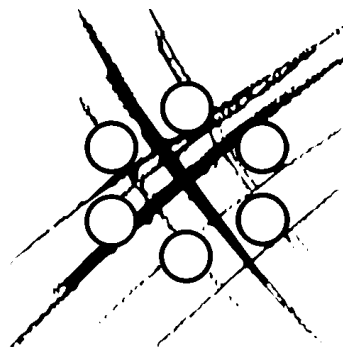


USER DOCUMENTATION : Models Documentation TrioCFD




Code Version	Date	Code manager J. DARONA	Authors
v1.8.2	3 mars 2021		TrioCFD Team
DES/ISAS/DM2S CEA SACLAY 91191 GIF-SUR-YVETTE CEDEX		<i>Input file</i> : models_report_TrioCFD.tex <i>Software</i> : TrioCFD	
		DES/ISAS/DM2S/STMF/LMSF/UD	

Table des matières

Table des matières	2
Liste des tableaux	4
I Introduction	4
II Équations de conservations : masse, quantité de mouvement et énergie	5
1 Rappel des équations fondamentales de la dynamique des fluides	6
2 Conservation de la masse	6
3 Conservation de la quantité de mouvement	6
4 Forme du tenseur des contraintes visqueuses	7
5 Résumé	8
5.1 Cas général pour un fluide newtonien	8
5.2 Cas particulier d'une viscosité constante	9
5.3 Cas particulier des écoulements incompressibles avec viscosité variable	9
5.4 Cas particulier des écoulements incompressibles avec viscosité constante	9
6 Conservation de l'énergie	10
7 Approximation de Boussinesq en incompressible	11
8 Numérique dans TrioCFD	11
8.1 Schéma en temps (valable en VEF et VDF)	11
8.2 Schéma en espace VEF	12
8.3 Matrices volume-éléments finis pour l'approximation P1NC/P0	12
III Modèles de turbulence	13
1 Introduction	14
2 Simulations des grandes échelles	14
Smagorinski	15
LES-WALE	15
3 Modèle RANS	16
3.1 Équations de Reynolds	16
3.2 Modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$	16

3.3	Autres modèles à deux équations	17
3.4	Modèle « bas Reynolds »	18
4	Lois de parois	19
4.1	Autres modèles de turbulence dans TrioCFD	20
IV	Modèles des écoulement diphasiques	21
1	Modèle à interface diffuse incompressible	23
1.1	Présentation du modèle	23
	Changement de variable	24
	Approximation de Boussinesq	24
	Formes du bilan de quantité de mouvement	24
1.2	Résolution numérique	25
	Equation de Cahn-Hilliard	25
	Equation de bilan de quantité de mouvement	26
V	The Arbitrary Lagrangian-Eulerian Method	26
1	The Arbitrary Lagrangian-Eulerian Method	27
1.1	ALE kinematic description	27
1.2	ALE form of governing equations	28
2	Principle of the ALE numerical method	29
VI	Sensitivity equation method for the Navier–Stokes equations applied to uncertainty propagation	30
1	Introduction	31
2	The physical model	32
2.1	The state equations	32
2.2	The sensitivity equations	32
3	Uncertainty propagation	33
VII	Perspectives	34
	Annexe A : liste des fiches de validation dans TrioCFD	36
	Bibliographie	39

Liste des tableaux

III.3.1	Synthèse des valeurs des paramètres du modèle $\bar{k} - \bar{\epsilon}$ (repris de [30]).	17
VII.0.1	Correspondance des mots clés utilisés dans les tables VII.0.2 et VII.0.3.	36
VII.0.2	Liste des cas tests et des fiches de validations regroupées par thèmes	37
VII.0.3	Liste des cas tests et des fiches de validations regroupées par thèmes (suite)	38

I. Introduction

Le code de calcul **TrioCFD** est un logiciel open-source [16] pour les simulations en mécanique des fluides, adapté en particulier aux calculs massivement parallèles d'écoulements turbulents dans des configurations industrielles. Cette note technique est une documentation des modèles physiques de ce code qui existe depuis plus de vingt-cinq ans (depuis les travaux sur les Volumes-Eléments Finis dans [24]) et qui a trouvé des applications dans plusieurs sous-domaines de la mécanique des fluides. De nombreuses références accessibles dans la littérature (dont 28 thèses) décrivent les méthodes numériques du code ou des applications originales. Ces références (thèses et articles) peuvent être retrouvées au format PDF sur le site internet [16]. Cette note technique complète la description qualitative du site web en précisant les modèles mathématiques qui sont utilisés dans les simulations. Compte tenu de la diversification des applications depuis 1992, on restreint la description aux écoulements monophasiques newtoniens, incompressibles et turbulents. Pour ce type d'écoulements de nombreux détails sont déjà disponibles dans plusieurs références dont [2, 4, 16, etc ...]. Cette note technique initie une documentation en faisant un effort de synthèse de la littérature existante, mais aussi d'homogénéisation des notations aussi bien entre les « modèles physiques » et la partie « méthodes numériques » qui font souvent l'objet de notations différentes entre les documents. Ici la partie numérique n'apparaît que dans la section 8 mais plusieurs nouvelles sections apparaîtront dans les versions ultérieures de la mise à jour de cette documentation.

Deux principales méthodes de discrétisation peuvent être utilisées dans **TrioCFD** : la méthode des Volume-Eléments Finis (VEF) et celle des Volume-Différence Finies (VDF). Pour les VEF, les maillages associés à cette méthode doivent nécessairement être triangulaires (en 2D) ou tétraédriques (en 3D). Le code est programmé en langage C++ et est basé sur la base logicielle **TRUST** (**TRio_U** Software for Thermalhydraulics), dans lequel sont notamment programmé l'ensemble des méthodes numériques et des schémas de discrétisation utilisés dans **TrioCFD**. La base **TRUST** est aussi le noyau d'autres applications du service STMF. Il est possible de réaliser des implémentations locales dans le code via le concept de **BALTIC** (**B**uilding an **A**pplication **L**inked to **TRio_U** **K**ernel), qui correspond à une brique de code (un ensemble de fichiers `.cpp` et `.h`) à modifier, puis de les intégrer éventuellement dans le code source une fois les développements vérifiés et validés. Pour résumer, **TrioCFD** s'appuie sur **TRUST** mais cette documentation ne concerne que la partie **TrioCFD**.

Afin de préciser les modèles mathématiques ainsi que leur domaine de validité, il est nécessaire de faire un rappel des équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie sans considération d'hypothèse simplificatrice. C'est l'objet de la section II dans laquelle les équations seront présentées sous leur forme la plus générale. Dans la mesure du possible, les modèles mathématiques sont écrits aussi bien en notations vectorielles qu'en notations indicielles. En notation vectorielle, les vecteurs, les tenseurs et les matrices sont écrits en gras. Dans cette section, des rappels sont également effectués sur les définitions des tenseurs du taux de déformation et celui de rotation car ceux-ci sont utilisés dans la section suivante dédiée aux modèles de turbulence. Les modèles de turbulence en mécanique des fluides sont nombreux et plusieurs livres et publications de synthèse existent déjà (e.g. [10, 5]). Dans **TrioCFD**, les modèles qui sont développés sont ceux qui sont les plus couramment utilisés dans la littérature et qui font l'objet d'un consensus dans le domaine tels que la LES (Smagorinski et WALE) et les différentes déclinaisons du RANS $\bar{k} - \bar{\epsilon}$. Ils seront détaillés dans la section III. Une base de cas tests d'environ 160 fiches de validations existe déjà pour **TrioCFD**. La liste de ces fiches est à ce jour regroupée dans un fichier Excel dont la version PDF est accessible en interne CEA. L'ensemble des cas tests de validation est synthétisé dans les deux tables VII.0.2 et VII.0.3 dans l'annexe VII de ce document. Dans les versions ultérieures de cette documentation, les modèles décrits seront illustrés par quelques fiches de validation de liste en Annexe. Plusieurs mises à jour de cette documentation sont à prévoir pour l'élargir petit à petit à l'ensemble des modèles accessibles dans le code.

II. Équations de conservations : masse, quantité de mouvement et énergie

II.1

Rappel des équations fondamentales de la dynamique des fluides

Dans cette section on rappelle les équations fondamentales de la dynamique des fluides. Elle permet d'introduire les principales notations et les équations aux dérivées partielles fondamentales sans hypothèses physiques simplificatrices. Les démonstrations peuvent être trouvées dans les références classiques. Dans la section 2, on rappelle l'équation de conservation de la masse (encore appelée équation de continuité) et dans la section 3 on rappelle l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Plusieurs formes mathématiques équivalentes entre elles existent dans la littérature : forme locale, forme locale notation vectorielle, forme locale conservative, forme locale conservative en notation vectorielle, formes macroscopiques, etc ... Ici on choisit la forme locale conservative avec notations vectorielles.

II.2

Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{II.2.0 eq1})$$

où $\rho \equiv \rho(\mathbf{x}, t)$ est la densité avec \mathbf{x} la position et t le temps, et $\mathbf{u} \equiv \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ la vitesse. D'autres formes équivalentes de cette équation peuvent être rencontrées en appliquant l'identité vectorielle $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho$ et en faisant apparaître la dérivée matérielle $d\rho/dt = \partial\rho/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho$.

II.3

Conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de la Quantité De Mouvement (QDM) traduit le principe fondamental de la dynamique qui indique que la variation de quantité de mouvement à l'intérieur d'un volume de contrôle est égale à la somme de toutes les forces extérieures qui lui sont appliquées. Les forces qui s'appliquent sur le

volume élémentaires peuvent être séparées en forces de volume et forces de surface. Ces dernières s'expriment comme un vecteur contrainte qui agit sur une surface, et ce vecteur contrainte s'exprime à son tour comme le produit scalaire d'un tenseur des contraintes \mathbf{T} (de composante T_{ij}) et du vecteur normal à la surface \mathbf{n} . La contrainte totale est décomposée en deux parties : $T_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij}$. La première est le tenseur des contraintes associées à la pression $-p\delta_{ij}$ où $p \equiv p(\mathbf{x}, t)$ est la pression et δ_{ij} est le symbole de Kronecker qui vaut un si $i = j$ et zéro sinon. La seconde, notée τ_{ij} est associée aux contraintes visqueuses. La pression agit de façon isotrope et sa valeur dépend de l'état thermodynamique du fluide. Les contraintes visqueuses sont liées à l'état de déformation du fluide

Comme pour l'équation de conservation de la masse, plusieurs formes mathématiques et équivalentes entre elles peuvent être déduites. Son écriture sous forme locale conservative est :

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{F}_v \quad (\text{II.3.0 eq1})$$

Dans l'équation (II.3.0 eq1), le membre de gauche de l'équation représente la quantité d'accélération par unité de volume. Les termes du membre de droite représentent respectivement (i) les forces associées à la pression par unité de volume, (ii) les contraintes visqueuses par unité de volume et (iii) la force externes par unité de volume. Lorsqu'on ne considère que la gravité elle s'exprime sous la forme : $\mathbf{F}_v = \rho\mathbf{g}$.

II.4

Forme du tenseur des contraintes visqueuses

Le tenseur des contraintes visqueuses τ est généralement exprimé en fonction des taux de déformation dans l'écoulement. On rappelle ci-dessous les définitions des tenseurs des taux de déformation et des taux de rotation à partir desquels sera exprimé le tenseur des contraintes visqueuses.

Rappel du tenseur des taux de déformation

L'accroissement de vitesse de deux particules fluides positionnées respectivement en \mathbf{r} et $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ et de vitesse \mathbf{u} et $\mathbf{u} + d\mathbf{u}$ s'exprime sous la forme $du_i = \sum_{j=1}^3 (\partial u_i / \partial x_j) dx_j$ au premier ordre par rapport aux composantes dx_j (pour $j = 1, 2, 3$). Dans cette expression, les quantités $G_{ij} = \partial u_i / \partial x_j$ sont les éléments d'un tenseur de rang deux, le tenseur des taux de déformation du fluide (ou des gradients de vitesse). En trois dimensions, il s'écrit sous la forme d'une matrice 3×3 qui peut être décomposée en une partie symétrique et une partie antisymétrique :

$$G_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.4.0 eq1})$$

Le premier terme est le tenseur des taux des déformations :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.4.0 eq2})$$

et il est symétrique ($S_{ij} = S_{ji}$). Le second terme est le tenseur des taux de rotation :

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.4.0 eq3})$$

et ce tenseur est antisymétrique ($\Omega_{ij} = -\Omega_{ji}$).

Forme du tenseur des contraintes visqueuses pour un fluide newtonien

Lorsque les fluides sont newtoniens la relation contrainte-déformation est linéaire et isotrope. La relation générale s'écrit :

$$\tau_{ij} = \eta \left(2S_{ij} - \frac{2}{3} S_{kk} \delta_{ij} \right) + \zeta S_{kk} \delta_{ij} \quad (\text{II.4.0 eq4})$$

qui fait apparaître deux viscosités, la viscosité dynamique $\eta \equiv \eta(\mathbf{x}, t)$ et la viscosité de volume ζ (ou deuxième viscosité). Le premier terme correspond à une déformation sans changement de volume tandis que le second terme correspond à une dilatation isotrope. Dans la majeure partie des applications on ne tient pas compte de la viscosité en volume ($\zeta = 0$) et le tenseur des contraintes s'écrit $\tau_{ij} = 2\eta S_{ij} - (2/3)\eta S_{kk} \delta_{ij}$, soit en utilisant la relation (II.4.0 eq2) :

$$\tau_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \eta \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (\text{II.4.0 eq5})$$

ou encore en notations vectorielles :

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\boldsymbol{\nabla} \mathbf{u} + \boldsymbol{\nabla}^T \mathbf{u}) - \frac{2}{3} \eta (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \quad (\text{II.4.0 eq6})$$

où \mathbf{I} est la matrice diagonale unité.

