ou cinétiques)
- raideur en temps due aux effets thermiques ou aux catalyseurs
- variables locales en nombre élevé (concentrations...)
- contraintes de positivité sur les concentrations (alors que des solutions existent dans l'espace des concentrations négatives)

Une stratégie classique dans le milieu industriel consiste à procéder par une approche séquentielle, ou découplée, éventuellement itérative (SIA : Sequential Iterative Approach). Selon cette approche, décrite plus en détail dans l'annexe B, on résout séparément le transport par un unique système global mais linéaire et la chimie par autant de petits systèmes locaux non-linéaires qu'on a choisi de Volumes élémentaires Représentatifs (VER), du point de vue chimique. Ces VER peuvent être identiques aux cellules du maillage ou correspondre à un maillage plus grossier, superposé au maillage utilisé pour le transport et/ou la thermohydraulique.

Dans ce contexte, on propose de coupler TrioCFD avec un code conçu spécifiquement pour la résolution de systèmes de transport réactif : SCORPIO. SCORPIO est un prototype développé au LMSF, associé à SIDES, un solveur non-linéaire comportant des intégrateurs temporels complexes et des méthodes permettant d'éviter les solutions à concentrations négatives, est utilisé notamment dans le code PAREX+. De plus, SCORPIO et SIDES sont basés sur la plateforme TRUST, ce qui facilitera la mise en œuvre technique du couplage.

Une première option sera d'utiliser SCORPIO pour la résolution des systèmes chimiques locaux et TrioCFD pour le transport, ainsi que la thermohydraulique, si celle-ci change fortement durant la simulation. Une seconde option consistera à utiliser TrioCFD pour la thermohydraulique et SCORPIO pour le transport réactif, si celui-ci peut s'effectuer sur un maillage comportant peu de cellules, notamment s'il est plus grossier que le maillage utilisé pour la thermohydraulique.

Lot 5 : Nouvelles fonctionnalités	
Sous-Lot 5.4 : Couplage avec la chimie via SCORPIO	
Objectif	- améliorer la prise en compte des phénomènes chimiques
Référence	[93]
Tâches à réaliser	- documentation - implémentation - validation du modèle

	Note Technique DEN	Page 60/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

Charge de travail	R&D long terme
-------------------	----------------

Après l'implémentation dans TrioCFD des modèles diphasiques utilisés dans Genepi + pour le générateur de vapeur, on envisage un couplage avec SCORPIO, sur le modèle de ce qui est déjà proposé pour le couplage Genepi+/SCORPIO, afin de simuler le phénomène de colmatage.

7 V&V et documentation

Pour que TrioCFD soit utilisé dans une démarche de sûreté ou plus généralement que son exploitation soit pertinente pour une application donnée, il est nécessaire de mettre en place un cadre méthodologique rigoureux permettant d'évaluer la crédibilité de résultats de simulations. En particulier, le code doit être en cohérence avec le guide de l'ASN numéro 28 concernant la qualification des outils de calcul scientifique utilisés dans la démonstration de sûreté nucléaire. Ce lot intègre les actions à réaliser pour construire une méthodologie d'études CFD avec le code TrioCFD ¹¹, qui repose sur les éléments suivants :

- Méthode V&V,
- Prédiction des incertitudes,
- Construction du domaine de validation du code.

Le volet prédiction des incertitudes concerne différents aspects, parmi lesquels l'estimation des erreurs (voir section 5.1), l'analyse de sensibilité (voir section 5.3), et est couvert en grande partie par la plateforme URANIE. On précise ci-dessous les volets V&V et domaines de validation du code. La V&V fait partie intégrante du projet de développement d'un code. Elle repose sur une base de tests unitaires et intégraux, qui doivent couvrir le domaine d'applications du code du point de vue de la physique et des options de calcul. Elle repose également sur une documentation complète du code.

7.1 Base de tests de vérification et de validation


Chaque développement informatique doit s'accompagner d'une étape de vérification (unitaire) et de validation (physique). La base de tests de validation existante est conséquente mais différents points sont à améliorer. Certains sont déjà précisés dans les différents lots ci-dessus présentés.

La limitation de la base de test de validation existante est que de nombreux problèmes sont résolus sur des maillages particuliers, à savoir des parallélépipèdes coupés en tétraèdres. Le comportement des schémas numériques étant très dépendant du maillage sous-jacent, il s'avère nécessaire de reprendre la base de tests et de la compléter par des maillages quelconques. Ce travail conséquent sera réalisé en continu.

L'exploitation de la base de tests est de nature double.

1. *Contrôle de la non-régression du code* : quotidiennement, les tests sont exécutés en ne réalisant que quelques (trois maximum) itérations en temps afin de s'assurer que les développements récents n'ont pas eu d'impact sur les résultats. L'analyse repose sur la comparaison de fichiers "pdf" générés par l'outil (une fiche par test).

11. un objectif majeur étant l'extension de l'utilisation de TrioCFD en général et au sein du CEA en particulier

		Note Technique DEN	Page 61/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

2. *Analyse qualitative des résultats et confrontation de différentes options physico-numériques ou maillages* : pour chaque cas test, les résultats sont récapitulés dans une fiche, sous forme de tableaux ou de courbes. Cela permet de repérer rapidement les options satisfaisantes (ou de façon équivalente à éviter).


Les fiches générées, si elles ont de nombreux avantages (production automatisée, comparaison possible de résultats obtenus avec deux exécutables) ne sont pas publiables dans l'état. En pratique, elles sont très peu consultées car assez peu conviviales pour certaines, ou trop lourdes pour d'autres (comparaison d'un nombre trop élevé d'options ou de maillages). Une réflexion doit être initiée concernant :

- l'objectif de la validation (par exemple, est-il nécessaire de comparer un nombre important d'options physico-numériques ?
- l'amélioration de la lisibilité des fiches de validation ;
- la rédaction d'un rapport de validation qui accompagnera chaque version majeure.

Lot 6 : V&V et domaine de validation du code	
Sous-Lot 6.1 : vérification et validation	
Tâche 6.1.a. Base de tests	
Objectif	Elargir la base de validation. Enrichir le périmètre de validation de TrioCFD
Références	
Tâches à réaliser	<ul style="list-style-type: none"> - ajout de tests intégrant des maillages représentatifs utilisés pour des études réalistes ; - ajout de nouveaux cas tests pour reproduire certains phénomènes physiques ou tester des options de modélisation et des schémas numériques ; - participation à des benchmarks ;
Risques identifiés	
Charge de travail	continu
Tâche 6.1.b. Fiches de validation et Atelier logiciel	
Références	
Tâches à réaliser	- améliorer l'Atelier logiciel et le format des fiches de validation ;
Risques identifiés	
Charge de travail	continu

Remarque 13. Une participation au benchmark FVCA8 [20] a eu lieu en fin 2016. Ce benchmark ayant pour objectif de comparer différentes discrétisations en espace de type volumes finis pour les équations de la mécanique des fluides incompressibles. Il est particulièrement axé sur l'évaluation de la précision, la robustesse, la complexité et la capacité à gérer diverses familles de mailles non structurées en deux et trois dimensions de l'espace. Les résultats obtenus avec TrioCFD sont synthétisés dans la référence [7]. Une note technique présentant des résultats beaucoup plus complets est à paraître.

