

Simulations numériques de dispersion de gaz lourds dans une couche limite turbulente

Saura Nathaniel *sous la supervision de :*

Mr. Louis GOSTIAUX

Mr. Emmanuel LÉVÊQUE

Mr. Bastien DI PIERRO

Mr. Pietro SALIZZONI

Mr. Lionel SOULHAC

Soutenance de stage de 5^{ème} année de Polytech Lyon filière mécanique.



Motivations du stage



Illustration 1: Experimental study of dense gas releases at the Nevada Spill Test facility.

- L'éjection de nuages lourds dans la couche limite atmosphérique est au cœur des problématiques environnementales et sécuritaire
 - Fuites de gaz industriels
 - Explosions
- L'étude de leur dispersion est fondamentale pour en améliorer la prise en charge

➤ Le modèle $k - \varepsilon$

- Permet l'obtention rapide de résultats
- Outil utilisé par les industriels
- Précision discutable

➤ La méthode des réseaux de Boltzmann

- Permet l'obtention rapide de résultats
- Outil en pleine expansion en recherche et en industrie
- Précision importante à faible nombre de mach

Plan de la présentation

I. Étude $k - \varepsilon$ de l'évolution du nuage

1. Simulation et les profils utilisés
2. Richardson, hauteur et vitesse moyenne de transport du nuage
3. Résultats et discussions

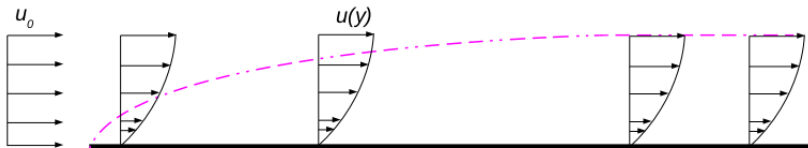
II. La méthode de Boltzmann sur réseaux

1. Hypothèses et éléments de théorie
2. Implémentation : dynamique à deux temps
3. Changement de discrétisation et conditions aux limites

Écoulement et domaine considérés

La couche limite turbulente

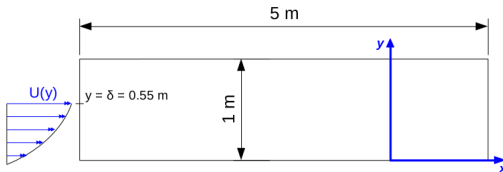
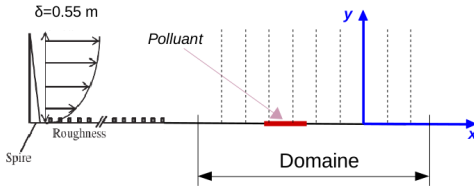
- Écoulement considéré : couche limite turbulente



- Constantes caractéristiques du problème issus des expériences menées par Hervé Gamel dans la Soufflerie Atmosphérique i11, utilisées pour les simulations Fluent
 - Vitesse en dehors de la couche limite : $U_\infty = 6.33 \text{ m/s}$
 - Hauteur de rugosité $z_0 = 1.38 \text{ mm}$: l'action du sol
 - Vitesse de frottement $u_* = 0.34 \text{ m/s}$
 - Hauteur de transition $\delta = 0.55 \text{ m}$.

Écoulement et domaine considérés

Domaine d'étude de la simulation



- Injection de polluant à 0.7 m de l'entrée
- Taille d'injecteur variable (de 1 à 20 cm)
- Injection de profils k , U_x et ε en entrée et pression imposée en sortie
- "Symmetry" en haut et non glissement à la paroi

Modèle $k - \varepsilon$

RANS : Reynolds Averaged Navier-Stokes

- Décomposition de Reynolds :

$$\underbrace{X}_{\text{Champ total}} = \underbrace{\bar{X}}_{\text{Champ moyen (temporel)}} + \underbrace{x}_{\text{champ fluctuant : écart à la moyenne}}$$

- Équation du champs moyen de la vitesse (RANS) stationnaire

$$\bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \underbrace{\frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j}}_{\text{Champ fluctuant}}$$

- Énergie cinétique turbulente k et sa dissipation ε

$$k = \frac{1}{2} \left(\overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2} \right)$$
$$\varepsilon \simeq \nu \overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}$$

Modèle $k - \varepsilon$: modèle à deux équations

L'équation de k et de ε dans le modèle $k - \varepsilon$

\times k :

$$\overline{U}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial k}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mathcal{P} - \varepsilon$$

\times ε :

$$\overline{U}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{C_{\varepsilon 1} \mathcal{P}}{\rho} - C_{\varepsilon 2} \varepsilon \right)$$

- Le modèle $k - \varepsilon$ ne calcule que les champs moyens et simule les champs fluctuant à partir de **constantes** (Launder 1974) ...