Fluide newtonien de viscosité constante

Lorsque la viscosité du fluide η est constante (i.e. $\eta(\mathbf{x}, t) = \eta_0 = \text{Cte}$), le terme des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}$ dans l'équation (II.3.0 eq1) s'exprime sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} &= \eta_0 \left[\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{2}{3} \eta_0 \frac{\partial}{\partial x_j} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \delta_{ij} \\ &= \eta_0 \left[\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \right] - \frac{2}{3} \eta_0 \frac{\partial}{\partial x_i} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \\ &= \eta_0 \nabla^2 u_i + \frac{\eta_0}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \end{aligned}$$

C'est-à-dire en notations vectorielles :

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} = \eta_0 \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{\eta_0}{3} \boldsymbol{\nabla} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \quad (\text{II.4.0 eq7})$$

II.5

Résumé

5.1 Cas général pour un fluide newtonien

Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement s'écrivent sous la forme générale :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{II.5.1 eq1a})$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\boldsymbol{\nabla} p + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{F}_v \quad (\text{II.5.1 eq1b})$$

où $\rho \equiv \rho(\mathbf{x}, t)$ et $\mathbf{u} \equiv \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ sont les inconnues du système d'équations. La loi d'état sur la pression et l'hypothèse de fluide newtonien pour le tenseur des contraintes permettent de fermer le système. La loi d'état sur la pression et les modèles de type « bas Mach » qui séparent la pression en une pression thermodynamique et une pression hydrodynamique sont présentés dans le chapitre suivant. Pour un fluide newtonien, le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\tau}$ est relié à celui des déformations \mathbf{D} par la relation :

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) - \frac{2}{3}\eta(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \quad (\text{II.5.1 eq2})$$

où la viscosité dynamique est notée $\eta \equiv \eta(\mathbf{x}, t)$ et la viscosité de volume ζ a été négligée.

5.2 Cas particulier d'une viscosité constante

Lorsque la viscosité est considérée constante (i.e. $\eta(\mathbf{x}, t) = \eta_0 = \text{Cte}$), le terme de divergence du tenseur des contraintes $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$ se simplifie à l'aide de la relation (II.4.0 eq7) et le système d'équations devient :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{II.5.2 eq3a})$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{\eta_0}{3} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{F}_v \quad (\text{II.5.2 eq3b})$$

5.3 Cas particulier des écoulements incompressibles avec viscosité variable

Lorsque le fluide est considéré incompressible (i.e. $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0 = \text{Cte}$) alors l'équation de conservation de la masse devient $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ (car $\partial \rho_0 / \partial t = 0$ et $\nabla \rho_0 = \mathbf{0}$), le terme non linéaire s'écrit $\nabla \cdot (\rho_0 \mathbf{u} \mathbf{u}) = \rho_0 \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ et le tenseur des contraintes visqueuses (Eq. (II.4.0 eq7)) se simplifie lui aussi en $\boldsymbol{\tau} = \eta(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})$.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{II.5.3 eq4a})$$

$$\rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho_0 \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\eta(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) \right] + \rho_0 \mathbf{F}_v \quad (\text{II.5.3 eq4b})$$

Dans cette formulation, la viscosité dynamique η reste dans le terme entre crochets car il peut dépendre de la position comme dans les modèles de turbulence.

5.4 Cas particulier des écoulements incompressibles avec viscosité constante

Enfin, lorsque le fluide est considéré incompressible et de viscosité dynamique η_0 constante, le tenseur des contraintes visqueuses (Eq. (II.4.0 eq7)) se simplifie une nouvelle fois en $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \eta_0 \nabla^2 \mathbf{u}$ et le système d'équations devient :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{II.5.4 eq5a})$$

$$\rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho_0 \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{u} + \rho_0 \mathbf{F}_v \quad (\text{II.5.4 eq5b})$$

II.6

Conservation de l'énergie

Plusieurs formes de l'équation de bilan de l'énergie sont possibles selon que l'on considère la conservation de l'énergie totale, l'énergie interne, l'enthalpie totale ou l'enthalpie. Des formulations peuvent être déduites sur la température ou même l'entropie. Dans la suite, on restreint la présentation à l'écriture de la conservation de l'énergie interne qui sera écrite sous forme équivalente sur l'équation de la température.

L'équation de bilan de l'énergie interne e s'écrit [8, p. 126] :

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} - p \nabla \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} \quad (\text{II.6.0 eq1})$$

Dans cette équation, le membre de gauche représente le taux de variation de l'énergie interne par unité de volume. Dans le membre de droite, le premier terme représente le flux de chaleur par unité de volume ; le second terme représente la puissance des forces de pression par unité de volume ; et le dernier terme représente la puissance des forces visqueuses par unité de volume. Ce dernier est la fonction de dissipation visqueuse qui est toujours positive ou nulle. Ainsi les forces visqueuses entraînent toujours un accroissement de l'énergie interne du fluide et donc de sa température.

L'équation de conservation de l'énergie interne peut se reformuler en une équation sur la température T . Cette équation prend deux formes différentes selon que l'on utilise la chaleur spécifique à volume constant C_v ou bien à pression constante C_p . Formulée en C_v , elle s'écrit :

$$\frac{\partial(\rho C_v T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_v T \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} + \rho T \frac{dC_v}{dt} \quad (\text{II.6.0 eq2a})$$

Formulée en C_p elle s'écrit :

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_p T \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \right) \frac{dp}{dt} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} + \rho T \frac{dC_p}{dt} \quad (\text{II.6.0 eq2b})$$

Remarque : lorsque le gaz est considéré parfait, i.e. $\rho = p_{th}/(RT)$ où R est la constante des gaz parfaits et p_{th} est la pression thermodynamique, le coefficient $(\partial \ln \rho / \partial \ln T)$ vaut $(\partial \ln \rho / \partial \ln T) = -1$. En supposant que le flux de chaleur est défini par la loi de Fourier $\mathbf{q} = -\lambda \nabla T$ où λ est la conductivité thermique, l'Eq. (II.6.0 eq2b) devient :

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_p T \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \frac{dp_{th}}{dt} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} + \rho T \frac{dC_p}{dt} \quad (\text{II.6.0 eq3})$$

L'introduction de la pression thermodynamique p_{th} sera utile pour les modèles « bas Mach ».

II.7

Approximation de Boussinesq en incompressible

Pour des écoulements incompressibles, lorsque la densité est supposée constante $\rho = \rho_0 = \text{Cte}$, la densité n'est ni une fonction de la température ni de la composition du fluide (pour les mélanges miscibles). Dans ce cas, les effets de flottabilité sont uniquement pris en compte par les forces gravitationnelles. Cette simplification est connue comme l'« approximation de Boussinesq » et valable en considérant que la variation de densité $\Delta\rho \ll \rho_0$. Dans ce cas, le terme force s'écrit dans les équations (II.5.3 eq4a)–(II.5.3 eq4b) ou (II.5.4 eq5a)–(II.5.4 eq5b) :

$$\mathbf{F}_v = -\mathbf{g}\beta_T(T - T_0) \quad (\text{II.7.0 eq1})$$

où β_T est le coefficient de dilatation thermique et T_0 une température de référence. Dans cette relation, le signe négatif indique que si la différence de température est positive $\Delta T = T - T_0 > 0$ (i.e. près de la paroi chaude en convection naturelle), alors la force est dirigée dans le sens opposé à la gravité \mathbf{g} .

II.8

Numérique dans TrioCFD

Dans ce document on détaille les méthodes numériques mises en œuvre dans TrioCFD pour le modèle incompressible défini par les équations (II.5.3 eq4a)–(II.5.3 eq4b). Deux méthodes de discrétisation spatiales sont possibles dans l'outil de calculs : la méthode des Volume-Éléments Finis (VEF) et celle des Volumes Différences Finies (VDF) mais on ne décrit que la partie VEF. Dans la suite, le domaine de calcul est noté Ω .

8.1 Schéma en temps (valable en VEF et VDF)

Après discrétisation, le système matrice-vecteur résolu s'écrit :

$$\begin{cases} \delta t^{-1}\mathbf{M}U^{n+1} + \mathbf{A}U^{n+1} + \mathbf{L}(U^n)U^{n+1} + \mathbf{B}^T P^{n+1} &= F^n + \delta t^{-1}\mathbf{M}U^n, \\ \mathbf{B}U^{n+1} &= 0. \end{cases} \quad (\text{II.8.1 eq1})$$

où $U^{n+1} \in \mathbb{R}^{N_u}$ représente le vecteur vitesse discrétisé au temps $(n+1)\delta t$ où δt est le pas de temps et N_u est le nombre de degrés de liberté pour discrétiser spatialement la vitesse. Les matrices en gras seront définies ci-dessous car dépendantes de la discrétisation en espace. $P^{n+1} \in \mathbb{R}^{N_p}$ représente la pression discrétisée au temps $(n+1)\delta t$ et N_p est le nombre de degrés de liberté pour discrétiser spatialement la pression.

Afin de découpler la vitesse et la pression, la résolution des équations (II.5.3 eq4a)–(II.5.3 eq4b) est réalisée en trois étapes [12, 50] :

— **étape de prédiction** : calculer U^* solution de

$$\delta t^{-1}\mathbf{M}U^* + \mathbf{A}U^* + \mathbf{L}(U^n)U^* + \mathbf{B}^T P^n = F^n + \delta t^{-1}\mathbf{M}U^n.$$

à cette étape $\mathbf{B}U^* \neq 0$.

— **Calcul de la pression** : calculer P' solution de

$$\mathbf{B}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}^T P' = \delta t^{-1}\mathbf{B}U^*, \quad P^{n+1} = P' + P^n.$$

— **étape de correction** : calculer U^{n+1} solution de

$$\mathbf{M}U^{n+1} = \mathbf{M}U^* - \delta t\mathbf{B}^T P'.$$

Remarque : plusieurs solveurs ont été testés (SIMPLE, SIMPLER, PISO) qui, selon les problèmes ont montré une convergence relativement faible. Le solveur utilisé à ce jour est inspiré de la référence [31].

8.2 Schéma en espace VEF

La méthode numérique est basée sur la méthode des éléments finis de Crouzeix-Raviart non conformes [14], et détaillés dans [24, 33, 28, 4]. Pour ($d = 2$) (resp. $d = 3$), on considère l'espace xy de \mathbb{R}^2 (resp. l'espace xyz de \mathbb{R}^3) d'origine O . On note $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ ($\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$) les vecteurs de la base canonique. On considère $\mathcal{T}_h := \cup_{\ell=1}^{N_T} T_\ell$, un maillage régulier du domaine Ω constitué de simplexes (triangles en 2D et tétraèdres en 3D), de sommets $(S_i)_{i=1}^{N_S}$, où i est l'indice de N_S sommets. Le nombre de simplexes (sommets) est noté par N_T (resp. N_S). Soit $T_\ell \in \mathcal{T}_h$, la frontière de T_ℓ est constituée d'arêtes en 2D ou de faces en 3D, mais on les appellera « face » dans tous les cas. Soit $\bar{\mathcal{F}}_h = \cup_{k=1}^{\bar{N}_F} F_k$ l'ensemble des faces du maillage, et $\mathcal{F}_h = \cup_{k=1}^{N_F} F_k$ l'ensemble des faces intérieures, où \bar{N}_F (resp. N_F) est le nombre total (resp. interne) de faces. On note M_k le barycentre de la face F_k , et \mathbf{n}_k le vecteur normal unitaire sortant à F_k . Soit $P_1(T)$ l'ensemble des polynômes d'ordre 1 définis sur T . L'espace de discrétisation des vitesses est :

$$X_h := \{\mathbf{v}_h \mid \forall T \in \mathcal{T}_h, \mathbf{v}_h \in P_1(T)^d \text{ et } \forall F \in \mathcal{F}_h : [\mathbf{v}_h](\mathbf{x}_F) = \mathbf{0}\}, \quad (\text{II.8.2 eq2})$$

où \mathbf{x}_F représente le barycentre de la face F , et $[\mathbf{v}_h](\mathbf{x}_F)$ est le saut de \mathbf{v}_h sur la face F . On suppose que $\bar{F} = \bar{T} \cap \bar{T}'$, telle que $\mathbf{n}_F = \mathbf{n}_{T,F}$. Le saut $[\mathbf{v}_h](\mathbf{x}_F)$ est défini par :

$$[\mathbf{v}_h](\mathbf{x}_F) := \mathbf{v}_{h|T_\ell}(\mathbf{x}_F) - \mathbf{v}_{h|T_{\ell'}}(\mathbf{x}_F) \text{ if } \bar{F} = \bar{T}_\ell \cap \bar{T}_{\ell'}, \text{ et } \mathbf{n}_F = \mathbf{n}_{T_\ell|F}.$$

L'espace X_h est muni de la semi-norme $\|\mathbf{v}_h\|_h = \left(\sum_{\ell=1}^{N_T} |\mathbf{v}_{h|T_\ell}|_{1,T_\ell}^2 \right)^{1/2}$, où $|\mathbf{v}_{h|T_\ell}|_{1,T_\ell}$ est la semi-norme de $\mathbf{v}_{h|T_\ell} \in H^1(T_\ell)$. On note $X_{0,h} := \{\mathbf{v}_h \in X_h \mid \mathbf{u}_{h|\partial\Omega} = 0\}$.

Soit $\lambda_i|_T$ la coordonnées barycentrique associée au sommet $S_i|_T$ et $(\mathbf{e}^\beta)_{\beta=1}^d$ les vecteurs de la base canonique.

