



ÉCOLE CENTRALE DES ARTS
ET MANUFACTURES
« ÉCOLE CENTRALE PARIS »

THÈSE

présentée par

Pierre-Emmanuel Angeli

pour l'obtention du

GRADE DE DOCTEUR

Spécialité : **Mécanique des fluides et Énergétique**

Laboratoire d'accueil : **EM2C**

Sujet :

**Simulation multirésolution et multiéchelle de la thermohydraulique des assemblages
de réacteur à neutrons rapides**

soutenue le : **10 novembre 2011**

devant un jury composé de :

Pierre Sagaut	Université Paris VI	Président
Benoît Goyeau	École Centrale Paris	Directeur de thèse
Frédéric Ducros	CEA Grenoble	Codirecteur de thèse
Florian Fichot	IRSN Cadarache	Rapporteur
Philippe Angot	Université Aix-Marseille I	Rapporteur
Olivier Cioni	CEA Grenoble	Examineur

2008 – 2011

N° d'ordre : 2011ECAP0048

Remerciements

LE moment d'écrire les remerciements est généralement assez heureux puisqu'il constitue la dernière touche d'un travail acharné qui est celui de la rédaction du mémoire. Ainsi, c'est avec plaisir que j'adresse mes sincères remerciements aux membres du jury, à commencer par son président Pierre Sagaut et les rapporteurs Florian Fichot et Philippe Angot ; puis à Benoît Goyeau, pour avoir supervisé cette thèse avec intérêt tout en m'accordant une grande liberté, ainsi que pour ses nombreux déplacements à Grenoble ; à Frédéric Ducros, qui s'est montré de très bon conseil et disponible, en dépit de ses fonctions de chef de laboratoire ; enfin à Olivier Cioni, pour sa disponibilité et son investissement quotidiens.

Ensuite, je remercie tout particulièrement les personnes autres que mes encadrants qui m'ont aidé sur le fond de mon travail : Didier Jamet et Marion Chandesris pour leurs réflexions pertinentes et constructives, Thomas Fortin pour ses explications touchant à l'analyse numérique, Ulrich Bieder et Gauthier Fauchet pour leur aide précieuse à la création d'un maillage périodique de « cellule » d'assemblage, Marc Elmo pour son assistance s'agissant de l'utilisation de Trio_U, et Benoît Mathieu pour les questions de post-traitement. Merci également à Didier Juhel pour les photos et les explications concernant le banc d'essai Phénix. Par ailleurs, je remercie chaleureusement toutes les personnes que je n'ai pas citées nommément et qui ont d'une façon ou d'une autre contribué à la progression de ce travail.

Naturellement, je n'oublie pas de remercier Bernard Faydide, chef du SSTH, et l'ensemble du personnel du laboratoire, qui m'ont accueilli avec bienveillance depuis le premier jour de mon stage de fin d'études jusqu'au dernier jour de ma thèse, lequel a coïncidé avec le dernier jour d'existence du SSTH et du LDAL. Merci aux secrétaires de l'École Doctorale de Centrale Paris, Géraldine Carbonel et Catherine Lhopital, pour le bon déroulement « administratif » de la thèse. Enfin, mes derniers remerciements, et non les moindres, vont à ma famille et à mes amis pour leur présence et leur soutien.

Table des matières

Notations et abréviations	9
Introduction	13
(i) Contexte industriel et scientifique	13
(ii) Milieux poreux et approche multiéchelle	16
(iii) Objectif général de la thèse	17
(iv) Méthodologies et plan de la thèse	18
1 De l'échelle locale à une échelle macroscopique continue	23
1.1 Méthodes de changement d'échelle	23
1.2 Méthode de la prise de moyenne volumique	31
1.2.1 Choix et propriétés du filtre	31
1.2.2 Problèmes de fermeture	39
1.2.3 Calcul numérique de la perméabilité et de la conductivité effective	46
1.3 Conditions aux limites macroscopiques	52
1.3.1 Motivation	52
1.3.2 Calculs analytiques	53
1.3.3 Calcul numérique du coefficient de Robin	57
1.3.4 Implémentation et stabilité	59
1.4 Conclusion	62
2 Une description macroscopique des assemblages de réacteur au sodium	63
2.1 Échelle macroscopique au sens d'un sous-canal	63
2.1.1 Principes généraux	63
2.1.2 Détermination des vitesses par sous-canal	66
2.1.3 Détermination des températures par sous-canal	69
2.2 Correspondance entre approches discrète et continue	73
2.2.1 Des moyennes par sous-canal aux moyennes cellulaires	73
2.2.2 Des moyennes volumiques aux moyennes cellulaires	75
2.2.3 Construction des gradients de champs moyens	78
2.2.4 Bilan	82
2.3 Conclusion	82
3 Retour à l'échelle locale à partir d'une description macroscopique	85
3.1 Remarques et développements préliminaires	85
3.2 Étapes détaillées de la méthodologie	90
3.2.1 Problème de reconstruction dans une cellule	90
3.2.2 Pénalisation	94
3.2.3 Synthèse	100
3.3 Premières applications	102
3.3.1 Écoulement en canal plan	102
3.3.2 Écoulement tournant bidimensionnel	109

3.3.3	Écoulement turbulent tridimensionnel	115
3.4	Conclusion	118
4	Applications à des assemblages de réacteur à neutrons rapides	121
4.1	Écoulement laminaire dans un assemblage à 61 aiguilles	121
4.1.1	Simulation numérique de l'assemblage complet	121
4.1.2	Simulation numérique d'une cellule	125
4.1.3	Résultats et interprétation	126
4.2	Écoulement laminaire dans une configuration modèle d'assemblage	127
4.2.1	Simulations de référence et de cellule	127
4.2.2	Résultats et discussion	129
4.3	Couplage « sous-canal »/cellule en régime turbulent	130
4.3.1	Simulation « sous-canal »	130
4.3.2	Simulation numérique d'une cellule	131
4.3.3	Analyse des résultats	132
4.4	Conclusion	134
5	Vers un couplage multiéchelle itératif	137
5.1	Positionnement du problème	137
5.2	Description du couplage	139
5.2.1	Problèmes constitutifs	139
5.2.2	Algorithme de couplage	142
5.3	Simulations numériques	144
5.3.1	Discussion sur le choix de Ω_z	144
5.3.2	Remarques sur la discrétisation	146
5.3.3	Tests numériques	149
5.4	Conclusion	153
	Conclusion générale	155
(i)	Synthèse des acquis et contributions	155
(ii)	Perspectives	156
A	La conduction axiale dans les écoulements de métaux liquides	159
B	Correspondance entre moyennes volumiques et cellulaires	163
B.1	Calculs en dimension deux	163
B.2	Calculs en dimension trois	165
C	Analyse numérique de la pénalisation	169
C.1	Problème temporel pénalisé	169
C.1.1	Convergence	170
C.1.2	Vitesse de convergence	171
C.1.3	Stabilité	173
C.2	Problème d'advection-diffusion pénalisé	174
C.3	Conclusion	180
	Références bibliographiques	183
	Liste des figures	191
	Liste des tableaux	197

Notations et abréviations

Abréviations

CEA	Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives
CFD	Computational Fluid Dynamics
CPU	Central Processing Unit
LDC	Local Defect Correction
LES	Large Eddy Simulation
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
RNR-Na	Réacteur à Neutrons Rapides refroidi au sodium
VER	Volume Élémentaire Représentatif

Lettres latines

$\vec{b}, \overline{B}, \vec{d}, \overline{D}$	Variables de fermeture
C_p	Capacité thermique massique
d, D, e, h, H, R	Dimensions géométriques
Da	Nombre de Darcy
D_h	Diamètre hydraulique
\vec{G}	Force motrice volumique
\mathcal{J}	Fonctionnelle d'énergie
K, \overline{K}	Perméabilité
K^*	Perméabilité adimensionnée
ℓ	Échelle de longueur microscopique
ℓ_0, r_0	Taille du VER
L	Échelle de longueur macroscopique
\mathcal{L}	Fonction de Lagrange
m, m_0, m_1, m_2, m_p	Filtres
\vec{n}	Vecteur unitaire normal à l'interface
p	Champ de pression à l'échelle microscopique
P	Champ de pression à l'échelle macroscopique
$\mathcal{P}_\omega, \vec{G}_\omega, \mathcal{R}_p$	Termes de pénalisation
Pe, Pe_p	Nombres de Péclet
Pr	Nombre de Prandtl
Re, Re_p	Nombres de Reynolds
$\text{Sp}(M)$	Spectre d'une matrice M
T, T_p	Champs de température à l'échelle macroscopique
\vec{u}	Champ de vitesse à l'échelle microscopique
\vec{U}, \vec{U}_p, W	Champs de vitesse à l'échelle macroscopique

V	Volume du VER
x, y, z	Variables spatiales

Lettres grecques

α^*	Coefficient de Robin adimensionné
γ	Courbure
$\vec{\Gamma}$	Multiplicateur de Lagrange
δ	Distribution de Dirac
$\delta t, \Delta t$	Pas de temps
ε	Facteur de séparation d'échelles
θ	Champ de température à l'échelle microscopique
λ	Conductivité thermique
$\Lambda_{\text{eff}}, \bar{\Lambda}_{\text{eff}}$	Conductivité thermique effective
Λ_{eff}^*	Conductivité thermique effective adimensionnée
μ	Viscosité dynamique
μ_{eff}	Viscosité effective
ν	Viscosité cinématique
ρ	Masse volumique
$\rho(M)$	Rayon spectral d'une matrice M
Σ_{fs}	Interface fluide/solide
ϕ	Porosité
χ	Fonction indicatrice de la phase fluide
ψ	Champ scalaire ou vectoriel
$\omega, \omega_u, \omega_\theta, \omega_p$	Paramètres de pénalisation
Ω	Milieu poreux

Indices

0	Référence
f	Phase fluide
z	Zoom

Exposants

*	Champ reconstruit à l'échelle microscopique
(n)	Itération n

Opérateurs

\mathcal{F}	Transformée de Fourier
$\langle \cdot \rangle$	Moyenne volumique
$\langle \cdot \rangle_f$	Moyenne volumique intrinsèque à la phase fluide
$\ \cdot \ $	Norme matricielle ou vectorielle
*	Produit de convolution
\otimes	Produit dyadique
$\tilde{\cdot}$	Déviation spatiale
$\hat{\cdot}$	Moyenne « sous-canal »
$\bar{\cdot}$	Moyenne cellulaire

Introduction

(i) Contexte industriel et scientifique

Depuis les années 2000, le pôle nucléaire du C.E.A. (Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives) est partie prenante dans les programmes de recherche internationaux sur les réacteurs nucléaires du futur. En fonction de leur technologie, les réacteurs nucléaires sont classés en *générations* :

- La *Génération I* est composée des premiers prototypes, construits entre 1950 et 1970 essentiellement aux États-Unis, en Russie, en France – avec par exemple le réacteur UNGG (Uranium Naturel Graphite Gaz) – et en Grande-Bretagne. Ces réacteurs utilisaient de l'uranium naturel, l'uranium enrichi n'étant alors pas disponible pour les applications civiles ;
- La *Génération II* désigne la majorité des réacteurs actuellement (en 2011) en service dans le monde, construits entre les années 70 et 90. Ensemble, les R.E.P. (Réacteurs à Eau sous Pression) et R.E.B. (Réacteurs à Eau Bouillante) comptent 357 unités en fonctionnement, soit plus de 81% du parc électronucléaire mondial ;
- La *Génération III*, imaginée dans les années 90, est une amélioration de la génération II. Ces nouveaux réacteurs sont en cours de déploiement, à l'exemple du futur E.P.R. (« European Pressurized Water Reactor ») de Flamanville, dont le chantier a débuté en 2007 ;
- La *Génération IV* présente une rupture technologique avec les générations précédentes, les objectifs étant de répondre aux enjeux d'une production d'énergie dans une vision à long terme, en minimisant les déchets radioactifs et en utilisant au mieux les ressources naturelles en combustible. Plusieurs concepts, sélectionnés en 2002, s'inscrivent dans cette génération, parmi lesquels les R.N.R. (Réacteurs à Neutrons Rapides).

Après une première phase de fonctionnement ayant permis d'en acquérir une expérience industrielle – le programme français a compté le réacteur expérimental Rapsodie¹, la centrale de démonstration Phénix² et la centrale prototype Superphénix³ –, le concept des réacteurs à neutrons rapides connaît un regain d'intérêt. Ainsi ce travail de thèse, comme l'indique la deuxième partie de son intitulé, intervient dans le cadre des nouvelles études engagées sur les RNR.

Les réacteurs à neutrons rapides se démarquent technologiquement de leurs prédécesseurs. Leurs spécificités principales touchent aux points suivants (Cretté [37]) :

1. Période de fonctionnement de Rapsodie : 1967 – 1983
2. Période de fonctionnement de Phénix : 1973 – 2009
3. Période de fonctionnement de Superphénix : 1985 – 1997

- le fluide caloporteur : dans la filière RNR, le sodium liquide fait l'objet d'un large consensus en raison de ses propriétés physiques avantageuses¹ et de son caractère non-modérateur (voir ci-après). On parle alors de réacteur à neutrons rapides (*refroidi*) *au sodium*, abrégé en RNR-Na. Un enjeu technologique notable lié à l'utilisation de sodium liquide est la prévention de toute interaction entre eau et sodium, qui produit une réaction fortement exothermique ;
- l'absence de modérateur pour les neutrons : contrairement par exemple à la filière REP, où l'eau joue le rôle de modérateur en ralentissant les neutrons par chocs élastiques, les neutrons émis dans un RNR-Na lors de la fission nucléaire (FIG. 1) ne sont volontairement pas ralentis – d'où leur qualificatif de *rapides*.

Cette caractéristique confère aux RNR-Na une aptitude à la surgénération : en effet, bien que la réaction en chaîne (FIG. 1) soit statistiquement d'autant mieux entretenue et efficace que le bombardement neutronique est ralenti, il est néanmoins possible en mélangeant dans une certaine proportion matière fissile et matière fertile² et en disposant judicieusement les assemblages et la couverture du cœur, de faire fonctionner la réaction en chaîne avec des neutrons rapides et ainsi produire du plutonium³ en quantité plus importante que celle apportée initialement. De cette façon, la matière fertile du combustible (^{238}U) est consommée en faible quantité, la matière fissile produite (^{239}Pu) étant réutilisée comme combustible. Par utilisation d'uranium appauvri ^{238}U , plutôt que son isotope ^{235}U rare (utilisé dans les centrales actuelles), la surgénération offre donc la possibilité de ralentir l'épuisement des ressources en uranium naturel en exploitant de façon plus optimale le potentiel énergétique de l'uranium.

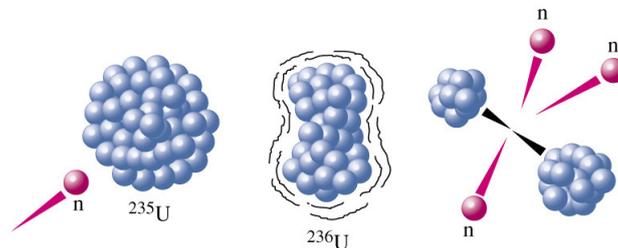


FIG. 1 – Un noyau d'uranium 235 impacté par un neutron est fragmenté en deux nouveaux noyaux (fission nucléaire) en libérant des neutrons, ces derniers allant impacter à leur tour d'autres noyaux (réaction en chaîne). Chaque fission libère une quantité d'énergie considérable (source : www.cea.fr).

- la conception des assemblages : les pastilles de combustible sont empilées dans de fines aiguilles disposées conjointement à la verticale, parallèles entre elles, et maintenues espacées par des fils d'acier, souvent appelés *fils espaceurs* , s'enroulant autour d'elles. Ce faisceau, délimité par une paroi externe hexagonale, prend alors le nom d'*assemblage* (FIG. 2). Les assemblages sont eux-mêmes disposés en nid d'abeille dans le cœur du réacteur. Le nombre d'aiguilles par assemblage dépend du type de RNR (par exemple, 217 pour Phénix et 271 pour Superphénix), de même que le nombre d'assemblages.

1. D'une manière générale, les propriétés essentiellement recherchées sont une viscosité faible, une conductivité thermique élevée et un haut point d'ébullition (voir aussi l'annexe A).

2. Le combustible utilisé dans les RNR est un oxyde mixte d'uranium naturel (uranium 238, fertile) et de plutonium (élément fissile).

3. Un noyau de plutonium 239 est formé par capture d'un neutron par un noyau d'uranium 238.

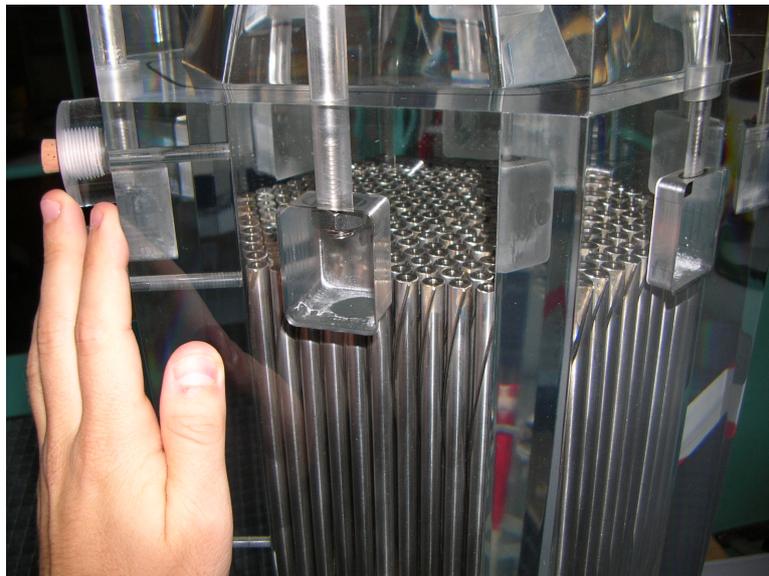


FIG. 2 – Photographies de la partie supérieure d'un assemblage (banc d'essai du CEA, 2011), dont la conception est de type Phénix. Dans les assemblages réels, le combustible nucléaire est placé dans des tubes, espacés par des fils hélicoïdaux. L'assemblage est ici inséré dans un boîtier transparent en Plexiglas. La photo du bas donne une idée de la finesse des aiguilles.

Un réacteur à neutrons rapides refroidi au sodium forme une structure complexe dont l'étude hydraulique et thermique offre des défis importants (Tenchine [110]). Comme désormais dans presque toute activité de recherche et développement, la phase d'étude des RNR comprend un volet de simulation numérique qui vient compléter les études expérimentales, et non les supplanter. Naturellement, comme ce mémoire l'illustrera amplement, la simulation numérique est tout autant soumise à des incertitudes que l'expérimentation, liées à la modélisation des phénomènes physiques (traduite par des équations d'évolution), aux méthodes de calcul adoptées et à la finesse de résolution. Elle offre néanmoins par rapport à l'expérimentation de nouvelles possibilités : études paramétriques, simplicité des « mesures » numériques (à peu de chose près, toute grandeur est post-traitable en tout

point), isolement d'un phénomène donné pour étudier sa seule contribution, etc..

Une grande variété de phénomènes physiques est susceptible de se produire à l'intérieur d'un cœur de réacteur (hydrauliques, thermiques, mécaniques, chimiques, nucléaires, ...), la plupart étant en profonde interaction. Or, la simulation numérique fine et complète d'un assemblage – soit une petite partie de toute la structure – du seul point de vue thermohydraulique (c'est-à-dire de l'écoulement du fluide caloporteur couplé aux effets thermiques) est encore difficilement accessible. Elle est compliquée notamment par la présence des fils espaceurs, qui multiplie sévèrement le nombre de mailles nécessaires à la résolution. Pour cette raison, les simulations réalisées à ce jour concernent des configurations réduites d'assemblage, où une partie des échelles spatiales est modélisée¹, mais demeurent malgré tout coûteuses en temps de calcul. Ainsi, Gajapathy *et al.* [48] considèrent un assemblage de 7 aiguilles avec un modèle de turbulence k-epsilon. À l'époque de leur simulation (2006), ils estiment nécessaires 200 millions de mailles et 100 jours de temps CPU pour mener un calcul similaire sur 217 aiguilles. Bieder *et al.* [20] s'intéressent à la thermohydraulique dans un assemblage de 61 aiguilles, avec un modèle k-epsilon. Leur simulation de 200 millions de mailles nécessite 10 jours de calcul sur 1000 processeurs en parallèle. Pointer *et al.* [88] réalisent une simulation des grandes échelles (L.E.S.) d'un assemblage de 217 aiguilles avec plus d'un milliard de points de discrétisation. La simulation du cœur complet du réacteur (ensemble des assemblages) serait de l'ordre de 300 fois plus coûteuse.