C_μ	C_{ε_1}	C_{ε_2}	σ_k	σ_ε
0.09	1.44	1.92	1.0	1.31

TABLE – Tableau présentant le jeu de constantes classique et couramment accepté pour le $k - \varepsilon$.

- ... Et de l'hypothèse de Boussinesq (1877) :

$$-\overline{u_i u_j} = \nu_t \left(\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij}$$

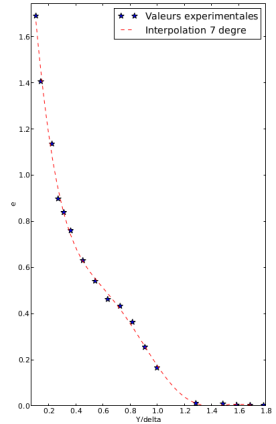
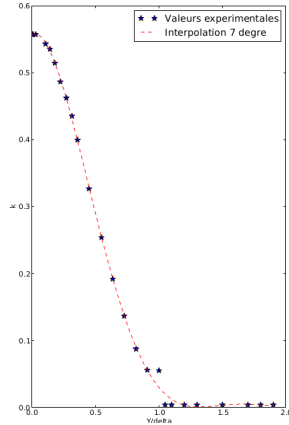
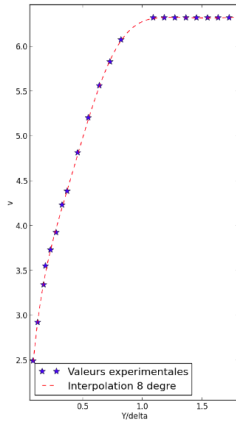
- Équation d'évolution de la viscosité turbulente

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

- 4 équations pour 4 inconnues

- Création du maillage
- Création des UDF (User Defined Function) en trois étapes
 - Récupération des données de Gamel et établissement fits polynomiaux
 - ✕ Utilisation des points expérimentaux
 - ✕ Prolongement : hypothèse laminaire
 - Écriture de ces polynômes dans des codes C appelés UDF
- Compilation de ces UDF avant initialisation Fluent

Profils expérimentaux et leur approximation



Tracés de U_x , de k et de ϵ en fonction de la hauteur adimensionnée par δ

Résultats des simulations avec les profils initiaux de Gamel

Critère de validation des résultats

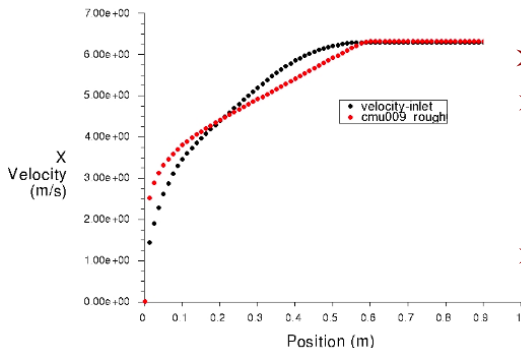
Similarité des profils de vitesse entrée/sortie après convergence
Fluent.

Résultats des simulations avec les profils initiaux de Gamel

Critère de validation des résultats

Similarité des profils de vitesse entrée/sortie après convergence
Fluent.

➤ Comparaisons entrée sortie après convergence : U_x



- Le profil continue de s'établir
- Ajout d'une source de quantité de mouvement pour compenser les frottements au sol n'y change rien
- Incompatibilité du niveau de précision des données et du $k - \varepsilon$.

Utilisation des profils théoriques

- Conservation des constantes du problèmes (U_∞ , δ , z_0)

$$U_{theo}(y) = \frac{u_*}{\kappa} \ln \left(\frac{y}{z_0} \right)$$

$$\varepsilon_{theo}(y) = \frac{u_*^3}{\kappa y}$$

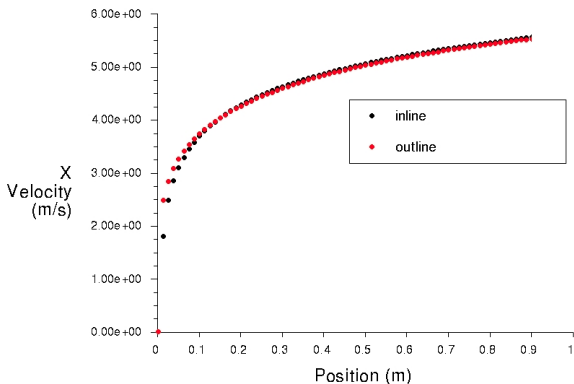
$$k_{theo} = \frac{u_*^2}{\sqrt{C_\mu}}$$