Les fonctions de base associées à l'espace X_h sont les vecteurs $\left(\left(\varphi_i^\beta \right)_{i=1}^{N_F} \right)_{\beta=1}^d$ tels que $\varphi_i^\beta|_T = (1 - d\lambda_i|_T) \mathbf{e}^\beta$.

On appelle ψ_j la fonction caractéristique associée au triangle T_j .

8.3 Matrices volume-éléments finis pour l'approximation P1NC/P0

Soit $(\mathbf{u}_h^n, p_h^n) \in X_h \times L_h$ l'approximation spatiale de (\mathbf{u}^n, p^n) dans $X_h \times L_h$ telle que :

$$\mathbf{u}_h^n := \sum_{\beta=1}^d \sum_{i=1}^{N_F} \left(U_i^\beta \right)^n \varphi_i^\beta, \quad p_h^n := \sum_{\ell=1}^{N_T} P_\ell^n \psi_\ell.$$

Posons : $U_n = ((U_i^\beta)^n)_{\beta,i} \in \mathbb{R}^{N_u}$, $F^n = ((f^{n+1}, \varphi_i^\beta)_0)_{\beta,i} \in \mathbb{R}^{N_u}$, avec $N_u := d N_F$, et $p_h^n = (P_\ell^n)_\ell \in \mathbb{R}^{N_T}$.

— La matrice de masse $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N_u \times N_u}$ est composée de d blocs diagonaux égaux à $\mathbf{M}_F \in \mathbb{R}^{N_F \times N_F}$ tels que $(\mathbf{M}_F)_{i,j} = (\phi_i, \phi_j)_0$ avec $\phi_i|_T = (1 - d\lambda_i|_T)$.

Pour $d = 2$, on obtient que la matrice de masse $2D$ est diagonale :

$$(\mathbf{M}_F)_{i,j} = \delta_{ij} \sum_{\ell \mid M_i \in T_\ell} \frac{|T_\ell|}{3}.$$

La matrice de masse 2D de la méthode des éléments finis non conformes de Crouzeix-Raviart est égale à la matrice de masse 2D obtenue par la méthode des volumes finis décrite dans la thèse de Emonot [24]. Ce n'est plus le cas en 3D, mais dans le code TrioCFD c'est la la matrice de masse de la discrétisation en volumes finis qui est implémentée pour laquelle

$$(\mathbf{M}_F)_{i,j} = \delta_{ij} \sum_{\ell \mid M_i \in T_\ell} \frac{|T_\ell|}{4}.$$

- La matrice de rigidité $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N_u \times N_u}$ est composée de d blocs diagonaux égaux à $\mathbf{A}_F \in \mathbb{R}^{N_F \times N_F}$ tels que $(\mathbf{A}_F)_{i,j} = (\nabla \phi_i, \nabla \phi_j)_0$. On obtient :

$$(\mathbf{A}_F)_{i,j} = \sum_{\ell \mid M_i, M_j \in T_\ell} |T_\ell|^{-1} \mathbf{S}_{i,\ell} \cdot \mathbf{S}_{j,\ell},$$

où $\mathbf{S}_{i,\ell}$ est le vecteur « face normale » associé à la face opposée au sommet S_i dans le triangle T_ℓ .

La matrice de rigidité de la méthode des éléments finis non conformes de Crouzeix-Raviart est égale à la matrice de rigidité obtenue par la méthode des volumes finis décrite dans la thèse de Emonot.

- La matrice de couplage $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N_T \times N_u}$ est composée de d blocs tels que $\mathbf{B} = (\mathbf{B}^\beta)_{\beta=1}^d$, $\mathbf{B}^\beta \in \mathbb{R}^{N_T \times N_F}$ et :

$$(\mathbf{B}^\beta)_{\ell,j} = -\mathbf{S}_{j,\ell} \cdot \mathbf{e}^\beta$$

- Dans le cas où la pression est P_1 , on a $p_h^n = (P_i^n)_i \in \mathbb{R}^{N_S}$ et la matrice de couplage $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N_S \times N_u}$ est telle que :

$$(\mathbf{B}^\beta)_{i,k} = -\sum_{\ell \mid M_k, S_i \in T_\ell} ((d+1)d)^{-1} \mathbf{S}_{i,\ell} \cdot \mathbf{e}^\beta.$$

III. Modèles de turbulence

III.1

Introduction

Les modèles et méthodes numériques de turbulence peuvent être classées en trois catégories selon les échelles résolues : (1) la méthode de simulation numérique directe (Direct Numerical Simulation – DNS), (2) la simulation des grandes échelles (Large Eddy Simulation – LES) et (3) la méthode des équations de Navier-Stokes moyennées (Reynolds-Averaged Navier-Stokes – RANS). La DNS résout les équations de Navier-Stokes sans modèle de turbulence et toutes les échelles spatiales et temporelles de la turbulence sont résolues. Par conséquent, le maillage en DNS doit être suffisamment fin pour capturer les tourbillons de tailles s'étendant de la plus petite échelle de dissipation (échelle de Kolmogorov) jusqu'à l'échelle de longueur caractéristique de la taille du domaine. La théorie de la turbulence montre que le nombre de points du maillage en DNS 3D est de l'ordre de $O(Re^{9/4})$ où Re est le nombre de Reynolds turbulent. Les coûts de calcul de la DNS sont par conséquent très importants pour des forts nombres de Reynolds.

Contrairement à la DNS, la LES résout seulement les grandes structures des écoulements en filtrant les équations de Navier-Stokes avec un filtre spatial et la petite échelle non résolue est modélisée en utilisant des modèles de sous-grille. La gamme des échelles résolues en LES est beaucoup plus petite qu'en DNS et par conséquent les coûts de calcul sont réduits de façon significative. On présentera les deux principaux modèles LES dans la section 2.

Enfin, les modèles RANS sont composés d'un ensemble d'équations de Navier-Stokes moyennées, avec des modèles de turbulence pour fermer le tenseur de Reynolds supplémentaire qui est induit par les fluctuations. Les modèles RANS résolvent seulement l'écoulement moyen aux échelles macroscopiques et il s'agit de la méthode la plus économique pour la simulation de la turbulence. Dans la suite on présente un des modèles RANS dans la section 3.

III.2

Simulations des grandes échelles

L'approche de la turbulence basée sur la Simulation des Grandes Echelles (SGE, ou Large Eddy Simulation – LES) consiste à obtenir par résolution directe des équations de Navier-Stokes, les caractéristiques de grande taille de la turbulence pour n'avoir à modéliser que les mouvements de « petite taille ». Les contributions des grandes échelles sont isolées en introduisant un opérateur de moyenne spatiale filtrée : $\tilde{f}(\mathbf{x}, t) = \int_V G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') f(\mathbf{x}', t) dV$ et toute fonction du champ de l'écoulement est décomposée en $f(\mathbf{x}, t) = \tilde{f}(\mathbf{x}, t) + f'(\mathbf{x}, t)$ où $f'(\mathbf{x}, t)$ est la fluctuation de sous-maille.

En appliquant l'opérateur de moyenne filtrée aux équations du mouvement on obtient :

$$\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{III.2.0 eq1a})$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\widetilde{u_i u_j}) = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (\text{III.2.0 eq1b})$$

La moyenne spatiale filtrée du produit $\widetilde{u_i u_j}$ est réécrite sous la forme :

$$\widetilde{u_i u_j} = \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \tilde{L}_{ij} + \tilde{R}_{ij}$$

où :

$$\tilde{L}_{ij} = \widetilde{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j \quad (\text{III.2.0 eq2a})$$

$$\tilde{R}_{ij} = \widetilde{\tilde{u}_i u'_j} + \widetilde{u'_j \tilde{u}_i} + \widetilde{u'_i u'_j} \quad (\text{III.2.0 eq2b})$$

La relation (III.2.0 eq2a) caractérise les tensions de Leonard tandis que la relation (III.2.0 eq2b) caractérise les tensions de Reynolds de sous-maille. Le problème de fermeture de la procédure SGE consiste à déterminer une relation de \tilde{R}_{ij} pour obtenir la solution d'une réalisation de l'écoulement.

Smagorinski

Le tenseur des contraintes de sous-maille \tilde{R}_{ij} peut être repris sous la forme :

$$\tilde{R}_{ij} = \tilde{T}_{ij} + \frac{1}{3} \tilde{R}_{kk} \delta_{ij}$$

Un des modèles de sous-maille très répandu est celui de Smagorinsky qui suppose une relation linéaire du tenseur anisotrope \tilde{T}_{ij} avec le champ des déformations filtré \tilde{S}_{ij} telle que :

$$\tilde{T}_{ij} = -2\nu_T \tilde{S}_{ij}$$

La viscosité tourbillonnaire des structures de sous-maille ν_T est choisie telle que :

$$\nu_T = (C_S \Delta)^2 \sqrt{\sum_{ij} \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}} \quad (\text{III.2.0 eq3})$$

où Δ est l'épaisseur du filtre et C_S est une constante positive qui peut varier selon les applications. Dans [54, p. 2203] les auteurs disent que la valeur peut varier de $C_S = 0.05$ à $C_S = 0.16$. Dans TrioCFD la valeur peut être spécifiée dans le fichier de données d'entrée. Par défaut, elle est fixée à $C_S = 0.18$ si elle n'est pas.

LES-WALE

Le modèle alternatif est le modèle LES-WALE (Wall Adaptive Local Eddy-viscosity) [42] :

$$\nu_T = (C_W \Delta)^2 \frac{(\tilde{S}_{ij}^d \tilde{S}_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (\tilde{S}_{ij}^d \tilde{S}_{ij}^d)^{5/4}} \quad (\text{III.2.0 eq4})$$

avec

$$\tilde{S}_{ij}^d = \tilde{S}_{ik} \tilde{S}_{kj} + \tilde{\Omega}_{ik} \tilde{\Omega}_{kj} - \frac{1}{3} \delta_{ij} (\tilde{S}_{mn} \tilde{S}_{mn} - \tilde{\Omega}_{mn} \tilde{\Omega}_{mn})$$

où $\tilde{\Omega}_{ij}$ est défini par

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

Dans l'Eq. (III.2.0 eq4), Δ est choisi à la taille de maille. Lorsque la valeur C_S est égale à 0.18, une valeur appropriée de C_w est comprise entre $0.55 \leq C_w \leq 0.6$ [42, p. 170]. Dans certaines conditions d'écoulements décrites dans [42, sec 3.1], la valeur la plus adaptée est $C_w = 0.5$, et c'est celle choisie dans les simulations ([42, pp. 191 and 192]).

III.3

Modèle RANS

3.1 Équations de Reynolds

La vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ et la pression $p(\mathbf{x}, t)$ du champ d'écoulement d'un fluide incompressible sont régies indépendamment de la température par les équations de continuité et de la quantité de mouvement :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{III.3.1 eq1})$$

$$\rho_0 \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{u} + \rho_0 \mathbf{F}_v \quad (\text{III.3.1 eq2})$$

Lorsque la vitesse et la pression sont traitées comme des fonctions aléatoires de l'espace et du temps dont on décompose les valeurs instantanées en :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= \bar{\mathbf{U}}(\mathbf{x}, t) + \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) \\ p(\mathbf{x}, t) &= \bar{P}(\mathbf{x}, t) + \tilde{p}(\mathbf{x}, t) \end{aligned}$$

où le symbole $\bar{(\)}$ indique l'opérateur de moyenne statistique (ou moyenne d'ensemble) et le symbole $\tilde{(\)}$ les fluctuations (ou écarts par rapport à ces moyennes), les équations moyennées de masse et de quantité de mouvement se traduisent par [10, sec 4 p 73–76] :

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{U}} = 0, \quad (\text{III.3.1 eq3})$$

$$\rho_0 \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{U}} \right] = \nabla \cdot \bar{\Sigma} + \rho_0 \bar{\mathbf{F}}_v \quad (\text{III.3.1 eq4})$$

avec :

$$\bar{\Sigma} = -\bar{P}\mathbf{I} + 2\eta_0\bar{\mathbf{S}} - \rho_0\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}} \quad \text{et} \quad \bar{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\nabla\bar{\mathbf{U}} + \nabla^T\bar{\mathbf{U}}) \quad (\text{III.3.1 eq5})$$

Le bilan de quantité de mouvement moyenne est appelée l'équation de Reynolds. Dans cette équation, les forces de surface font apparaître un terme supplémentaire $-\rho_0\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}$ qui représente l'agitation turbulente. Le système d'équations est ouvert en raison de la présence des corrélations des vitesses fluctuantes $\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}$.