Remarque 14. Des comparaisons entre TrioCFD et le logiciel FLUENT ont été réalisées en 2017 (voir [5, 104]).

			Note Technique DEN	Page 62/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025				

7.2 Documentation

Les documents suivants doivent être rédigés et à terme livrés avec les sources du code (ils existent aujourd'hui partiellement, mais doivent être complétés) :

- **Guide théorique** : description des méthodes numériques et modèles physiques ;
- **Guide des bonnes pratiques** : document succinct permettant à l'utilisateur une meilleure prise en main de l'outil.


Lot 6 : V&V et domaine de validation du code	
Sous-Lot 6.2 : documentation	
Objectif	disposer d'une documentation à jour pour les mot-clés et la description de la théorie
Références	
Tâches à réaliser	- maintenance du site internet, - mise à jour régulière de la documentation, - formations utilisateurs et développeurs à améliorer.
Risques identifiés	aucun
Charge de travail	continu

7.3 Domaine de validation

Il est nécessaire de maîtriser le domaine de validation du code, et de définir des méthodes pour évaluer le niveau de crédibilité des résultats de calcul obtenus pour une étude donnée. On pourra s'inspirer des travaux d'EDF et la représentation PTS qu'ils utilisent ou des matrices de maturité de la NASA.


Lot 6 : V&V et domaine de validation du code	
Sous-Lot 6.3 : domaine de validation	
Objectif	- construire une matrice de maturité permettant de comparer le domaine de validité du code au domaine d'application d'une étude donnée
Références	- à préciser, regarder travaux EDF et NASA
Tâches à réaliser	- veille bibliographique ; - définir une matrice de maturité.
Risques identifiés	aucun
Charge de travail	continu

Remarque 15. La construction d'un dossier de validation est prévue en 2020.


		Note Technique DEN	Page 63/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

Références


- [1] G. Allaire and R. Brizzi. A multiscale Finite element method for numerical homogenization. *SIAM Multiscale Modeling and Simulations*, 4(3) :790–812, 2005.
- [2] A. Allendes, G. R. Barrenechea, and C. Naranjo. A divergence-free low-order stabilized finite element method for a generalized steady state boussinesq problem. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 340 :90–120, 2018.
- [3] P.-E. Angeli. Détermination avec TrioCFD des coefficients de perte de charge dans un faisceau de tubes en l'absence de grilles. Technical Report DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF/NT/2019-65093/A/DR Spécial France, CEA, 2019.
- [4] P.-E. Angeli, B. Bieder, A. Cartalade, E. Jamelot, N. Leterrier, P. Omnes, and M. A. Puscas. Plan de développement du code TrioCFD. Indice B. Période 2017-2020. Note Technique CEA DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF/NT/16-014/B, CEA, 2018.
- [5] P.-E. Angeli and F. Brambourg. Revue de modélisations pariétales en RANS et calculs comparatifs TrioCFD / Fluent sur une sélection de cas-tests. Note Technique CEA DEN/DANS/DM2S/STMF/NT/2017-62065/A, CEA, 2017.
- [6] P.-E. Angeli and N. Leterrier. Implémentation et validation du modèle de turbulence k-epsilon réalisable dans TrioCFD. Technical Report DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF/NT/2018-64015/A, CEA, 2018.
- [7] P.-E. Angeli, M.-A. Puscas, G. Fauchet, and A. Cartalade. FVCA8 Benchmark for the Stokes and Navier-Stokes equations with the TrioCFD Code. *Finite Volumes for Complex Applications VIII - Methods and Theoretical Aspects.*, 2017.
- [8] L. Beirão da Veiga, F. Brezzi, A. Cangiani and L. D. Marini, and A. Russo. Basic Principles of Virtual Element Methods. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 23(1) :199–214, 2013.
- [9] D. N. Arnold, F. Brezzi, and M. Fortin. A stable finite element for the Stokes equations. *Calcolo*, XXI(IV), 1984.
- [10] I. Babuska and W.C. Rheinboldt. A posteriori error estimates for the finite element method. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 12 :1597–1615, 1978.
- [11] I. Babuska and W.C. Rheinboldt. Error estimates for adaptive finite element computations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 15 :736–754, 1978.
- [12] E. Baglietto, H. Ninokata, and T. Misawa. CFD and DNS methodologies development for fuel bundle simulations. *Nucl. Eng. Des.*, 236 :1503–1510, 2006.
- [13] G. R. Barrenechea and F. Valentin. Consistent local projection stabilized finite element methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 48(5) :1801–1825, 2010.
- [14] F. Bassi and S. Rebay. A High-Order Accurate Discontinuous Finite Element Method for the Numerical Solution of the Compressible Navier-Stokes Equations. *Journal of Computational Physics*, 131(2) :267–279, 1996.
- [15] S. Bastinga, A. Quainib, S. Canié, and R. Glowinski. Extended ALE Method for fluid-structure interaction problems with large structural displacements. *Journal of Computational Physics*, 2017.
- [16] M. Belliard. *Méthodes de décomposition de domaine et de frontière immergée pour la simulation des composants nucléaires*. Hdr, Aix-Marseille Université, 2014.
- [17] A. Bergeron and A. Bruneton. La stratégie de la plateforme METAPHOR. NT DEN/DANS/DM2S/STMF/RT/2018-63903/A, CEA, 2018.