On touche donc à une limitation essentielle de la simulation numérique, les temps de calculs, et ceci malgré la croissance rapide des technologies micro-informatiques et microélectroniques. Partant de ce constat, et considérant l'évidente nécessité de parvenir à des calculs d'assemblage en des temps raisonnables, nous allons donc envisager dans cette thèse une méthodologie de calcul particulière, consistant en une résolution « fine » d'une partie seulement d'assemblage, le reste étant calculé de façon « moyenne ». Cette approche suggère le recours à des méthodes multiéchelles, dont le cadre retenu sera celui des milieux poreux.

(ii) Milieux poreux et approche multiéchelle

La modélisation multiéchelle désigne l'analyse de problèmes physiques au sein desquels coexistent plusieurs échelles, généralement spatiales. Cette approche est largement mise en œuvre dans le domaine nucléaire [1] et plus généralement industriel, ainsi qu'en météorologie, océanographie, mais également dans des domaines de recherche plus fondamentaux comme l'étude de la formation des grandes structures de l'univers. Comme indicateur de l'intérêt croissant porté à la modélisation multiéchelle ces dernières années, Horstemeyer [58] (page 90) fait part de la forte augmentation du nombre d'articles scientifiques publiés contenant « multiscale modeling » dans leur titre : de 10 en 1999 à 236 en 2007. Cette expansion est liée à la place grandissante faite à la simulation numérique dans les activités de recherche et développement.

Les milieux poreux semblent particulièrement bien adaptés aux approches multiéchelles (mais n'en sont évidemment pas le seul cadre d'application). En effet, ils contiennent au moins deux échelles spatiales : l'échelle des pores, dite *microscopique*, et une échelle plus

1. La simulation numérique directe (calcul de toutes les échelles de l'écoulement, sans modèle de turbulence) est encore trop chère pour être mise à profit industriellement. Néanmoins, en mobilisant d'importants moyens (nombreux processeurs en parallèle, logiciels de post-traitement appropriés), une simulation numérique directe d'assemblage complet sera probablement réalisable dans un avenir proche, mais elle ne pourra constituer qu'un calcul de référence sans qu'il soit réellement envisageable de la reproduire en série, pour mener par exemple une étude paramétrique.

globale, dite *macroscopique*. Par exemple, un tas de sable apparaît de loin (donc à l'échelle macroscopique) comme un matériau homogène puisqu'il n'est pas possible d'en distinguer les grains, alors qu'en zoomant sur sa structure (donc à l'échelle microscopique) on a une impression de grande hétérogénéité en raison de la variété de tailles et de formes des grains de sable. Or, un assemblage de RNR-Na peut effectivement être vu comme un matériau poreux : il contient un espace chargé de fluide caloporteur (l'espace entre aiguilles), et des espaces solides constitués par l'ensemble des aiguilles et des fils espaceurs. Cette structure poreuse n'est d'ailleurs pas quelconque puisqu'elle possède la particularité, malgré la présence des fils espaceurs, d'être géométriquement périodique¹, à l'image de nombreux échangeurs de chaleur industriels ; elle est donc formée d'une unité structurelle que l'on appellera *cellule unitaire*. Cette approche des assemblages est d'un grand intérêt, puisqu'elle permet de tirer profit du formalisme associé à l'étude des milieux poreux périodiques.

Les transferts de masse et d'énergie en milieux poreux sont souvent envisagés sous l'angle macroscopique : des méthodes de changement d'échelle permettent de passer d'une description microscopique, régie par des équations de conservation locales, à une description macroscopique traduisant le comportement spatial moyen de l'écoulement et de la température du fluide (Kaviany [60]). Ces méthodes reviennent formellement à appliquer un opérateur de prise de moyenne volumique, noté $\langle \cdot \rangle$, aux divers champs dans le volume chargé en fluide. D'une façon générale, résoudre numériquement les équations de conservation locales dans le milieu entier pour accéder au comportement fin du fluide dans tous les petits espaces entre les grains est extrêmement coûteux en temps de calcul, et l'étude des assemblages, comme on l'a vu, n'échappe pas à ce constat. La résolution des équations moyennées est beaucoup plus abordable : en effet, l'opérateur $\langle \cdot \rangle$ agit d'une part comme un filtrage des petites échelles spatiales – donc les phénomènes à petites échelles qui pénalisent les temps de calcul ne sont pas représentés –, et d'autre part il transforme le milieu en un volume continu, ce qui autorise une finesse de maillage moins grande. En revanche l'approche macroscopique seule se révèle insuffisante pour les besoins d'une étude de sûreté, puisqu'elle ne donne accès qu'au comportement moyen du fluide. En particulier, il est clair que la moyenne d'un champ ne peut être qu'inférieure au maximum de ce champ ; ainsi les pics de température, s'ils existent, ne peuvent être correctement représentés à l'échelle macroscopique. Le TAB. 1 résume les avantages et inconvénients de chacune des échelles.

Échelle	Coût de calcul	Information
Microscopique	Élevé	Locale
Macroscopique	Faible	Moyenne

TAB. 1 – Avantages et inconvénients des approches microscopique et macroscopique.

(iii) Objectif général de la thèse

Dans ce sujet de thèse, on se propose alors la mise au point d'une méthode de simulation numérique permettant de profiter simultanément des avantages de l'approche microscopique (résolution fine) et de l'approche macroscopique (temps de calcul modeste), ainsi que sa mise en œuvre sur des assemblages de RNR-Na. La stratégie employée consiste,

1. Un milieu poreux périodique est aussi qualifié d'*homogène*.

dans un premier temps, à déterminer les champs moyens dans la totalité du milieu, puis à reconstruire l'information manquante, c'est-à-dire les variations à petites échelles, dans des sous-domaines d'intérêt particulier pour un coût de calcul modique étant donnée la petite taille supposée de ces zones. Ces dernières peuvent être choisies soit parce qu'elles sont représentatives de l'écoulement dans tout l'assemblage, soit parce qu'elles sont le siège d'un évènement local dans le fluide. On propose donc un couplage *multi physique*, dans le sens où sont résolus deux problèmes physiques différents, l'un microscopique, l'autre macroscopique. Ce couplage est suivi d'une simulation *multirésolution*, chacun des problèmes possédant sa discrétisation propre. La méthodologie requiert un couplage de l'échelle microscopique avec l'échelle macroscopique, consistant fondamentalement à imposer des flux corrects de masse et d'énergie issus de la résolution macroscopique dans le sous-domaine de résolution microscopique. Ce couplage d'échelles, qui aboutit à la connaissance fine locale de l'écoulement à partir d'informations moyennes, se traduira par un enrichissement fréquentiel local de la solution moyennée. La méthodologie peut être appelée *reconstruction*, ou *retour à l'échelle locale*, ou *raffinement d'échelle*, ou plus abusivement *déconvolution*¹. Notons que le terme anglais adéquat, « downscaling » (par opposition à « upscaling », qui est lui fréquemment rencontré dans la littérature scientifique des milieux poreux) ne semble pas avoir d'équivalent en français ; on pourrait littéralement le traduire par « changement d'échelle descendant », c'est-à-dire de la plus grande échelle vers la plus petite.

Les questions essentielles soulevées par une telle approche et traitées dans les chapitres de ce mémoire sont d'abord celles de la description du milieu à l'échelle macroscopique (quels modèles employer ?), et ensuite de la méthode de couplage permettant le passage de description moyenne à description locale (comment le problème de reconstruction utilise-t-il les informations macroscopiques ?). Parallèlement à ces considérations théoriques, on s'assurera non seulement de la possibilité de mise en œuvre de ces techniques dans un code de calcul (voir plus bas), mais on poursuivra également un objectif de validation par la simulation numérique² : d'abord sur des configurations modèles, puis sur le problème industriel visé (les assemblages de RNR-Na). On étudiera des milieux poreux périodiques, avec néanmoins l'existence de parois externes imposant des considérations particulières qui ne seront pas approfondies dans cette thèse mais sur lesquelles nous donnons des pistes de réflexion en conclusion.

(iv) Méthodologies et plan de la thèse

La validation numérique du couplage multiéchelle sera effectuée par étapes : on réalisera d'abord des simulations numériques de reconstruction sur des configurations simplifiées (milieux 2D « perforés »), qui permettent des calculs peu coûteux (maillages légers et simples à générer, post-traitement rapide), avant d'aboutir, par complexifications successives des cas-tests, à l'application à des configurations de type assemblage. La validation des méthodologies nécessitant la comparaison de la solution reconstruite avec une solution de référence obtenue par calcul direct, ces dernières configurations occasionneront des calculs généralement chers (en particulier au chapitre 4).

Toutes les simulations numériques reportées dans cette thèse ont été exclusivement réalisées à l'aide du logiciel de simulation numérique en mécanique des fluides Trio_U³.

1. Au sens strict, la déconvolution est l'application d'un opérateur $\langle \cdot \rangle^{-1}$. Une telle opération pose des problèmes parfois insurmontables d'existence, d'unicité, de bruit (les difficultés de la déconvolution sont passées en revue par Biraud [21]), et ne sera pas considérée dans ce travail.

2. On souligne par ailleurs que la thèse ne comporte pas de volet expérimental.

3. www-trio-u.cea.fr

Ce code de calcul, développé et utilisé au S.S.T.H.¹, où s'est déroulée la thèse, intègre de nombreux modèles physiques, méthodes numériques et la possibilité de parallélisme lui permettant d'appréhender une vaste gamme de problèmes, allant de la simulation locale d'écoulements diphasiques à la simulation d'écoulements turbulents sur des installations industrielles telles des parties de réacteurs nucléaires. Les maillages peuvent être réalisés grâce à un mailleur interne au logiciel, mais des passerelles existent aussi pour importer des maillages créés avec d'autres mailleurs (Gmsh, ICem, etc.). Trio_U est soumis à de continues validations, corrections et mises à jour en fonction des besoins mais aussi des erreurs constatées lors de son utilisation.

Dans Trio_U, la résolution numérique s'appuie sur les méthodes dites V.D.F. (« Volumes Différences Finies ») ou V.E.F. (« Volumes Éléments Finis ») (voir Calvin *et al.* [29]). Seule la seconde est applicable à des maillages non structurés, tétraédriques, qui concerneront les applications développées dans la thèse. Dans la méthode VEF, les vitesses sont calculées aux centres des faces (éléments finis de type « P1 Non Conforme ») et la pression est calculée aux centres de gravité des mailles et aux sommets (éléments finis de type « P1P0 »). Par ailleurs, le découplage de la vitesse et de la pression est réalisé par une méthode de projection. L'inversion de la matrice de pression est basée entre autres sur une factorisation de Cholesky ou sur une méthode de gradient conjugué, selon le choix de l'utilisateur. Différents schémas sont disponibles pour la discrétisation des opérateurs spatiaux : amont, centré, ... Enfin, la discrétisation temporelle est réalisable, par exemple, par le biais de schémas d'Euler explicite ou implicite.

Les chapitres reportés dans ce mémoire suivent un ordre quasi-chronologique par rapport au déroulement des trois ans de thèse, et intègrent aspects théoriques et applicatifs (FIG. 3) :

- Chapitre 1 : dans ce chapitre essentiellement théorique, le formalisme classique de changement d'échelle en milieux poreux est développé. Ce formalisme permet d'aboutir à une description à l'échelle macroscopique d'un milieu poreux, régie par des équations établies à partir des équations de conservation locale de la mécanique des fluides. Plusieurs méthodes existent, mais nous axons la démarche sur la prise de moyenne volumique, pour des raisons qui sont précisées. Les problèmes résultants de fermeture des équations sont appréhendés par des modélisations des termes inconnus (termes à petites échelles spatiales), qui sont explicitées. Dans ce chapitre, il n'est pas question de proposer des fermetures, mais plutôt d'explicitier les conséquences de la prise de moyenne volumique. En fin de chapitre, la problématique de la description macroscopique près des frontières externes d'un milieu poreux est abordée ;
- Chapitre 2 : les ingénieurs en charge de la modélisation des assemblages de réacteur au sodium ont développé une approche alternative aux méthodes usuelles de changement d'échelle, qui sera désignée sous le nom de modélisation « sous-canal »². Dans la première partie de ce chapitre, les principes et avantages de cette approche sont décrits et des illustrations de mise en œuvre sont proposées. La seconde partie établit un lien entre les champs moyens obtenus par prise de moyenne volumique (chapitre 1) et l'approche « sous-canal ». Dans les deux cas, la description à l'échelle macroscopique est déclinée en moyennes discrètes sur des volumes de contrôles spécifiques, moyennes dont l'intérêt apparaîtra clairement au chapitre 3 ;

1. S.S.T.H. : Service de Simulation en Thermohydraulique.

2. L'origine de cette appellation sera justifiée.

- Chapitre 3 : dans ce chapitre, qui constitue la pierre angulaire de la thèse, on développe la méthode de reconstruction des échelles microscopiques à partir de la description macroscopique obtenue *via* les techniques des chapitres précédents. Ses aspects théoriques sont d'abord présentés, puis de premières applications à des situations académiques réalisées. On tire avantage du caractère périodique du milieu en effectuant la reconstruction dans des cellules unitaires et en postulant un comportement périodique à l'échelle microscopique, avec éventuellement l'introduction de déviations spatiales. On fait par ailleurs appel à une méthode de pénalisation des équations locales, où le type d'information faisant l'objet de la contrainte est spécifié. Dans son ensemble, cette approche est nouvelle à la fois dans sa conception et son cadre d'application¹ ;
- Chapitre 4 : la méthodologie de reconstruction développée au chapitre 3 est appliquée à des configurations réalistes d'assemblage de RNR-Na. Pour cela, diverses simulations numériques d'assemblage sont réalisées. Ces calculs de référence permettent une comparaison avec les champs reconstruits dans des cellules unitaires, et une évaluation de la qualité des résultats. L'objectif est de démontrer que le retour à l'échelle locale, préalablement validé sur des configurations modèles, peut également être mis en œuvre sur une structure aussi complexe qu'un assemblage, et de pointer les difficultés numériques surgissant lors de telles simulations. Deux applications s'intéressent à un écoulement laminaire dans un assemblage de 61 aiguilles et examinent les effets de maillage. Une troisième application utilise la méthodologie « sous-canal » (chapitre 2), en prenant en compte effets thermiques et turbulence ;
- Chapitre 5 : la méthodologie de reconstruction développée jusqu'alors ne traitant que du passage de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique, on envisage dans ce dernier chapitre le sens retour par le biais d'un couplage réciproque, où les champs microscopiques rétroagissent sur leur version macroscopique. Un tel couplage permet d'envisager des situations où un événement local existe dans le fluide (bouchage, excursion de puissance), impliquant l'existence de forts gradients. La méthode proposée s'inspire des méthodes de décomposition de domaine, avec la particularité que l'on résout ici des problèmes physiques différents dans les sous-domaines (d'autres variantes de la décomposition ont également fait l'objet de développements récents : ainsi, Liu *et al.* [72] traitent d'un couplage entre milieu continu et échelle atomique par le biais d'une décomposition de domaine ; Dufrière *et al.* [42] envisagent un couplage multiéchelle en milieu poreux par une méthode analogue²). Après avoir exposé le principe du couplage, nous traitons en fin de chapitre une application à un problème modèle de conduction-convection.
- En conclusion générale, nous évoquerons l'universalité de l'approche développée au cours de ce travail, en introduisant un large panel d'applications possibles.

1. La méthode d'homogénéisation (évoquée au chapitre 1) permet, par corrections successives des champs macroscopiques à des ordres de plus en plus petits en espace, de reconstruire les champs microscopiques (El Ganaoui [44]), mais elle ne sera pas mise en œuvre ici.

2. L'objectif de Dufrière *et al.* [42] est cependant tout à fait différent de celui que nous poursuivons, puisqu'il s'agit principalement de déterminer la taille de la zone d'influence d'une perturbation dans un écoulement visqueux.

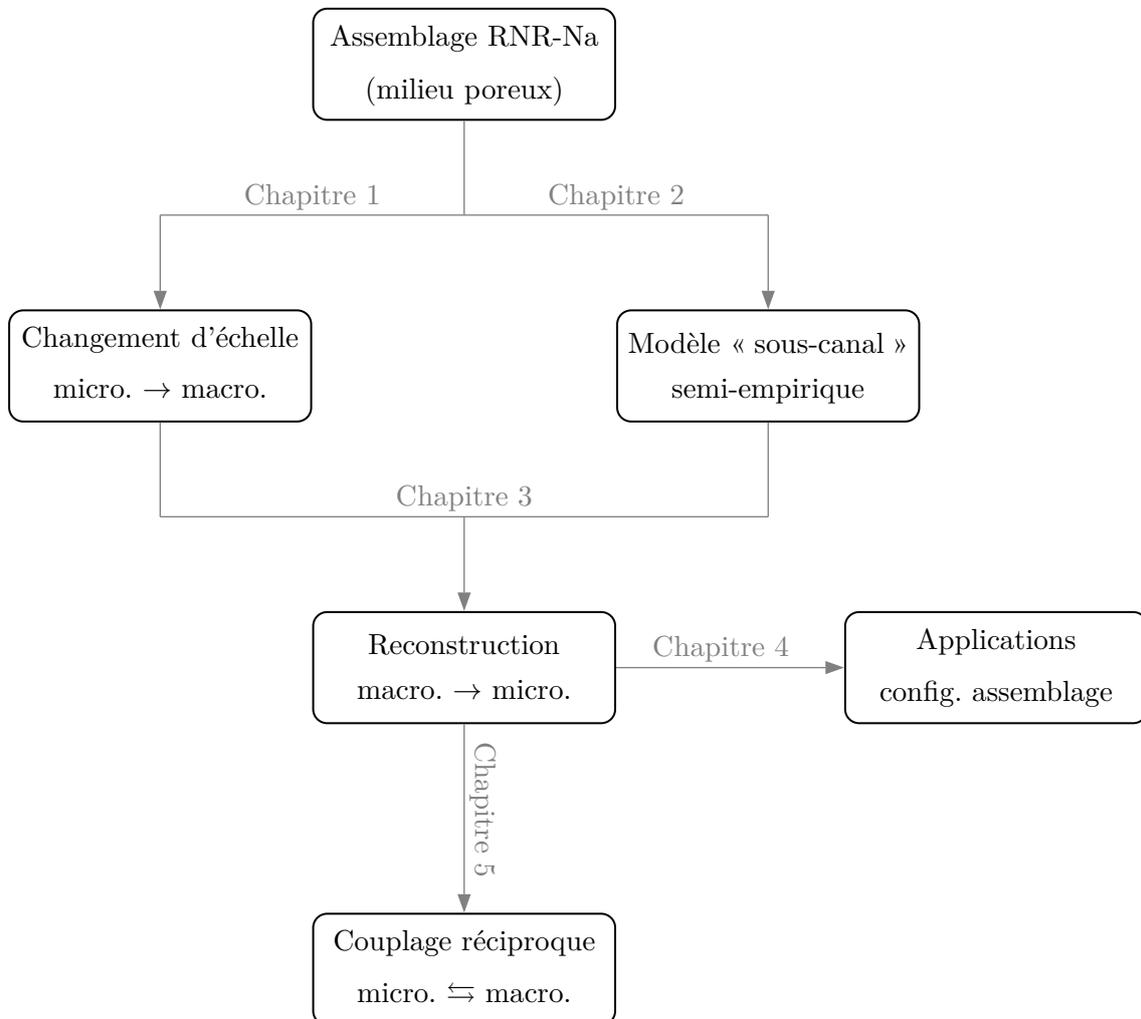


FIG. 3 – Plan schématique de la thèse : une description d'un milieu poreux à l'échelle macroscopique peut être formellement obtenue par changement d'échelle (chapitre 1), ou plus spécifiquement par une modélisation « sous-canal » si l'on considère un assemblage de RNR-Na (chapitre 2). Connaissant les champs moyens dans la structure, une méthodologie de reconstruction des champs microscopiques est décrite (chapitre 3), et appliquée numériquement à des assemblages de RNR-Na (chapitre 4). Enfin, une généralisation de la procédure sous la forme d'un couplage d'échelle dynamique est proposée (chapitre 5).