3.2 Modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$

De nombreuses modélisations du tenseur de Reynolds sont possibles, mais nous nous intéressons ici à la plus classique, basée sur l'hypothèse de Boussinesq :

$$\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}} = -\nu_T 2\bar{\mathbf{S}} + \frac{2}{3}\bar{k}\mathbf{I} \quad (\text{III.3.2 eq6})$$

Référence	C'_η	σ_k	σ_ϵ	C_{ϵ_1}	C_{ϵ_2}	écoulement
[35]	0.09	1.0	1.3	1.55	2.00	Haut Reynolds
[39]	0.09	1.0	1.3	1.44	1.92	Tourbillonnant
[11]	0.09	1.0	1.3	1.35	1.92	Bas Reynolds
[25]	0.09	1.0	1.3	1.39	1.80	Bas Reynolds
[41]	0.09	1.0	1.3	1.60	1.92	Jet
[6]	0.09	1.0	1.3	1.40	1.92	Flottabilité

TABLE III.3.1 – Synthèse des valeurs des paramètres du modèle $\bar{k} - \bar{\epsilon}$ (repris de [30]).

où ν_T est une viscosité turbulente scalaire qui traduit les effets d'agitation turbulente. Le terme en \bar{k} au second membre s'apparente à une pression par agitation turbulente et est intégré dans la pression \bar{P} . On obtient ainsi une équation fermée pour la vitesse moyenne. Dans le cadre du modèle à deux équations $\bar{k} - \bar{\epsilon}$ qui nous intéresse, une analyse dimensionnelle donne pour la viscosité turbulente :

$$\nu_T = C'_\eta \frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}} \quad (\text{III.3.2 eq7})$$

Le modèle $\bar{k} - \bar{\epsilon}$ permet de fermer le système d'équations (III.3.1 eq3)–(III.3.1 eq5) en résolvant deux équations supplémentaires, une sur l'énergie cinétique turbulente \bar{k} et l'autre sur le taux de dissipation $\bar{\epsilon}$ suivantes [10, p. 469] (repris de [40, Eq. (2.2-1 et 2.2-2)]) :

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} = \nu_T \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] - \bar{\epsilon} \quad (\text{III.3.2 eq8a})$$

$$\frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} = C_{\epsilon_1} \nu_T \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} \right] - C_{\epsilon_2} \frac{\bar{\epsilon}^2}{\bar{k}} \quad (\text{III.3.2 eq8b})$$

Les équations (III.3.2 eq8a) et (III.3.2 eq8b) sont des équations de type advection-diffusion avec des termes source. Le terme de production d'énergie cinétique turbulente (premier terme du membre de droite) joue un rôle important dans les modélisations pariétales. Les valeurs standards des cinq constantes du modèle C'_η , C_{ϵ_1} , C_{ϵ_2} , σ_k et σ_ϵ sont fixées par défaut à : $C'_\eta = 0.09$, $C_{\epsilon_1} = 1.44$, $C_{\epsilon_2} = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$ et $\sigma_\epsilon = 1.3$. Certaines d'entre elles peuvent aussi varier selon le type d'écoulement considéré (voir table III.3.1) :

3.3 Autres modèles à deux équations

Modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ -« réalisable »

Alternativement au modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$, d'autres modèles de fermeture à deux équations existent dans la littérature : les modèles $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ modifiés (parmi eux le $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ -« réalisable », modèle pour lequel les validations sont en cours). Le modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ -« réalisable » s'écrit [49, Eq. (22) et (23) p. 233] :

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right) + \left(2\nu_T S_{ij} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} - \bar{\epsilon} \quad (\text{III.3.3 eq9a})$$

$$\frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} \right] + C_1 S \epsilon - C_2 \frac{\bar{\epsilon}^2}{\bar{k} + \sqrt{\nu \bar{\epsilon}}} \quad (\text{III.3.3 eq9b})$$

avec

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad C_1 = \max \left\{ 0.43, \frac{\eta}{5 + \eta} \right\}, \quad \eta = \frac{S\bar{k}}{\bar{\epsilon}} \quad (\text{III.3.3 eq10a})$$

et [49, Eq. (19) p. 232 et (21) p. 233] :

$$C_\eta = \frac{1}{A_0 + A_s U^{(*)} \frac{\bar{k}}{\bar{\epsilon}}}, \quad \text{où } A_0 = 4, \quad A_s = \sqrt{6} \cos \phi, \quad \phi = \frac{1}{3} \arccos \left(\sqrt{6} W \right), \quad W = \frac{S_{ij} S_{jk} S_{ki}}{(S_{ij} S_{ij})^{3/2}} \quad (\text{III.3.3 eq10b})$$

et une vitesse $U^{(*)}$ calculée par [49, Eq. (20) p. 232]

$$U^{(*)} = \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij}\tilde{\Omega}_{ij}}, \quad \tilde{\Omega}_{ij} = \Omega_{ij} - 2\epsilon_{ijk}\omega_k, \quad \Omega_{ij} = \bar{\Omega}_{ij}\epsilon_{ijk}\omega_k \quad (\text{III.3.3 eq10c})$$

où $\bar{\Omega}_{ij}$ est le taux de rotation moyen dans un repère de référence en rotation de vitesse angulaire ω_k .

Dans TrioCFD, ce modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ -« réalisable » a été développé et validé dans [3].

3.4 Modèle « bas Reynolds »

Les lois de paroi, établies à partir de résultats expérimentaux, permettent d'éviter de calculer la solution des équations de Navier-Stokes et du modèle de turbulence proche de la paroi. Le modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$, couplé à une loi de paroi, permet ainsi de simuler le cœur de l'écoulement en se préservant d'un coût de calcul trop grand dû à un maillage trop fin proche de la paroi. Cependant, ce type de modèle est inadapté lorsque le premier point du maillage se trouve dans la sous-couche visqueuse ($y^+ < +30$). Plus le nombre de Reynolds est haut plus cette sous-couche visqueuse est d'épaisseur négligeable, ce qui rend le modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ avec loi de paroi bien adapté aux écoulements avec de grand nombre de Reynolds. C'est pourquoi ce modèle est appelé également modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ « haut-Reynolds ». Lorsque l'on étudie des écoulements à faible nombre de Reynolds, la sous-couche visqueuse devient plus importante, ce qui rend l'utilisation d'une loi de paroi inadaptée. à faible nombre de Reynolds, il peut être préférable d'utiliser des modèles, appelés ainsi « bas-Reynolds », qui font désormais appel à des fonctions d'amortissement et des termes dépendants de la discrétisation pour prendre en compte la résolution numérique de la sous-couche visqueuse. Ces modèles permettent également d'étudier l'ensemble de l'écoulement notamment proche de la paroi (par exemple à des effets de recirculation, de décollement pour des géométries complexes). Le modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ bas-Reynolds laisse l'équation de transport de \bar{k} du modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ de base inchangée mais modifie celle de $\bar{\epsilon}$ par adjonction de termes d'atténuation dans la zone proche de la paroi où le nombre de Reynolds est localement plus faible. Du fait d'un maillage de paroi important, ce modèle est donc plus coûteux que le modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ standard. Il existe plusieurs modèles bas-Reynolds dans la littérature [39, 40, 35, 38]. La forme générale de ces modèles peut s'écrire sous la forme (écriture inspirée de [35]) :

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} = \nu_T \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] - \bar{\epsilon} - \bar{\mathcal{K}} \quad (\text{III.3.4 eq11a})$$

$$\frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} = C_{\epsilon_1} \nu_T \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} f_{\epsilon_1} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} \right] - C_{\epsilon_2} f_{\epsilon_2} \frac{\bar{\epsilon}^2}{\bar{k}} \quad (\text{III.3.4 eq11b})$$

$$\nu_T = C_\eta f_\eta \frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}} \quad (\text{III.3.4 eq11c})$$

Modèle « bas-Reynolds » de Launder & Spalding [40]

Pour ce modèle, les termes $\bar{\mathcal{K}}$ et $\bar{\mathcal{E}}$ s'écrivent [40, Eqs. (2.3-4) et (2.3-5)] :

$$\bar{\mathcal{K}} = 2\nu \left(\frac{\partial \bar{k}^{1/2}}{\partial x_j} \right)^2, \quad \bar{\mathcal{E}} = 2.0\nu\nu_T \left(\frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j \partial x_l} \right) \quad (\text{III.3.4 eq12})$$

et les fonctions f_{ϵ_1} , f_{ϵ_2} , f_η sont données par [40, Eqs. (2.3-6) et (2.3-7)] :

$$f_{\epsilon_1} = 1, \quad f_{\epsilon_2} = 1.0 - 0.3e^{-Re_t^2}, \quad f_\eta = e^{-2.5/(1+Re_t/50)}$$

où Re_t est le nombre de Reynolds turbulent défini par $Re_t = \bar{k}^2/\nu\bar{\epsilon}$. Les valeurs des coefficients empiriques sont $C_\eta = 0.09$, $C_{\epsilon_1} = 1.44$, $C_{\epsilon_2} = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$ et $\sigma_\epsilon = 1.3$.

Modèle de Jones & Launder [35]

Ce modèle est formulé dans la référence originale [35] en ne considérant qu'une seule dérivée spatiale $\partial/\partial y$ dans les équations (III.3.4 eq11a) et (III.3.4 eq11b). Dans ce cas, les termes $\bar{\mathcal{K}}$ et $\bar{\mathcal{E}}$ de ce modèle s'écrivent [35, Eqs. (8) et (9)] :

$$\bar{K} = 2\nu \left(\frac{\partial \bar{k}^{1/2}}{\partial y} \right)^2, \quad \bar{\mathcal{E}} = 2.0\nu\nu_T \left(\frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial y^2} \right)$$

qui, en 3D s'écrivent de manière identique aux deux relations de l'équation (III.3.4 eq12). les fonctions f_{ϵ_1} , f_{ϵ_2} , f_η sont données par [35, Eq. (12)] :

$$f_{\epsilon_1} = 1, \quad f_{\epsilon_2} = 1.0 - 0.3e^{-Re_t^2}, \quad f_\eta = e^{-2.5/(1+Re_t/50)}$$

Les paramètres empiriques du modèle sont donnés par [35, Table 1] : $C_\eta = 0.09$, $C_{\epsilon_1} = 1.55$, $C_{\epsilon_2} = 2$, $\sigma_k = 1.0$ et $\sigma_\epsilon = 1.3$. Ce modèle ne se différencie du précédent (celui de Launder & Spalding) que par les valeurs des paramètres C_{ϵ_1} et C_{ϵ_2} .

Modèle de Lam & Bremhorst [38]

Dans ce modèle les termes \bar{K} et $\bar{\mathcal{E}}$ dans les équations (III.3.4 eq11a) et (III.3.4 eq11b) sont nuls et les fonctions f_{ϵ_1} , f_{ϵ_2} , f_η sont données par [38, Eq. (11), (12) et (13)] :

$$f_{\epsilon_1} = 1 + \left(\frac{A_c}{f_\eta} \right)^3, \quad f_{\epsilon_2} = 1 - e^{-Re_t^2}, \quad f_\eta = (1 - e^{-A_\eta Re_y})^2 \left(1 + \frac{A_t}{Re_t} \right)$$

où Re_y est le nombre de Reynolds turbulent qui varie avec la distance y à la paroi et qui est défini par $Re_y = \bar{k}^{1/2} y / \nu$. Les coefficients A_η , A_t et A_c sont calés en comparant les résultats numériques à des mesures expérimentales. Les valeurs obtenues sont ([38, sec. 3.1]) $A_\eta = 0.0165$, $A_t = 20.5$, et $A_c = 0.05$. Les valeurs des autres coefficients sont $C_{\epsilon_1} = 1.44$ et $C_{\epsilon_2} = 1.92$.

Modèle de Launder & Sharma [39]

Ce modèle est formulée pour les écoulements tourbillonnants (disque en rotation) pour lesquels les coordonnées indépendantes sont r et y où r est la distance radiale à l'axe du disque et y est la distance normale à la surface du disque. Dans ce cas, des termes supplémentaires qui impliquent le gradient de V_θ/r apparaissent dans les équations de \bar{k} et de $\bar{\epsilon}$. Les fonctions f_{ϵ_2} et f_η et les constantes sont légèrement différentes [39, Eqs. (5), (6)] :

$$f_{\epsilon_2} = 1.0 - 0.3e^{-Re_t^2}, \quad f_\eta = e^{-3.4/(1+Re_t/50)^2}$$

et [39, Eqs. (5), (6) et valeurs au-dessous] $C_\eta = 0.09$, $C_{\epsilon_1} = 1.44$, $C_{\epsilon_2} = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$ et $\sigma_\epsilon = 1.3$.

Dans TrioCFD

Dans TrioCFD, les modèles de turbulence en $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ « bas Reynolds » de Jones & Launder [35] et celui de Lam & Bremhorst [38] ont été mis en œuvre dans [43]. Les fonctions et paramètres de Launder & Sharma [39] sont également disponibles.

III.4

Lois de parois

Dans le cadre des études de turbulence, en particulier pour des cas avec des géométries complexes, la résolution des phénomènes physiques ayant lieu en proche paroi est généralement coûteuse en terme de temps de calcul car elle demande un maillage très fin dans ces zones où les gradients de vitesse et de température

sont très élevés. Or il est primordial de prédire correctement ces phénomènes car par simple conservation du débit, une mauvaise description pariétale de la vitesse entraînera une mauvaise description au cœur de l'écoulement. Plutôt que de faire porter l'effort sur une résolution fine, il est alors classique de faire porter l'effort sur une modélisation du gradient de vitesse pariétal, qui permet de conserver un maillage relativement grossier à la paroi. Ces approches sont connues sous le nom de " lois de paroi " ou " traitement de paroi " (on rencontre très souvent les termes anglais de " wall functions " et " wall treatment ") et permettent une diminution notable des temps de simulation. Elles sont depuis longtemps intégrées à la plupart des codes de calcul industriels.