		Note Technique DEN	Page 64/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			


- [18] C. Bernardi and G. Raugel. Analysis of some finite elements for the Stokes problem. *Math. Comp.*, 44(169) :71–79, 1985.
- [19] M. Bertrand. *Les procédés de précipitation dans l'industrie nucléaire : études phénoménologiques et hydrodynamiques*. Hdr, Université de Lorraine, 2014.
- [20] F. Boyer and P. Omnes. Benchmark for the FVCA8 Conference Finite volume methods for the Stokes and Navier-Stokes equations. In *Finite Volume for Complex Applications 8*, pages 1–10, 2016. https://github.com/FranckBoyer/FVCA8_Benchmark.
- [21] F. Brezzi, J. Douglas, and L. D. Marini. Two families of mixed finite elements for second order elliptic problems. *Numerische Mathematik*, 47(2) :217–235, 1985.
- [22] A. Burbeau. Feuille de route du code TrioCFD : 2015-2020. Version initiale. Note Technique CEA DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF/NT/15/004/A, CEA, 2015.
- [23] A. Burbeau and C. Calvin. Une politique de licence Open Source pour la plateforme TRUST et l'application TrioCFD. Note Technique CEA DEN/DANS/DM2S/STMF/NT/15-002/A, CEA, 2015.
- [24] A. Burbeau, A. Canton, E. Richebois, and K.-C. Le Thanh. Architecture de la plateforme thermohydraulique TRUST de la DEN. Note Technique CEA DEN/DANS/DM2S/STMF/NT/15-001/A, CEA, 2015.
- [25] FIORINI C., DESPRES B., and M. A. Puscas. Uncertainty quantification for the Navier-Stokes equations. Talk, SHARK-FV 2019, Portugal, 2019.
- [26] C. Cancès, M. Cathala, and C. Le Potier. Monotone corrections for generic cell-centered finite volume approximations of anisotropic diffusion equations. *Numer. Math.*, 125 :387–417, 2013.
- [27] A. Cangiani, Z. Dong, E. H. Georgoulis, and P. Houston. *hp-Version Discontinuous Galerkin Methods on Polygonal and Polyhedral Meshes*. Springer, 2017.
- [28] C. Carstensen and S. Funken. A posteriori error control in low-order finite element discretisations of incompressible stationary flow problems. *Mathematics of Computation*, 70(236) :1353–1381, 2001.
- [29] N. Chaabane, V. Girault, B. Rivière, and T. Thompson. A stable enriched Galerkin element for the Stokes problem. *Applied Numerical Mathematics*, 132 :1–21, 2018.
- [30] C. Chalons, M. Girardin, and S. Kokh. An all-regime lagrange-projection like scheme for the gas dynamics equations on unstructured meshes. *Communications in Computational Physics*, 20(1) :188–233, 2016.
- [31] L. Chen and F. Wang. A divergence free weak virtual element method for the stokes problem on polytopal meshes. *Journal of Scientific Computing*, 78 :864–886, 2019.
- [32] A. J. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of computation*, 22(104) :pp. 745–762, 1968.
- [33] Chalons Christophe, Duvigneau Régis, and Fiorini Camilla. Sensitivity analysis and numerical diffusion effects for hyperbolic pde systems with discontinuous solutions. the case of barotropic euler equations in lagrangian coordinates. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 40(6) :A3955–A3981, 2018.
- [34] E. Chung, Y. Efendiev, and T. Hou. Adaptive multiscale model reduction with generalized multiscale Finite element methods. *Journal of Computational Physics*, 320 :69–95, 2016.
- [35] M. Cicuttin, D. A. Di Pietro, and A. Ern. Implementation of Discontinuous Skeletal methods on arbitrary-dimensional, polytopal meshes using generic programming. *J. Comput. Appl. Math.*, 344 :852–874, 2018.
- [36] O. A. Ciobanu. *Méthode de décomposition de domaine avec adaptation de maillage en espace-temps pour les équations d'Euler et de Navier-Stokes*. Phd, Université Paris XIII, 2014.

		Note Technique DEN	Page 65/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			


- [37] B. Cockburn, N. C. Nguyen, and N.C. Peraire. Chapter 8 - HDG Methods for Hyperbolic Problems. *Handbook of Numerical Analysis*, 17 :173–197, 2016.
- [38] B. Cockburn and C.-W. Shu. The Runge-Kutta Discontinuous Galerkin Method for Conservation Laws V : Multidimensional Systems. *Journal of Computational Physics*, 141(2) :199–224, 1998.
- [39] F. Cordier, P. Degond, and A. Kumbaro. An asymptotic-preserving all-speed scheme for the euler and navier–stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 231(17) :5685–5704, 2012.
- [40] T.J. Craft, B.E. Launder, and K. Suga. Development and application of a cubic eddy-viscosity model of turbulence. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 17 :108–115, 1996.
- [41] E. Dari, R. Durán, and C. Padra. Error estimators for nonconforming finite element approximations of the stokes problem. *mathematics of computation*, 64(211) :1017–1033, 1995.
- [42] S. Dellacherie, J. Jung, P. Omnes, and P-A Raviart. Construction of modified godunov-type schemes accurate at any mach number for the compressible euler system. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 26(13) :2525–2615, 2016.
- [43] J. Donea, A. Huerta, J.-P. Ponthot, and A. Rodríguez-Ferran. Arbitrary Lagrangian-Eulerian Methods. In *Encyclopedia of Computational Mechanics*, volume 1, chapter 14. 2004.
- [44] F. Duarte, R. Gormaz, and S. Natesan. Arbitrary Lagrangian-Eulerian method for Navier-Stokes equations with moving boundaries. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 193 :4819–4836, 2004.
- [45] Régis Duvigneau and Dominique Pelletier. Evaluation of nearby flows by a shape sensitivity equation method. In *43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, page 127, 2005.
- [46] Y. Efendiev and T. Y. Hou. *Multiscale Finite Element Methods. Theory and Applications*. Springer, 2008.
- [47] P. Emonot. *Méthodes de Volumes Éléments Finis. Application aux équations de Navier-Stokes et résultats de convergence*. PhD thesis, Université Claude Bernard. Lyon I, 1992.
- [48] Ph. Emonot. *Méthode de volumes éléments finis : applications aux équations de Navier-Stokes et résultats de convergence*. PhD thesis, Université Claude Bernard – Lyon I, 1992.
- [49] Q. FENG. *Développement d'une méthode d'éléments finis multi-échelles pour les écoulements incompressibles dans un milieu hétérogène*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, 2019.
- [50] P. F. Fischer, F. Hecht, and Y. Maday. A parareal in time semi-implicit approximation of the navier-stokes equations. In *Domain decomposition methods in science and engineering*, pages 433–440. Springer, 2005.
- [51] T. Fortin. Une méthode d'éléments finis à décomposition L^2 d'ordre élevé motivée par la simulation d'écoulement diphasique bas Mach. *Thèse de Doctorat*, 2006.
- [52] T. Fortin. *Une méthode éléments finis à décomposition L^2 d'ordre élevé motivée par la simulation d'écoulement diphasique bas Mach*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie – Paris VI, 2006.
- [53] D. Fuster and S. Popinet. An all-mach method for the simulation of bubble dynamics problems in the presence of surface tension. *Journal of Computational Physics*, 374 :752–768, 2018.
- [54] K. J. Galvin, A. Linke, L. G. Rebholz, and N. E. Wilson. Stabilizing poor mass conservation in incompressible flow problems with large irrotational forcing and application to thermal convection. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 237/240 :166–176, 2012.
- [55] M. J. Gander, Y.-L. Jiang, and R.-J. Li. Parareal schwarz waveform relaxation methods. In *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XX*, pages 451–458. Springer, 2013.