Chapitre 1

De l'échelle locale à une échelle macroscopique continue

Le changement d'échelle est une notion centrale d'un couplage multiéchelle, qui est étroitement liée à la modélisation des transferts thermiques convectifs en milieux poreux. On s'intéresse d'abord au sens le plus direct, qui consiste à passer des petites échelles (dites *microscopiques*) aux grandes échelles (dites *macroscopiques*). L'objectif général est de disposer d'une première méthodologie de description d'un milieu poreux à l'échelle macroscopique, avant d'envisager le sens inverse, à partir du chapitre 3. Dans ce premier chapitre, on rappelle les idées générales des méthodes de changement d'échelle, puis on formule le choix d'une méthode de référence – la prise de moyenne volumique –, dont le formalisme est décrit. À titre d'illustration, cette méthode est mise en application sur des configurations modèles. En fin de chapitre, la question des conditions aux limites du modèle macroscopique est abordée.

1.1 Méthodes de changement d'échelle

L'idée principale des méthodes de modélisation des transferts de masse et d'énergie en milieu poreux consiste à définir un milieu continu équivalent. Ce milieu serait celui vu par un observateur regardant *de loin*, et qui, par conséquent, ne distinguerait pas les discontinuités de structure et de phases. L'échelle de longueur caractéristique associée à ce milieu équivalent est dite *macroscopique*, par opposition à l'échelle *microscopique* (aussi appelée échelle *locale*). Deux grandes voies s'offrent alors à la modélisation : soit l'on raisonne directement à l'échelle macroscopique – donc de manière phénoménologique, avec l'appui de résultats expérimentaux –, soit l'on déduit la description macroscopique du comportement microscopique à l'aide d'un formalisme à préciser. On propose, dans le paragraphe suivant, d'expliciter quelques réflexions par rapport à ces deux voies d'obtention d'un modèle homogénéisé.

La première voie, contrairement à la seconde, ne consiste pas à proprement parler en un changement d'échelle, car on raisonne directement à l'échelle macroscopique sans faire intervenir l'échelle microscopique. Ce type d'approche est illustré par la célèbre étude de Darcy [38]. Étudiant un écoulement d'eau à travers un cylindre rempli de sable, il constate expérimentalement une relation de proportionnalité entre le débit de liquide et le gradient de charge piézométrique. La loi de Darcy résultante est habituellement écrite comme une relation entre la *vitesse de filtration*¹ \bar{U} du fluide (ou vitesse *superficielle*) et le gradient de pression qui l'a mis en mouvement,

1. C'est-à-dire la moyenne des vitesses de la phase fluide et de la phase solide, par opposition à la vitesse *intrinsèque*, qui est la vitesse moyenne de la phase fluide seule.

$$\vec{U} = -\frac{K}{\mu} \overrightarrow{\text{grad}}P, \quad (1.1)$$

où K est la perméabilité du milieu. Ainsi, moins le matériau est perméable et plus le fluide s'écoule lentement. La perméabilité, en général tensorielle, traduit donc la capacité d'un milieu à laisser passer le fluide dans chaque direction. La loi (1.1) n'est valable qu'en régime de Darcy, c'est-à-dire pour des écoulements à faible nombre de Reynolds de pore et en régime stationnaire. Comme l'indique Bear [16], le calcul du nombre de Reynolds est habituellement basé sur la dimension représentative des grains. La transition d'un régime de Darcy à un régime inertiel a alors lieu pour un nombre de Reynolds compris entre 1 et 10 (FIG. 1.1). On pourra également se reporter à Zeng et Grigg [123] pour davantage de détails.

Par la suite, la loi de Darcy sera démontrée par application des techniques de changement d'échelle à un écoulement de Stokes : Neuman [83] et Whitaker [119] en utilisant la *prise de moyenne volumique*¹, Sanchez-Palencia [104] en utilisant la méthode d'*homogénéisation* (cf. *infra*). Par analogie avec l'équation de Stokes, Brinkman [27], [28] ajoute à l'équation de Darcy un terme en laplacien de la vitesse superficielle, pondéré par un coefficient de viscosité effective, pour décrire l'écoulement d'un fluide chargé en particules sphériques :

$$\overrightarrow{\text{grad}}P = -\frac{\mu}{K} \vec{U} + \mu_{\text{eff}} \Delta \vec{U}. \quad (1.2)$$

Cette nouvelle loi de Darcy-Brinkman étant assez largement utilisée pour d'autres types de milieux poreux, son domaine de validité est discuté par Auriault [12] qui rappelle les conditions pour lesquelles elle a été initialement proposée. Néanmoins, Whitaker [121] retrouve la correction de Brinkman à l'aide de la méthode de prise de moyenne volumique, à la différence notable que la viscosité remplace la viscosité effective. Il suggère que cet écart provient d'une ambiguïté entre vitesse superficielle et vitesse intrinsèque. Enfin, la loi de Darcy est également étendue à des écoulements inertiels. Forchheimer [47] lui ajoute d'abord un terme en carré de la vitesse superficielle – terme que retrouve Whitaker [120] par prise de moyenne volumique, puis Chen *et al.* [34] par homogénéisation :

$$U + aU^2 = -\frac{K}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x}. \quad (1.3)$$

Puis pour des régimes plus modérés, Mei et Auriault [78] obtiennent une dépendance cubique en vitesse :

$$U + bU^3 = -\frac{K}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x}. \quad (1.4)$$

D'autres généralisations ont été apportées à la loi de Darcy ; citons par exemple les travaux de Vafai et Tien [115]. Les différents régimes d'écoulement dans des milieux à géométrie simple sont répertoriés par Skjetne et Auriault [107] et schématiquement représentés sur la FIG. 1.1.

L'approche phénoménologique et l'approche par changement d'échelle sont complémentaires dans le sens où la première trouve en général dans la seconde une justification formelle. Le changement d'échelle consiste le plus souvent à passer d'une description à l'échelle microscopique à une description à l'échelle macroscopique (« upscaling² » en anglais), à l'aide d'un traitement mathématique appliqué aux équations de conservation locales. Différentes méthodes de changement d'échelle existent. Parmi les plus largement

1. Méthode décrite en détail en 1.2.

2. Le sens inverse (« downscaling »), étant le cœur du présent travail de thèse, sera développé au chapitre 3.

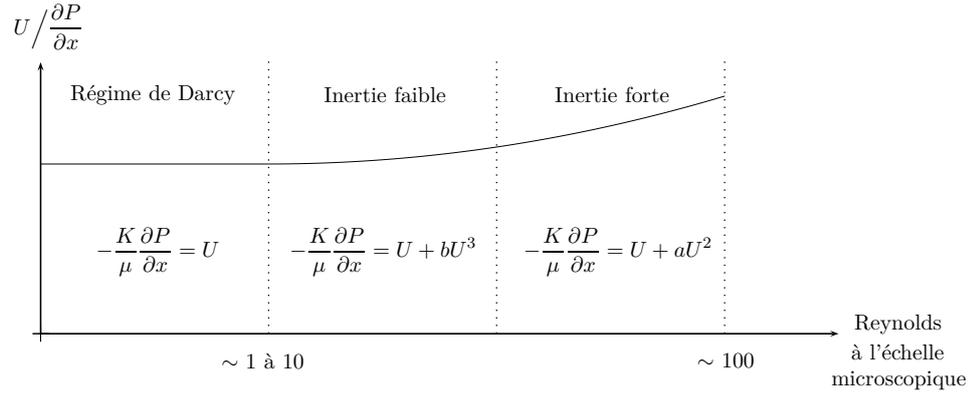


FIG. 1.1 – Régimes d'écoulement et lois associées. La loi de Darcy, traduisant la proportionnalité entre vitesse et gradient de pression, n'est plus valide si les effets d'inertie sont importants. La transition vers le régime turbulent a lieu approximativement pour $Re > 100$ (Bear [16], Kaviany [60], Skjetne et Auriault [107]).

employées dans la communauté des chercheurs en milieux poreux figurent probablement les méthodes probabilistes, l'homogénéisation et la prise de moyenne volumique.

Les méthodes probabilistes s'appliquent essentiellement aux milieux poreux naturels, comme les roches et les sols. Dans ces milieux souvent très hétérogènes et anisotropes, l'agencement et la topologie des grains sont généralement impossibles à connaître. On les représente alors à l'aide de lois décrivant la probabilité qu'un point quelconque du milieu appartienne à la phase fluide ou à la phase solide. Les interactions entre les particules de fluide et les grains sont ensuite modélisées à l'aide de processus stochastiques tels que la marche aléatoire ou les méthodes de Monte-Carlo (voir, par exemple, Haring et Greenkorn [56], Roco *et al.* [99]). Ce type de méthode semble peu pertinent pour l'étude d'un assemblage de réacteur, car ce dernier présente une structure ordonnée dont les caractéristiques géométriques sont connues. Nous n'en ferons donc pas usage dans ce travail de thèse.

Les méthodes d'homogénéisation et de prise de moyenne volumique reposent quant à elles sur une notion commune de séparation d'échelles. Soit ℓ la longueur caractéristique de l'échelle microscopique, L la longueur caractéristique de l'échelle macroscopique, et ε le facteur de séparation d'échelles défini par

$$\varepsilon = \frac{\ell}{L}, \quad (1.5)$$

alors la condition de séparation d'échelles s'écrit

$$\varepsilon \ll 1. \quad (1.6)$$

Cette condition signifie que la taille des hétérogénéités est très petite devant la taille du milieu poreux (FIG. 1.2). L'échelle macroscopique correspond à la taille caractéristique du système. Pour un milieu hétérogène, l'échelle microscopique est la taille caractéristique des pores, tandis que pour un milieu périodique, il s'agit souvent de la taille de la cellule unitaire (FIG. 1.3). La notion de séparation d'échelles est rattachée à celle de *Volume Élémentaire Représentatif* (abrégé en V.E.R. dans la suite). Le VER est le plus petit volume permettant de donner un sens aux propriétés macroscopiques du milieu. Si le volume est choisi trop petit, alors les effets microscopiques induits par les hétérogénéités de structure deviennent visibles, et les propriétés macroscopiques que l'on pourrait tenter

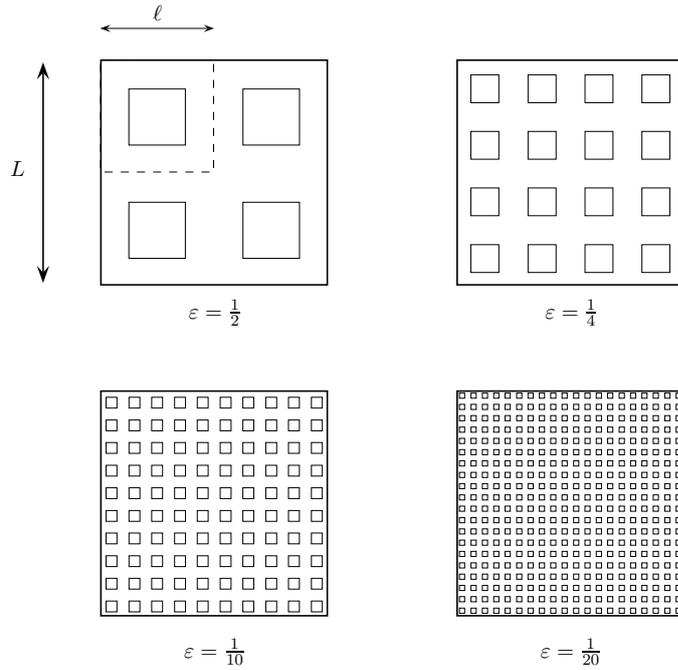


FIG. 1.2 – Illustration de la séparation d'échelles dans un milieu poreux périodique constitué de grains carrés. On considère que l'échelle microscopique est la taille de la cellule unitaire engendrant le milieu. La séparation d'échelles est d'autant mieux vérifiée que le milieu est formé d'un grand nombre de cellules.

de définir à partir d'un tel volume ne sont pas pertinentes car sujettes à des variations spatiales « rapides ». Cette propriété, décrite notamment par Marle [75], Bachmat et Bear [14], Quintard et Whitaker [95], est représentée schématiquement sur la FIG. 1.4. À l'inverse, les propriétés macroscopiques calculées à partir de tout volume plus grand que le VER demeurent invariantes (ou alors varient faiblement), à condition que la séparation d'échelles soit bien respectée. Si tel n'est pas le cas, on ne peut pas définir de VER ni de propriétés macroscopiques *intrinsèques* à cause de l'influence des bords externes sur les phénomènes physiques moyens. Une description à l'échelle macroscopique n'est donc légitime que si le facteur de séparation d'échelles est suffisamment petit (voir la discussion dans Goyeau *et al.* [49]). Enfin, la forme du VER doit être adaptée à la topologie du milieu considéré. Si le milieu est périodique, on prendra pour VER la cellule unitaire engendrant le milieu (FIG. 1.3). En notant r_0 (resp. ℓ_0) la taille du VER dans le cas d'un milieu hétérogène (resp. périodique), on aura ainsi, selon la nature du milieu, les conditions de séparation d'échelles suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \ell \ll r_0 \ll L & \text{pour un milieu hétérogène,} \\ \ell \simeq \ell_0 \ll L & \text{pour un milieu périodique.} \end{array} \right. \quad (1.7a) \quad (1.7b)$$

Pour un milieu hétérogène, la taille du VER doit être beaucoup plus grande que celle des hétérogénéités. Pour un milieu périodique, elle peut être du même ordre (Whitaker [118], [119]).

La méthode de prise de moyenne volumique consiste à obtenir une description à l'échelle macroscopique en appliquant un opérateur de moyenne spatiale aux équations ou champs microscopiques. Appliqué à un champ ψ (vectoriel ou scalaire) associé à la phase fluide, cet opérateur a été originellement défini par

$$\langle \psi \rangle(\vec{x}_0) = \frac{1}{V} \int_{V_f(\vec{x}_0)} \psi(\vec{x}_0 + \vec{x}) dV_f, \quad (1.8)$$

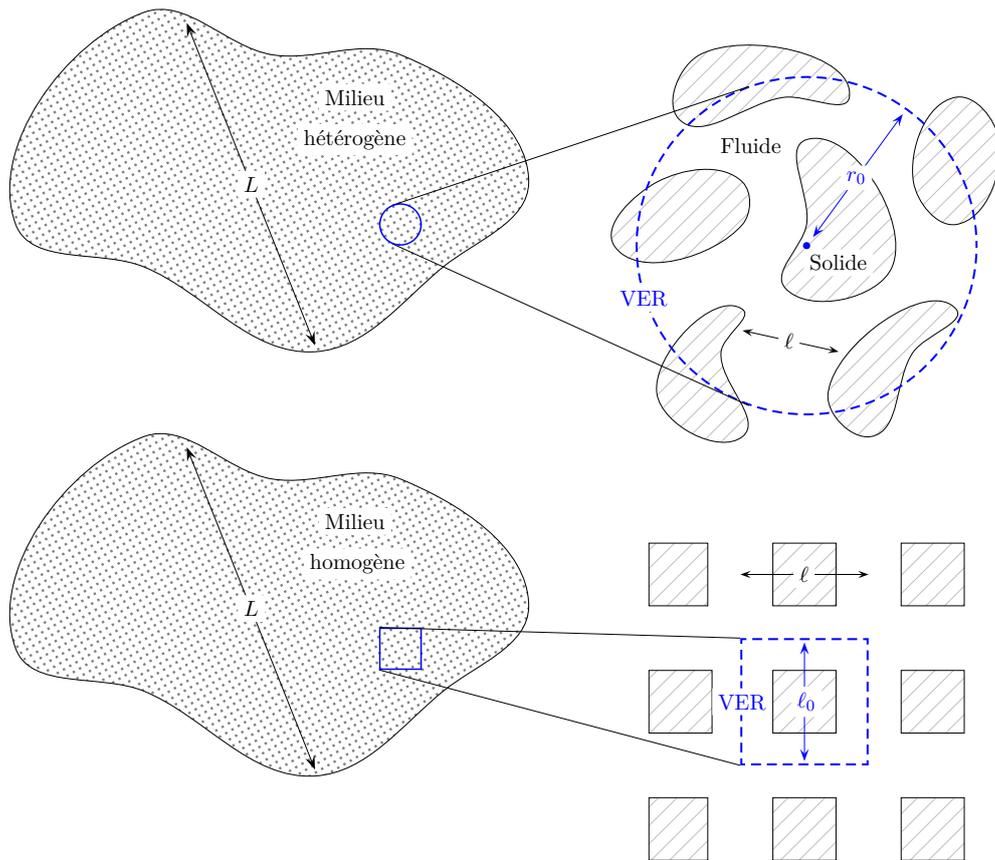


FIG. 1.3 – Échelles de longueur et volume élémentaire représentatif associés à un milieu poreux hétérogène (en haut) et périodique (en bas).

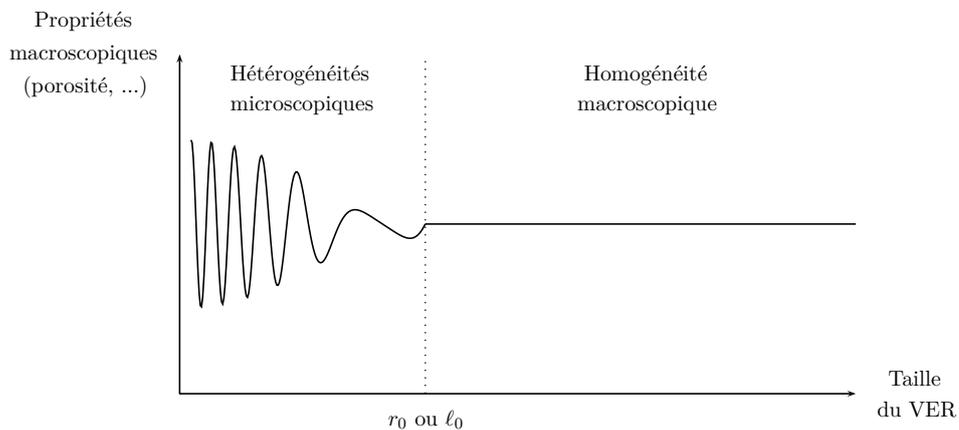


FIG. 1.4 – Effet qualitatif de la taille du VER sur les propriétés macroscopiques. Si cette taille est inférieure à r_0 ou l_0 , les hétérogénéités microscopiques sont visibles et le volume choisi n'est pas représentatif du milieu.

où V_f est le volume de fluide contenu dans le volume V du VER, et où l'intégration est réalisée sur la variable \vec{x} décrivant le volume V_f (FIG. 1.5). Cette moyenne, qui dépend de la position \vec{x}_0 du centre du VER, est un champ continu dans le milieu poreux. Whitaker [120] précise que la notation est généralement simplifiée en

$$\langle \psi \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_f} \psi dV_f, \quad (1.9)$$

rendant implicites la variable d'intégration et la dépendance en \vec{x}_0 . Si le VER est choisi suffisamment grand, alors les variations à petites échelles sont éliminées et l'on obtient ainsi le comportement moyen de ψ en ne conservant que ses grandes échelles de variation. D'autre part, les grandeurs ainsi moyennées sont définies à la fois dans le fluide et dans le solide : il n'y a plus de notion d'interfaces fluide/solide à l'intérieur du milieu équivalent. La procédure de prise de moyenne volumique rappelle les méthodes RANS et LES (Sagaut [103]) en mécanique des fluides turbulente. La différence avec la première est que la moyenne appliquée est ici spatiale et non statistique ; la différence avec la seconde est que le volume de prise de moyenne est macroscopique, au lieu d'être lié au volume d'une maille de calcul. Cependant les problématiques afférentes sont analogues et concernent essentiellement la fermeture des équations moyennées.

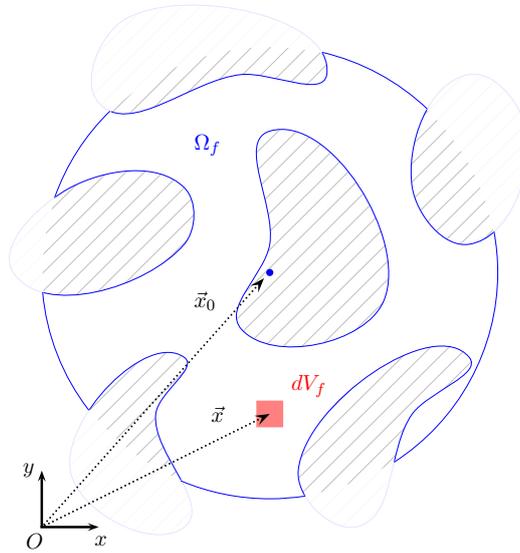


FIG. 1.5 – Prise de moyenne volumique : un champ défini dans la phase fluide est intégré sur le domaine fluide Ω_f contenu dans le volume de prise de moyenne de centre \vec{x}_0 . Une valeur moyenne du champ est ainsi définie à chaque position \vec{x}_0 .