Les lois disponibles avec le modèle $\bar{k}-\bar{\epsilon}$ dans **TrioCFD** sont formulées de manière à décrire continûment toute la couche limite. Pour la vitesse adimensionnée, la loi de paroi de Reichardt est utilisée [47] :

$$U^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(1 + \kappa y^+) + A \left(1 - e^{-y^+/11} - \frac{y^+}{11} e^{-y^+/3} \right)$$

avec

$$A = \frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{E}{\kappa} \right)$$

Les valeurs des constantes sont $\kappa = 0.415$ et $E = 9.11$. Asymptotiquement, on retrouve le comportement linéaire lorsque y^+ tend vers zéro, et le comportement logarithmique lorsque y^+ devient " grand ". De plus, cette loi donne une description raisonnable de la zone tampon. Les quantités \bar{k} et $\bar{\epsilon}$ sont décrites, pour tout y^+ , par :

$$\begin{aligned} \bar{k}^+ &= 0.07 y^{+2} e^{-y^+/9} + \frac{1}{\sqrt{C_\eta}} \left(1 - e^{-y^+/20} \right)^2 \\ \bar{\epsilon}^+ &= \frac{1}{\kappa (y^{+4} + 15^4)^{1/4}} \end{aligned}$$

Ces formulations respectent le comportement généralement admis à la paroi, à savoir :

$$\bar{k}(y=0) = 0; \quad \frac{d\bar{k}}{dy}(y=0) = 0; \quad \frac{d\bar{\epsilon}}{dy}(y=0) = 0$$

4.1 Autres modèles de turbulence dans TrioCFD

Signalons que la loi développée par Ciofalo et Collins [13] est également disponible mais uniquement pour la discrétisation VDF de **TrioCFD** (maillages cartésiens). Il est également possible de modifier la valeur des constantes de la loi logarithmique, ou d'imposer la vitesse de frottement, mais cela semble assez peu utile dans les études industrielles. Concernant la LES, la loi de Werner et Wengle est également implémentée [55] ainsi que l'approche TBLE (Thin Boundary Layer Equation).

Modèle $(\bar{k}, \bar{\omega})$ à venir

D'autres modèles de type $(\bar{k}, \bar{\omega})$ existent dans la littérature tels que les modèles $(\bar{k}, \bar{\omega})$ et $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ -SST (Shear Stress Transport). Les systèmes d'équations de ces modèles sont présentés dans la référence [5, sec 2.3.6 pp. 701–705] de laquelle on reprend le modèle (\bar{k}, ω) pour lequel la viscosité turbulence est :

$$\nu_T = \frac{\bar{k}}{\bar{\omega}}, \quad \bar{\omega} = \max \left\{ \omega, C_{lim} \sqrt{\frac{2S_{ij}S_{ij}}{\beta^*}} \right\}, \quad \text{avec } C_{lim} = \frac{7}{8}$$

Le modèle s'écrit [5, p. 702] (repris de [56]) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \sigma^* \frac{\bar{k}}{\omega} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] - \beta^* \bar{k} \omega + \tau_{ij} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \\ \frac{\partial \omega}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \sigma \frac{\bar{k}}{\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] - \beta \omega^2 + \frac{\sigma_d}{\omega} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} + a \frac{\omega}{\bar{k}} \tau_{ij} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \end{aligned}$$

avec :

$$\sigma_d = \begin{cases} 0 & \text{si } \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \leq 0 \\ \sigma_{d0} & \text{si } \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} > 0 \end{cases}, \quad f_\beta = \frac{1 + 85\chi_\omega}{1 + 100\chi_\omega}, \quad \chi_\omega = \left| \frac{\Omega_{ij}\Omega_{jk}S_{ki}}{(\beta^*\omega)^3} \right|, \quad \Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right)$$

Les coefficients sont les suivants :

$$a = 0.52, \quad \beta = \beta_0 f_\beta, \quad \beta_0 = 0.0708, \quad \beta^* = 0.09, \quad \sigma = 0.5, \quad \sigma^* = 0.6, \quad \sigma_{d0} = 0.125$$

IV. Modèles des écoulement diphasiques

IV.1

Modèle à interface diffuse incompressible

1.1 Présentation du modèle

Le modèle *Phase Field* est un modèle à interface diffuse dédié à la simulation numérique directe d'écoulements diphasiques incompressibles de fluides non miscibles. Dans les modèles à interface diffuse, les interfaces séparant les phases du système ne sont pas modélisées comme des surfaces de discontinuité mais comme des zones volumiques de transition à travers lesquelles toutes les grandeurs physiques varient de manière continue. Ces modèles sont basés sur l'introduction d'un paramètre d'ordre caractéristique des phases. Dans le modèle présenté ici, ce paramètre d'ordre est représentatif du taux de présence volumique de l'une des phases, que l'on note φ . Afin de prendre en compte les phénomènes capillaires, importants en simulation numérique directe, l'énergie du système est supposée dépendre de φ mais également de $\nabla\varphi$ sous la forme suivante :

$$E = W(\varphi) + \frac{\alpha}{2} (\nabla\varphi)^2 \quad (\text{IV.1.1 eq1})$$

où α est appelée coefficient de capillarité interne. La fonction $W(\varphi)$ est une fonction double-puit dont la forme la plus simple est :

$$W(\varphi) = \beta\varphi^2(1-\varphi)^2 \quad (\text{IV.1.1 eq2})$$

où β est une constante caractéristique du modèle.

Les coefficients α et β sont caractéristiques de la tension interfaciale σ et de l'épaisseur h des interfaces. En effet, on a les relations suivantes :

$$\sigma = \frac{\sqrt{2\alpha\beta}}{6} \quad (\text{IV.1.1 eq3})$$

$$h = 4\sqrt{\frac{\alpha}{2\beta}} \quad (\text{IV.1.1 eq4})$$

La tension interfaciale σ est une caractéristique des fluides en présence et l'épaisseur h est en général choisie égale à environ 4 ou 5 fois la taille des mailles.

Par application de second principe de la thermodynamique, on peut montrer que les équations du mouvement sont les suivantes :

$$\frac{d\varphi}{dt} = \nabla \cdot \left[\kappa(\varphi) \nabla \left(\tilde{\mu} + \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{u^2}{2} \right) \right] \quad (\text{IV.1.1 eq5})$$

$$\rho(\varphi) \frac{du}{dt} = -\nabla P + \tilde{\mu} \nabla \varphi + \rho(\varphi) g + \nabla \cdot \tau \quad (\text{IV.1.1 eq6})$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (\text{IV.1.1 eq7})$$

où

$$\tilde{\mu} = \frac{dW}{d\varphi} - \nabla \cdot (\alpha \nabla \varphi) \quad (\text{IV.1.1 eq8})$$

est le potentiel chimique généralisé et

$$\rho(\varphi) = \rho_1 + \varphi(\rho_2 - \rho_1) \quad (\text{IV.1.1 eq9})$$

est la masse volumique, ρ_1 et ρ_2 représentant la masse volumique des phase correspondant à $\varphi = 0$ et $\varphi = 1$ respectivement.

Dans le système précédent, d/dt représente la dérivé convective, P est la pression et τ le tenseur des contraintes visqueuses.

L'équation d'évolution de φ (équation IV.1.1 eq5) est appelée **équation de Cahn-Hilliard**. Le coefficient κ apparaissant dans cette équation est appelé **mobilité** et peut dépendre de φ de manière quadratique :

$$\kappa(\varphi) = a\kappa_0\varphi(1 - \varphi) \quad (\text{IV.1.1 eq10})$$

où a et κ_0 sont des constantes.

A noter que le terme $\tilde{\mu}\nabla\varphi$ apparaissant dans l'équation de bilan de quantité de mouvement (équation IV.1.1 eq6) représente les **forces capillaires**.

Changement de variable

Pour des raisons de simplicité de programmation, l'équation de Cahn-Hilliard est considérée comme une équation de convection-diffusion de concentration. Le second membre de l'équation de Cahn-Hilliard (équation IV.1.1 eq5) est considéré comme un terme source, de même que le terme en $\tilde{\mu}\nabla\varphi$ de l'équation de bilan de quantité de mouvement (équation IV.1.1 eq6).

Pour des raisons de symétrie, la "concentration", *i.e.* l'inconnue de l'équation de Cahn-Hilliard, est définie par :

$$c = \varphi - \frac{1}{2} \quad (\text{IV.1.1 eq11})$$

c varie alors de $-1/2$ à $+1/2$ à la traversée d'une interface. Les relations de fermeture $W(\varphi)$, $\rho(\varphi)$ et $\kappa(\varphi)$ doivent donc être modifiées en conséquence :

$$W(\varphi) = \beta \left(c - \frac{1}{2} \right)^2 \left(c + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (\text{IV.1.1 eq12})$$

$$\rho(\varphi) = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2} + c(\rho_2 - \rho_1) \quad (\text{IV.1.1 eq13})$$

$$\kappa(\varphi) = a\kappa_0 \left(\frac{1}{2} + c \right) \left(\frac{1}{2} - c \right) \quad (\text{IV.1.1 eq14})$$

Approximation de Boussinesq

Le modèle général peut être dégradé en utilisant l'**approximation de Boussinesq** dans laquelle la masse volumique est supposée constante mis à part dans le terme de gravité où elle est linéarisée. Cette approximation est celle classiquement utilisée dans **TrioCFD** et les variables servant à la résolution numérique du système d'équations ainsi obtenu sont celles classiquement utilisées dans **TrioCFD**. En particulier, la "pression" utilisée pour la résolution couplée des équations de bilan de quantité de mouvement et de divergence nulle de la vitesse est en fait $(P/\rho_m - gz)$, où $\rho_m = (\rho_1 + \rho_2)/2$ est la masse volumique moyenne et z la coordonnée verticale (suivant la direction de la gravité). Etant donnée la forme IV.1.1 eq13 de la fonction $\rho(c)$, le terme source lié à la gravité, a l'expression suivante :

$$\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_m} cg \quad (\text{IV.1.1 eq15})$$

Cette forme permet de définir la valeur du paramètre **beta_co** (*i.e.* $(\rho_2 - \rho_1)/\rho_m$).

Formes du bilan de quantité de mouvement

Différentes formes du bilan de quantité de mouvement sont possibles et quatre sont actuellement disponibles. Si ces formes sont équivalentes au niveau continu, elles peuvent potentiellement donner des résultats différents du fait de la discrétisation spatiale et de la résolution numérique. Ces formes modifient la définition de la "pression" utilisée pour la résolution de l'équation de Poisson lors de la résolution du bilan de quantité de mouvement (cf paragraphe 1.2). Les formes disponibles sont les suivantes :

Forme 1

$$-\nabla P + \tilde{\mu}\nabla c = -\nabla(P - \tilde{\mu}c) - c\nabla\tilde{\mu} \quad (\text{IV.1.1 eq16})$$

Forme 2

$$-\nabla P + \tilde{\mu} \nabla c = -\nabla (P + W + c \nabla \cdot (\alpha \nabla c)) + c \nabla [\nabla \cdot (\alpha \nabla c)] \quad (\text{IV.1.1 eq17})$$

Forme 3

$$-\nabla P + \tilde{\mu} \nabla c = -\nabla \left(P + W - \alpha \frac{(\nabla c)^2}{2} + c \nabla \cdot (\alpha \nabla c) \right) + c \nabla [\nabla \cdot (\alpha \nabla c)] - \nabla \left(\alpha \frac{(\nabla c)^2}{2} \right) \quad (\text{IV.1.1 eq18})$$

Forme 4

$$-\nabla P + \tilde{\mu} \nabla c = -\nabla (P + W) - \nabla \cdot (\alpha \nabla c) \nabla c \quad (\text{IV.1.1 eq19})$$

La première forme (équation [IV.1.1 eq16](#)) est en général préférée aux autres, plus historiques. Cette forme présente en effet l'avantage numérique d'avoir un terme source nul à l'équilibre, ce dernier étant en particulier caractérisé par la condition $\tilde{\mu} = cste$. En revanche, la "pression" ($P - \tilde{\mu}c$ est constante à la traversée d'une interface courbe à l'équilibre, ce qui ne correspond pas à la pression habituelle des physiciens ; la pression habituelle du physicien est en fait, P).

1.2 Résolution numérique

Le système d'équations [IV.1.1 eq5](#) à [IV.1.1 eq10](#) est résolu numériquement en deux étapes principales :

1. résolution de l'équation de Cahn-Hilliard (équation [IV.1.1 eq5](#)), ce qui permet de déterminer φ^{n+1} et $\tilde{\mu}^{n+1}$;
2. résolution de l'équation de bilan de quantité de mouvement (équation [IV.1.1 eq6](#)) couplée à la contrainte ([IV.1.1 eq7](#)) par une méthode de projection qui permet de déterminer u^{n+1} et P^{n+1} .

La résolution de l'équation de Cahn-Hilliard peut se faire soit de manière explicite, soit de manière implicite. La résolution implicite est effectuée soit par une méthode du point fixe soit par une méthode de Newton-Krylov et permet essentiellement d'augmenter le pas de temps de stabilité (parfois de manière significative). Les schémas de discrétisation en temps des équations de Cahn-Hilliard et de bilan de quantité de mouvement peuvent être différents.

Equation de Cahn-Hilliard

L'avancée en temps du champ de c s'effectue en deux grandes sous-étapes :

1. détermination de $c^{n+1/2}$ en tenant compte uniquement du membre de droite de l'équation de Cahn-Hilliard ; cette étape peut être résolue soit de manière explicite, soit de manière implicite.
2. détermination de c^{n+1} en prenant en compte le terme de convection ; c'est pour cette seconde étape que l'on peut choisir le schéma en temps (Euler, Runge-Kutta, *etc.*).