- Comparaisons Entrées Sorties après convergence de Fluent (ajout de la source quantité de mouvement)

Comparaisons avec les profils théoriques

Critère de validation des résultats

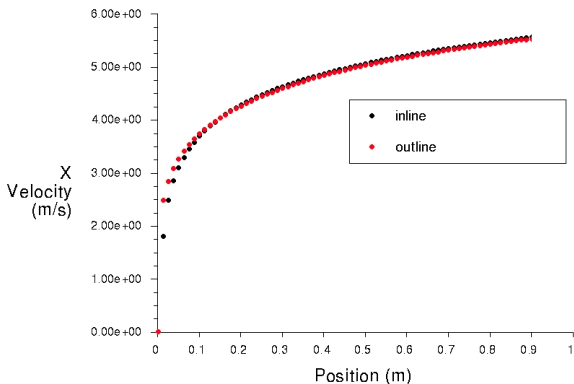
Similarité des profils de vitesse entrée/sortie après convergence
Fluent.



Comparaisons avec les profils théoriques

Critère de validation des résultats

Similarité des profils de vitesse entrée/sortie après convergence Fluent.



- Le profil est établi
- Ajout indispensable d'une source de quantité de mouvement
- Profils gardés pour la suite

Définition du nombre de Richardson

Un nombre adimensionné, beaucoup d'interprétations

Définition formelle du Richardson

$$Ri = \frac{\text{Énergie potentielle}}{\text{Énergie cinétique}} \equiv \frac{\text{Flottabilité}}{\text{Inertie}}$$

Définition du nombre de Richardson

Un nombre adimensionné, beaucoup d'interprétations

Définition formelle du Richardson

$$Ri = \frac{\text{Énergie potentielle}}{\text{Énergie cinétique}} \equiv \frac{\text{Flottabilité}}{\text{Inertie}}$$

➤ Nombre adimensionné \Rightarrow nécessité de spécifier les échelles

- Énergie potentielle du **nuage**

- × Définition du poids du nuage $g'_s = g(\rho_s - \rho_a) / \rho_a$

- × Définition de la hauteur du nuage h_p (slide suivante)

- Énergie cinétique **ambiante** caractérisée u_*

$$Ri = \frac{g'_s h_p}{u_*^2}$$

➤ Approximation de Boussinesq : variations de masse volumique négligeables si non multipliées par g et $\rho_{air} = \rho_{env}$

Caractérisation de l'évolution du nuage

h_p et U_p

Définition de la hauteur du nuage h_p

La hauteur du nuage est définie comme la hauteur maximale pour laquelle on mesure une différence significative de masse volumique :

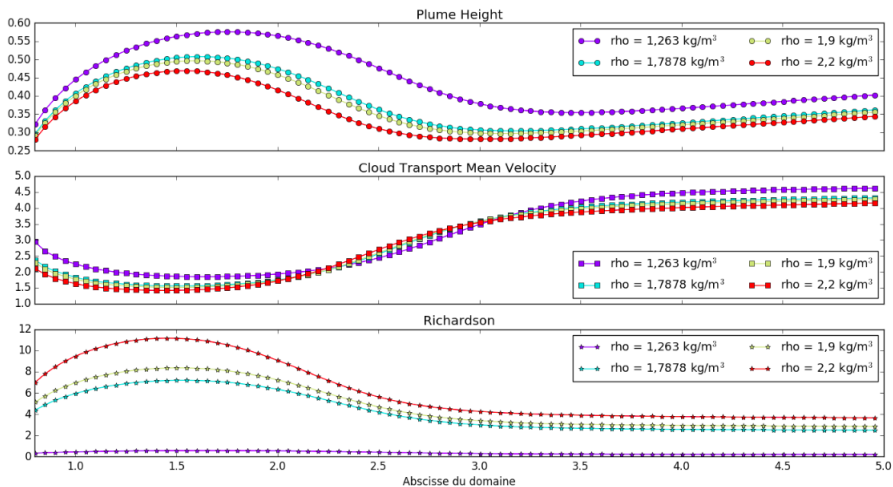
$$h_p = \int_0^{\infty} \frac{\rho(x, y) - \rho_a}{\rho_s - \rho_a} dy$$