La méthode d'homogénéisation, développée notamment par Keller [62], Bensoussan *et al.* [18] et Sanchez-Palencia [104], est une technique mathématique fondée sur des développements asymptotiques des variables physiques. Elle a d'abord été établie pour des milieux poreux périodiques, bien qu'elle s'applique également aux milieux désordonnés. Soit ψ une quantité physique locale dépendant de l'espace, et soit $\vec{X} = (X_1, X_2)$ la variable d'espace. On introduit deux variables d'espace adimensionnées,

$$\begin{cases} \vec{x} = (x_1, x_2) = \frac{\vec{X}}{L} & \text{la variable d'espace macroscopique ou } \textit{lente}, & (1.10a) \\ \vec{y} = (y_1, y_2) = \frac{\vec{X}}{\ell} & \text{la variable d'espace microscopique ou } \textit{rapide}, & (1.10b) \end{cases}$$

ces deux variables étant reliées par

$$\vec{y} = \frac{\vec{x}}{\varepsilon}. \quad (1.11)$$

Supposons que le milieu poreux considéré soit périodique. Si la condition de séparation d'échelles (1.6) est remplie, alors le champ ψ dépend des deux variables d'espaces séparées \vec{x} et \vec{y} , et on peut rechercher ψ sous la forme d'un développement asymptotique à deux échelles en puissances de ε :

$$\psi_\varepsilon(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_{n=0}^{+\infty} \varepsilon^n \psi_n(\vec{x}, \vec{y}), \quad (1.12)$$

où les fonctions ψ_n sont supposées périodiques par rapport à la variable \vec{y} , avec une période identique à celle de la géométrie. Dans ce développement, les termes ψ_n traduisent les contributions de toutes les échelles spatiales contenues dans les variations de ψ , l'échelle étant d'autant plus fine que n est grand. En pratique, on peut généralement stopper le développement aux premiers ordres. On applique la règle de dérivation « en chaîne »,

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial X_1} \\ \frac{\partial}{\partial X_2} \end{pmatrix}}_{\vec{\nabla}} = \frac{1}{L} \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \end{pmatrix}}_{\vec{\nabla}_x} + \frac{1}{\ell} \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y_1} \\ \frac{\partial}{\partial y_2} \end{pmatrix}}_{\vec{\nabla}_y}, \quad (1.13)$$

que l'on normalise par L^1 , donnant le nouvel opérateur

$$\vec{\nabla}^* = \vec{\nabla}_x + \frac{1}{\varepsilon} \vec{\nabla}_y. \quad (1.14)$$

Ensuite, si ψ est régie par une équation différentielle, la méthode consiste à substituer dans cette équation préalablement adimensionnée le développement (1.12) et à regrouper les termes par puissance de ε . La même procédure est effectuée pour les conditions aux limites. Imaginons par exemple que ψ soit une fonction harmonique, c'est-à-dire

$$\Delta^* \psi = 0, \quad (1.15)$$

où l'on a noté $\Delta^* = \vec{\nabla}^* \cdot \vec{\nabla}^*$, alors la première application au développement (1.12) de l'opérateur gradient fournit

$$\vec{\nabla}^* \psi_\varepsilon = \sum_{n=0}^{+\infty} \varepsilon^n \vec{\nabla}^* \psi_n \quad (1.16a)$$

$$= \sum_{n=0}^{+\infty} \varepsilon^n \left(\vec{\nabla}_x \psi_n + \frac{1}{\varepsilon} \vec{\nabla}_y \psi_n \right) \quad (1.16b)$$

$$= \frac{1}{\varepsilon} \vec{\nabla}_y \psi_0 + \sum_{n=0}^{+\infty} \varepsilon^n \left(\vec{\nabla}_x \psi_n + \vec{\nabla}_y \psi_{n+1} \right). \quad (1.16c)$$

L'application de la divergence conduit alors à

$$\Delta^* \psi_\varepsilon = \vec{\nabla}^* \cdot \left[\frac{1}{\varepsilon} \vec{\nabla}_y \psi_0 + \sum_{n=0}^{+\infty} \varepsilon^n \left(\vec{\nabla}_x \psi_n + \vec{\nabla}_y \psi_{n+1} \right) \right] \quad (1.17a)$$

$$= \left(\vec{\nabla}_x + \frac{1}{\varepsilon} \vec{\nabla}_y \right) \cdot \left[\frac{1}{\varepsilon} \vec{\nabla}_y \psi_0 + \sum_{n=0}^{+\infty} \varepsilon^n \left(\vec{\nabla}_x \psi_n + \vec{\nabla}_y \psi_{n+1} \right) \right]. \quad (1.17b)$$

Après développement et regroupement des termes, l'équation (1.15) devient

1. On pourrait aussi, d'après Auriault [11], normaliser par ℓ sans conséquence sur le résultat final.

$$\begin{aligned}
 0 &= \varepsilon^{-2} [\Delta_y \psi_0] \\
 &= +\varepsilon^{-1} \left[\vec{\nabla}_x \cdot (\vec{\nabla}_y \psi_0) + \vec{\nabla}_y \cdot (\vec{\nabla}_x \psi_0) + \Delta_y \psi_1 \right] \\
 &= +\sum_{n=0}^{+\infty} \varepsilon^n \left[\Delta_x \psi_n + \vec{\nabla}_x \cdot (\vec{\nabla}_y \psi_{n+1}) + \vec{\nabla}_y \cdot (\vec{\nabla}_x \psi_{n+1}) + \Delta_y \psi_{n+2} \right],
 \end{aligned} \tag{1.18}$$

où Δ_x (resp. Δ_y) est égal à $\vec{\nabla}_x^2$ (resp. $\vec{\nabla}_y^2$). On a ainsi décomposé le problème initial en un ensemble de problèmes à différents ordres en espace. On en déduit que les coefficients du développement (1.18) sont identiquement nuls, ce qui conduit à un ensemble d'équations :

$$\text{À l'ordre } \varepsilon^{-2} \quad : \Delta_y \psi_0 = 0, \tag{1.19a}$$

$$\text{À l'ordre } \varepsilon^{-1} \quad : \vec{\nabla}_x \cdot (\vec{\nabla}_y \psi_0) + \vec{\nabla}_y \cdot (\vec{\nabla}_x \psi_0) + \Delta_y \psi_1, \tag{1.19b}$$

$$\text{À l'ordre } \varepsilon^n, n \geq 0 \quad : \Delta_x \psi_n + \vec{\nabla}_x \cdot (\vec{\nabla}_y \psi_{n+1}) + \vec{\nabla}_y \cdot (\vec{\nabla}_x \psi_{n+1}) + \Delta_y \psi_{n+2}. \tag{1.19c}$$

L'équation (1.19a) associée à la périodicité de ψ_0 conduit à

$$\psi_0(\vec{x}, \vec{y}) = \psi_0(\vec{x}). \tag{1.20}$$

Ainsi la variable au premier ordre ψ_0 ne dépend pas de l'échelle macroscopique et correspond donc aux variations à l'échelle macroscopique de la variable ψ : ψ_0 est la valeur homogénéisée de ψ . Par suite, l'équation (1.19b) devient

$$\vec{\nabla}_y \cdot (\vec{\nabla}_x \psi_0 + \vec{\nabla}_y \psi_1) = 0. \tag{1.21}$$

On peut alors montrer (Auriault et Lewandowska [13]) qu'il existe deux champs $\vec{\kappa}(\vec{y})$ et $\eta(\vec{x})$ tels que ψ_1 s'écrit

$$\psi_1(\vec{x}, \vec{y}) = \vec{\kappa}(\vec{y}) \cdot \vec{\nabla}_x \psi_0 + \eta(\vec{x}), \tag{1.22}$$

où $\vec{\kappa}$ est périodique et de moyenne nulle sur la cellule unitaire. En substituant la forme (1.22) dans l'équation (1.21), on obtient

$$\vec{\nabla}_y \cdot (\bar{I} + \vec{\nabla}_{\vec{y}} \vec{\kappa}) = 0, \tag{1.23}$$

où \bar{I} est le tenseur identité et $J_{\vec{y}}(\vec{\kappa})$ la matrice jacobienne de $\vec{\kappa}$, notée aussi $\vec{\nabla}_{\vec{y}} \vec{\kappa}^1$. En poursuivant l'analyse à l'ordre ε^0 , on obtient l'équation d'évolution de la forme homogénéisée de ψ :

$$\vec{\nabla}_x \cdot (\bar{K} \vec{\nabla}_x \psi_0) = 0, \tag{1.24}$$

où \bar{K} est un tenseur *effectif* caractéristique du milieu s'exprimant comme

$$\bar{K} = \frac{1}{V} \int_{V_f} (\bar{I} + \vec{\nabla}_{\vec{y}} \vec{\kappa}) dV. \tag{1.25}$$

1. Le tenseur $\vec{\nabla}_{\vec{y}} \vec{\kappa}$ est représenté par la matrice de coefficients $(\vec{\nabla}_{\vec{y}} \vec{\kappa})_{ij} = \frac{\partial \kappa_i}{\partial x_j}$.

Un traitement analogue fournit des conditions aux limites pour (1.24), qui peut ainsi être résolue en ayant préalablement déterminé le tenseur $\overline{\overline{K}}$ à l'aide de (1.23) résolue dans une cellule unitaire. L'enjeu de la méthode d'homogénéisation consiste, dans un second temps, à démontrer la convergence de la série (1.12) vers ψ_0 lorsque le facteur d'échelle ε tend vers zéro. Cette propriété de convergence est notamment étudiée par Tartar [109] (méthode de l'énergie) et par Allaire [4] (méthode de convergence à deux échelles).

La méthode d'homogénéisation n'a pas été mise en pratique au cours de la thèse, aussi pertinente qu'elle soit dans l'étude des milieux poreux périodiques. Nous lui avons préféré la méthode de prise de moyenne volumique, également adaptée aux milieux poreux périodiques qui font l'objet de notre étude. En effet, cette méthode nous semble tout d'abord moins calculatoire et d'interprétation physique plus simple. Un second argument en sa faveur est la similitude de sens entre les quantités définies par la relation (1.9) et les quantités obtenues par un calcul de type volumes finis. De plus, la prise de moyenne volumique fait l'objet d'une plus grande expérience parmi l'encadrement de la thèse, de nombreux outils de simulation numérique en rapport avec cette méthode ayant déjà été développés au laboratoire. Enfin, si la méthode d'homogénéisation a été largement utilisée pour des problèmes linéaires, son application à des problèmes non linéaires devient beaucoup plus délicate (bien que cette problématique ait déjà été abordée, voir par exemple Amaziane *et al.* [8]). On notera cependant qu'homogénéisation et prise de moyenne comportent certaines similitudes, soulignées par Bourgeat *et al.* [23]. Dans la suite, nous ferons une large utilisation de la prise de moyenne, sur laquelle nous revenons plus en détail dans la section suivante 1.2.

1.2 Méthode de la prise de moyenne volumique

1.2.1 Choix et propriétés du filtre

Notons Ω le milieu poreux, c'est-à-dire la réunion des phases fluide et solide, et Ω_f la phase fluide contenue dans Ω . On définit la fonction indicatrice de la phase fluide par

$$\chi(\vec{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \vec{x} \in \Omega_f, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1.26)$$

L'opérateur de prise de moyenne (1.8) peut alors être généralisé à l'aide de fonctions de pondération, notées m , en l'écrivant sous la forme d'un produit de convolution (Marle [75], Anderson et Jackson [9], Quintard et Whitaker [94]) :

$$\langle \psi \rangle = m * (\chi\psi), \quad (1.27)$$

soit, par définition du produit de convolution $*$,

$$\forall \vec{x}_0 \in \Omega, \langle \psi \rangle(\vec{x}_0) = \int_{\Omega} m(\vec{x}_0 - \vec{x}) \chi(\vec{x}) \psi(\vec{x}) dV. \quad (1.28)$$

La fonction de pondération m sera par la suite appelé *filtre*, puisqu'elle agit comme un filtre passe-bas en coupant les hautes fréquences spatiales du champ ψ . On retrouve la définition (1.8) en choisissant le filtre *boîte* (ou *créneau*) m_0 tel que

$$m_0(\vec{x}) = \begin{cases} \frac{1}{V} & \text{si } \vec{x} \text{ appartient au VER,} \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (1.29)$$

Or selon la définition (1.28), on a pour tout champ uniforme ψ_0 ,

$$\langle \psi_0 \rangle = \psi_0 \langle 1 \rangle \neq \psi_0. \quad (1.30)$$

On définit alors aussi une moyenne volumique *intrinsèque* associée à la phase fluide, notée avec l'indice « f » :

$$\langle \psi \rangle_f = \frac{m * (\chi \psi)}{m * \chi} = \frac{\langle \psi \rangle}{\langle 1 \rangle}. \quad (1.31)$$

Ainsi, cet opérateur de moyenne intrinsèque est tel que pour tout champ ψ_0 uniforme dans la phase fluide,

$$\langle \psi_0 \rangle_f = \psi_0. \quad (1.32)$$

Naturellement, les définitions (1.28) et (1.31) nous amènent à réfléchir sur le choix du filtre. Divers critères ont été exhibés par Quintard et Whitaker [94], [95] et par Breugem [25]. Mathématiquement, on peut choisir *a priori* n'importe quel filtre m tel que le produit de convolution $m * (\chi \psi)$ soit défini, c'est-à-dire tel que la fonction $\vec{x} \mapsto m(\vec{x}_0 - \vec{x}) \chi(\vec{x}) \psi(\vec{x})$ soit intégrable sur Ω . Toutefois, d'un point de vue physique, la pertinence et la simplicité d'interprétation de la méthode de prise de moyenne reposent sur la forme donnée au filtre. Pour le choix du filtre, on s'appuie sur les deux critères suivants :

- (i) la taille du filtre doit être suffisamment grande pour gommer les hétérogénéités de la microstructure (FIG. 1.4), et suffisamment petite pour ne pas perdre trop d'information sur les champs microscopiques ;
- (ii) le filtre doit être suffisamment régulier pour que les quantités filtrées le soient. En effet, le produit de convolution a des propriétés régularisantes : plus le filtre est régulier et plus le produit de convolution l'est.

Dans toute la suite, nous considérerons exclusivement des milieux poreux périodiques. Ainsi, on choisira plutôt des filtres à support¹ compact², ce qui revient à choisir un VER compact. Suivant ces considérations, nous utiliserons une famille particulière de filtres m_p définis comme des puissances (au sens de la convolution) du filtre boîte m_0 :

$$\forall p \geq 1 : m_p = \underbrace{m_0 * m_0 * \cdots * m_0}_p \text{ étoiles}, \quad (1.33)$$

soit encore

$$\forall p \geq 1 : m_p = m_0 * m_{p-1} = m_{p-1} * m_0. \quad (1.34)$$

Comme nous le verrons par la suite (chapitre 2), cette famille particulière de filtres offre des relations simples entre les types de moyennes – volumiques et *cellulaires* – dont nous comprendrons l'intérêt dans la stratégie de reconstruction des fines échelles (chapitre 3). Les expressions analytiques des filtres monodimensionnels m_p aux trois premiers ordres, également tracées sur la FIG. 1.6, sont

$$m_0(x) = \begin{cases} \frac{1}{\ell_0} & \text{si } -\frac{\ell_0}{2} \leq x \leq \frac{\ell_0}{2}, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (1.35)$$

1. Le support de la fonction m est défini comme l'adhérence de l'ensemble $\mathcal{S} = \{\vec{x} \in \Omega, m(\vec{x}) \neq 0\}$.

2. Les filtres à support non compact sont surtout utilisés pour l'étude des milieux poreux hétérogènes.

pour le filtre *boîte*,

$$m_1(x) = \begin{cases} -\frac{|x|}{\ell_0^2} + \frac{1}{\ell_0} & \text{si } |x| \leq \ell_0, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (1.36)$$

pour le filtre *triangle*, et

$$m_2(x) = \begin{cases} \frac{9}{8\ell_0} \left(1 - \frac{2|x|}{3\ell_0}\right)^2 & \text{si } \frac{\ell_0}{2} \leq |x| \leq \frac{3\ell_0}{2}, \\ \frac{9}{8\ell_0} \left(1 - \frac{2|x|}{3\ell_0}\right)^2 - \frac{3}{8\ell_0} \left(1 - \frac{2|x|}{\ell_0}\right)^2 & \text{si } 0 \leq |x| \leq \frac{\ell_0}{2}, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (1.37)$$

pour le filtre *quadratique*.

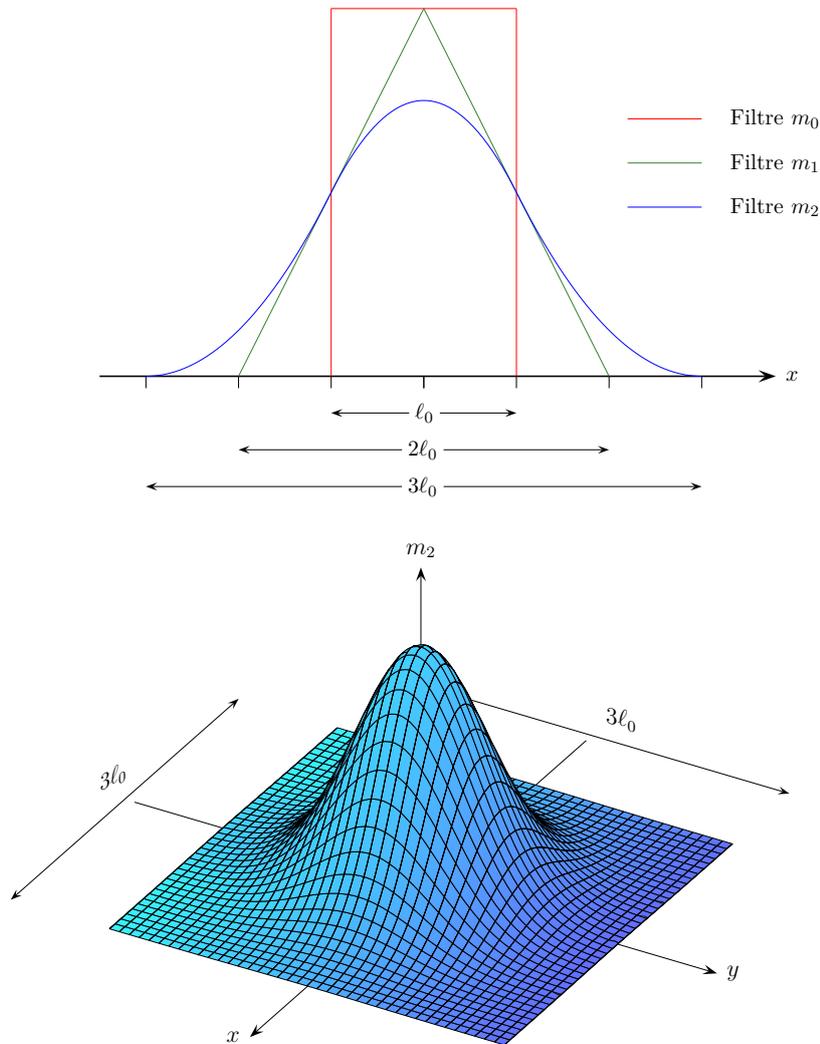


FIG. 1.6 – Tracés des filtres m_p aux trois premiers ordres en dimension un (en haut), et du filtre quadratique m_2 en dimension deux (en bas). Le support de m_p a un côté de longueur $(p + 1)\ell_0$, traduisant un étalement des fonctions m_p lorsque p augmente.

Le produit de convolution est alors bien défini puisque la fonction $\vec{x} \mapsto m(\vec{x}_0 - \vec{x})\chi(\vec{x})\psi(\vec{x})$ est intégrable sur Ω en tant que fonction bornée à support compact. Les principales propriétés des filtres m_p sont assez simples à exhiber :

- *Normalisation* : dans un milieu périodique, si le support du filtre boîte (c'est-à-dire le VER) est suffisamment grand, alors la moyenne volumique de la fonction unité est une constante ϕ telle que

$$\langle 1 \rangle = m_0 * \chi = \frac{1}{V} \int_{\text{VER}} 1 \, dV_f = \frac{V_f}{V} = \phi. \quad (1.38)$$

Cette constante, définie comme le rapport du volume de fluide contenu dans le VER sur le volume du VER, est la *porosité* du milieu. Il en résulte que tous les filtres d'ordre p vérifient la condition de normalisation

$$m_p * \chi = \langle 1 \rangle = \phi. \quad (1.39)$$

En effet, cette propriété est initialisée *via* (1.38). Si elle vraie au rang p , alors

$$\begin{aligned} m_{p+1} * \chi &= m_p * (m_0 * \chi) \\ &= m_p * \phi \\ &= \phi. \end{aligned} \quad (1.40)$$

La propriété (1.39) est donc vraie pour tout $p \geq 0$, par récurrence sur p .