		Note Technique DEN	Page 66/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			


- [56] N. Gauger, A. Linke, and P. Schroeder. On high-order pressure-robust space discretisations, their advantages for incompressible high Reynolds number generalised Beltrami flows and beyond. *SIAM Journal of Computational Mathematics*, 2019.
- [57] M. Germano, M. Piomelli, U. Moin, and P. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A*, 3(7) :1760–1765, 1991.
- [58] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W.H. Cabot. A Dynamic Subgrid-Scale Eddy Viscosity Model. *Phys. Fluids A*, 3 :1760–1765, 1991.
- [59] A. Gerschenfeld. Schéma numérique PolyMAC. Application à l'OCS TrioMC. Unification des échelles sous-canal et CFD. Note Technique CEA CEA/DEN/DANS/DM2S/STMF/LMEC/NT/2018-64061/A, CEA, 2018.
- [60] J-L Guermond, A Larios, and T Thompson. Validation of an entropy-viscosity model for large eddy simulation. In *Direct and Large-Eddy Simulation IX*, pages 43–48. Springer, 2015.
- [61] F. Hecht. Construction d'une base de fonctions P_1 non conforme à divergence nulle dans \mathbb{R}^3 . *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 15(2) :119–150, 81.
- [62] S. Heib. *Nouvelles discrétisations non structurées pour des écoulements de fluides à incompressibilité renforcée*. PhD thesis, Université Paris 6, 2003.
- [63] S. Heib. *Nouvelles discrétisations non structurées pour des écoulements de fluides à incompressibilité renforcée*. PhD thesis, Université Paris VI, 2003.
- [64] O. M. Hernandez. Quelques contributions vers la simulation parallèle de la cinétique neutronique et la prise en compte de données observées en temps réel. *Université Pierre et Marie Curie*, 2014.
- [65] T. Hou and X.-H. Wu. A multiscale Finite element method for elliptic problems in composite materials and porous media. *Journal of Computational Physics*, 134 :169–189, 1997.
- [66] Hristina Hristova, Stephane Etienne, Dominique Pelletier, and Jeff Borggaard. A continuous sensitivity equation method for time-dependent incompressible laminar flows. *International Journal for numerical methods in fluids*, 50(7) :817–844, 2006.
- [67] F. Huvelin, E. Longatte, and M. Souli. Simulation numérique d'un tube flexible soumis à un écoulement interne. *Mechanics & Industry*, 8(2) :143–149, 2007.
- [68] Guermond J.-L. and Mineev P. High-Order Time Stepping for the Incompressible Navier–Stokes Equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 37(6) :A2656–A2681, 2015.
- [69] Guermond J.-L., Pasquetti R., and Popov B. From Suitable Weak Solutions to Entropy Viscosity. *J. Sci. Comput*, 49 :J. Sci. Comput, 2011.
- [70] E. Jamelot. A proposal to improve the stability of the $P_1^{NC}P_0$ scheme in the TrioCFD code. Note Technique CEA DEN/DANS/DM2S/STMF/NT/2018-62465/A, CEA, 2018.
- [71] E. Jamelot. Méthodes d'éléments finis de Galerkin discontinus pour résoudre les équations de Navier-Stokes. Note Technique CEA DEN/DANS/DM2S/STMF/NT/2018-64097/A, CEA, 2018.
- [72] G. Jankowiak and A. Lozinski. Non-conforming multiscale finite element method for Stokes flows in heterogeneous media. Part II : Error estimates for periodic microstructure. *arXiv preprint arXiv :1802.04389*, 2018.
- [73] Caroline Japhet, Michel Kern, Jean E Roberts, et al. Space–time domain decomposition for advection–diffusion problems in mixed formulations. *Mathematics and Computers in Simulation*, 137 :366–389, 2017.

		Note Technique DEN	Page 67/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			


- [74] V. John, A. Linke, C. Merdon, M. Neilan, and L. Rebholz. On the divergence constraint in mixed finite element methods for incompressible flows. *SIAM Review*, 59(3) :492–544, 2017.
- [75] S. Klainerman and A. Majda. Singular limits of quasilinear hyperbolic systems with large parameters and the incompressible limit of compressible fluids. *Communications on pure and applied Mathematics*, 34(4) :481–524, 1981.
- [76] S. Klainerman and A. Majda. Compressible and incompressible fluids. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 35(5) :629–651, 1982.
- [77] B. Koobus, C. Farhat, and H. Tran. Computation of unsteady viscous flows around moving bodies using the $k-\epsilon$ turbulence model on unstructured dynamic grids. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 190(11-12) :1441–1466, 2000.
- [78] D. Kuzmin, M. J. Shashkov, and D. Svyatskiy. A constrained finite element method satisfying the discrete maximum principle for anisotropic diffusion problems. *Journal of Computational Physics*, 228, 2009.
- [79] D. Kuzmin and S. Turek. European congress on computational methods in applied sciences and engineering. In *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, ECCOMAS 2004, 2004.
- [80] E. Labourasse. A low-mach correction for multi-dimensional finite volume shock capturing schemes with application in lagrangian frame. *Computers & Fluids*, 179 :372–393, 2019.
- [81] C.K.G. Lam and K. Bremhorst. A modified form of the $k-\epsilon$ model for predicting wall turbulence. *ASME J. Fluids Eng.*, 103 :456–460, 1981.
- [82] C. Le Potier. Schéma volumes-finis monotones pour des opérateurs de diffusion fortement anisotropes sur des maillages de triangles non structurés. *C.R. Acad. Sci. Paris, Ser 1*(341) :787–792, 2005.
- [83] N. LETERRIER. Ares : un intégrateur temporel adaptatif pour calculer l'état stationnaire d'un système algébro-différentiel non-linéaire fortement raide. NT STMF/LMSF/NT/2018-62524/B, CEA, 2018.
- [84] R. Li, Z. Sun, F. Yang, and Z. Yang. A finite element method by patch reconstruction for the Stokes problem using mixed formulations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 353 :1–20, 2014.
- [85] D.K. Lilly. A Proposed Modification of the Germano Subgrid-Scale Closure Method. *Phys. Fluids A*, 4 :633–635, 1991.
- [86] J. Ling, A. Kurzwaski, and J. Templeton. Reynolds averaged turbulence modelling using deep neural networks with embedded invariance. *Journal of Fluid Mechanics*, 807 :155–166, 2016.
- [87] A. Linke. On the Role of the Helmholtz-Decomposition in Mixed Methods for Incompressible Flows and a New Variational Crime. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 268(1) :782–800, 2014.
- [88] A. Majid Bahari and K. Hejazi. Invetigation of Buoyant Parameters of $k-\epsilon$ Turbulence Model in Gravity Stratified Flows. *International Journal of Physical and Mathematical Sciences*, 3(7), 2009.
- [89] F.R. Menter. Zonal Two Equation $k-\omega$ Turbulence Models for Aerodynamic Flows. *AIAA Paper 1993-2906*, 1993.
- [90] Y. Moguen, S. Delmas, V. Perrier, P. Bruel, and E. Dick. Godunov-type schemes with an inertia term for unsteady full mach number range flow calculations. *Journal of Computational Physics*, 281 :556–590, 2015.
- [91] C. Morel. Proposition de modélisation hydrodynamique appliquée au lit fluidisé. NT DEN/CAD/DER/SSTH/LDLD/2011-050/A, CEA, 2011.
- [92] B. P. Muljadi, J. Narski, A. Lozinski, and P. Degond. Nonconforming multiscale finite element method for stokes flows in heterogeneous media. Part I : methodologies and numerical experiments. *Multiscale Modeling & Simulation*, 13(4) :1146–1172, 2015.