Définition de la vitesse de transport moyen du nuage U_p

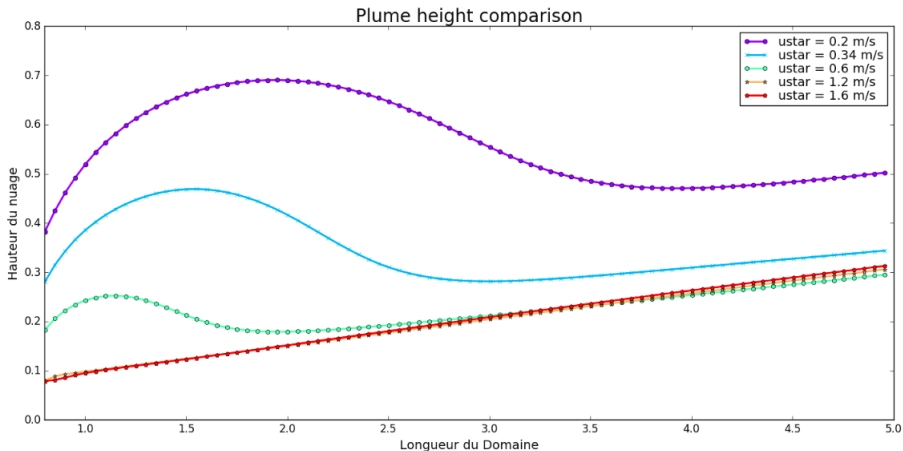
La vitesse de transport moyen du nuage est définie comme la vitesse moyenne de l'écoulement pondérée par les différences de masse volumiques observables :

$$U_p(x) = \frac{\int_0^{\infty} U(x, y) (\rho(x, y) - \rho_a) dy}{\int_0^{\infty} (\rho(x, y) - \rho_a) dy}$$

Similitude dans les comportements



Richardson Vs h_p



Bilan des actions du Richardson

Richardson : paramètre de Bulk Stability

➤ Sur la vitesse :

- Corrélation entre U_p et Ri
- Les zones concentrées peu affectées par U_p . Zone supérieure du nuage happée par cette dernière.

Bilan des actions du Richardson

Richardson : paramètre de Bulk Stability

- Sur la vitesse :
 - Corrélation entre U_p et Ri
 - Les zones concentrées peu affectées par U_p . Zone supérieure du nuage happée par cette dernière.
- Sur la hauteur du nuage
 - Force d'Archimède ou agitation turbulente ;
 - Deux facettes du Richardson

Bilan des actions du Richardson

Richardson : paramètre de Bulk Stability

- Sur la vitesse :
 - Corrélation entre U_p et Ri
 - Les zones concentrées peu affectées par U_p . Zone supérieure du nuage happée par cette dernière.
- Sur la hauteur du nuage
 - Force d'Archimède ou agitation turbulente ;
 - Deux facettes du Richardson
- Ri : critère de stabilité à l'étirement/contraction (Bulk Stability)
 - Pour de forts Richardson, la vitesse de transport est réduite et le nuage est compact, tassé sur lui même
 - Pour de faibles Richardson c'est l'inverse le nuage est vite emporté et sa dispersion s'accroît

Motivations des simulations Boltzmann sur Réseau LBM

- Simuler un cas de dispersion de nuage lourd 3D instationnaire
- Massivement parallélisable
- Détails de la méthode et des premiers travaux constituent la deuxième partie de cette présentation

La méthode de Boltzmann sur Réseau (LBM)

Hypothèses

Origine de la LBM

La LBM est issue de la théorie cinétique des gaz. On suppose que :

- Les molécules
 - sont petites, $D_{\text{molécules}} \ll l_{\mu}$ (**gaz dilué**)
 - sont de masse, de forme et de volume identiques
 - se déplacent à une vitesse **proche de la vitesse du son**
- La dynamique est
 - **seulement** due aux **collisions** inter-particule
 - régie par **l'équation de Boltzmann**

La méthode de Boltzmann sur Réseau (LBM)

Hypothèses

Origine de la LBM

La LBM est issue de la théorie cinétique des gaz. On suppose que :

- Les molécules
 - sont petites, $D_{\text{molécules}} \ll l_{\mu}$ (**gaz dilué**)
 - sont de masse, de forme et de volume identiques
 - se déplacent à une vitesse **proche de la vitesse du son**
- La dynamique est
 - **seulement** due aux **collisions** inter-particule
 - régie par **l'équation de Boltzmann**
- $f^{(N)}(\vec{x}, \vec{p}, t)$: fonction de distribution : probabilité de trouver N particules au point (\vec{x}, \vec{p}) à l'instant t .
- N répliques de $f^{(1)} \equiv f$ pour décrire la dynamique d'un gaz

la LBM

Discrétisation

➤ Discrétisation de l'espace des phases

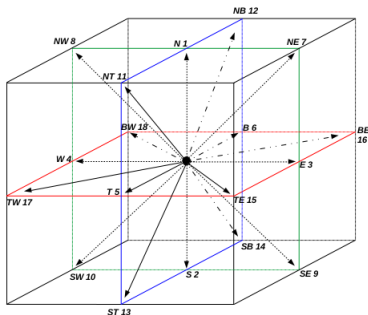
- Discrétisation du domaine en réseaux (lattices)
- Ensemble de Q vitesses possibles muni de poids $\{c_a, w_a\}$