La résolution explicite de la première sous-étape permet de résoudre l'équation suivante :

$$\frac{c^{n+1/2} - c^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \left[\kappa(c^n) \nabla \left(\tilde{\mu}^n + \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{(u^n)^2}{2} \right) \right] \quad (\text{IV.1.2 eq20})$$

La résolution implicite mérite plus d'explications car elle est basée sur l'utilisation d'une approximation semi-implicite de $\tilde{\mu}$. Pour tout champ ϕ , on note :

$$\phi^{n+1/4} = \theta \phi^{n+1/2} + (1 - \theta) \phi^n, \text{ avec } \theta \in [0; 1] \quad (\text{IV.1.2 eq21})$$

Pour des raisons de stabilité et de précision, la valeur de θ est imposée à 0.6.

$$\frac{c^{n+1/2} - c^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \left[\kappa(c^n) \nabla \left(\tilde{\mu}^{n+1/4} + \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{(u^n)^2}{2} \right) \right] \quad (\text{IV.1.2 eq22})$$

avec

$$\tilde{\mu}^{n+1/4} = W(c^{1/4}) + \nabla \cdot (\alpha \nabla c^{n+1/4}) \quad (\text{IV.1.2 eq23})$$

Le système d'équations [IV.1.2 eq22](#) - [IV.1.2 eq23](#) est non linéaire (du fait de la non linéarité de $W(c)$) et est résolu de manière itérative soit par une méthode du point fixe, soit par une méthode de Newton-Krylov (également appelée méthode GMRES non linéaire). A noter que, pour des raisons de simplification du système non linéaire, la mobilité est toujours déterminée au pas de temps n et non pas au pas de temps $(n + 1)$.

Equation de bilan de quantité de mouvement

L'équation de bilan de quantité de mouvement, couplée à la contrainte de divergence nulle de la vitesse, est résolue par une méthode de projection dont on rappelle ici les grandes étapes. Pour simplifier ici, on considère uniquement un schéma d'Euler explicite et l'on met l'équation de bilan de quantité de mouvement sous la forme suivante :

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla P + F \quad (\text{IV.1.2 eq24})$$

où le vecteur F représente toutes les forces autres que celle de pression. Cette équation est discrétisée de la manière suivante :

$$\rho^n \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = -\nabla P^{n+1} + F \quad (\text{IV.1.2 eq25})$$

où le pas de temps auquel est évalué F n'est pas précisé car cela peut dépendre des problèmes traités. Cependant, les dépendances en u de F doivent être explicites.

Après division par ρ^n application de l'opérateur de divergence et prise en compte de la condition [IV.1.1 eq7](#), on obtient l'équation de Poisson sur la pression suivante :

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho^n} \nabla P^{n+1} \right) = \nabla \cdot \left(\frac{F}{\rho^n} \right) \quad (\text{IV.1.2 eq26})$$

La matrice en pression associée à la discrétisation de cette équation dépend du champ ρ^n et doit par conséquent être assemblée à chaque pas de temps. C'est la raison pour laquelle les méthodes liées aux assembleurs ont dues être modifiées.

V. The Arbitrary Lagrangian-Eulerian Method

V.1

The Arbitrary Lagrangian-Eulerian Method

To determine the flow of a fluid, it is necessary to describe the kinematics of all its material particles throughout time. To do so, one can adopt either an Euler description of motion, in which a fluid particle is identified by its initial position, or a Lagrange description of motion, in which a fluid particle is identified by its instantaneous position. Both descriptions are totally equivalent, leading to different forms of the Navier-Stokes equations that can be discretized on a stationary mesh grid (Euler) or a mesh grid that follows the motion of the fluid particles (Lagrange). In both cases, the mesh grids do not account for the motion of the boundaries, which makes the numerical simulations of the related Navier-Stokes equations delicate. To overpass this problem, several approaches, such as the immersed boundary methods [44, 46, 45], or the Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) method [19, 29, 37] have been developed.

Here, we rely on the ALE method. In the ALE approach, the fluid flow is computed in a domain that is deformed in order to follow the movement of the fluid-solid interface. It provides a hybrid description not associated with the fluid particles and the laboratory coordinates. We associate the description with a moving imaginary mesh that follows the fluid domain. The motion of the ALE computational mesh is independent of the material motion, the approach treats the mesh as a frame that moves with the arbitrary velocity \mathbf{v}_{ALE} . In the Eulerian approach, this velocity is zero, whereas it is equal to the velocity of the fluid particles in the Lagrangian approach. But in the ALE method, this velocity is equal to neither zero nor the velocity of the fluid particles; it varies smoothly and arbitrarily between both of them. This method is a Lagrangian description in zones and directions near solid, and Eulerian elsewhere.

1.1 ALE kinematic description

In the ALE kinematic description, neither the Lagrangian (material frame) configuration $R_{\mathbf{X}}$ (coordinates are denoted by \mathbf{X}), nor Eulerian (spatial frame) configuration $R_{\mathbf{x}}$ (coordinates are denoted \mathbf{x}) is taken as the reference. A third domain is considered, the referential configuration (ALE frame) R_{ξ} in which the reference coordinates (also called mixed coordinates) ξ allows the identification of the grid points [19].

Fig. V.1.1 illustrates this configurations and the transformations which relate them. The referential domain is mapped into the material domain by Ψ and into the spatial domain by Φ . The mapping from the material domain to the referential domain, is representing by :

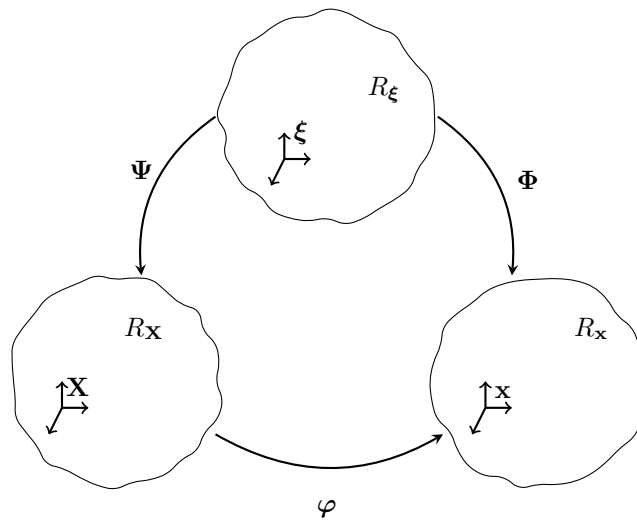
$$\begin{aligned} \Psi^{-1} : R_{\mathbf{X}} \times [t_0, t_{end}[&\longrightarrow R_{\xi} \times [t_0, t_{end}[, \\ (\mathbf{X}, t) &\longmapsto \Psi^{-1}(\mathbf{X}, t) = (\xi, t), \end{aligned} \tag{V.1.1 eq1}$$

and his gradient is :

$$\frac{\partial \Psi^{-1}}{\partial (\mathbf{X}, t)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{X}} & \mathbf{v}_{ALE} \\ \mathbf{0}^T & 1 \end{pmatrix}, \tag{V.1.1 eq2}$$

where $\mathbf{0}^T$ is a null row-vector and the velocity \mathbf{v}_{ALE} is defined as :

$$\mathbf{v}_{ALE}(\mathbf{X}, t) = \left. \frac{\partial \xi}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} (\mathbf{X}, t), \tag{V.1.1 eq3}$$

FIGURE V.1.1 – Lagrangian \mathbf{X} , Eulerian \mathbf{x} , ALE $\boldsymbol{\xi}$ frame references and transformations relating them.

where the index in the partial derivatives indicates the variables that remain constant during the derivation. The Jacobian J determinant :

$$J(\mathbf{X}, t) = \det \left(\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbf{X}} \right)_t (\mathbf{X}, t), \quad (\text{V.1.1 eq4})$$

provides a link between the referential coordinates $\boldsymbol{\xi}$ and the material coordinates \mathbf{X} . It also relates the current volume element dV in the reference frame and the associated volume element dV_0 in the initial configuration :

$$dV(\boldsymbol{\xi}, t) = J(\mathbf{X}, t) dV_0(\boldsymbol{\xi}, t). \quad (\text{V.1.1 eq5})$$

The time rate of change of the Jacobien is given by [18] :

$$\left. \frac{\partial J}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) = J(\mathbf{X}, t) \nabla \cdot \mathbf{v}_{ALE}(\boldsymbol{\xi}, t). \quad (\text{V.1.1 eq6})$$

1.2 ALE form of governing equations

In order to relate the time derivative in the material and referential domains, let a scalar physical quantity be described by $f(\mathbf{X}, t)$ in the material description and by $f^*(\boldsymbol{\xi}, t)$ in the referential domain. Using the mapping $\boldsymbol{\Psi}^{-1}$ (V.1.1 eq1), the transformation from the material description f of the scalar physical quantity to the referential description f^* can be related as :

$$f(\mathbf{X}, t) = f^*(\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{X}, t), t) \quad \text{or} \quad f = f^* \circ \boldsymbol{\Psi}^{-1}, \quad (\text{V.1.2 eq7})$$

and its gradient is given by :

$$\frac{\partial f}{\partial (\mathbf{X}, t)} (\mathbf{X}, t) = \frac{\partial f^*}{\partial (\boldsymbol{\xi}, t)} (\boldsymbol{\xi}, t) \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}^{-1}}{\partial (\mathbf{X}, t)} (\mathbf{X}, t), \quad (\text{V.1.2 eq8})$$

which is amenable to the matrix form :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \quad \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\mathbf{X}} = \left(\frac{\partial f^*}{\partial \boldsymbol{\xi}} \quad \frac{\partial f^*}{\partial t} \right)_{\boldsymbol{\xi}} \begin{pmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbf{X}} & \mathbf{v}_{ALE} \\ \mathbf{0}^T & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{V.1.2 eq9})$$

after block multiplication, it leads to the fundamental ALE relation between the material and the referential time derivatives :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) = \left. \frac{\partial f^*}{\partial t} \right|_{\boldsymbol{\xi}} (\boldsymbol{\xi}, t) + \mathbf{v}_{ALE} \frac{\partial f^*}{\partial \boldsymbol{\xi}} (\boldsymbol{\xi}, t) \quad (\text{V.1.2 eq10})$$

Using the identity $\nabla \cdot (f^* \otimes \mathbf{v}_{ALE}) = f^* \nabla \cdot \mathbf{v}_{ALE} + \mathbf{v}_{ALE} \nabla f^*$, equation (V.1.1 eq6) results is :

$$J \nabla \cdot (f^* \otimes \mathbf{v}_{ALE}) = f^* \left. \frac{\partial J}{\partial t} \right|_{\xi} + J \mathbf{v}_{ALE} \cdot \nabla f^*. \quad (\text{V.1.2 eq11})$$

Finally, from equation (V.1.2 eq11), results :

$$\left. \frac{\partial(Jf)}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} (\mathbf{X}, t) = J(\mathbf{X}, t) \left(\left. \frac{\partial f^*}{\partial t} \right|_{\xi} + \nabla \cdot (f^* \otimes \mathbf{v}_{ALE}) \right) (\xi, t). \quad (\text{V.1.2 eq12})$$

By applying (V.1.2 eq12) to the Navier-Stokes equations, we obtain the local form of the Navier-Stokes equations in a reference frame moving at an arbitrary velocity \mathbf{v}_{ALE} :

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial(J\mathbf{v})}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} (\mathbf{X}, t) = J(\mathbf{X}, t) \left(\nu \Delta \mathbf{v} - \nabla \cdot ((\mathbf{v} - \mathbf{v}_{ALE}) \otimes \mathbf{v}) - \frac{1}{\rho} \nabla p \right) (\xi, t), \\ \nabla \cdot \mathbf{v}(\xi, t) = 0. \end{cases} \quad (\text{V.1.2 eq13})$$

The ALE method gives a formulation of the Navier-Stokes equations in a conservative form with a modification of the transport velocity by the grid's velocity. Furthermore, we can remark that both purely Lagrangian or Eulerian mesh description are contained in the ALE form as particular cases. Chosen $\Psi = \mathbf{I}$ it implies $\mathbf{X} = \xi$ and $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{ALE}$ which results into a Lagrangian description; the Eulerian description corresponds to $\Phi = \mathbf{I}$ which is equivalent to $\mathbf{x} = \xi$ and it implies $\mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0}$.

In the ALE framework, the choice of appropriate fluid mesh velocity is important. This arbitrary mesh velocity keeps the movement of the meshes under control according to the physical problem, and it depends on the numerical simulations. In general, a new elasticity equation is solved. For moderate deformations, one can pose an auxiliary Laplace problem that is known as harmonic mesh motion [20] :

$$\begin{cases} \Delta \mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0} & \text{in the fluid domain,} \\ \mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{v}_S & \text{at a solid interface,} \\ \mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0} & \text{at a free surface,} \end{cases} \quad (\text{V.1.2 eq14})$$

from which the kinematics of the mesh grid is updated, i.e. $\mathbf{x}^{new} = \mathbf{x}^{old} + \Delta t \mathbf{v}_{ALE}$.

V.2

Principle of the ALE numerical method

To determine the flow of a fluid, it is necessary to describe the kinematics of all its material particles throughout time. To do so, one can adopt either an Euler description of motion, in which a fluid particle is identified by its instantaneous position, or a Lagrange description of motion, in which a fluid particle is identified by its initial position. Both descriptions are totally equivalent, leading to different forms of the Navier-Stokes equations that can be discretized on a stationary mesh grid (Euler) or a mesh grid that follows the motion of the fluid particles (Lagrange). In both cases, the mesh grids do not account for the motion of the boundaries, which makes the numerical simulations of the related Navier-Stokes equations delicate.

To overpass this problem, several approaches, such as the immersed boundary methods [44, 46, 45], or the Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) method [19, 29, 37] have been developed. In the ALE approach, a fluid particle is identified by its position relative to a frame moving with a nonuniform velocity \mathbf{v}_{ALE} . In this new frame of reference, the Navier-Stokes equations write

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (\text{V.2.0 eq1a})$$

$$\frac{\partial J\mathbf{v}}{\partial t} = J \left(\nu \Delta \mathbf{v} - \nabla \cdot ((\mathbf{v} - \mathbf{v}_{ALE}) \otimes \mathbf{v}) - \frac{1}{\rho} \nabla p \right), \quad (\text{V.2.0 eq1b})$$

with J the Jacobian of the transformation between the ALE and the Lagrange descriptions. The ALE method is actually a hybrid description between the Euler and the Lagrange descriptions, both of them corresponding to the particular cases $\mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0}$ and $\mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{v}_{particle}$, respectively.