		Note Technique DEN	Page 68/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

- [93] LETERRIER N. Le module de résolution SCORPIO pour le transport réactif (à paraître). Nt, CEA.
- [94] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62 :183–200, 1999.
- [95] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow Turbul. Combust.*, 62 :183–200, 1999.
- [96] Angeli P.-E. Étude avec TrioCFD d'un choc thermique pressurisé dans le cadre du benchmark « Cold Leg Mixing ». NT STMF/LMSF/NT/2018-64067/A, CEA, 2018.
- [97] A. Palha and M. Gerritsma. A mass, enstrophy and vorticity conserving (MEEVC) mimetic spectral element discretization for the 2D incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 328 :200–220, 2017.
- [98] R. Pegonen and N. LETERRIER. Coupling a CFD code (TrioCFD) with ALE modeling and a structural dynamics code (EUROPLEXUS). Rapport Technique CEA DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF/NT/2018-64017/A, CEA, 2018.
- [99] M. Peybernes. Modèles de turbulence dans TrioCFD. Technical Report DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF/16–009/A, CEA, 2016.
- [100] D. A. Di Pietro, A. Ern, and S. Lemaire. *A review of Hybrid High-Order methods : formulations, computational aspects, comparison with other methods*, pages 205–236. Springer International Publishing, 2016.
- [101] S.B. Pope. A more general effective-viscosity hypothesis. *J. Fluid Mech.*, 72 :331–340, 1975.
- [102] M. A. Puscas. *Conservative coupling method between an inviscid compressible fluid flow and a three-dimensional deformable structure with possible fragmentation*. PhD thesis, Université Paris-Est, 2014. General Mathematics [math.GM].
- [103] M.-A. Puscas. Mise en place d'un algorithme stationnaire dans TrioCFD. NT STMF/LMSF/NT/2017-62241/A, CEA, 2017.
- [104] M. A. Puscas. Mise en place d'un algorithme stationnaire dans TrioCFD. Note Technique CEA DEN/DANS/DM2S/STMF/NT/2017-62241/A, CEA, 2017.
- [105] M. A. Puscas and R. Pegonen. Fluid-structure interaction for the PWR fuel assembly under axial flow and seismic loading. Coupling a CFD program (TrioCFD) with ALE representation and a structural dynamics program. Rapport Technique CEA DEN/DANS/DM2S/STMF/RT/2017-62296/A, CEA, 2017.
- [106] P.-A. Raviart and J.-M. Thomas. A mixed finite element method for second order elliptic problems. In *Mathematical aspects of finite element methods*, volume 606 of *Lecture Notes in Mathematics*, pages 292–315. Springer, 1977.
- [107] T.-H. Shih, Z. Jiang, and J.L. Lumley. A realizable Reynolds stress algebraic equation model. Technical Memorandum NASA-TM-105993, NASA, 1993.
- [108] T.-H. Shih, W. W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, and J. Zhu. A new $k - \varepsilon$ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. *Computers & Fluids*, 24(3) :227–238, 1995.
- [109] T.-H. Shih, J. Zhu, and J. L. Lumley. A new Reynolds stress algebraic equation model. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 125(1-4) :287–302, 1995.
- [110] J. Smagorinsky. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. *Mon. Weather Rev.*, 91 :99–164, 1963.
- [111] M. Souli and D. J. Benson. *Arbitrary Lagrangian-Eulerian and Fluid-Structure Interaction*. ISTE Ltd and John Wiley Sons, 2010.

	Note Technique DEN	Page 69/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
	Date : 27/11/2019	Indice : A
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

- [112] J. Steiner, D. Ruprecht, R. Speck, and R. Krause. Convergence of parareal for the navier-stokes equations depending on the reynolds number. In *Numerical Mathematics and Advanced Applications-ENUMATH 2013*, pages 195–202. Springer, 2015.
- [113] R. Temam. Une méthode d'approximation de la solution des équations de Navier-Stokes. *Bulletin de la Société Mathématique de France*, 96 :pp. 115–152, 1968.
- [114] W. Thomas. Fluid-structure interactions using different mesh motion techniques. *Computers & Structures*, 89(13-14) :1456–1467, 2011.
- [115] É Turgeon, D Pelletier, and J Borggaard. Application of a sensitivity equation method to the k-epsilon model of turbulence. In *15th AIAA computational fluid dynamics conference*, page 2534, 2001.
- [116] K. Van Maele and B. Merci. Application of two buoyancy-modified k- ε models to different types of buoyant plumes. *Fire Safety Journal*, 41(2) :122–138, 2006.
- [117] R. Verfürth. A posteriori error estimators for the stokes equations ii non-conforming discretizations. *Numerische Mathematik*, 60(1) :235–249, 1991.
- [118] Z. Wang, M. S. Triantafyllou, Y. Constantinides, and G. E. Karniadakis. An entropy-viscosity large eddy simulation study of turbulent flow in a flexible pipe. *Journal of Fluid Mechanics*, 859 :691–730, 2019.
- [119] D.C. Wilcox. Re-assessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. *AIAA J.*, 26(11) :1299–1310, 1988.

		Note Technique DEN	Page 70/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
	Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

A Schéma de discrétisation spatiale VEF

Le schéma VEF de TrioCFD est décrit succinctement dans ce qui suit, afin de pouvoir préciser les axes de progrès possibles et justifier les voies futures proposées dans la section 2.2.

Pour introduire le schéma VEF, on considère un problème modèle simplifié par rapport au problème réellement résolu dans le code. Il décrit l'écoulement stationnaire d'un fluide incompressible isotherme soumis à un champ de forces quelconque.

A.1 Problème modèle continu

Soit le problème à résoudre, en dimension d de l'espace ($d = 2$ ou $d = 3$) :

$$\begin{cases} -\nu \Delta \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla P &= \mathbf{f}, \quad \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \\ \mathbf{u} &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Soient $X = \mathbf{H}_0^1(\Omega)^d$ et $Q = L_0^2(\Omega)$. La formulation faible du problème continu (A.1) est :

$$\left| \begin{array}{l} \text{Trouver } (\mathbf{u}, p) \in X \times Q \text{ tels que } \forall (\mathbf{v}, q) \in X \times Q \\ a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + c(\mathbf{u}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, p) = l(\mathbf{v}) \\ b(\mathbf{u}, q) = 0. \end{array} \right. \quad (\text{A.2})$$

Ici, $a : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ et $b : X \times Q \rightarrow \mathbb{R}$ sont deux formes bilinéaires continues, $c : X \times X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ est une forme trilineaire continue et $l : X \rightarrow \mathbb{R}$ une forme linéaire continue. Ces formes sont données par :


$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \nu \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} \, dx \quad (\text{A.3})$$

$$b(\mathbf{u}, q) = - \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} \, dx \quad (\text{A.4})$$

$$c(\mathbf{a}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} ((\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{u}) \cdot \mathbf{v} \, dx \quad (\text{A.5})$$

$$l(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} f \mathbf{v} \, dx \quad (\text{A.6})$$

Avant d'introduire le problème discrétisé en espace, on introduit quelques notations.