➤ Calcul des densités discrètes f_a sur chaque site du réseau

➤ Discrétisation temporelle

$$\rho_{\text{réseau}} = \sum_{a=0}^{Q-1} f_a$$

$$\vec{u}_{\text{réseau}} = \frac{1}{\rho} \sum_{a=0}^{N_{\text{chemins}}} f_a \vec{c}_a$$



Principe de la LBM

l'équation de Boltzmann discrétisée

L'équation de Boltzmann discrétisée (LBE)

On résout l'équation dite de Boltzmann sur réseaux, sur l'espace discrétisé :

$$f_a(\vec{x}_a + \vec{c}_a \Delta t, t + \Delta t) = f_a(\vec{x}_a, t) + \Delta t \Omega_a(\vec{x}_a, t)$$

- Introduction de distribution f à l'équilibre f^{eq}
 - Équilibre en gains/pertes de molécules *i.e.* énergie gagnée puis perdue
 - Égalisation de la probabilité de présence de particules
 - Prends en compte les lois de conservation de l'hydrodynamique (masse, quantité de mouvement, énergie...)
- Nécessité de trouver $\Omega \rightarrow$ modèle de Bhatnagar, Gross et Krook

La LBM dans le modèle de Bhatnagar, Gross et Krook

LBGK

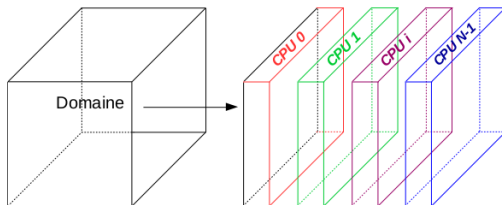
Bhatnagar, Gross et Krook introduisent en 1954 le LBGK qui consiste principalement à écrire :

$$\Omega(f, f) = -\frac{1}{\tau} (f - f^{\text{eq}})$$
$$f^{\text{eq}} = \sum_{i=1}^{Q-1} \rho w_i \left(1 + 3 \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{u}}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{\vec{u}^2}{c^2} \right)$$

➤ Ces deux expressions sont extrêmement importantes

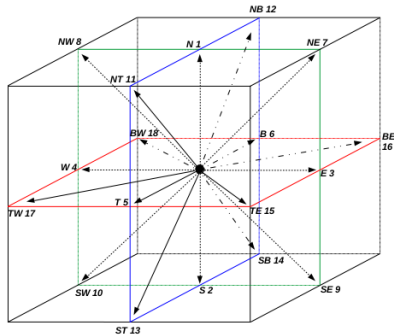
Spécificité du code d'Emmanuel Lévêque

- Programmation Orientée Objet (POO)
 - Classes, attributs, méthodes
 - Surcharges de méthodes pour gagner en lisibilité
- Parallélisé : M(essage) P(assing) I(nterface)

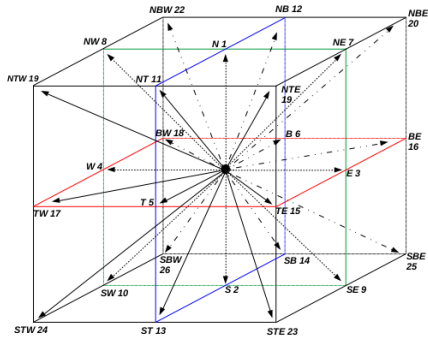


- Conditions aux limites tri-périodiques avec GhostNodes
- Fichier d'entrée : dimensions des grilles, largeur de la tranche...
- Écrit pour la discrétisation D_3Q_{19} que nous avons transcrit en D_3Q_{27}

D_3Q_{19} et D_3Q_{27}



D_3Q_{19} et D_3Q_{27}



Dynamique en deux temps

La collision

La collision est modélisée par la fonction d'équilibre qui est construite à partir des conservations des moments hydrodynamiques. Elle s'écrit :

