## Sujet de PFE

## Schémas d'ordre élevé pour le transport de sprays

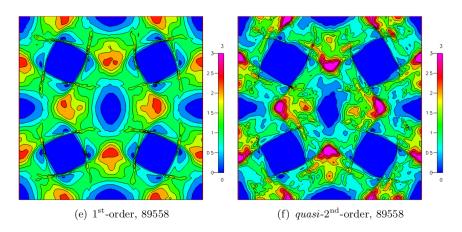


FIGURE 1 – Simulation numérique sur maillage de triangles du transport de particules dans des tourbillons de Taylor-Green par un schéma d'ordre 1 et un schéma quasi d'ordre 2 (issu de [1]).

Contexte. Les sprays sont des ensembles de particules solides ou liquides, transportées par un fluide. La simulation du transport des sprays est un thème important tant dans les domaines industriel (combustion, peinture) que médical (diffusion de virus comme le covid ou administration de médicaments par inhalation comme la ventoline) ou environnemental (échange océan-atmosphère). D'un point de vue physique, les particules composant un spray peuvent être considérées comme des particules ponctuelles, porteuses de certaines quantités (masse, vitesse, énergie, composition chimique, etc.).

Le spray peut alors être modélisé par un système, dit lagrangien, d'équations différentielles décrivant l'évolution des paramètres des particules au cours du temps sous l'effet des diverses forces qui s'exercent sur elles (force de traînée exercée par le fluide porteur, gravité, poussée d'Archimède, etc.), des échanges de masse et d'énergie avec le fluide (changement de température, évaporation, condensation), et des interactions entre particules (fragmentation, coalescence). Un tel système devient vite trop complexe quand le nombre de particules composant le spray devient grand.

Il est alors pertinent de décrire le spray au moyen d'une densité de particules dans l'espace des paramètre position-vitesse (et masse-énergie-etc.). Cette densité est solution d'une équation cinétique dite de Williams-Boltzmann (voir [2]). Si cette équation est encore trop complexe pour une simulation efficace, elle peut être simplifiée par la technique des modèles aux moments, comme la méthode QMOM [3]. Cette méthode réduit l'équation de Williams-Boltzmann à un système d'équations faiblement hyperboliques dont les inconnues sont des variables macroscopiques comme la densité, la quantité de mouvement, ou l'énergie des particules.

D'un point de vue numérique, la grand difficulté est de construire des schémas qui soient suffisamment précis. Le schéma le plus robuste, d'ordre 1, est affecté d'une diffusion numérique importante, d'autant plus nuisible que l'on veut faire une simulation sur des temps grands et/ou sur de longues distances. Sur les systèmes obtenus par la méthode QMOM, les méthodes d'ordre élevé usuelles (MUSCL, DG, etc.) sont très peu robustes, même avec des limiteurs a priori, et en pratique pas vraiment utilisables. Une approche récente a montré une certaine avancée dans ce domaines (voir la figure 1), mais ne permet pas vraiment d'obtenir une méthode d'ordre très élevé.

Objectifs. Le but de ce PFE est d'étudier une autre approche, assez récente et très prometteuse : la méthode MOOD [4], dont l'idée consiste à simuler l'évolution d'un système hyperbolique assez général sur un pas de temps avec un schéma d'ordre éventuellement très élevé, sans limiteur a priori, et de corriger a posteriori les mailles dans lesquelles ont été obtenues des valeurs incorrectes. Cette méthode a été appliquée avec succès sur les équations d'Euler ou de Navier-Stokes, mais n'a jamais encore été testée sur des problèmes de transport de spray.

En outre, il faudra adapter cette méthode à la prise en compte des termes sources induits par les forces s'exerçant sur les particules. Ces termes sources étant assez raides, il conviendra d'étudier la possibilité d'utiliser des méthodes numériques de type implicites.

**Profil recherché.** Nous recherchons une personne ayant des compétences en mathématiques appliquées, calcul scientifique, et calcul haute performance (HPC), avec des notions de mécanique des fluides.

Encadrement Ce PFE sera encadré par Rodolphe Turpault et Luc Mieussens, professeurs à l'ENSEIRB-MATMECA et à l'Institut de Mathématiques de Bordeaux, et par Raphaël Loubère, directeur de recherche au CNRS et à l'Institut de Mathématiques de Bordeaux. Le stage de 5 mois se déroulera dans les locaux de l'Institut de Mathématiques de Bordeaux, et pourra commencer dès le 1er février 2024. Contacts :

- Raphaël Loubère : raphael.loubere@math.u-bordeaux.fr
- Luc Mieussens: Luc.Mieussens@math.u-bordeaux.fr
- Rodolphe Turpault : rodolphe.turpault@u-bordeaux.fr

## Références

- [1] V. Vikas, Z.J. Wang, A. Passalacqua, and R.O. Fox. Realizable high-order finite-volume schemes for quadrature-based moment methods. *Journal of Computational Physics*, 230(13):5328–5352, 2011.
- [2] L. Mieussens. Transport de particules : modèles, simulations, et applications. 2022.
- [3] O. Desjardins, R.O. Fox, and P. Villedieu. A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows. Journal of Computational Physics, 227(4):2514–2539, 2008.
- [4] S. Clain, S. Diot, and R. Loubère. A high-order finite volume method for hyperbolic systems: Multi-dimensional optimal order detection (mood). *Journal of Computational Physics*, 230(10), 2011.