In the ALE framework, the choice of \mathbf{v}_{ALE} is arbitrary as long as the deformation of the mesh grid remains under control. For moderate deformations, \mathbf{v}_{ALE} is usually defined as the solution of an auxiliary Laplace problem, see [20] :

$$\Delta \mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0} \quad \text{in the fluid domain,} \quad (\text{V.2.0 eq2a})$$

$$\mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{v}_{solid} \quad \text{at a solid interface,} \quad (\text{V.2.0 eq2b})$$

$$\mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0} \quad \text{at a free surface,} \quad (\text{V.2.0 eq2c})$$

from which the kinematics of the mesh grid is updated, i.e. $\mathbf{x}^{new} = \mathbf{x}^{old} + \Delta t \mathbf{v}_{ALE}$.

VI. Sensitivity equation method for the Navier–Stokes equations applied to uncertainty propagation

VI.1

Introduction

Sensitivity analysis (SA) studies how changes in the input of a model affect the output, and it is essential for many engineering applications, such as uncertainty quantification, optimal design, and to answer *what if* questions, i.e. what happens to the solution of the model if the input parameters change. These tasks can be performed in many different ways, depending on the nature of the model considered. In this work, we consider systems that can be modelled with partial differential equations (PDEs). The sensitivity variable itself is defined as the derivative of the state (i.e., the output of the model) with respect to the parameters of interest.

In the framework of PDEs, one can distinguish two main classes of methods : the *differentiate-then-discretise* methods and the *discretise-then-differentiate* methods. As the names say, in the first case the state model is formally differentiated with respect to the parameter of interest, providing an analytical sensitivity system which can then be discretised with the most appropriate numerical scheme. The second class of methods swaps the two steps which, in the general case, are not commutative. A detailed comparison between the two classes of methods can be found in [32] for optimisation problems. In this work, we focus on the first class, and, in particular, on the continuous sensitivity equation method [7, 23, 22, 9, 27].

The main aim of this work is to give an estimate of the variance of the solution of the Navier–Stokes equations when there are uncertain parameters and then to use the estimated variance to compute confidence intervals. This goes under the name of forward uncertainty propagation, which is part of the broader field of uncertainty quantification (UQ). Many strategies and techniques have been proposed in the literature to tackle UQ problems, particularly in the case of PDEs models : Monte Carlo method [48], polynomial chaos [52, 57, 36, 17], random space partition [1], to name but a few. A review of these methods applied to fluid dynamics problems can be found in [53].

Methods of uncertainty propagation based on SA are particularly efficient in terms of computational time if compared, for instance, to methods like Monte Carlo. However, since SA is based on Taylor expansions of the state variable with respect to the parameter of interest, these methods are intrinsically local [15] : they can be used only for random variables with a small variance. The Monte Carlo approach does not require this assumption ; however, it is not applicable for realistic unsteady test cases in 2D and 3D, due to its high computational cost. In this work we propose an approach based on the sensitivity equation method : under the hypothesis of small variance of the input parameters, we can provide a first-order estimate of the variance of the solution at a reasonable computational cost.

VI.2

The physical model

In this section, we present the physical model as well as some stability estimates for it and its sensitivity.

2.1 The state equations

Let us consider the domain Ω in Figure VI.2.1 : it is a channel with walls on the top and the bottom and an obstacle of square section at distance x_D from the inflow boundary. The Navier-Stokes system and the boundary conditions for this domain are :

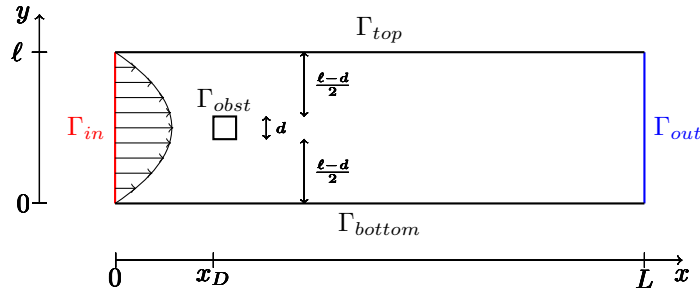


FIGURE VI.2.1 – Domain for the first test case.

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f} & \Omega, t > 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 & \Omega, t > 0, \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = 0 & \Omega, t = 0, \\ \mathbf{u} = -g(y)\mathbf{n} & \text{on } \Gamma_{in}, \\ \mathbf{u} = 0 & \text{on } \Gamma_w = \Gamma_{obst} \cup \Gamma_{top} \cup \Gamma_{bottom}, \\ (\nu \nabla \mathbf{u} - pI)\mathbf{n} = 0 & \text{on } \Gamma_{out}, \end{cases} \quad (\text{VI.2.1 eq1})$$

where $\mathbf{u} = (u^x, u^y)^t$ is the velocity, p is the pressure, \mathbf{f} the external force and $g(y)$ the prescribed inflow condition. The first equation models the conservation of the momentum and the second one the conservation of the mass. In the following, they will be referred to as, respectively, the momentum equation and the mass equation. We impose no slip boundary condition of the walls of the domain, a prescribed velocity at the inflow and a homogeneous Neumann boundary condition at the outflow.

2.2 The sensitivity equations

We now consider \mathbf{u} as a function of space, time and a scalar uncertain parameter a , $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t; a)$ and we write a formal Taylor expansion with respect to a :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t; a + \delta a) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{u}_k(\mathbf{x}, t; a) \delta a^k, \quad (\text{VI.2.2 eq2})$$

where $\mathbf{u}_0 = \mathbf{u}$ and the coefficient \mathbf{u}_k is the k -th derivative of \mathbf{u} with respect to a :

$$\mathbf{u}_k(\mathbf{x}, t; a) := \frac{d^k}{da^k} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t; a),$$

and it is called the k -th order sensitivity. To consider more than one parameter of interest, the sensitivity should be defined as the gradient of the state with respect to the vector of parameters and a multi-dimensional Taylor expansion would be necessary, but this is not treated in this work. A similar expansion can be done for the pressure p , and the data \mathbf{f} , \mathbf{d} , and g . In order to write the equations for the sensitivities, one can replace (VI.2.2 eq2) into (VI.2.1 eq1) and then factorise according to the powers of δa . For $k = 0$ we obtain the state system (VI.2.1 eq1). For $k = 1$, we obtain the first order sensitivity equations. In this work, we consider only first-order sensitivity and the notation $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_a$ will be employed. This choice is common [7, 23, 22, 9, 27] because in most cases first order sensitivities provide enough information. It is possible to consider higher order sensitivities if necessary, but this is not investigated in this work. The first order sensitivity equations, referred to as the sensitivity equations in short, are :

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u}_a - \nu \Delta \mathbf{u}_a + (\mathbf{u}_a \cdot \nabla) \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}_a + \nabla p_a = \mathbf{f}_a & \Omega, t > 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{u}_a = 0 & \Omega, t > 0, \\ \mathbf{u}_a(\mathbf{x}, 0) = 0 & \Omega, t = 0, \\ \mathbf{u}_a = -g_a(y) \mathbf{n} & \text{on } \Gamma_{in}, \\ \mathbf{u}_a = 0 & \text{on } \Gamma_w, \\ (\nu \nabla \mathbf{u}_a - p_a I) \mathbf{n} = 0 & \text{on } \Gamma_{out}, \end{cases} \quad (\text{VI.2.2 eq3})$$

where $\Gamma_w := \Gamma_{obst} \cup \Gamma_{top} \cup \Gamma_{bottom}$. These are known as the Oseen equations : an introduction on the subject can be found in [51], both for the theoretical and the numerical aspects. A similar problem is investigated, although only from a numerical point of view, in [21, 23], where they use the sensitivity for shape optimization problems : in their case an expansion of the normal $\mathbf{n} = \sum \mathbf{n}_k(\mathbf{x}; a) \delta a^k$ is necessary, which leads to more complicated boundary conditions. Remark : if ν is considered as the parameter of interest, the second member of the first equation should be $\bar{\mathbf{f}}_a := \mathbf{f}_a + \nu_a \Delta \mathbf{u}$ and the Neumann boundary condition should have the additional term $\nu_a \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$, but this case is not considered in this work.

VI.3

Uncertainty propagation

In this section, we want to show how the sensitivity can be used to give a first order estimate of the variance of the model output. In this context, the parameter a is a random variable with a known distribution, expected value μ_a , and variance σ_a^2 . Let $X(\mathbf{x}, t; a)$ be a physical variable (i.e. the horizontal or vertical velocity, or the pressure), whose expected value μ_X and variance σ_X^2 we want to estimate. To do this, we start from a Taylor expansion of X with respect to the parameter a centred in the expected value of a , μ_a :

$$X(\mathbf{x}, t; a) = X(\mathbf{x}, t; \mu_a) + (a - \mu_a) X_a(\mathbf{x}, t; a) + o(|a - \mu_a|^2), \quad (\text{VI.3.0 eq1})$$

where $X_a = \partial_a X$ is the sensitivity of X with respect to the parameter a . Computing the expected value of the right and left-hand side of (VI.3.0 eq1), one obtains the following first order estimate :

$$\mu_X(\mathbf{x}, t) = E[X(\mathbf{x}, t; a)] \simeq X(\mathbf{x}, t; \mu_a) + E[(a - \mu_a)] X_a(\mathbf{x}, t; a) = X(\mathbf{x}, t; \mu_a). \quad (\text{VI.3.0 eq2})$$

Using again the Taylor expansion (VI.3.0 eq1) and the estimate just obtained for the average (VI.3.0 eq2), we obtain an estimate of the variance :

$$\sigma_X^2(\mathbf{x}, t) = E[(X(\mathbf{x}, t; a) - \mu_X(\mathbf{x}, t))^2] \simeq E[(a - \mu_a)^2] X_a^2(\mathbf{x}, t; a) = \sigma_a^2 X_a^2(\mathbf{x}, t; a). \quad (\text{VI.3.0 eq3})$$

The estimates (VI.3.0 eq2)-(VI.3.0 eq3) are valid only where the Taylor expansion (VI.3.0 eq1) holds, i.e. for small variances of the random parameter σ_a^2 . However, one can have an estimate of the variance with just one simulation of the state and one of the sensitivity, which is a minimal computational cost when compared to methods such as Monte Carlo that require thousands of simulations of the state to estimate the variance. In the general case, when more than one parameter is uncertain, to provide an estimate of the variance, one would need one simulation for the state and as many simulations of the sensitivity as the number of uncertain parameters [26]. This makes the sensitivity approach really affordable and highly competitive when the number of uncertain parameters is small enough. In the next subsection, we compare the results of the SA approach with the well-known Monte Carlo method [48].

The estimated variance can be used for multiple purposes. In this work, we use it to compute some confidence intervals for the physical variables, i.e. find an interval CI_X such that the probability that X falls into CI_X is bigger than $1 - \alpha$. Standard choices for α are 0.05 or 0.01. If the distribution of the random variable X is known, some precise estimates for the extrema of the interval exist. However, SA does not provide any insight of what the distribution of the output is. Therefore we start from Chebyshev inequality [34], which states that for any random variable with finite expected value and variance

$$P(|X - \mu_X| \geq \lambda) \leq \frac{\sigma_X^2}{\lambda^2}.$$

By imposing the desired level for confidence interval, i.e. $\alpha = \frac{\sigma_X^2}{\lambda^2}$, one gets $\lambda = \frac{\sigma_X}{\sqrt{\alpha}}$, therefore

$$CI_X = \left[\mu_X - \frac{\sigma_X}{\sqrt{\alpha}}, \mu_X + \frac{\sigma_X}{\sqrt{\alpha}} \right]. \quad (\text{VI.3.0 eq4})$$

VII. Perspectives

Plusieurs perspectives d'amélioration de ce document initial sont d'ores et déjà à prévoir. D'une part, il s'agit de compléter et de détailler les modèles physiques des cas tests de validation déjà existants tels que les modèles d'écoulement quasi-compressibles (modèles de type « bas Mach ») ou encore les modèles qui impliquent des couplages avec les équations du transport d'espèces. D'autre part, les sections seront complétées avec les méthodes numériques dédiées à la résolution des modèles physiques.

Annexe A : liste des fiches de validation dans TrioCFD

Cette annexe présente deux tables qui regroupent l'ensemble des fiches de validation disponibles dans TrioCFD. Ce travail de synthèse a été réalisé sur la version 1.7.5. Le fichier **Excel** est accessible dans le répertoire `/data/tmptrust/validation/main_Validation175` qui contient également le fichier PDF **Synthese_fiches_validation_V2.pdf** dont les deux tables ci-dessous en sont une synthèse. Dans la dernière colonne des deux tables, les mots clés suivants sont utilisés :

Mot clé	Correspondance
C_d_t	Convection_diffusion_temperature
C_d_t_t	Convection_diffusion_temperature_turbulent
C_d_c_t	Convection_diffusion_concentration_turbulent
C_d_ch_QC	Convection_diffusion_chaleur_QC
C_d_ch_t_QC	Convection_diffusion_chaleur_turbulent_QC
pb_thermohyd_t_s_p	pb_thermohydraulique_turbulent_scalaires_passifs
pb_thermohyd_t_QC	pb_thermohydraulique_turbulent_QC

TABLE VII.0.1 – Correspondance des mots clés utilisés dans les tables [VII.0.2](#) et [VII.0.3](#).