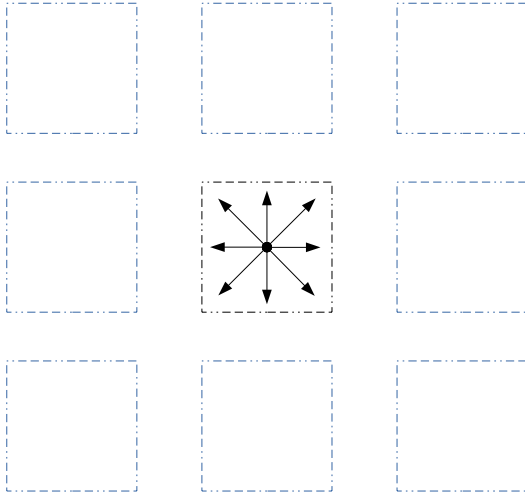
$$f_a^* (\vec{x}_a, t) = f_a (\vec{x}_a, t) - \frac{1}{\tau} (f_a (\vec{x}_a, t) - f_a^{\text{eq}} (\vec{x}_a, t))$$

La propagation (streaming)

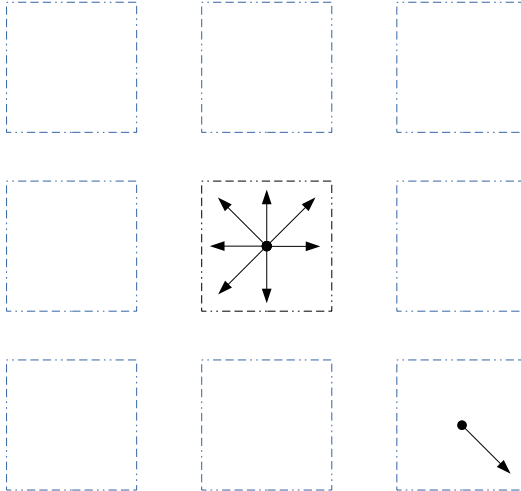
Propagation des populations dans le sens de leur direction de propagation \vec{c}_a

$$f (\vec{x}_a + \vec{c}_a \Delta t, t + \Delta t) = f_a^* (\vec{x}_a, t)$$

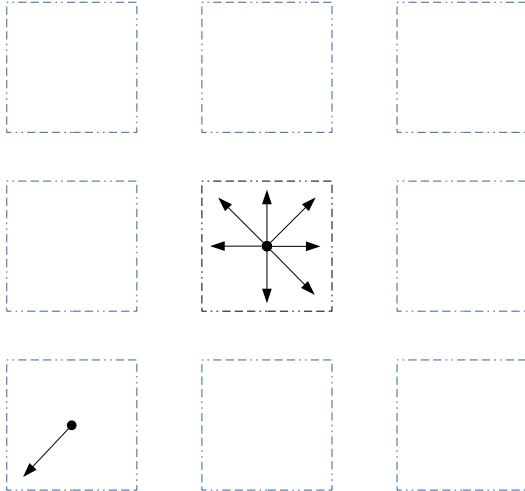
Collision et propagation



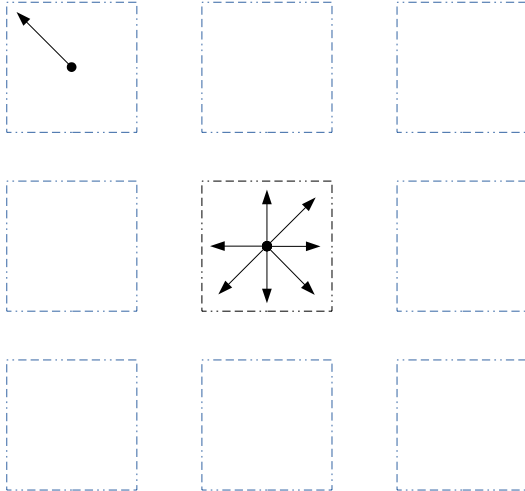
Collision et propagation



Collision et propagation



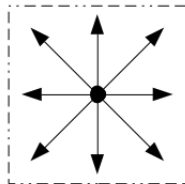
Collision et propagation



Modifications des conditions aux limites

Simuler une couche limite : modélisation du non glissement

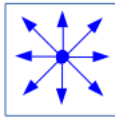
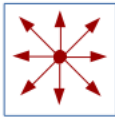
- Conditions de non glissement au Sud
 - Suppression communication Nord-Sud *i.e.* de la périodicité Nord-Sud
 - Modélisation de la paroi : annulation de la vitesse
- Le Bounce Back répond à la question de la provenance des populations orientées Nord dans les réseaux les plus proches de la paroi Sud.