		Note Technique DEN	Page 71/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
	Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

A.2 Notations

Soit un maillage $\mathcal{T}_h = \{T_m\}_{1 \leq m \leq N}$ du domaine de calcul Ω en triangles ou tétraèdres. Pour des domaines à frontières courbes (typiquement les assemblages avec des crayons combustibles) le maillage \mathcal{T}_h ne recouvre pas nécessairement Ω ¹². On désigne donc par Ω_h l'intérieur de l'ensemble $\bigcup_{m=1}^N T_m$. L'ensemble des faces intérieures du maillage est noté \mathcal{F}_h^i . On note $\{s_{i,T}\}_{i=1}^{d+1}$ les sommets de l'élément T . La face opposée au sommet $s_{i,T}$ est la face $F_{i,T}$.

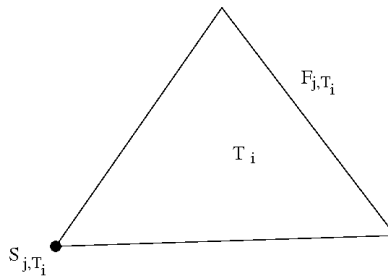


FIGURE 3 – Schéma GD sur grille décalée : notations.

A.3 Problème discrétisé

Le schéma peut être exprimé comme un schéma VEF ou un schéma de type Eléments Finis (EF). Les deux approchent différent essentiellement du point de vue de l'assemblage de la matrice du système à inverser et de certains termes (matrice de rigidité et termes sources par exemple) qui ne remettent pas en cause les idées ici présentées¹³. Le formalisme EF permet d'établir certaines preuves de stabilité et de convergence et est choisi ici. Introduisons maintenant le problème discret.

L'espace d'éléments finis de Crouzeix-Raviart est défini comme suit :

$$X_h = \left\{ \mathbf{v}_h \in \mathbf{L}^2(\Omega_h); \forall T \in \mathcal{T}_h, \mathbf{v}_h|_T \in \mathbb{P}^1(T); \forall F \in \mathcal{F}_h^i, \int_F \llbracket \mathbf{v}_h \rrbracket_F = 0 \right\} \quad (\text{A.7})$$

où $\llbracket \cdot \rrbracket_F$ désigne le saut sur la face F .

La vitesse discrète est définie par

$$\mathbf{v}_h(\mathbf{x}) = \sum_{F \in \mathcal{F}_h} \sigma_F(\mathbf{v}_h) \mathbb{I}_F(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega_h. \quad (\text{A.8})$$

12. Ce point pose un problème de précision de la solution numérique en proche paroi.

13. L'équivalence entre les formulations VEF et EF est abordée dans [47] et [63].

		Note Technique DEN	Page 72/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
	Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

avec

$$\sigma_F(\mathbf{v}_h) \equiv \frac{1}{\text{mes}(F)} \int_F \mathbf{v}_h \, ds = \mathbf{v}_h(\mathbf{x}_F). \quad (\text{A.9})$$

Remarque 16. Puisque le saut de \mathbf{v}_h est linéaire sur F , la condition $\int_F \llbracket \mathbf{v}_h \rrbracket = 0$ est équivalente à la continuité de \mathbf{v}_h au barycentre de F .

Si $\mathbf{v}_h \in X_h$ alors sur chaque élément T on peut écrire

$$\mathbf{v}_{h|T} = \sum_{i=1}^{d+1} \sigma_{T,i} \theta_{T,i} \in \mathbb{P}^1(T), \quad \sigma_{T,i} = \mathbf{v}_{h|T}(\mathbf{m}_i). \quad (\text{A.10})$$

où $\theta_{T,i} = 1 - d\lambda_{T,i}$ avec λ_i la coordonnée barycentrique associée au sommet i de T : $\lambda_{T,i} = 1$ au sommet $s_{i,T}$ et 0 aux autres sommets.

Dans (A.8), la fonction φ_F appartient à l'espace X_h et son support est constitué du ou des deux simplexes contenant F . Sur ces deux simplexes, elle coïncide avec la fonction de forme de l'élément fini de Crouzeix-Raviart associée à F à savoir : si la face F correspond à la face F_i de l'élément T alors $\varphi_{F|T} = \theta_{T,i}$.

Ainsi, on peut exprimer la vitesse discrète en se ramenant à une sommation sur les éléments du maillage :

$$\mathbf{v}_h(\mathbf{x}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \left(\sum_{i=1}^{d+1} \sigma_{T,i} \theta_{T,i} \right) \mathbf{1}_T, \mathbf{x} \in \Omega_h, \quad (\text{A.11})$$

Il existe différentes variantes du schéma VEF, qui diffèrent les unes des autres dans le calcul de la pression discrète. Dans la version de base du schéma VEF, on approche le champ de pression par le calcul d'une valeur moyenne de la solution sur chaque élément. Il s'agit de la thèse de P. Emonot [47]. Cet espace a ensuite été enrichi dans les thèses de S. Heib [63] et de T. Fortin [51] pour améliorer la stabilité du schéma et obtenir des propriétés de super-convergence.

Soit


$$\mathcal{Q}_h^0 = \{q_h \in L_0^2(\Omega_h) : q_{h|T} \in \mathbb{P}^0(T) \, \forall T \in \mathcal{T}_h\}. \quad (\text{A.12})$$

Une fonction $q_h^0 \in \mathcal{Q}_h^0$ s'écrit

$$q_h^0(\mathbf{x}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} q_T \Psi_T(\mathbf{x}), \quad (\text{A.13})$$

avec $\Psi_T(\mathbf{x}) = 1$ si $\mathbf{x} \in T$, 0 sinon. Le degré de liberté q_T associé au triangle T s'interprète comme une approximation de la moyenne de la solution sur l'élément :

$$q_T = \frac{1}{\text{mes}(T)} \int_T q(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}. \quad (\text{A.14})$$

			Note Technique DEN	Page 73/77
			Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
			Date : 27/11/2019	Indice : A
	Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

Un autre espace d'approximation pour la pression a ensuite été introduit par S. Heib [63], pour réduire l'apparition de certains modes parasites en vitesse. Il introduit des degrés de liberté en pression aux sommets des éléments :

$$\mathcal{Q}_h^1 = \{q_h \in \mathcal{C}^0(\Omega_h) : q_h|_T \in \mathbb{P}^1(T) \forall T \in \mathcal{T}_h\} \quad (\text{A.15})$$

Une fonction $q_h^1 \in \mathcal{Q}_h^1$ s'écrit

$$q_h^1(\mathbf{x}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \left(\sum_{i=1}^{d+1} q_h(\mathbf{s}_i) \phi_i(\mathbf{x}) \right) \mathbb{I}_T(\mathbf{x}) \quad (\text{A.16})$$