En revanche, si la taille du filtre boîte est « trop petite », $\langle 1 \rangle$ devient une fonction dépendant de l'espace, ce qui rejoint les observations faites à la section 1.1, page 25. La FIG. 1.7 est une illustration de ce phénomène, qui a déjà été décrit de façon schématique sur la FIG. 1.4.

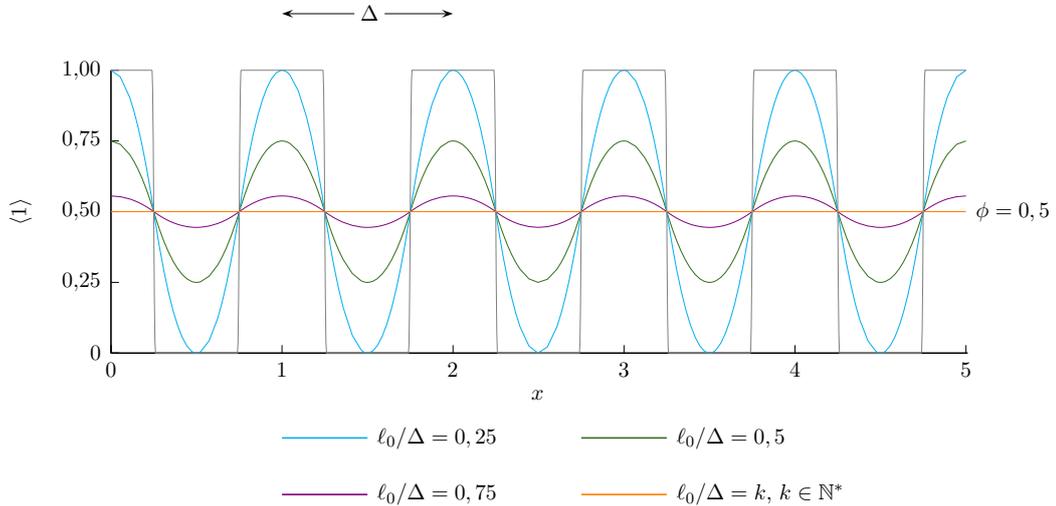


FIG. 1.7 – Variations de $\langle 1 \rangle = m_1 * \chi$ en fonction de la taille ℓ_0 du filtre boîte m_0 , pour une fonction indicatrice de phase χ (en gris) de période spatiale $\Delta = 1$. Si la taille du filtre correspond à un nombre entier de périodes, la fonction $\langle 1 \rangle$ prend une valeur constante égale à la porosité $\phi = 0,5$. Pour $0 \leq \ell_0 < 1$, l'effet des discontinuités de χ demeure visible après filtrage. Enfin, $\langle 1 \rangle$ tend vers χ lorsque $\ell_0 \rightarrow 0$, car les filtres m_p tendent vers le pic de Dirac qui est neutre pour l'opération de convolution.

- *Régularité* : les fonctions m_p sont polynomiales par morceaux, donc de classe \mathcal{C}^∞ presque partout. En réalité, pour $p \geq 1$, m_p est de classe \mathcal{C}^{p-1} , c'est-à-dire $p - 1$ fois

dérivable et à dérivée $(p-1)^{\text{ième}}$ continue. En effet, d'après son expression (1.36), m_1 est continue donc de classe \mathcal{C}^0 . Supposons la propriété vraie au rang p . Nous pouvons alors dériver formellement au sens des distributions le produit de convolution (1.34) en introduisant la distribution de Dirac δ (Schwartz [106]) :

$$\begin{aligned}
 m'_{p+1} &= (m_0 * m_p)' \\
 &= m'_0 * m_p \\
 &= \delta(x - \ell_0/2) * m_p - \delta(x + \ell_0/2) * m_p \\
 &= m_p(x - \ell_0/2) - m_p(x + \ell_0/2),
 \end{aligned} \tag{1.41}$$

donc m'_{p+1} est de classe \mathcal{C}^{p-1} . Par suite, m_{p+1} est de classe \mathcal{C}^p en tant que primitive d'une fonction de classe \mathcal{C}^{p-1} , ce qui prouve la propriété par récurrence sur p . Ceci se généralise bien entendu aux dimensions d'espace supérieures. Ainsi, le filtre de dimension \dim

$$m_p(\vec{x}) = \prod_{i=1}^{\dim} m_p(x_i) \tag{1.42}$$

est de classe \mathcal{C}^{p-1} par rapport à chaque variable d'espace x_i .

Le produit de convolution a des propriétés régularisantes : il est au moins aussi régulier que la plus régulière des deux fonctions convoluées (Mazet [77]). Comme

$$\forall p \geq 0 : \underbrace{m_{p+1} * (\chi\psi)}_{\langle \psi \rangle_{p+1}} = m_0 * \underbrace{m_p * (\chi\psi)}_{\langle \psi \rangle_p}, \tag{1.43}$$

alors la régularité du produit de convolution augmente avec l'ordre du filtre. C'est ce que l'on observe sur l'exemple simple de la FIG. 1.8, où un champ $\chi\psi$ linéaire par morceaux est convolué avec un filtre m_p . En réalité, pour cette famille de filtres, l'observation des premiers ordres indique que $m_p * (\chi T)$ est de classe \mathcal{C}^p , alors que m_p n'est que de classe \mathcal{C}^{p-1} . Autrement dit, le champ moyen a exactement un ordre de régularité de plus que le filtre employé¹. Cette propriété est intéressante dans la mesure où elle permet de choisir un filtre qui produira un champ ayant une régularité connue. Par exemple, sachant qu'à chaque opération de dérivation la classe de régularité baisse d'un ordre, le gradient du produit de convolution existe et est au moins continu dès lors que $p \geq 1$. Si l'on souhaite manipuler les laplaciens de quantités moyennes, alors le filtre m_2 assure au moins leur continuité².

La procédure de filtrage avec un filtre passe-bas incite à se placer dans l'espace spectral – par analogie avec le traitement du signal, par exemple en électronique –, afin de visualiser l'action du filtre. Le spectre de fréquences composant un champ microscopique ψ fonction de coordonnées spatiales, est obtenu en calculant la transformée de Fourier de ce champ :

$$\mathcal{F}(\psi)(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \psi(x) dx, \tag{1.44}$$

1. On peut d'ailleurs se demander quel filtre choisir pour que $\langle \psi \rangle$ ait exactement le même ordre de régularité que ce filtre, et non un ordre plus élevé. L'idée est que le filtre ne soit pas régulier « presque partout », on peut par exemple prendre une fonction partout continue et nulle part dérivable (Thim [111]).

2. Ces considérations sur le choix du filtre et sur la régularité du produit de convolution n'ont donc qu'un intérêt pratique puisqu'il est intéressant, dans les applications numériques, de disposer de champs suffisamment réguliers dont on peut post-traiter les gradients et autres dérivées spatiales. D'ailleurs, le formalisme du changement d'échelle par prise de moyenne volumique est généralement présenté en utilisant la formulation initiale (1.8).

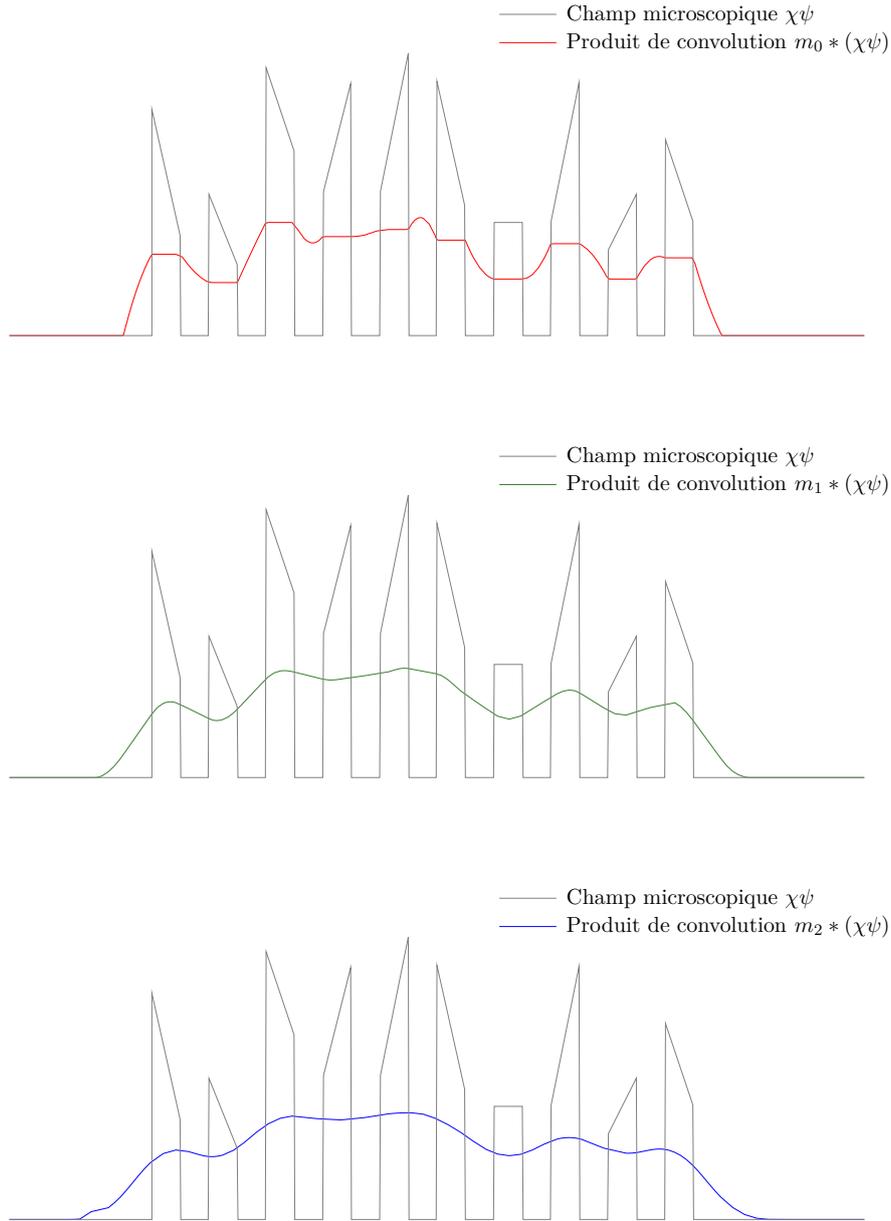


FIG. 1.8 – Champ microscopique $\chi\psi$ (en gris) et produit de convolution de ce champ avec un filtre m_p , $p = 1, 2, 3$. Le produit de convolution est d'autant plus « lisse » que l'ordre du filtre est élevé.

où $k = 2\pi\nu$ et ν sont (uniquement dans cette section) respectivement le nombre d'onde et la fréquence spatiale. Nous cherchons à déterminer sous quelle forme la transformée de Fourier de $\langle\psi\rangle$ varie en fonction de k . D'abord, la transformée de Fourier de m_0 est

$$\mathcal{F}(m_0) = \left(\frac{\sin\left(\frac{k\ell_0}{2}\right)}{\frac{k\ell_0}{2}} \right). \quad (1.45)$$

Puis en vertu de l'égalité

$$\mathcal{F}(g * h) = \mathcal{F}(g) \times \mathcal{F}(h), \quad (1.46)$$

nous avons

$$\mathcal{F}(m_p) = \mathcal{F}(m_0)^{p+1} = \left(\frac{\sin\left(\frac{k\ell_0}{2}\right)}{\frac{k\ell_0}{2}} \right)^{p+1}. \quad (1.47)$$

Sa transformée de Fourier tendant vers zéro en $k^{-(p+1)}$, le filtre m_p élimine d'autant plus efficacement les hautes fréquences spatiales que p est élevé. Supposons par ailleurs que $\chi\psi$ soit une fonction linéaire par morceaux, comme dans l'exemple de la FIG. 1.8. On peut alors l'écrire à l'aide de fonctions de Heaviside sous la forme

$$\chi(x)\psi(x) = \sum_i (a_i x + b_i) [H(x - c_i) - H(x - c_{i+1})]. \quad (1.48)$$

Sa transformée de Fourier est de la forme

$$\mathcal{F}(\chi\psi)(k) = \frac{\alpha(k)}{k} + \frac{\beta(k)}{k^2}, \quad (1.49)$$

où α et β sont des combinaisons linéaires à coefficients complexes de sinus et de cosinus de k , donc des fonctions de module borné. Par suite, en utilisant (1.46), (1.47) et (1.49), nous obtenons

$$\mathcal{F}(\langle\psi\rangle_p)(k) = \frac{a(k)}{k^{p+2}} + \frac{b(k)}{k^{p+3}}. \quad (1.50)$$

Enfin, en faisant appel à la propriété

$$\mathcal{F}(g^{(n)}) = (ik)^n \mathcal{F}(g), \quad (1.51)$$

nous en déduisons que la transformée de Fourier des dérivées de $\langle\psi\rangle_p$ est

$$\mathcal{F}(\langle\psi\rangle_p^{(n)})(k) = \frac{A(k)}{k^{p-n+2}} + \frac{B(k)}{k^{p-n+3}}. \quad (1.52)$$

Si l'on souhaite que les hautes fréquences de la dérivée $n^{\text{ième}}$ soient coupées, c'est-à-dire que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \mathcal{F}(\langle\psi\rangle_p^{(n)})(k) = 0, \quad (1.53)$$

alors on doit choisir l'ordre p du filtre de telle sorte que

$$p - n + 2 \geq 1. \quad (1.54)$$

Les tracés de la FIG. 1.9 représentent les transformées de Fourier de $\langle\psi\rangle_p^{(n)}$ pour $n, p = 0, 1, 2$. Il est à noter, premièrement que $\mathcal{F}(\langle\psi\rangle_p^{(n)})$ ne tend pas forcément vers zéro en l'infini¹, et deuxièmement que (1.54) ne prouve pas la classe de régularité de $\langle\psi\rangle_p$ ².

1. Sans pour autant contredire le théorème de Riemann-Lebesgue, selon lequel la transformée de Fourier de toute fonction intégrable sur \mathbb{R} tend vers zéro en l'infini. En effet, les dérivées au sens classique de $\langle\psi\rangle_p$ n'existant pas nécessairement, on est amené à dériver au sens des distributions. Or la transformée de Fourier d'une distribution peut ne pas avoir de limite vers zéro en l'infini (par exemple, la transformée de Fourier du pic de Dirac est une constante).

2. En effet, on peut avoir une fonction non dérivable dont la transformée de Fourier de la dérivée au sens des distributions tend vers zéro. Par exemple la fonction $|x|$ est seulement continue, et sa dérivée au sens des distributions est une somme de « créneaux » dont la transformée de Fourier (une somme de sinus cardinaux) tend vers zéro.

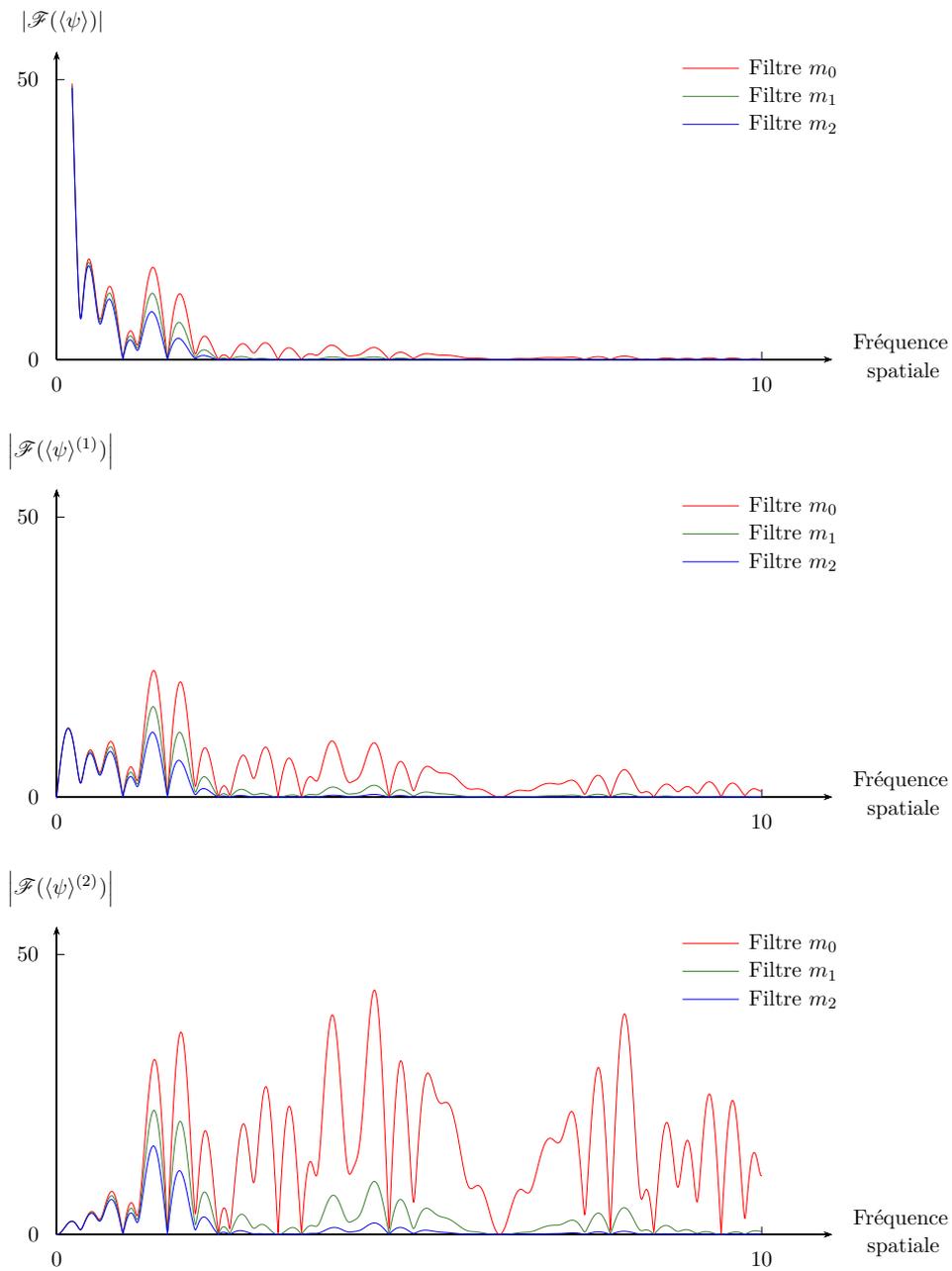


FIG. 1.9 – Tracés des transformées de Fourier des dérivées $n^{\text{ièmes}} \langle\psi\rangle_p^{(n)}$ pour $n, p = 0, 1, 2$. Dériver fait apparaître de plus en plus de hautes fréquences spatiales. Augmenter l'ordre du filtre permet d'éliminer de mieux en mieux ces hautes fréquences.

En résumé de cette section où est décrit le choix des filtres dans la méthode de prise de moyenne volumique, il apparaît que l'on peut choisir toute fonction m répondant à certains critères : taille adaptée à la structure du milieu poreux, normalisation, régularité. Cependant, les fonctions m_p introduites ici ont une portée pratique : d'abord leurs propriétés sont bien connues (notamment leur régularité et leur taille, qui augmentent avec p), et par conséquent elles permettent de préciser la signification des grandeurs $\langle\psi\rangle$; et s'agissant de la méthodologie de reconstruction développée au chapitre 3, ces filtres permettent d'établir analytiquement des relations avec des moyennes de type « cellulaires » (ce qui est fait au chapitre 2), qui sont utilisées comme données d'entrée des problèmes de reconstruction.