Modifications des conditions aux limites

Simuler une couche limite : modélisation de la condition de non glissement

➤ Configuration initiale



Pré Collision (t)

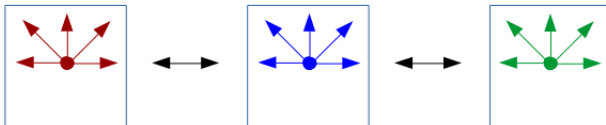
$y = 0$



Modifications des conditions aux limites

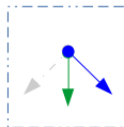
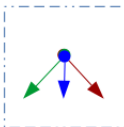
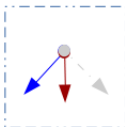
Simuler une couche limite : modélisation de la condition de non glissement

- Configuration intermédiaire : mi parcours propagation dans les Ghostnodes



Étape intermédiaire ($t + \frac{dt}{2}$)

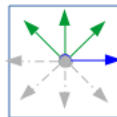
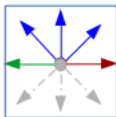
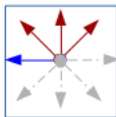
$y = 0$



Modifications des conditions aux limites

Simuler une couche limite : modélisation de la condition de non glissement

- Configuration finale fin de l'itération



Post Collision ($t+\underline{dt}$)

No-Slip

$y=0$

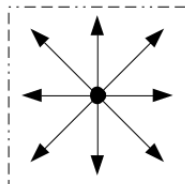


- Les particules ont "rebondi". Sans l'étape intermédiaire, on perd en précision.

Modifications des conditions aux limites

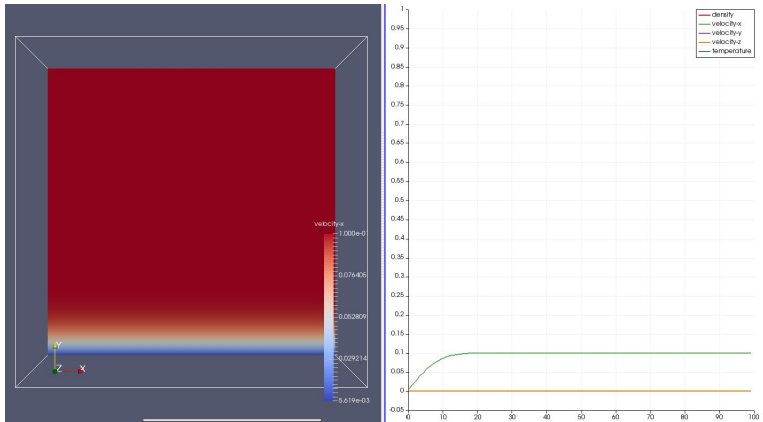
Simuler une couche limite : modélisation du glissement

- Conditions de glissement au Nord
 - Suppression communication Nord-Sud *i.e.* de la périodicité Nord-Sud
 - Modélisation du glissement : annulation de la composante de vitesse normale à la paroi
- Le Bounce Back spéculaire répond à la question de la provenance des populations orientées Sud dans les réseaux les plus proches de la limite Nord du domaine.



Validation des conditions aux limites

- Validation : profil initial uniforme puis établissement de la couche limite



Conclusion de la présentation

Ce stage et sa suite

➤ Deux approches différentes

○ Études autour du $k - \varepsilon$

- ✕ Modèle et approximations
- ✕ Construction simulation
- ✕ Retrouver les résultats de Briggs (2001)

○ Études autour de la LBM

- ✕ Méthode et dynamique
- ✕ Éléments sur la précision et la stabilité
- ✕ Implémentation des conditions aux limites

Conclusion de la présentation

Ce stage et sa suite

➤ S'inscrivant dans la suite des projets

○ $k - \varepsilon$

- ✗ Problématiques avec obstacles
- ✗ Thèse expérimentale à venir pour comparaison
- ✗ Détermination de paramètres de contrôle et loi de similitude

○ LBM

- ✗ D_3Q_{19} à D_3Q_{27} pour méthode plus élaborée
- ✗ Implémentation de stratification, ou force de flottabilité
- ✗ injection de scalaire dans le domaine

Merci

Merci pour votre attention

Annexe

Le nombre de Knudsen et la limite incompressible

➤ Nombre de Knudsen (Kn) :

- Compare échelles micro sur macro
- Définit le modèle requis pour la description d'un problème

Le Kn indique l'outil de description à utiliser

Plus les échelles sont proches plus on devra raffiner la description du milieu

Expressions de Kn

$$\text{Kn} = \frac{l_\mu}{l_M} = \frac{\tau_\mu}{\tau_M} = \frac{\text{Ma}}{\text{Re}}$$