Enfin, T. Fortin [51] a proposé d'ajouter des degrés de liberté en pression sur chaque arête des éléments :

$$\mathcal{Q}_h^a = \{q_h \in \mathcal{C}^0(\Omega) : q_h|_T \in \mathbb{P}_T^a \forall T \in \mathcal{T}_h\}, \quad (\text{A.17})$$

Une fonction $q_h^a \in \mathcal{Q}_h^a$ s'écrit

$$q_h^a(\mathbf{x}) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \sum_{a=1}^{d+1} q_h(a_T) \mathbb{I}_a(\mathbf{x}). \quad (\text{A.18})$$

Le problème discret s'écrit :

$$\left| \begin{array}{l} \text{Trouver } (\mathbf{u}_h, p_h) \in X_h \times Q_h \text{ tels que } \forall (\mathbf{v}_h, q_h) \in X \times Q_h \\ a_h(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + c_h(\mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + b_h(\mathbf{v}_h, p_h) = l_h(\mathbf{v}_h) \\ b_h(\mathbf{u}_h, q_h) = 0. \end{array} \right. \quad (\text{A.19})$$


avec

$$\left\{ \begin{array}{l} a_h(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) := \nu \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T \nabla \mathbf{u}_h : \nabla \mathbf{v}_h \, dx \\ c_h(\mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T ((\mathbf{u}_h \cdot \nabla) \mathbf{u}_h) \cdot \mathbf{v}_h \, dx. \end{array} \right. \quad (\text{A.20})$$

La définition de la forme bilinéaire b_h dépend de l'espace d'approximation retenu pour la pression.

- **Schéma \mathbb{P}^1 NC / \mathbb{P}^0** : $q_h = q_h^0 \in \mathcal{Q}_h^0$.

$$b_h(\mathbf{u}_h, q_h) = - \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \nabla \mathbf{u}_h q_h^0 \, dx. \quad (\text{A.21})$$

		Note Technique DEN	Page 74/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
	Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

- **Schéma \mathbb{P}^1 NC / $\mathbb{P}^0\mathbb{P}^1$** : $q_h = q_h^0 + q_h^1 \in \mathcal{Q}_h^0 + \mathcal{Q}_h^1$

$$b_h(\mathbf{u}_h, q_h) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T (\mathbf{u}_h \nabla q_h^1 - q_h^0 \nabla \mathbf{u}_h) \, d\mathbf{x}. \quad (\text{A.22})$$

- **Schéma \mathbb{P}^1 NC / $\mathbb{P}^0\mathbb{P}^1\mathbb{P}^a$ (3D uniquement)** : $q_h = q_h^0 + q_h^1 + q_h^a \in \mathcal{Q}_h^0 + \mathcal{Q}_h^1 + \mathcal{Q}_h^a$.

$$b_h(\mathbf{u}_h, q_h) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T (\mathbf{u}_h \nabla (q_h^1 + q_h^a) - q_h^0 \nabla \mathbf{u}_h) \, d\mathbf{x}. \quad (\text{A.23})$$

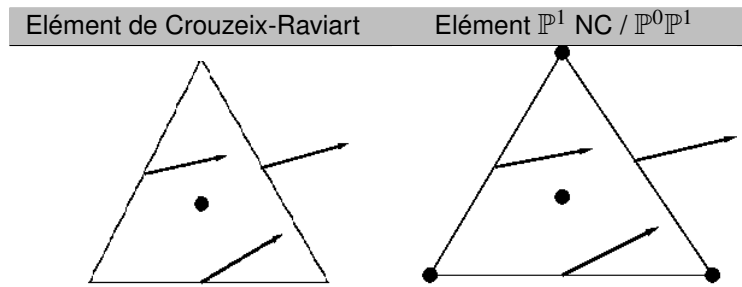


FIGURE 4 – Degrés de liberté du schéma VEF en 2D en vitesse (flèches) et pression (ronds).

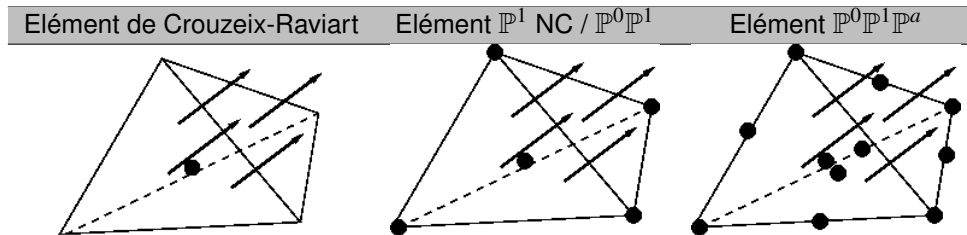



FIGURE 5 – Degrés de liberté du schéma VEF en 3D en vitesse (flèches) et pression (ronds).

En pratique, la méthode $\mathbb{P}^0\mathbb{P}^1\mathbb{P}^a$, qui nécessite le calcul de 11 degrés de liberté en pression par élément n'est pas utilisée car trop coûteuse, malgré les propriétés de stabilité et de convergence démontrées dans [51]. L'élément de Crouzeix-Raviart, stable uniquement pour le problème de Stokes, n'est pas utilisé. Seule la variante $\mathbb{P}^0\mathbb{P}^1$ est en général considérée.

A.4 Termes de convection non-linéaires

Différents schémas numériques sont implémentés pour la discrétisation du terme de convection. On décrit ici les plus utilisés, à savoir :

- les schémas décentrés AMONT et MUSCL, de type volumes finis,

		Note Technique DEN	Page 75/77
		Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759	
		Date : 27/11/2019	Indice : A
	Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025		

- le schéma centré EF et le schéma décentré EF_STAB.

Ces schémas diffèrent les uns des autres par la méthode de décentrement utilisée, qui se traduit par une dissipation numérique plus ou moins importante.

Afin de simplifier la présentation, nous nous restreignons au cas bi-dimensionnel. Nous rappelons que dans la formulation VEF à chaque degré de liberté x_i de la vitesse, on associe un volume de contrôle w_i (voir Fig.6).

Nous avons :

$$\int_{w_i} \text{div}(\vec{u} \otimes \vec{u}) dV = \int_{\gamma_i} \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{n}) ds,$$

où γ_i désigne les faces du volume de contrôle w_i .