1.2.2 Problèmes de fermeture

Les étapes du changement d'échelle par prise de moyenne volumique sont décrites en détail par Whitaker [121] et Kaviany [60]. Nous en reprenons ici les grandes lignes. L'opérateur de prise de moyenne (1.28) est appliqué aux équations locales régissant les champs physiques. Contrairement à l'opérateur de moyenne statistique en RANS, l'opérateur de moyenne spatiale ne commute pas avec l'opérateur de dérivée (qu'elle soit spatiale ou temporelle), à cause de la présence d'interfaces entre le fluide et le solide. Notons Σ_{fs} ces interfaces, c'est-à-dire la réunion de toutes les surfaces fermées – ou *contours* fermés, si le milieu est bidimensionnel – délimitant la phase solide de la phase fluide. On a les relations d'intervention suivantes, évaluées en \vec{x}_0 (Marle [75], Whitaker [118], Veverka [116], Mls [81]) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \frac{\partial \psi}{\partial t} \rangle = \frac{\partial \langle \psi \rangle}{\partial t} - \int_{\Sigma_{fs}} m(\vec{x}_0 - \vec{x}) \vec{n}(\vec{x}) \cdot \vec{w}(\vec{x}) \psi(\vec{x}) dS , \\ \langle \vec{\nabla} \psi \rangle = \vec{\nabla} \langle \psi \rangle + \int_{\Sigma_{fs}} m(\vec{x}_0 - \vec{x}) \vec{n}(\vec{x}) \psi(\vec{x}) dS , \\ \langle \vec{\nabla} \cdot \vec{\psi} \rangle = \vec{\nabla} \cdot \langle \vec{\psi} \rangle + \int_{\Sigma_{fs}} m(\vec{x}_0 - \vec{x}) \vec{n}(\vec{x}) \cdot \vec{\psi}(\vec{x}) dS , \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (1.55a) \\ (1.55b) \\ (1.55c) \end{array}$$

où \vec{w} est le vecteur vitesse de déplacement des points de l'interface et \vec{n} est le vecteur unitaire normal à l'interface fluide/solide (FIG. 1.10), orienté du fluide vers le solide. Donc s'il n'y a pas d'interfaces ou si le champ moyenné est nul aux interfaces, alors il y a commutativité de la moyenne spatiale et des dérivées spatiales. Si la matrice solide est indéformable, alors il y a commutativité de la moyenne spatiale et de la dérivée temporelle.

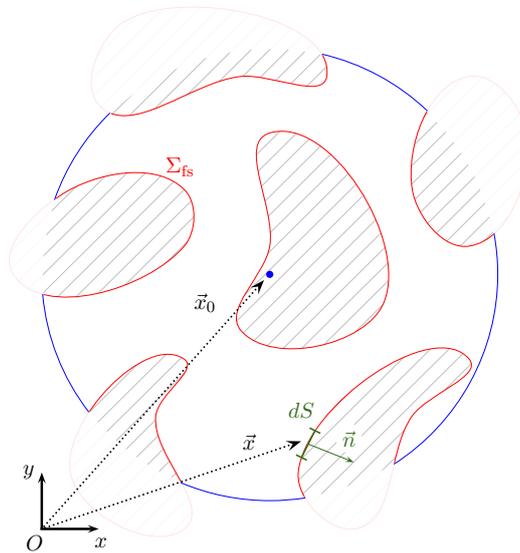


FIG. 1.10 – Interfaces fluide/solide Σ_{fs} contenues dans le VER. Les formules d'intervention (1.55a) – (1.55c) font apparaître une moyenne surfacique où l'intégration est réalisée pour la variable \vec{x} décrivant Σ_{fs} .

L'origine de ces relations est la discontinuité de la fonction indicatrice de phase au passage des interfaces, puisqu'elle passe de la valeur zéro à la valeur un. En effet, en utilisant le fait que la dérivée d'un produit de convolution se transmet à l'une ou l'autre des fonctions convoluées, on a

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} [m * (\chi\psi)] &= m * \frac{\partial(\chi\psi)}{\partial x_i} \\ &= m * \left(\chi \frac{\partial\psi}{\partial x_i} \right) + m * \left(\frac{\partial\chi}{\partial x_i} \psi \right), \end{aligned} \quad (1.56)$$

c'est-à-dire

$$\left\langle \frac{\partial\psi}{\partial x_i} \right\rangle = \frac{\partial\langle\psi\rangle}{\partial x_i} - m * \left(\frac{\partial\chi}{\partial x_i} \psi \right). \quad (1.57)$$

Or $\frac{\partial\chi}{\partial x_i}$ est nulle partout sauf aux interfaces, donc le produit de convolution du membre de droite est dégénéré en une intégrale surfacique.

Considérons par exemple le transfert thermique convectif en régime permanent dans un milieu poreux, la température θ étant transportée à la vitesse \vec{u} . En notant λ la conductivité thermique du fluide, supposée scalaire et uniforme, l'équation régissant le champ de température dans la phase fluide à l'échelle microscopique s'écrit

$$\rho C_p \vec{\nabla} \cdot (\vec{u}\theta) = \vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{\nabla}\theta) \quad \text{dans } \Omega_f. \quad (1.58)$$

La paroi est supposée adhérente et imperméable, et l'interaction fluide/solide est modélisée par un flux thermique q_0 imposé à l'interface :

$$\begin{cases} \vec{u} = \vec{0} & \text{sur } \Sigma_{fs}, \\ \lambda \vec{\nabla}\theta \cdot \vec{n} = q_0 & \text{sur } \Sigma_{fs}. \end{cases} \quad (1.59a)$$

$$(1.59b)$$

L'équation du transport convectif à l'échelle macroscopique s'obtient par application de l'opérateur (1.8) à l'équation (1.58),

$$\rho C_p \langle \vec{\nabla} \cdot (\vec{u}\theta) \rangle = \langle \vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{\nabla}\theta) \rangle, \quad (1.60)$$

puis en utilisant la relation d'interversion (1.55c)¹ et les conditions aux interfaces (1.59a) et (1.59b),

$$\begin{aligned} \rho C_p \vec{\nabla} \cdot \langle \vec{u}\theta \rangle + \underbrace{\frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} \rho C_p (\vec{n} \cdot \vec{u}) \theta \, dS}_{= 0 \text{ car } \vec{u} = \vec{0} \text{ à l'interface}} &= \vec{\nabla} \cdot \langle \lambda \vec{\nabla}\theta \rangle + \underbrace{\frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} \lambda \vec{n} \cdot \vec{\nabla}\theta \, dS}_{= \frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} q_0 \, dS}, \end{aligned} \quad (1.61)$$

et enfin en appliquant la relation (1.55b) au premier terme du membre de droite,

$$\rho C_p \vec{\nabla} \cdot \langle \vec{u}\theta \rangle = \vec{\nabla} \cdot \left[\lambda \vec{\nabla}\langle\theta\rangle + \frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} \lambda \vec{n}\theta \, dS \right] + \underbrace{\frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} q_0 \, dS}_{\mathcal{P}}. \quad (1.62)$$

On voit ainsi apparaître de nouveaux termes dans l'équation, qui traduisent les échanges conductifs entre phases et les effets de structure. Les conditions aux limites (1.59b) traduisant le chauffage du fluide à l'échelle microscopique sont remplacées à l'échelle macroscopique par un terme de création volumique de puissance thermique qui s'écrit, en revenant à la définition incluant les filtres m_p , si q_0 est uniforme,

1. Avec la notation simplifiée (1.9).

$$\mathcal{P}(\vec{x}_0) = \frac{q_0}{V} \int_{\Sigma_{\text{fs}}} \underbrace{m_p(\vec{x}_0 - \vec{x})}_{\text{noté } \iota_p(\vec{x}_0)} dS. \quad (1.63)$$

S'il n'est pas évident que \mathcal{P} soit uniforme, c'est néanmoins le cas à condition que la taille du filtre soit suffisamment grande. En effet, raisonnons dans le plan \mathbb{R}^2 et supposons que la microstructure du milieu soit Δ -périodique à la fois par rapport à la variable x et à la variable y . Si le support du filtre m_0 , de côté ℓ_0 , contient un nombre entier de cellules unitaires, alors l'intégrale $\iota(\vec{x}_0)$ dans (1.63) ne dépend pas de la position \vec{x}_0 ni de l'ordre p du filtre m_p , mais uniquement de la structure du milieu poreux. Notons Σ_{ij} les courbes fermées correspondant aux interfaces, de telle sorte que

$$\Sigma_{\text{fs}} = \bigcup_{i,j \in \mathbb{Z}} \Sigma_{ij}. \quad (1.64)$$

En tout point \vec{x}_0 de l'espace,

$$\iota_0(x_0, y_0) = \sum_{i,j \in \mathbb{Z}} \int_{\Sigma_{ij}} \underbrace{m_0(x_0 - x) \times m_0(y_0 - y)}_{m_0(\vec{x}_0)} dx dy. \quad (1.65)$$

Or les interfaces Σ_{ij} sont distantes d'un nombre entier de périodes, donc il existe une interface de référence $\Sigma_{\text{réf}}$ telle que (FIG. 1.11)

$$\forall (x, y) \in \Sigma_{ij}, \exists (x_{\text{réf}}, y_{\text{réf}}) \in \Sigma_{\text{réf}} : \begin{cases} x = x_{\text{réf}} + i\Delta, \\ y = y_{\text{réf}} + j\Delta. \end{cases} \quad (1.66)$$

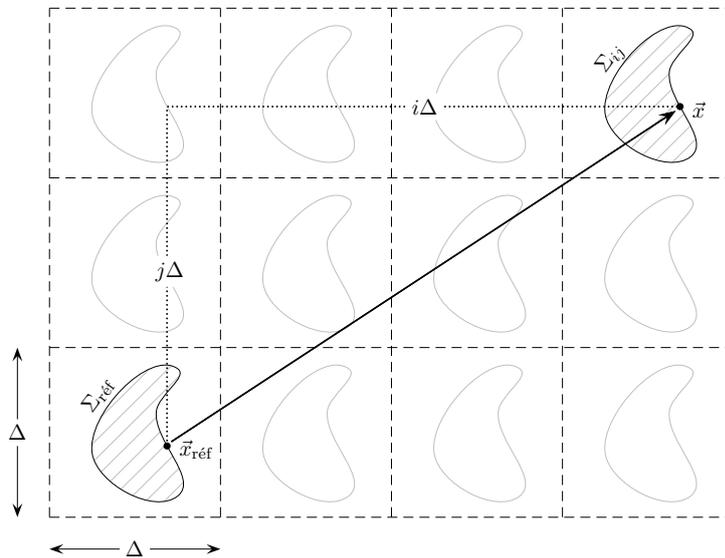


FIG. 1.11 – Illustration de la propriété (1.66), avec ici $i = 3$ et $j = 2$.

D'où

$$\iota_0(x_0, y_0) = \sum_{i,j \in \mathbb{Z}} \int_{\Sigma_{\text{réf}}} m_0(x_0 - x_{\text{réf}} - i\Delta) \times m_0(y_0 - y_{\text{réf}} - j\Delta) dx_{\text{réf}} dy_{\text{réf}}. \quad (1.67)$$

Calculons la dérivée au sens des distributions de ι_0 par rapport à x :

$$\frac{\partial \iota_0}{\partial x}(x, y) = \sum_{i, j \in \mathbb{Z}} \int_{\Sigma_{\text{réf}}} m'_0(x - x_{\text{réf}} - i\Delta) m_0(y - y_{\text{réf}} - j\Delta) dx_{\text{réf}} dy_{\text{réf}}, \quad (1.68)$$

avec

$$m'_0(x - x_{\text{réf}} - i\Delta) = \delta\left(x - x_{\text{réf}} - i\Delta - \frac{\ell_0}{2}\right) - \delta\left(x - x_{\text{réf}} - i\Delta + \frac{\ell_0}{2}\right). \quad (1.69)$$

En intervertissant somme et intégrale, on en déduit que

$$\frac{\partial \iota_0}{\partial x}(x, y) = \int_{\Sigma_{\text{réf}}} \left[S_\delta(x - x_{\text{réf}}) \sum_{j \in \mathbb{Z}} m_0(y - y_{\text{réf}} - j\Delta) \right] dx_{\text{réf}} dy_{\text{réf}}, \quad (1.70)$$

où

$$S_\delta(x - x_{\text{réf}}) = \sum_{i \in \mathbb{Z}} \left[\delta\left(x - x_{\text{réf}} - i\Delta - \frac{\ell_0}{2}\right) - \delta\left(x - x_{\text{réf}} - i\Delta + \frac{\ell_0}{2}\right) \right]. \quad (1.71)$$

Supposons que ℓ_0/Δ soit un entier k_x , alors

$$S_\delta(x - x_{\text{réf}}) = \sum_{i \in \mathbb{Z}} \delta\left[x - x_{\text{réf}} - \left(\frac{k_x}{2} + i\right)\Delta\right] - \delta\left[x - x_{\text{réf}} + \left(\frac{k_x}{2} - i\right)\Delta\right]. \quad (1.72)$$

En décalant l'indice dans la seconde distribution de Dirac, $i' = k_x + i$, on montre ainsi que la somme S_δ est nulle par télescopage de ses termes. Par conséquent, comme les variables x et y sont « interchangeables »,

$$\frac{\partial \iota_0}{\partial x}(x, y) = \frac{\partial \iota_0}{\partial y}(x, y) = 0 \quad (1.73)$$

et l'intégrale ι_0 est donc uniforme. Pour $p \geq 1$, ι_p l'est aussi car $\iota_p = m_{p-1} * \iota_0$; elle est égale au périmètre des interfaces contenues dans le VER.

Revenons à notre équation macroscopique de diffusion-convection (1.62) :

$$\rho C_p \vec{\nabla} \cdot \langle \vec{u} \theta \rangle = \vec{\nabla} \cdot \left[\lambda \vec{\nabla} \langle \theta \rangle + \frac{\lambda}{V} \int_{\Sigma_{\text{fs}}} \vec{n} \theta dS \right] + \mathcal{P}. \quad (1.74)$$

Cette équation n'est pas *fermée*, autrement dit il subsiste trop d'inconnues ($\langle \theta \rangle$, θ et \vec{u}) pour envisager une résolution, qu'elle soit analytique ou numérique. On doit donc

- (i) transformer le terme du premier membre en un terme convectif, c'est-à-dire de transport du champ de température moyen par le champ de vitesse moyen ;
- (ii) modéliser l'intégrale du second membre en fonction de l'inconnue macroscopique $\langle \theta \rangle$.

L'étape (i) est réalisée en décomposant les champs de vitesse et de température sous la forme (Gray [50])

$$\vec{u} = \langle \vec{u} \rangle_f + \tilde{\vec{u}}, \quad (1.75a)$$

$$\theta = \langle \theta \rangle_f + \tilde{\theta}, \quad (1.75b)$$

1.2 Méthode de la prise de moyenne volumique

où $\tilde{\vec{u}}$ et $\tilde{\theta}$ désignent les déviations spatiales des champs de vitesse et de température par rapport à leurs moyennes volumiques intrinsèques¹. On remarque que si \vec{u} est à divergence nulle (et $\vec{u} = \vec{0}$ aux interfaces), alors $\langle \vec{u} \rangle_f$ et $\tilde{\vec{u}}$ le sont aussi. La moyenne $\langle \vec{u}\theta \rangle$ se décompose en

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{u}\theta \rangle &= \langle (\langle \vec{u} \rangle_f + \tilde{\vec{u}})(\langle \theta \rangle_f + \tilde{\theta}) \rangle \\
 &= \langle \langle \vec{u} \rangle_f \langle \theta \rangle_f \rangle + \langle \langle \vec{u} \rangle_f \tilde{\theta} \rangle + \langle \tilde{\vec{u}} \langle \theta \rangle_f \rangle + \langle \tilde{\vec{u}} \tilde{\theta} \rangle \\
 &= \phi \langle \vec{u} \rangle_f \langle \theta \rangle_f + \langle \vec{u} \rangle_f \langle \tilde{\theta} \rangle + \langle \tilde{\vec{u}} \rangle_f \langle \theta \rangle_f + \langle \tilde{\vec{u}} \tilde{\theta} \rangle_f \\
 &= \phi \langle \vec{u} \rangle_f \langle \theta \rangle_f + \langle \tilde{\vec{u}} \tilde{\theta} \rangle_f,
 \end{aligned} \tag{1.76}$$

où l'on a utilisé successivement des approximations du type (Whitaker [121])

$$\langle g\langle h \rangle_f \rangle \simeq \langle g \rangle \langle h \rangle_f \langle 1 \rangle = \phi \langle g \rangle \langle h \rangle_f \tag{1.77}$$

et

$$\langle \tilde{\psi} \rangle \simeq 0. \tag{1.78}$$

Pour l'étape (ii), on commence par transformer la moyenne superficielle $\langle \theta \rangle$ restant au second membre de l'équation (1.74) en moyenne intrinsèque *via* la porosité ϕ ,

$$\langle \theta \rangle = \phi \langle \theta \rangle_f, \tag{1.79}$$

puis on décompose la température dans l'intégrale du second membre :

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \theta \, dS &= \frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \langle \theta \rangle_f \, dS + \frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \tilde{\theta} \, dS \\
 &\simeq \langle \theta \rangle_f \frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \, dS + \frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \tilde{\theta} \, dS,
 \end{aligned} \tag{1.80}$$

où l'on a supposé que l'échelle de variation de $\langle \theta \rangle_f$ est très grande devant la taille du VER, donc que $\langle \theta \rangle_f$ est pratiquement uniforme dans le volume de prise de moyenne. En remplaçant ψ par la fonction unité dans la relation (1.55b), on trouve

$$\frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \, dS = -\vec{\nabla} \phi, \tag{1.81}$$

d'où

$$\frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \theta \, dS \simeq -\langle \theta \rangle_f \vec{\nabla} \phi + \frac{1}{V} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \tilde{\theta} \, dS. \tag{1.82}$$

On rassemble les termes (1.76), (1.79) et (1.82) en considérant la porosité comme constante pour obtenir

$$\rho C_p \langle \vec{u} \rangle_f \cdot \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f = \vec{\nabla} \cdot \left[\lambda \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f + \frac{\lambda}{V_f} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \tilde{\theta} \, dS - \rho C_p \langle \tilde{\vec{u}} \tilde{\theta} \rangle_f \right] + \frac{\mathcal{P}}{\phi}. \tag{1.83}$$

Cette équation n'est toujours pas fermée à cause de la présence de $\tilde{\theta}$. On postule alors la relation de fermeture

1. L'utilisation de la moyenne intrinsèque plutôt que de la moyenne superficielle dans la décomposition de Gray implique que la déviation d'un champ uniforme est nulle, cf. (1.32).

$$\tilde{\theta} = \vec{b} \cdot \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f, \quad (1.84)$$

avec \vec{b} un vecteur variable en espace et dépendant de la géométrie du milieu poreux, de la conductivité thermique λ et de la vitesse \vec{u} . Il s'identifie au $\vec{\kappa}$ de la relation (1.22) dans la méthode d'homogénéisation (Bourgeat *et al.* [23]). On introduit la relation (1.84) dans les deux termes à modéliser de l'équation (1.83), en utilisant le fait que $\vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f$ est uniforme dans le VER, soit

$$\begin{aligned} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \tilde{\theta} \, dS &= \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} (\vec{b} \cdot \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f) \, dS \\ &= \int_{\Sigma_{fs}} (\vec{n} \otimes \vec{b}) \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f \, dS \\ &\simeq \left(\int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \otimes \vec{b} \, dS \right) \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f, \end{aligned} \quad (1.85)$$

où \otimes désigne le produit *dyadique*¹ (ou *tensoriel*), et

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\vec{u}} \tilde{\theta} \rangle_f &= \langle \tilde{\vec{u}} (\vec{b} \cdot \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f) \rangle_f \\ &= \langle (\tilde{\vec{u}} \otimes \vec{b}) \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f \rangle_f \\ &\simeq \langle \tilde{\vec{u}} \otimes \vec{b} \rangle_f \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f. \end{aligned} \quad (1.86)$$

On introduit alors deux nouveaux tenseurs :

- le tenseur de *tortuosité*

$$\bar{\tau} = \frac{1}{V_f} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \otimes \vec{b} \, dS; \quad (1.87)$$

- le tenseur de *dispersion* thermique

$$\bar{D}_{\text{dis}} = -\langle \tilde{\vec{u}} \otimes \vec{b} \rangle_f. \quad (1.88)$$

L'équation macroscopique prend alors la forme

$$\rho C_p \langle \vec{u} \rangle_f \cdot \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f = \vec{\nabla} \cdot \left[\underbrace{\left(\lambda (\bar{I} + \bar{\tau}) + \rho C_p \bar{D}_{\text{dis}} \right)}_{\rho C_p \bar{D}_t} \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f \right] + \frac{\mathcal{P}}{\phi}, \quad (1.89)$$

avec $\bar{\Lambda}_{\text{eff}}$ le tenseur de conductivité thermique effectif et \bar{D}_t le tenseur de conductivité effective totale, somme de la diffusion thermique et de la dispersion thermique. La dispersion provient du terme convectif; l'intensité du phénomène de dispersion par rapport à la conduction est donc d'autant plus faible que le nombre de Péclet de l'écoulement est faible. La dispersion thermique en milieu poreux est un phénomène fréquemment non négligeable, et est donc largement étudiée dans la littérature (on se reportera, entre autres, à

1. Le produit dyadique des vecteurs \vec{n} et \vec{b} est un tenseur d'ordre deux représenté par la matrice de coefficients $(\vec{n} \otimes \vec{b})_{ij} = n_i b_j$.

