

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Intitulé : Atomisation d'un liquide dans un environnement gazeux incompressible sur maillage Cartésien : développement et évaluation d'une approche multidirectionnelle nouvelle.

Référence : **SNA-DMPE-2025-25** (à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : 1/10/2025

Date limite de candidature : 1/7/2025

Mots clés : Atomisation, méthode Level set, Volume of Fluid (VOF), schéma WENO, schéma multidirectionnel quasi ENO

Profil et compétences recherchées : candidat issu d'une école d'ingénieur, connaissances en atomisation, compétences en schémas numériques, capacité à programmer et à tester les idées.



Simulation directe de l'atomisation primaire d'un jet liquide par un écoulement gazeux avec le code DyJeAT, maillage 4 milliards de points, 86000 cœurs de calcul, 45 millions d'heures de simulation

Présentation du projet doctoral, contexte et objectif

Contexte

Depuis plusieurs années l'ONERA/DMPE/MH développe le code de calcul DyJeAT qui simule les écoulements diphasiques de type liquide gaz par une approche DNS (Direct Numerical Simulation). Cet outil utilise des maillages cartésiens uniformes et des schémas directionnels qui tirent profit des directions des lignes de maillage. La méthode de discrétisation des équations est de type Volumes Finis. En pratique, cette approche est efficace mais elle peut présenter des limites lorsque les phénomènes d'intérêt ne sont pas alignés avec les lignes du maillage. On doit donc envisager une approche multidirectionnelle afin d'éviter ce défaut. Parmi ces approches, on trouve les méthodes de reconstruction polynômiales dites k-exacte à stencil étendu comme celle proposée par Ollivier-Gooch et Van Altena [1]. On construit un polynôme de degré p sous la contrainte que ce polynôme approche "au mieux" la solution sur une molécule de points et afin d'avoir une molécule symétrique (stencil), le nombre de cellules dépasse généralement le nombre de monômes du polynôme. Les monômes sont obtenus par résolution d'un système linéaire non carré avec la méthode des moindres carrés. Si la molécule de points est trop petite, il en résulte des soucis de stabilité ou de convergence [2]. Fort heureusement, l'approche fonctionne nominalement sur molécule de points étendue. On peut ensuite comparer la reconstruction locale de la solution avec les champs disponibles sur le stencil. Cela donne un critère de régularité de la solution. En répétant le processus, on sait obtenir une représentation de la solution sur le stencil induisant la plus faible des oscillations. On parle alors d'approche quasi-ENO [3].

Ce nouveau schéma coûte numériquement cher mais nous avons montré dans [4] que l'approche est prometteuse : les solutions obtenues avec le schéma de référence de type WENO5 et ceux de l'approche à l'ordre 3 sont de qualité comparable. Ce surcoût est contrebalancé par la mise à disposition d'un schéma totalement multidirectionnel en remplacement d'un schéma 1D par direction. Afin de diminuer le coût de calcul, l'approche peut être combinée avec la méthode de déconvolution publiée récemment [5]. Elle permet de construire le gradient et la Hessienne « exacts » par résolution d'un système linéaire carré. Le système linéaire obtenu est inversible et il semble que son conditionnement soit toujours petit. Dans le cadre d'un stage de fin d'étude en 2023 [4], on a démontré la faisabilité des schémas proposés à l'ordre 2 et 3 en 1D et à l'ordre 2 en 2D sur un cas élémentaire d'équation de convection linéaire.

Objectifs

On souhaite dans ce projet de thèse implémenter dans le code DyJeAT l'approche précédente sur les équations de transport de l'interface (Level-set et Vof). On évaluera l'apport de la reconstruction polynomiale sur la définition des quantités géométriques de l'interface, notamment la normale et la courbure qui servent à calculer les forces capillaires.

Ensuite, on étendra la méthodologie pour résoudre des points durs rencontrés actuellement dans la résolution de l'équation de la conservation de la quantité de mouvement. En effet, avec l'approche actuelle, on observe dans certains cas des problèmes de conservation de l'énergie du système car des transferts d'énergie non physiques entre les phases peuvent apparaître, induisant des divergences du calcul ou, pire, des résultats non physiques [6], ce qui oblige à dégrader la qualité de l'approximation à l'ordre 1 pour garantir la stabilité des calculs.

Une troisième étape concernera l'optimisation numérique en termes de temps de calcul. En effet, ces approches multidimensionnelles augmentent l'intensité arithmétique. Une implémentation optimisée permettra de tirer profit des nouvelles architectures sur lesquelles on effectuera les simulations.

Dans le cadre de cette thèse, nous prévoyons que le doctorant participera à plusieurs communications, comme par exemple, les conférences sur les méthodes volumes finis. Les premiers résultats obtenus dès le stage en 2023 [4] permettent d'envisager une publication assez rapidement sur le sujet, sans doute au début de la thèse, en tirant profit des résultats déjà obtenus. Plusieurs types de journaux peuvent être ciblés (méthodes numériques, journaux spécialisés sur l'atomisation...)

Références principales :

- [1] C. Ollivier-Gooch and M. Van Altena, A high-order accurate unstructured mesh finite-volume scheme for the advection - diffusion equation, *Journal of Computational Physics*, 181(2), pp. 729–752, 2002.
- [2] T. Bridel Bertomeu, Immersed boundary conditions for hypersonic flows using ENO-like least-square reconstruction, *Computers & Fluids*, 215, pp. 104791, 2021.
- [3] C. Ollivier-Gooch, Quasi-ENO schemes for unstructured meshes based on unlimited data-dependent least-squares reconstruction. *Journal of Computational Physics*, 133:6-17, 1997.
- [4] J. Malazeyrat, An original high-order-accurate and polydirectional scheme with finite volume method for fluid-interface problems using the level-set method, MSc Polytech' Marseille and ONERA, 2023.

[5] M. Bernard, G Lartigue, G. Balarac, V. Moureau and G. Puigt, A framework to perform high-order deconvolution for finite-volume method on simplicial meshes, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 92:1551–1583, 2020.

[6] D. Zuzio, A new efficient momentum preserving Level-Set/VOF method for high density and momentum ratio incompressible two-phase flows, Journal of Computational Physics, Volume 410, 2020, 109342, ISSN 0021-9991, <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109342>.

Collaborations envisagées NA

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Département : DMPE

Lieu (centre ONERA) : Toulouse

Contact : Davide ZUZIO, Jean-Luc ESTIVALEZES et
Guillaume PUIGT

Tél. : 0562252845

Email : davide.zuzio@onera.fr, jean-luc.estivalezes@onera.fr,
guillaume.puigt@onera.fr

Directeur de thèse

Nom : Guillaume PUIGT, Davide ZUZIO

Laboratoire : ONERA/DMPE

Tél. : 0562252940 / 0562252845

Email : guillaume.puigt@onera.fr,
davide.zuzio@onera.fr

Pour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>