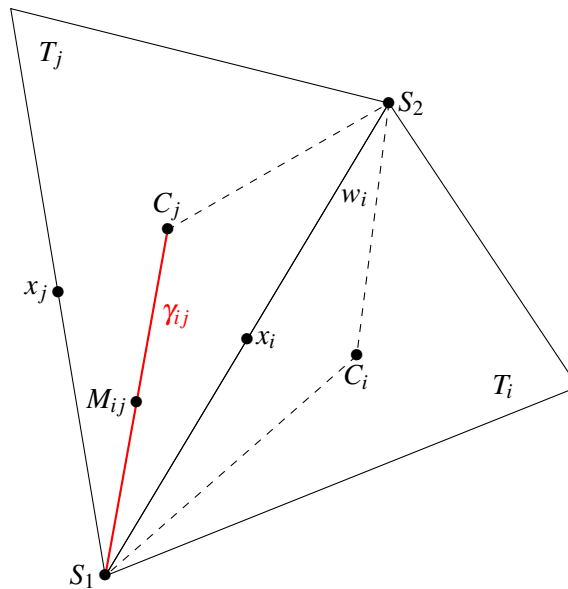


FIGURE 6 – Volume de contrôle

Schéma AMONT

Dans le schéma décentré amont \vec{u}_i est approché, par exemple sur $\gamma_{ij} = w_i \cap w_j$, par \vec{u}_i si $(\vec{u} \cdot \vec{n}_{ij}) > 0$, et par \vec{u}_j si $(\vec{u} \cdot \vec{n}_{ij} < 0)$, où \vec{n}_{ij} représente la normale unitaire extérieure à γ_{ij} :

$$\int_{\gamma_{ij}} \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{n}) ds \approx \int_{\gamma_{ij}} \vec{u}_i \max(\vec{u} \cdot \vec{n}_{ij}, 0) + \vec{u}_j \min(\vec{u} \cdot \vec{n}_{ij}, 0).$$

Schéma MUSCL

Dans le schéma MUSCL (Monotone Upstream-Centred Scheme for Convective flows), le flux à travers la face γ_{ij} est approché à partir de la formule d'interpolation de Simpson :

			Note Technique DEN	Page 76/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759			
			Date : 27/11/2019	Indice : A
	Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

$$\int_{\gamma_{ij}} \vec{u}(\vec{u} \cdot \vec{n}) ds \approx \frac{|\gamma_{ij}|}{6} \left(\vec{u}_{S_1} \vec{U}_{S_1} + 4\vec{u}_{M_{ij}} \vec{U}_{M_{ij}} + \vec{u}_{C_j} \vec{U}_{C_j} \right),$$

où nous avons utilisé les notations représentées dans Fig. 6 et, si $\vec{u}_{M_{ij}} \cdot \vec{n}_{ij} > 0$:

$$\begin{aligned} \vec{U}_{S_1} &= \vec{u}_i + |x_j S_1| \nabla(\vec{u}_i), \\ \vec{U}_{M_{ij}} &= \vec{u}_i + |x_j M_{ij}| \nabla(\vec{u}_i), \\ \vec{U}_{C_j} &= 2\vec{u}_{M_{ij}} - \vec{u}_{S_1}, \end{aligned}$$

sinon,

$$\begin{aligned} \vec{U}_{S_1} &= \vec{u}_j + |x_j S_1| \nabla(\vec{u}_j), \\ \vec{U}_{M_{ij}} &= \vec{u}_j + |x_j M_{ij}| \nabla(\vec{u}_j), \\ \vec{U}_{C_j} &= 2\vec{u}_{M_{ij}} - 2\vec{u}_{S_1}. \end{aligned}$$

Différents limiteurs de pente sont utilisés afin de calculer le $\nabla(\vec{u}_i)$ à partir des gradients associés aux triangles T_i et T_j partageant la face $S_1 S_2$:

$$\nabla(\vec{u}_i) = \begin{cases} \text{minmod}(\nabla(\vec{u}_{T_i}); \nabla(\vec{u}_{T_j})), \\ \text{Van-Leer}(\nabla(\vec{u}_{T_i}); \nabla(\vec{u}_{T_j})), \\ \text{Van-Albada}(\nabla(\vec{u}_{T_i}); \nabla(\vec{u}_{T_j})), \end{cases}$$

La fonction minmod est définie par


$$\text{minmod}(a, b) = \begin{cases} 0, & \text{si } a \cdot b \leq 0, \\ a, & \text{si } |a| < |b|, \quad a \cdot b > 0, \\ b, & \text{si } |a| > |b|, \quad a \cdot b > 0, \end{cases}$$

la fonction Van-Leer est définie par

$$\text{Van-Leer}(a, b) = \begin{cases} 0, & \text{si } a \cdot b \leq 0, \\ \frac{2a \cdot b}{a + b}, & \text{sinon,} \end{cases}$$

et Van-Albada par

$$\text{Van-Albada}(a, b) = \begin{cases} 0, & \text{si } a \cdot b \leq 0, \\ \frac{a \cdot b \cdot (a + b)}{a^2 + b^2}, & \text{sinon.} \end{cases}$$

	Note Technique DEN		Page 77/77
	Réf : STMF/LMSF/NT/2019-65759		
	Date : 27/11/2019	Indice : A	
Plan de développement du code TrioCFD. Période 2020-2025			

B Découplage des opérateurs transport et chimie

Le système de transport réactif peut s'écrire, dans le cas d'un milieu poreux non-déformable saturé :

$$\begin{cases} \partial_t \omega \vec{c} &= \underbrace{\vec{\mathcal{L}}}_{\text{transport}} + \underbrace{S^T}_{\text{stoe.}} \vec{r} \\ \omega &= \omega^0 \frac{1+f_{mv}^0}{1+f_{mv}} \text{ avec } f_{mv} = \sum_j \gamma_j^{mol} f_j \\ \Phi_\chi(\omega, \vec{c}, \vec{r}) &= 0 \end{cases}$$

ω représente la porosité et f_{mv} la fraction volumique réactive de la phase solide. Attention : les concentrations des espèces chimiques solides sont ici calculées en fonction du volume de la phase liquide et non solide. Cela peut paraître contre-intuitif mais c'est un point de vue fréquemment adopté, dans le cadre de la chimie des transferts entre phase liquide et solide.

Nous savons par le théorème du rang que, si les équations chimiques sont toutes indépendantes (i.e. si le problème chimique est bien posé), alors il existe une matrice U telle que $US^T =$ matrice nulle. Donc en posant $\vec{u} = U\omega\vec{c}$, nous avons $\partial_t \vec{u} = U\partial_t \omega\vec{c} = U\vec{\mathcal{L}} + US^T \vec{r} = U\vec{\mathcal{L}}$

\vec{u} est souvent appelé vecteur des **composants**, c'est-à-dire des invariants chimiques, obtenu par combinaison linéaire des concentrations des espèces.

1. Nous résolvons alors le système de transport **linéaire et global** suivant :

$$\partial_t \vec{u} = U\vec{\mathcal{L}}$$

2. Nous utilisons la valeur calculée de \vec{u} pour en déduire \vec{c} par un ensemble de systèmes chimiques **non-linéaires et locaux** :

$$\begin{cases} U\omega\vec{c} &= \vec{u} \\ \Phi_\chi(\omega, \vec{c}, \vec{r}) &= 0 \\ \omega &= \omega^0 \frac{1+f_{mv}^0}{1+f_{mv}} \end{cases}$$

On peut procéder de manière séquentielle ou itérative entre les étapes 1 et 2.