Kaviany [60] pour une synthèse détaillée). D'autres développements, présentés notamment par Whitaker [121], permettent de montrer que la variable de fermeture \vec{b} est solution de

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho C_p (\tilde{\vec{u}} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \vec{b}) = \lambda \Delta \vec{b} & \text{dans } \Omega_f, \\ -\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \vec{b} = \vec{n} & \text{sur } \Sigma_{fs}, \\ \vec{b} & \Delta_i\text{-périodique dans chaque direction } i. \end{array} \right. \quad (1.90a)$$

$$(1.90b)$$

$$(1.90c)$$

L'établissement de la loi de Darcy par prise de moyenne volumique de l'équation de Stokes fait appel à des développements analogues (voir par exemple Whitaker [121]). Les relations de fermeture liant les déviations de vitesse et de pression au champ de vitesse moyen sont

$$\tilde{\vec{u}} = \overline{\overline{B}} \langle \vec{u} \rangle_f, \quad (1.91a)$$

$$\tilde{p} = \mu \vec{b} \cdot \langle \vec{u} \rangle_f, \quad (1.91b)$$

où le tenseur $\overline{\overline{B}}$ et le vecteur \vec{b} satisfont¹

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\vec{\nabla} \vec{b} + \Delta \overline{\overline{B}} + \phi \overline{\overline{K}}^{-1} = 0 & \text{dans } \Omega_f, \\ \vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{B}} = 0 & \text{dans } \Omega_f, \\ \overline{\overline{B}} + \vec{I} = 0 & \text{sur } \Sigma_{fs}, \\ \overline{\overline{B}} \text{ et } \vec{b} & \Delta_i\text{-périodiques dans chaque direction } i, \\ \langle \overline{\overline{B}} \rangle_f = 0. & \end{array} \right. \quad (1.92a)$$

$$(1.92b)$$

$$(1.92c)$$

$$(1.92d)$$

$$(1.92e)$$

Le tenseur de perméabilité $\overline{\overline{K}}$ est défini à l'aide de $\overline{\overline{B}}$ et \vec{b} :

$$\phi \overline{\overline{K}}^{-1} = \frac{1}{V_f} \int_{\Sigma_{fs}} \vec{n} \otimes (\vec{b} - \vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{B}}) dS. \quad (1.93)$$

Barrère *et al.* [15] simplifient le problème de fermeture en introduisant le tenseur $\overline{\overline{D}}$ et le vecteur \vec{d} tels que

$$\tilde{\vec{u}} = \frac{1}{\mu} \overline{\overline{D}} \vec{\nabla} \langle p \rangle_f, \quad (1.94a)$$

$$\tilde{p} = \vec{d} \cdot \vec{\nabla} \langle p \rangle_f, \quad (1.94b)$$

puis en montrant que $\overline{\overline{D}}$ et \vec{d} sont solutions de

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\vec{\nabla} \vec{d} + \Delta \overline{\overline{D}} = \vec{I} & \text{dans } \Omega_f, \\ \vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{D}} = 0 & \text{dans } \Omega_f, \\ \overline{\overline{D}} = 0 & \text{sur } \Sigma_{fs}, \\ \overline{\overline{D}} \text{ et } \vec{d} & \Delta_i\text{-périodiques dans chaque direction } i, \end{array} \right. \quad (1.95a)$$

$$(1.95b)$$

$$(1.95c)$$

$$(1.95d)$$

et que le tenseur de perméabilité est relié à $\overline{\overline{D}}$ par

$$\overline{\overline{K}} = \phi \langle \overline{\overline{D}} \rangle_f. \quad (1.96)$$

1. La divergence $\vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{B}}$ du tenseur $\overline{\overline{B}}$ est représentée par le vecteur de composantes $(\vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{B}})_i = \frac{\partial B_{ij}}{\partial x_j}$ (sommutation sur j). Le laplacien $\Delta \overline{\overline{B}} = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{B}})$ du tenseur $\overline{\overline{B}}$ est représenté par la matrice de coefficient $(\Delta \overline{\overline{B}})_{ij} = \frac{\partial^2 B_{ik}}{\partial x_j \partial x_k}$ (sommutation sur k).

Dans cette section 1.2.2, nous avons détaillé quelques aspects formels des problèmes de fermeture apparaissant suite à la prise de moyenne volumique des équations locales. Dans la section 1.2.3 suivante, nous proposons un calcul numérique de variables de fermeture (perméabilité et de conductivité effective) pour un milieu poreux modèle. L'objectif est, premièrement, de comparer les valeurs obtenues avec des résultats de la littérature, et deuxièmement d'illustrer la façon d'appréhender pratiquement ce type de calcul pour un milieu périodique quelconque.

1.2.3 Calcul numérique de la perméabilité et de la conductivité effective

Avec l'évolution des moyens de calcul, l'estimation de la perméabilité et de la conductivité effective par des approches numériques s'est vue abondamment abordée dans la littérature. On peut, de façon non exhaustive, citer les travaux de Amaral Souto et Moyne [6], Hellou *et al.* [57] et Tamayol et Bahrami [108] pour la perméabilité, et de Ryan *et al.* [101], Sáez et Perfetti [102], Quintard [92] et Trinh *et al.* [113] pour la conductivité effective. Les études numériques des coefficients de conductivité effective incluent souvent le phénomène de dispersion – par exemple dans Amaral Souto et Moyne [7], Quintard *et al.* [93], Hsiao et Advani [59], Kuwahara et Nakayama [66] ou encore Ait Saada *et al.* [3] –, ce que nous ne ferons pas ici.

Considérons un milieu poreux périodique en deux dimensions constitué d'une matrice de grains carrés de côté d , disposés selon un pas carré, tel que représenté sur la FIG. 1.12, et déterminons les valeurs de conductivité thermique effective et de perméabilité pour ce milieu. Ce milieu est invariant par rotation d'angle $\pi/2$, donc les tenseurs de conductivité effective et de perméabilité se réduisent à

$$\overline{\Lambda}_{\text{eff}} = \Lambda_{\text{eff}} \overline{\mathbf{I}}, \quad (1.97a)$$

$$\overline{\mathbf{K}} = K \overline{\mathbf{I}}. \quad (1.97b)$$

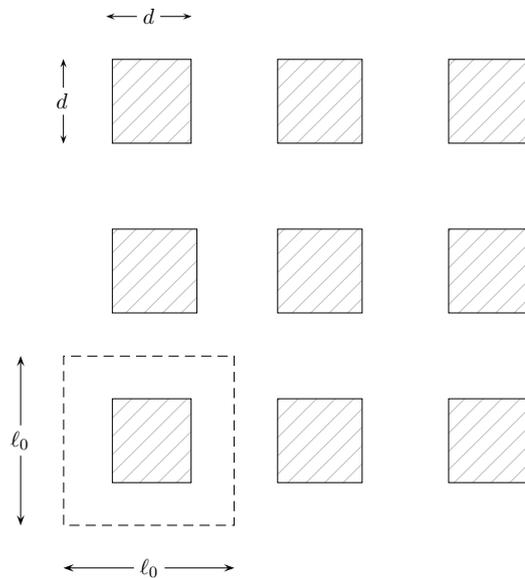


FIG. 1.12 – Milieu poreux et cellule unitaire considérés pour le calcul numérique de la conductivité thermique effective et de la perméabilité.

La conductivité effective est calculée dans une situation de conduction thermique sans convection – pour annuler la dispersion thermique –, tandis que la perméabilité est calculée pour un écoulement de Stokes. Elles sont définies analytiquement par les relations (1.87), (1.89) et (1.93), qui font intervenir les coefficients de fermeture $\overline{\mathbf{B}}$ et \vec{b} eux-mêmes

1.2 Méthode de la prise de moyenne volumique

solutions des problèmes (1.90a) – (1.90c) et (1.92a) – (1.92e). Calculer numériquement la conductivité thermique et la perméabilité par le biais de ces relations n’est pas immédiat en terme d’implémentation et de post-traitement. D’autres méthodes de calcul sont alors envisageables. Pour la conductivité effective d’abord, en repartant des équations (1.62) et (1.89), on peut écrire que

$$\Lambda_{\text{eff}} \underbrace{\overrightarrow{\nabla}\langle\theta\rangle_f}_{\text{post-traité}} = \lambda \underbrace{\overrightarrow{\nabla}\langle\theta\rangle_f}_{\text{post-traité}} + \underbrace{\frac{\lambda}{V_f} \int_{\Sigma_{\text{fs}}} \vec{n}\tilde{\theta} dS}_{\text{post-traité}}. \quad (1.98)$$

Le champ microscopique θ est accessible en résolvant numériquement dans une cellule l’équation de la chaleur

$$\overrightarrow{\nabla} \cdot (\lambda \overrightarrow{\nabla}\theta) = 0, \quad (1.99)$$

après quoi le champ macroscopique $\langle\theta\rangle_f$, la déviation $\tilde{\theta}$ ainsi que l’intégrale surfacique sont déterminés en post-traitement¹; enfin la valeur de $\overline{\Lambda}_{\text{eff}}$ est déduite. L’avantage de cette méthode est qu’elle ne nécessite pas le calcul de la variable de fermeture \tilde{b} . Son inconvénient est de devoir implémenter le calcul de l’intégrale surfacique. On peut éviter cela en revenant à

$$\frac{1}{V_f} \int_{\Sigma_{\text{fs}}} \vec{n}\tilde{\theta} dS = \langle\overrightarrow{\nabla}\theta\rangle_f - \overrightarrow{\nabla}\langle\theta\rangle_f, \quad (1.100)$$

ce qui réduit l’équation (1.98) à

$$\Lambda_{\text{eff}} \overrightarrow{\nabla}\langle\theta\rangle_f = \lambda \langle\overrightarrow{\nabla}\theta\rangle_f. \quad (1.101)$$

Il suffit donc d’imposer le gradient de température moyen $\langle\overrightarrow{\nabla}\theta\rangle_f$ dans une direction donnée et d’évaluer le comportement résultant du milieu équivalent, c’est-à-dire $\overrightarrow{\nabla}\langle\theta\rangle_f$. L’isotropie du milieu assure que ces deux vecteurs sont colinéaires. Comme une résolution analytique n’est guère envisageable, on adopte une démarche numérique qui consiste à effectuer une simulation numérique fine où l’on résout (1.99) en imposant une condition de flux $+q > 0$ sur la frontière du bas, une condition de flux $-q$ sur la frontière du haut, et pour simplifier une condition d’adiabaticité de l’interface (FIG. 1.13). Dans la configuration particulière étudiée, on peut exploiter la symétrie de la cellule unitaire pour ne simuler qu’une demi-cellule. À défaut, on utiliserait des conditions de périodicité de la température sur les frontières de gauche et de droite, autrement dit on imposerait que les valeurs de θ soient identiques sur ces deux frontières.

Il résulte de (1.101) que la conductivité thermique effective adimensionnée à l’aide de la conductivité thermique moléculaire est

$$\Lambda_{\text{eff}}^* \triangleq \frac{\Lambda_{\text{eff}}}{\lambda} = \frac{\langle\overrightarrow{\nabla}\theta\rangle \cdot \vec{e}_y}{\overrightarrow{\nabla}\langle\theta\rangle \cdot \vec{e}_y}, \quad (1.102)$$

où \vec{e}_y est le vecteur normal unitaire de la direction y . Le flux moyen traversant le milieu dans la direction y vaut

$$q = -\lambda \langle\overrightarrow{\nabla}\theta\rangle \cdot \vec{e}_y = -\lambda \left\langle \frac{\partial\theta}{\partial y} \right\rangle. \quad (1.103)$$

1. En réalité, il n’est pas nécessaire de calculer la déviation puisque d’après (1.75b) et (1.81), à porosité constante, on a $\frac{1}{V_f} \int_{\Sigma_{\text{fs}}} \vec{n}\tilde{\theta} dS \simeq \frac{1}{V_f} \int_{\Sigma_{\text{fs}}} \vec{n}\theta dS + \phi \overrightarrow{\nabla}\phi \cdot \overrightarrow{\nabla}\langle\theta\rangle_f$.

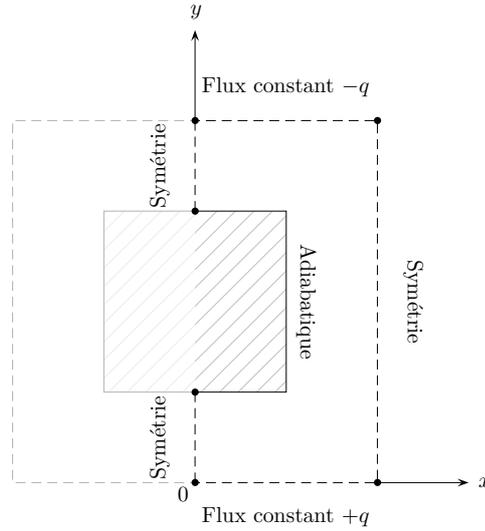


FIG. 1.13 – Domaine de calcul et conditions aux limites considérés pour la détermination de la conductivité effective. On impose un flux thermique moyen q dans la direction y .

Afin que le champ macroscopique $\langle \theta \rangle_f$, évalué par filtrage « direct » du champ fin θ , ainsi que son gradient aient un sens, il faut en principe que le domaine de calcul contienne plusieurs cellules unitaires. Cependant, l'accroissement de température moyenne dans la direction y peut aussi être calculé comme

$$\vec{\nabla} \langle \theta \rangle \cdot \vec{e}_y = \frac{\partial \langle \theta \rangle}{\partial y} = \frac{\bar{\theta}_{\text{haut}} - \bar{\theta}_{\text{bas}}}{\ell_0}, \quad (1.104)$$

où

$$\begin{cases} \bar{\theta}_{\text{haut}} &= \frac{2}{\ell_0} \int_0^{\ell_0/2} \theta(x, \ell_0) dx, \\ \bar{\theta}_{\text{bas}} &= \frac{2}{\ell_0} \int_0^{\ell_0/2} \theta(x, 0) dx. \end{cases} \quad (1.105)$$

Si le calcul est réalisé à température initiale nulle, alors en régime permanent

$$\bar{\theta}_{\text{haut}} = -\bar{\theta}_{\text{bas}} \quad (1.106)$$

et

$$\Lambda_{\text{eff}}^* = \frac{q \ell_0}{2 \lambda \bar{\theta}_{\text{bas}}}. \quad (1.107)$$

À porosité fixée, la conductivité effective Λ_{eff} est une fonction linéaire de la conductivité du fluide λ . Elle dépend également de la géométrie du milieu par l'intermédiaire de la porosité ϕ , mais aussi de la forme et de l'arrangement des grains solides. Une série de simulations numériques à porosité variable montre que plus la porosité est importante et plus Λ_{eff} se rapproche de λ . En effet, si la porosité est élevée, alors le milieu tend vers un milieu libre de porosité λ . À l'inverse, lorsque la porosité diminue, le milieu devient presque entièrement occupé par des grains de surface adiabatique, et n'est plus capable de bien transférer la chaleur : sa conductivité effective devient proche de zéro (FIG. 1.14). Les résultats des simulations numériques montrent une bonne cohérence avec ceux de Trinh *et al.* [113] obtenus par une méthode de Monte-Carlo.

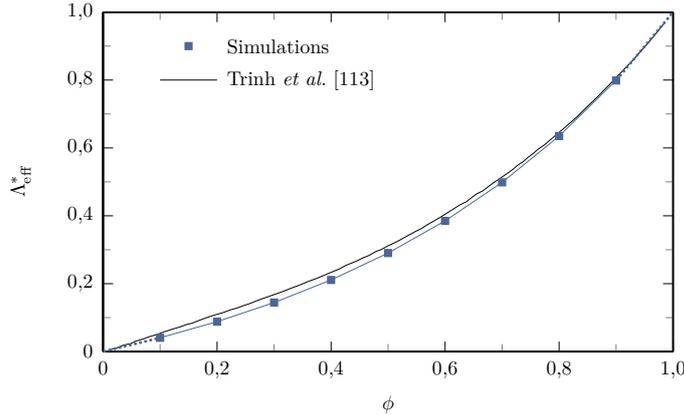


FIG. 1.14 – Évolution de la conductivité effective adimensionnée Λ_{eff}^* en fonction de la porosité $\phi = 1 - d^2/\ell_0^2$. Le comportement de la courbe des simulations est extrapolé pour $\phi < 0,1$ et pour $\phi > 0,9$.

La perméabilité peut être calculée à partir de la loi de Darcy (1.1), que l'on réécrit en introduisant les moyennes volumiques :

$$\langle \vec{u} \rangle = -\frac{K}{\mu} \vec{\nabla} \langle p \rangle_f. \quad (1.108)$$

Connaissant le gradient de pression moyenne $\vec{\nabla} \langle p \rangle_f$ ainsi que le champ de vitesse microscopique \vec{u} , solution de l'équation de Stokes, on peut en déduire par post-traitement le champ moyen $\langle \vec{u} \rangle$ puis la valeur de la perméabilité K . De façon similaire à la conductivité effective, on effectue la simulation numérique d'un écoulement de Stokes dans une demi-cellule où sont imposés des conditions de symétrie et de périodicité ainsi qu'un terme moteur de l'écoulement dans la direction y , noté \vec{G} (Fig. 1.15). Cette force volumique s'identifie au gradient de pression de la loi de Darcy, de telle sorte que l'équation résolue est

$$\vec{0} = -\vec{\nabla} \tilde{p} + \mu \Delta \vec{u} - \underbrace{\vec{\nabla} \langle p \rangle_f}_{\vec{G}}, \quad (1.109)$$

où \tilde{p} est la déviation spatiale résultant de la décomposition de Gray du champ de pression microscopique p ,

$$p = \langle p \rangle_f + \tilde{p}. \quad (1.110)$$

La raison de cette décomposition est qu'il n'est pas pertinent d'imposer une véritable différence de pression entre les parois du haut et du bas par l'intermédiaire de conditions aux limites sur ces deux frontières – donc sous la forme d'une vraie « entrée » et d'une vraie « sortie », le fluide rentrant dans la cellule avec une pression p_{bas} et en ressortant par le haut avec une pression $p_{\text{haut}} < p_{\text{bas}}$. En effet, si l'on procédait ainsi, l'écoulement ne pourrait pas être spatialement établi et le calcul de la perméabilité n'aurait pas de sens. Dans la résolution numérique, on préfère donc périodiser le champ de pression \tilde{p} et imposer le gradient de $\langle p \rangle_f$, qui va être responsable de la mise en mouvement du fluide. Le gradient de déviation de pression, quant à lui, n'est pas moteur de l'écoulement ; néanmoins il est nécessairement non nul dans la cellule afin que l'équation de conservation de la masse, $\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0$, soit respectée.