La limite incompressible : ajuster le Mach pour que l'équation de Boltzmann puisse décrire l'hydrodynamique

Annexe

La LBM dans le modèle de Bhatnagar, Gross et Krook

LBGK

Bhatnagar, Gross et Krook introduisent en 1954 le LBGK qui consiste à écrire :

$$\Omega(f, f) = -\frac{1}{\tau} (f - f^{\text{eq}})$$

$$f^{\text{eq}} = \sum_{i=1}^{Q-1} \rho w_i \left(1 + 3 \frac{\vec{c}_i \cdot \vec{u}}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{\vec{u}^2}{c^2} \right)$$

$$c_s = \frac{c}{\sqrt{3}} \quad \text{et} \quad c = \frac{\Delta x}{\Delta t} = 1$$

Raisons du passage $D_3Q_{19} \rightarrow D_3Q_{27}$

- Pour améliorer la stabilité et augmenter le nombre de Mach maximum
 - D_3Q_{27} admet plus de degrés de liberté que D_3Q_{19}
 - ✗ Plusieurs vitesses du son possibles
 - ✗ Poids w_a associé à chaque densité de propagation c_a , non fixé
 - Prends en compte des tenseurs d'ordre supérieur corrigeant certaines erreurs et modes spurieux
- Pour utiliser la méthode dite cascadée
 - Méthode plus robuste et plus stable, permettant la considération de Mach plus élevés (proche de l'unité)
 - Nécessitant que $Q = 3^D$

La procédure de Chapman-Enskog : quelques résultats

- La procédure de Chapman-Enskog permet d'écrire :

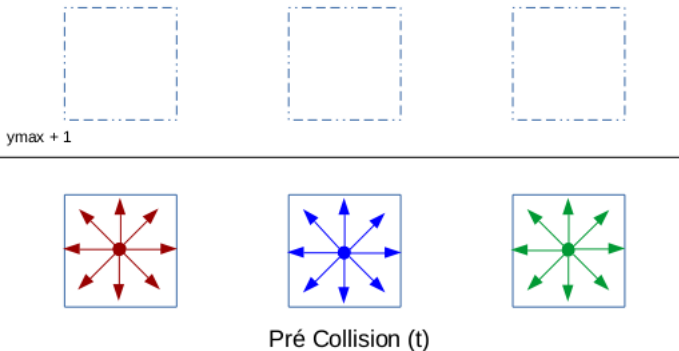
$$\nu = c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right)$$

- Elle permet d'obtenir les solutions de Navier-Stokes avec une erreur d'ordre $\mathcal{O}(u^3)$
- Fonction d'équilibre construite pour $\text{Ma}^2 \ll 1$
- Prendre une vitesse U_{LB} assez faible permet de construire un Mach *numérique faible* et réduire les erreurs.
- Existence de modèle avec plusieurs temps de relaxation

Modifications des conditions aux limites

Simuler une couche limite : modélisation de la condition de glissement

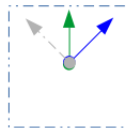
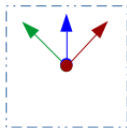
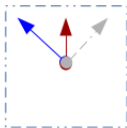
➤ Configuration initiale



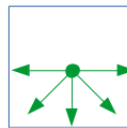
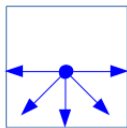
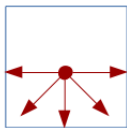
Modifications des conditions aux limites

Simuler une couche limite : modélisation de la condition de glissement

- Configuration intermédiaire : mi parcours propagation dans les Ghostnodes



ymax + 1

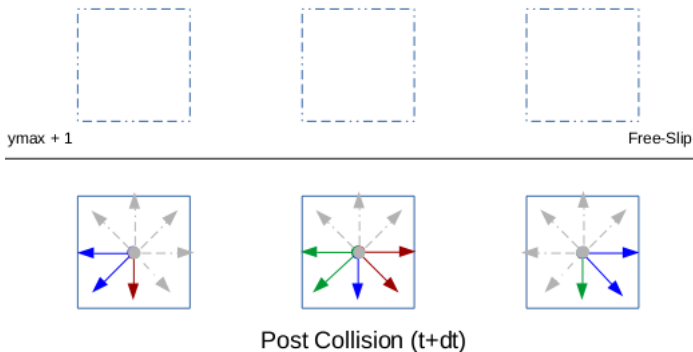


Étape intermédiaire (t+dt/2)

Modifications des conditions aux limites

Simuler une couche limite : modélisation de la condition de glissement

- Configuration finale fin de l'itération : réflexion spéculaire



- Conservation de la vitesse tangentielle

Annexe

Richardson Vs U_p