TABLE VII.0.2 – Liste des cas tests et des fiches de validations regroupées par thèmes

Thèmes	Nb	Problem	Equations
1. Conduction	3	Keyword pb_conduction + pb_thermohydraulique + pb_thermohydraulique_turbulent	Nb 3 3 1 1 1
2. Incompressible laminar pipe and channel flow	3	Keyword pb_thermohydraulique + pb_conduction	Nb 3 2
3. Incompressible turbulent pipe and channel flow	45	Keyword pb_thermohydraulique_turbulent pb_hydraulique_turbulent pb_thermohydraulique_turbulent + pb_conduction	Nb 19 22 4 2
4. Flow through curved pipes	2	Keyword pb_hydraulique_turbulent pb_thermohydraulique_turbulent	Nb 1 1
5. Impinging or submerged jet	6	Keyword pb_hydraulique_concentration_turbulent pb_thermohydraulique_turbulent ??	Nb 3 2 1 1
6. Thermal stratification	5	Keyword pb_thermohydraulique_turbulent pb_thermohydraulique ??	Nb 2 2 1 1
7. Natural/mixed convection	7	Keyword pb_thermohydraulique_turbulent pb_thermohydraulique pb_thermohydraulique_QC pb_thermohydraulique + pb_conduction + pb_couple_rayonnement	Nb 1 (+1) 3 (+1) 1 1 1 1 (+1) 1 (+1) 1

TABLE VII.0.3 – Liste des cas tests et des fiches de validations regroupées par thèmes (suite)

Thèmes	Nb	Problem	Equations
8. Obstacles in axial or cross flow	9	Keyword pb_hydraulique 1 pb_hydraulique_turbulent 5 pb_thermohydraulique_turbulent 1 ?? 2	Keyword Navier_Stokes_standard 1 Navier_Stokes_turbulent 5 Navier_Stokes_turbulent + C_d_t_t 1 ?? 2
9. Diffusor	1	Keyword pb_hydraulique_turbulent 1 Keyword pb_hydraulique_turbulent 6 pb_thermohydraulique_turbulent 1	Keyword Navier_Stokes_turbulent 1 Keyword Navier_Stokes_turbulent 6 Navier_Stokes_turbulent + C_d_t_t 1
10. Channel or pipe flow with abrupt changing cross section	7	Keyword pb_hydraulique_turbulent 6 pb_thermohydraulique_turbulent 1	Keyword Navier_Stokes_turbulent 6 Navier_Stokes_turbulent + C_d_t_t 1
11. Poiseuille flow	16	Keyword pb_thermohyd_t_s_p 1 pb_hydraulique_turbulent 1	Keyword Navier_Stokes_turbulent 2 + C_d_t_t 1
12. Isotropic Homogenous Turbulence	2	Keyword pb_thermohyd_t_s_p 1 pb_hydraulique_turbulent 1	Keyword Navier_Stokes_turbulent 2 + C_d_t_t 1
13. Flow through porous media	3	Keyword pb_thermohydraulique_QC 6 pb_thermohyd_t_QC 3 + pb_conduction 1	Keyword Navier_Stokes_QC + C_d_ch_QC 6 Navier_Stokes_turbulent_QC + C_d_ch_t_QC 2 + Conduction Navier_Stokes_turbulent Navier_Stokes_turbulent_QC C_d_t_t 1 C_d_ch_t_QC
14. Quasi-compressible flow	9		
15. Advection of passive scalars using different convection schemes	3		
16. Test of grid convergence	4		
17. Miscellaneous tests	14		
18. Front-Tracking	21		
Total	160		

Bibliographie

- [1] Remi Abgrall and Pietro Marco Congedo. A semi-intrusive deterministic approach to uncertainty quantification in non-linear fluid flow problems. *Journal of Computational Physics*, 235 :828–845, 2013.
- [2] P.-E. Angeli, U. Bieder, and G. Fauchet. Overview of the triocfd code : Main features, V&V procedures and typical applications to nuclear engineering. In *NURETH-16, Chicago, IL, August 30-September 4, 2015*.
- [3] 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, 2019.
- [4] P.-E. Angeli, A. Puscas, G. Fauchet, and A. Cartalade. FVCA8 benchmark for the Stokes and Navier-Stokes Equations with the TrioCFD Code – Benchmark Session. In *C. Cancès et P. Omnès, éditeurs : Finite Volumes for Complex Applications VIII – Methods and Theoretical Aspects*, pages 181 – 203. Springer, 2017.
- [5] C.D. Argyropoulos and N.C. Markatos. Recent advances on the numerical modelling of turbulent flows. *Applied Mathematical Modelling*, 39(2) :693 – 732, 2015.
- [6] A. Majid Bahari and Kourosh Hejazi. Investigation of buoyant parameters of $k-\epsilon$ turbulence model in gravity stratified flows. *International Journal of Physical and Mathematical Sciences*, 3(7) :494 – 501, 2009.
- [7] J. Borggaard and J. Burns. A PDE sensitivity equation method for optimal aerodynamic design. *Journal of Computational Physics*, 136(2) :366 – 384, 1997.
- [8] Sébastien Candel. *Mécanique des fluides, 2ème Ed.* Dunod, 2001.
- [9] C. Chalons, R. Duvigneau, and C. Fiorini. 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.
- [10] Patrick Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides*. CÉPADUÈS-ÉDITIONS, 2000.
- [11] Kuei-Yuan Chien. Predictions of channel and boundary-layer flows with a low-reynolds-number turbulence model. *AIAA Journal*, 20(1) :33–38, 1982.
- [12] A. J. Chorin. Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations. *Math. Comp.*, 22(104) :745–762, 1968.
- [13] M. Ciofalo and M.W. Collins. $k-\epsilon$ predictions of heat transfer in turbulent recirculating flows using an improved wall treatment. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 15(1) :21–47, 1989.
- [14] M. Crouzeix and P.-A. Raviart. Conforming and nonconforming finite element methods for solving the stationary Stokes equations. *RAIRO, Sér. Anal. Numer.*, 33, 1977.
- [15] C. Delenne. *Propagation de la sensibilité dans les modèles hydrodynamiques*. PhD thesis, Montpellier II, 2014.
- [16] DES-CEA. Code CEA TrioCFD. http://triocfd.cea.fr/Pages/Presentation/TrioCFD_code.aspx.

-
- [17] Bruno Després, Gaël Poëtte, and Didier Lucor. Robust uncertainty propagation in systems of conservation laws with the entropy closure method. In Uncertainty quantification in computational fluid dynamics, pages 105–149. Springer, 2013.
 - [18] J. Donea, S. Giuliani, and J.-P. Halleux. An arbitrary lagrangian-eulerian finite element method for transient dynamic fluid-structure interactions. Computer methods in applied mechanics and engineering., 33 :689–723, 1982.
 - [19] J. Donea, A. Huerta, J. Ph. Ponthot, and A. Rodríguez-Ferran. Arbitrary Lagrangian–Eulerian Methods. American Cancer Society, 2004.
 - [20] F. Duarte, R. Gormaz, and S. Natesan. Arbitrary Lagrangian-Eulerian method for Navier-Stokes equations with moving boundaries. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering., 193 :4819–4836, 2004.
 - [21] R. Duvigneau and D. Pelletier. Evaluation of nearby flows by a shape sensitivity equation method. In 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, page 127, 2005.
 - [22] R. Duvigneau and D. Pelletier. A sensitivity equation method for fast evaluation of nearby flows and uncertainty analysis for shape parameters. International Journal of Computational Fluid Dynamics, 20(7) :497–512, 2006.
 - [23] R. Duvigneau, D. Pelletier, and J. Borggaard. An improved continuous sensitivity equation method for optimal shape design in mixed convection. Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals, 50(1) :1–24, 2006.
 - [24] Ph. Emonot. Méthode de volumes éléments finis : applications aux équations de Navier-Stokes et résultats de conve. PhD thesis, Université Claude Bernard – Lyon I, 1992.
 - [25] Sixin Fan, Budugur Lakshminarayana, and Mark Barnett. Low-reynolds-number k-epsilon model for unsteady turbulent boundary-layer flows. AIAA Journal, 31(10) :1777–1784, 1993.
 - [26] C. Fiorini. Sensitivity analysis for nonlinear hyperbolic systems of conservation laws. PhD thesis, Université Paris Saclay, 2018.
 - [27] C. Fiorini, C. Chalons, and R. Duvigneau. A modified ensitivity equation method for Euler equations in presence of shocks. Numerical methods for partial differential equations, 2019.
 - [28] T. Fortin. Une méthode éléments finis à décompositoin L^2 d’ordre élevé motivée par la simulation d’écoulement dip. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie – Paris VI, 2006.
 - [29] G. Furestey and S. Piperno. A second-order time-accurate ALE Lagrange-Galerkin method applied to wind engineering and control of bridge profiles. Computer methods in applied mechanics and engineering., 193 :4117–4137, 2004.
 - [30] A. Genty. Optimisation de paramètres du modèle de turbulence $k-\epsilon$ pour les écoulements avec stratification thermique. étude préliminaire. Technical Report DEN/DANS/DM2S/STMF/LATF/NT/2019-65405/A, CEA, 2019.
 - [31] J.-L. Guermond and L. Quartapelle. On stability and convergence of projection methods based on pressure poisson equation. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 26(9) :1039–1053, 1998.
 - [32] M. D. Gunzburger. Perspectives in flow control and optimization, volume 5. Siam, 2003.
 - [33] S. Heib. Nouvelles discrétisations non structurées pour des écoulements de fluides à incompressibilité renforcée. PhD thesis, Université Paris 6, 2003.
 - [34] J. Jacod and P. Protter. Probability essentials. Springer Science & Business Media, 2012.
 - [35] W.P Jones and B.E Launder. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. International Journal of Heat and Mass Transfer, 15(2) :301 – 314, 1972.
 - [36] O.M. Knio and O.P. Le Maitre. Uncertainty propagation in CFD using polynomial chaos decomposition. Fluid Dynamics Research, 38(9) :616–640, September 2006.
-

-
- [37] 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 :1441–1466, 2000.
 - [38] C.K.G. Lam and K. Bremhorst. A Modified Form of the $k-\epsilon$ Model for Predicting Wall Turbulence. Journal of Fluids Engineering, 103(3) :456–460, 09 1981.
 - [39] B.E. Launder and B.I. Sharma. Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. Letters in Heat and Mass Transfer, 1(2) :131 – 137, 1974.
 - [40] B.E. Launder and D.B. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 3(2) :269 – 289, 1974.
 - [41] R.C. Morgans, B.B. Dally, G.J. Nathan, P.V. Lanspeary, and D.F. Fletcher. Application of the revised wilcox (1998) $k-\omega$ turbulence model to a jet in co-flow. In Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries CSIRO, Melbourne, Australia, 6-8 December, 1999.
 - [42] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. Flow, Turbulence and Combustion, 62(3) :183–200, Sep 1999.
 - [43] M. Peybernès. Modèles de turbulence dans TrioCFD. Technical Report DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF/NT/16-009/A, CEA, 2016.
 - [44] M. A. Puscas and L. Monasse. A three-dimensional conservative coupling method between an inviscid compressible flow and a moving rigid solid. SIAM Journal on Scientific Computing, 37 :B884–B909, 2015.
 - [45] M. A. Puscas, L. Monasse, A. Ern, C. Tenaud, and C. Mariotti. A conservative embedded boundary method for an inviscid compressible flow coupled with a fragmenting structure. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 103 :970–995, 2015.
 - [46] M. A. Puscas, L. Monasse, A. Ern, C. Tenaud, C. Mariotti, and V. Daru. A time semi-implicit scheme for the energy-balanced coupling of a shocked fluid flow with a deformable structure. Journal of Computational Physics, 296 :241–262, 2015.
 - [47] H. Reichardt. Die wärmeübertragung in turbulenten reibungsschichten. ZAMM – J. Appl. Math. Mech., 20(6) :297–328, 1940. Translation : HEAT TRANSFER THROUGH TURBULENT FRICTION LAYERS.
 - [48] C. Robert and G. Casella. Monte Carlo statistical methods. Springer Science & Business Media, 2013.
 - [49] Tsan-Hsing Shih, William W. Liou, Aamir Shabbir, Zhigang Yang, and Jiang Zhu. A new $k-\epsilon$ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. Computers & Fluids, 24(3) :227 – 238, 1995.
 - [50] R. Temam. Une méthode d’approximation de la solution des équations de Navier-Stokes. S. M. F., 96 :115–152, 1968.
 - [51] J. Volker. Lecture notes on numerical methods for incompressible flow problems II, **Chapter 4**, 2014.
 - [52] R. Walters. Towards stochastic fluid mechanics via polynomial chaos. In 41st AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, USA, 2003.
 - [53] R. W. Walters and L. Huyse. Uncertainty analysis for fluid mechanics with applications. Technical report, National aeronautics and space administration, Hampton, VA, Langley research center, 2002.
 - [54] M. Weickert, G. Teike, O. Schmidt, and M. Sommerfeld. Investigation of the LES WALE turbulence model within the lattice boltzmann framework. Computers & Mathematics with Applications, 59(7) :2200 – 2214, 2010. Mesoscopic Methods in Engineering and Science.
 - [55] M. Werner and M. Wengle. Large-eddy simulation of turbulent flow over and around a cube in a plate channel. In 8th Symposium on Turbulent Shear Flows, Munich, Germany, 1991.
 - [56] David C. Wilcox. Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. AIAA Journal, 26(11) :1299–1310, 1988.
 - [57] D. Xiu and George E. Karniadakis. Modeling uncertainty in flow simulations via generalized polynomial chaos. Journal of computational physics, 187(1) :137–167, 2003.
-