D'autre part, imaginons que la demi-cellule calculée soit dupliquée à l'infini, alors le champ de vitesse moyen $\langle \vec{u} \rangle$ est uniforme. Mais comme le domaine de calcul est plus petit que le VER, $\langle \vec{u} \rangle$ ne peut pas être calculé par filtrage du champ résolu \vec{u} , qui ne fournirait

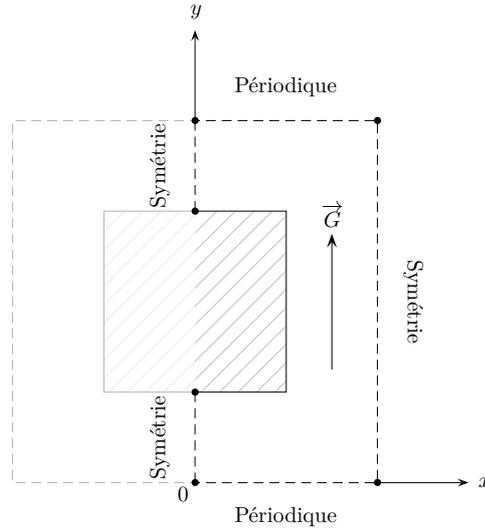


FIG. 1.15 – Domaine de calcul et conditions aux limites considérés pour la détermination de la perméabilité. On impose une force motrice volumique uniforme $G\vec{e}_y$ dans la direction de périodicité.

pas un champ uniforme dans la demi-cellule. Dans le cas d'un milieu infini, $\langle \vec{u} \rangle$ évalué au centre d'une cellule est égal à une constante U_p ,

$$U_p = \frac{1}{\ell_0^2} \int_{\text{cellule}} \vec{u} \, dV, \quad (1.111)$$

où la moyenne est ici « fixe », et non pas « glissante » comme dans (1.9). Par symétrie, on aura aussi

$$U_p = \frac{2}{\ell_0^2} \int_{\text{demi-cellule}} \vec{u} \, dV. \quad (1.112)$$

La loi de Darcy en projection selon la direction y de l'écoulement moyen donne alors la perméabilité :

$$K = \frac{\mu U_p}{G}. \quad (1.113)$$

Dans les simulations numériques, on fixe la valeur de la force motrice G de telle façon que le nombre de Reynolds de l'écoulement soit compatible avec l'hypothèse d'un régime de Darcy. On définit le nombre de Reynolds à l'échelle du pore par

$$\text{Re}_p = \frac{\rho U_p d}{\mu}. \quad (1.114)$$

Cet ajustement de G nécessite un calcul préalable, dans lequel on fixe « arbitrairement » la valeur de G et on détermine la valeur de Re_p correspondante. Si celle-ci est hors régime de Darcy, alors on recommence avec une valeur de G plus faible jusqu'à obtenir une valeur de Re_p adéquate.

Des relations empiriques ou semi-empiriques reliant la perméabilité et la porosité existent. En l'adaptant à nos notations, la loi expérimentale proposée par Ergun [46] puis améliorée par Macdonald *et al.* [74], qui est citée ou utilisée dans de nombreuses publications (dont Amaral Souto et Moyne [6], Prieur du Plessis et Woudberg [91], Elmo et Cioni [45]), s'écrit

$$K^* \triangleq \frac{K}{d^2} = \left[\frac{180(1-\phi)^2}{\phi^3} + \frac{1,8(1-\phi)}{\phi^3} \text{Re}_p \right]^{-1}. \quad (1.115)$$

Dans les simulations numériques, Re_p est au maximum de l'ordre de 10^{-7} , donc

$$K^* \simeq \frac{\phi^3}{180(1-\phi)^2}. \quad (1.116)$$

Cette relation d'Ergun modifiée est connue sous le nom d'*équation de Kozeny-Carman*. Les résultats des simulations numériques obtenus pour différentes porosités sont comparés à cette loi sur la FIG. 1.16. Ils sont en bon accord avec la loi de Kozeny-Carman, les variations en fonction de la porosité étant retrouvées. Les valeurs diffèrent légèrement parce que la loi de Kozeny-Carman a été établie pour une topologie de grains qui n'a pas la forme idéalisée d'un carré¹ (« smooth particles »), et dans une certaine gamme de porosités. À haute porosité cependant, la forme des grains influence peu l'écoulement, c'est pourquoi l'écart entre simulations numériques et loi expérimentale se réduit. Différentes déclinaisons de la loi de Kozeny-Carman sont données par Kaviany [60]. Enfin, on remarque que la perméabilité diminue quand la porosité diminue : les zones solides, qui occupent alors de plus en plus de place, empêchent le passage du fluide. Lorsque la porosité tend vers zéro, la perméabilité tend également vers zéro.

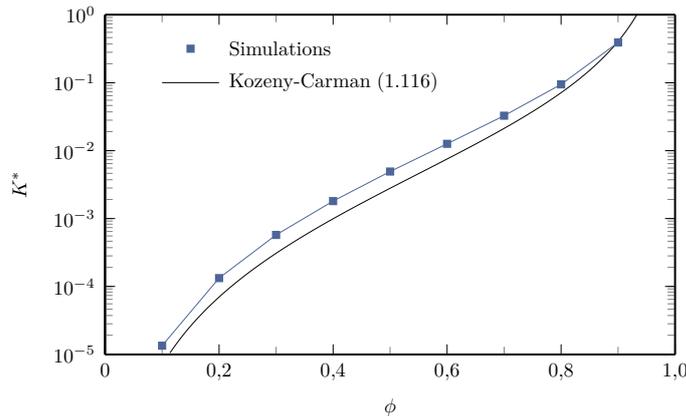
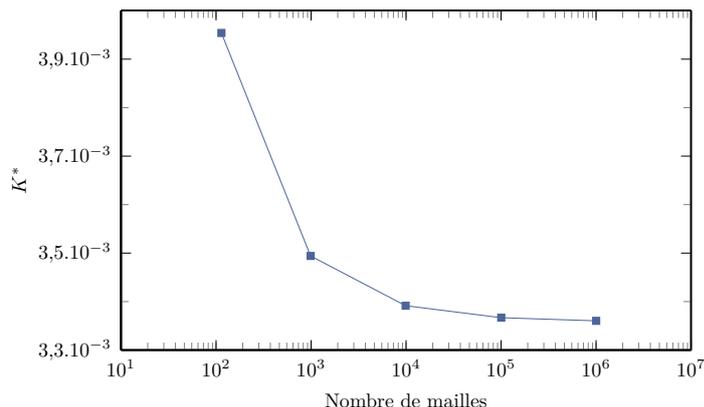


FIG. 1.16 – Perméabilité en fonction de la porosité.

Les simulations numériques à porosité variable ont été réalisées avec un maillage d'environ 1000 mailles. Évidemment, la valeur de K^* est sensible à la finesse du maillage adopté. Celui-ci doit être suffisamment fin afin de pouvoir parler de *convergence en maillage*. La FIG. 1.17 indique l'évolution de la valeur de K^* calculée en fonction du nombre de mailles dans la demi-cellule. On précise que la vitesse de convergence en maillage pour la conductivité thermique effective était sensiblement la même que pour la perméabilité.

Nous avons à ce stade exposé la méthode de changement d'échelle par prise de moyenne volumique, en précisant notamment les problèmes de fermeture ainsi que le calcul pratique des coefficients effectifs apparaissant dans les équations de l'échelle macroscopique. Néanmoins, nous n'avons pas mentionné le choix des conditions aux limites macroscopiques. Or cette question revêt une certaine importance dans l'optique de la simulation numérique multiéchelle, plus spécifiquement appliquée à des assemblages de RNR-Na : en effet, les phénomènes hydrodynamiques et thermiques sont particulièrement marqués dans les régions pariétales de ces structures, et leur bonne représentation à l'échelle macroscopique

1. Nous aurions également pu effectuer un calcul pour des sphères et comparer les résultats à ceux de Zick et Homsy [124].


 FIG. 1.17 – Convergence en maillage de la perméabilité, pour $\phi = 0,5$.

est indispensable. On propose ainsi, dans la dernière section de ce chapitre, une tentative de modélisation macroscopique pariétale d'un milieu poreux modèle, limitée à l'hydrodynamique.

1.3 Conditions aux limites macroscopiques

1.3.1 Motivation

En pratique, tout milieu poreux « réel » est borné, ce qui veut dire qu'il existe une frontière le séparant de son environnement extérieur (FIG. 1.18). Connaissant les équations du transfert thermique convectif à l'échelle macroscopique dans un milieu poreux, leur simulation numérique est alors possible à condition de spécifier des conditions aux limites sur cette frontière. Cette problématique est relativement peu abordée dans la littérature, excepté par Prat [89], [90]. Généralement, les simulations de milieux poreux à l'échelle macroscopique supposent l'équivalence des conditions aux limites aux échelles microscopique et macroscopique. Par exemple une paroi adhérente et imperméable à l'échelle microscopique le reste à l'échelle macroscopique, ce qui conduit à imposer sur cette paroi $\vec{u} = \vec{0}$ et $\langle \vec{u} \rangle = \vec{0}$. Cette approche semble physiquement cohérente, mais elle se heurte à une absence de justification théorique car la paroi est de nature différente selon l'échelle à laquelle elle est vue. À l'échelle microscopique, il s'agit d'une interface infiniment fine séparant deux milieux. À l'échelle macroscopique, la notion de VER implique qu'elle s'apparente davantage à une région dans laquelle les coefficients effectifs ainsi que les champs macroscopiques sont susceptibles de subir des gradients importants. Cette distinction incite à traiter différemment les conditions aux limites aux deux échelles, et il peut sembler judicieux d'imposer des conditions en cohérence avec une méthode de changement d'échelle. Dans le contexte de la prise de moyenne volumique, l'épaisseur de la région limite correspond à la taille du VER. En effet, pour un point \vec{x}_0 dans cette région, le VER centré sur \vec{x}_0 « déborde » du milieu et contient une partie dans le milieu extérieur. Pour que la prise de moyenne volumique ait un sens à l'approche de la paroi, on doit donc théoriquement spécifier la nature du milieu extérieur. Pour ne pas avoir à faire une telle spécification, on peut cependant supposer que le champ microscopique considéré dans le milieu poreux n'a pas d'existence en dehors de celui-ci. On donnera alors un sens à la moyenne volumique en imaginant un filtre dont la taille diminue à l'approche de la paroi, ce qui explique que les propriétés effectives ne peuvent pas demeurer uniformes dans la région limite (FIG. 1.4). En réalité, tout se passe comme si l'on avait conservé une taille de filtre constante et pris une valeur nulle pour la variable filtrée dans l'environnement extérieur. Par ailleurs, le champ sur la frontière ne se raccorde généralement pas à la valeur zéro imposée à l'extérieur puisqu'il

dépend du champ microscopique dans le milieu jusqu'à une certaine distance de la paroi :

$$\langle \psi \rangle(\vec{x}_{\text{paroi}}) = \int_{\Omega} m(\vec{x}_{\text{paroi}} - \vec{x}) \chi(\vec{x}) \psi(\vec{x}) dV. \quad (1.117)$$

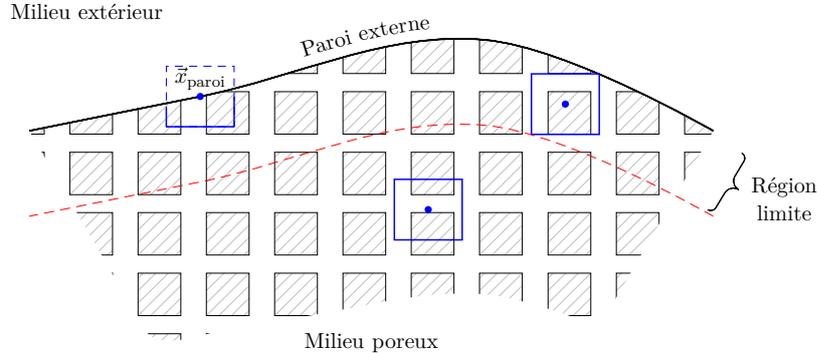


FIG. 1.18 – Paroi externe d'un milieu poreux.

Cette brève analyse qualitative montre que le problème des conditions aux limites macroscopiques dépend de la configuration physique étudiée, et surtout qu'il dépend finalement de *ce que l'on veut faire*, c'est-à-dire si l'on s'intéresse à la région limite ou seulement à l'écoulement dans le cœur du milieu. Or, nous verrons que la méthode de reconstruction des échelles microscopiques développée au chapitre 3 s'appuie implicitement sur les débits de masse et d'énergie à l'échelle macroscopique. Ces débits sont d'autant plus influencés par les conditions aux limites macroscopiques que la séparation d'échelles est mauvaise. Il est donc intéressant d'imposer des conditions telles que les débits de masse et d'énergie soient identiques aux deux échelles. Afin de montrer la possibilité d'estimer de telles conditions, nous considérons un cas très simple qui permet une étude semi-analytique : l'écoulement dans un canal plan obstrué par des alignements d'objets solides de forme carrée.

1.3.2 Calculs analytiques

Soit un canal plan bidimensionnel délimité par les parois $y \pm D$ et traversé par un fluide. La matrice solide est constituée de carrés de côté d et disposés périodiquement, espacés d'une distance ℓ_0 (FIG. 1.19). Cette configuration de canal poreux a fait l'objet de nombreuses études (Nakayama *et al.* [82], Nield *et al.* [85], Haji-Sheikh et Vafai [54], Haji-Sheikh *et al.* [53], Minkowycz et Haji-Sheikh [80], Liu *et al.* [71], Dukhan et Ratowski [43]), souvent dans un contexte de convection forcée afin d'estimer l'effet de la matrice poreuse sur les transferts thermiques pariétaux ; cependant, on ne s'intéresse ici qu'à l'hydrodynamique.

On suppose que le régime est hydrauliquement établi et que la vitesse superficielle de l'écoulement, notée U , en régime permanent est gouvernée par l'équation de Darcy-Brinkman (1.2), où l'on impose un gradient de pression uniforme G :

$$\mu_{\text{eff}} \frac{d^2 U}{dy^2} + G = \frac{\mu}{K} U. \quad (1.118)$$

La détermination de la viscosité effective μ_{eff} est discutée notamment par Kolodziej [65], Martys *et al.* [76] et Breugem [26]. L'équation de Darcy-Brinkman permet de traduire les frottements à la paroi par le rôle du terme de diffusion visqueuse, contrairement à la loi de Darcy pour laquelle le champ de vitesse est uniforme (y compris à la paroi) sous un gradient de pression uniforme. Le terme de diffusion visqueuse est semblable à celui de

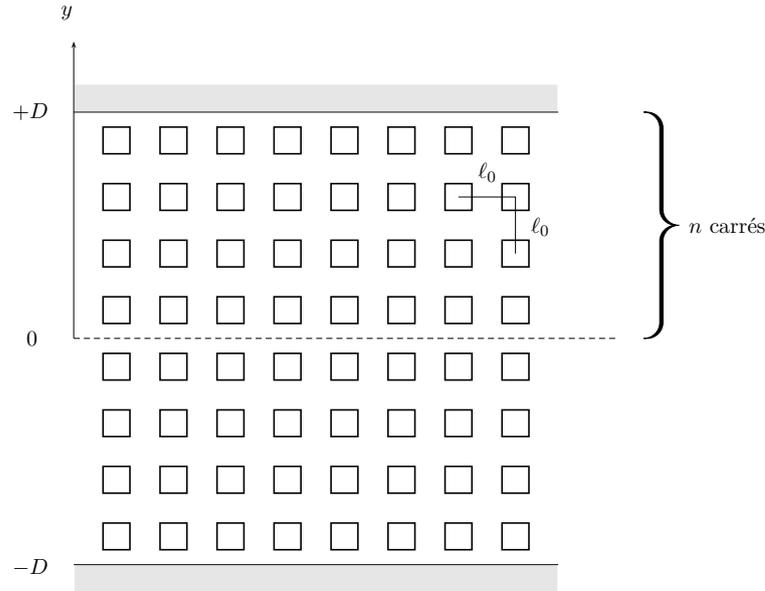


FIG. 1.19 – Canal plan poreux rempli d'une matrice de grains carrés.

l'équation de Stokes mais le coefficient de viscosité est différent car le frottement est vu à l'échelle macroscopique. On considère que la perméabilité est uniforme, même dans la région limite. On cherche alors à compenser la mauvaise représentation du frottement dans cette zone induite par l'hypothèse de perméabilité uniforme en imposant des conditions aux parois adéquates. On associe à l'équation (1.118) la condition

$$U_{\text{paroi}} = U(y = \pm D). \quad (1.119)$$

Le problème adimensionné s'écrit

$$\begin{cases} \mu^* \frac{d^2 U^*}{dY^2} + \frac{1}{\text{Da}} = \frac{U^*}{\text{Da}}, \\ U^*(Y \pm 1/2) = U_{\text{paroi}}, \end{cases} \quad (1.120)$$

avec les variables

$$\mu^* = \frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu}, \quad Y = \frac{y}{2D}, \quad U^* = \frac{U}{U_p} = \frac{\mu U}{GK}, \quad \text{Da} = \frac{K}{(2D)^2}, \quad (1.121)$$

où l'on rappelle que U_p est définie par les relations (1.111) et (1.113) : il s'agit de la vitesse (uniforme) atteinte par le fluide loin des parois. La solution de (1.120) a pour expression

$$U^*(Y) = 1 + (U_{\text{paroi}}^* - 1) \frac{\text{ch}\left(\frac{Y}{\sqrt{\mu^* \text{Da}}}\right)}{\text{ch}\left(\frac{1}{2\sqrt{\mu^* \text{Da}}}\right)}. \quad (1.122)$$

L'épaisseur de la couche limite pariétale est d'autant plus faible que le nombre de Darcy Da est faible. Dans le cas contraire¹, tout le milieu est dominé par le frottement pariétal et le champ de vitesse n'atteint pas la valeur U_p au centre du canal (FIG. 1.20).

Si $U_{\text{paroi}}^* = 1$, on retrouve un écoulement de Darcy sans frottement à la paroi, avec un fluide qui se déplace « en bloc » à la vitesse U_p dans le canal (écoulement « piston »). Le débit correspondant est alors

1. C'est-à-dire en particulier si n est grand, à porosité fixée.

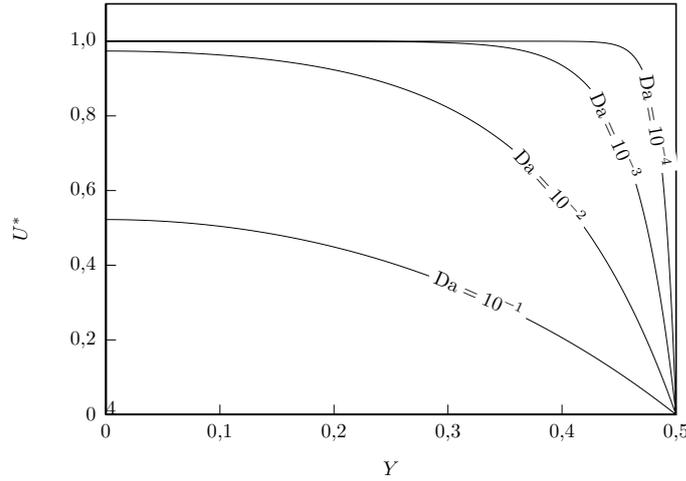


FIG. 1.20 – Profils de vitesse dans le demi-canal à différents nombres de Darcy, pour $\mu^* = 4/3$ et $U_{\text{paroi}}^* = 0$.

$$Q_{\text{Darcy}} = 2DU_p. \quad (1.123)$$

Avec une condition $U_{\text{paroi}}^* \neq 1$, le débit macroscopique dans le canal, adimensionné avec Q_{Darcy} , devient

$$Q_{\text{macro}}^* \hat{=} \frac{Q_{\text{macro}}}{Q_{\text{Darcy}}} = \int_{-1/2}^{1/2} U^*(Y) dY, \quad (1.124)$$

soit

$$Q_{\text{macro}}^* = 1 + \underbrace{2\sqrt{\mu^* \text{Da}} (U_{\text{paroi}}^* - 1) \text{th}\left(\frac{1}{2\sqrt{\mu^* \text{Da}}}\right)}_{-\delta Q_{\text{macro}}^*}. \quad (1.125)$$

Une condition $U_{\text{paroi}}^* \neq 1$ est responsable d'un écart de débit $\delta Q_{\text{macro}}^*$ par rapport au débit de Darcy dont on a obtenu l'expression. On souhaite imposer une vitesse à la paroi telle que le débit à l'échelle macroscopique et le débit à l'échelle microscopique,

$$Q_{\text{micro}}^* = \frac{1}{Q_{\text{Darcy}}} \int_{-D}^D u(y) dy, \quad (1.126)$$

soient identiques. Cette condition associée à la relation (1.125) donne alors immédiatement la condition de Dirichlet

$$U_{\text{paroi}}^* = 1 + \frac{Q_{\text{micro}}^* - 1}{2\sqrt{\mu^* \text{Da}} \text{th}\left(\frac{1}{2\sqrt{\mu^* \text{Da}}}\right)}. \quad (1.127)$$

Naturellement, cette expression dépend du débit Q_{micro}^* . Il semble donc préférable de la transformer en introduisant un paramètre intrinsèque au milieu poreux, de telle sorte qu'elle ne dépende plus explicitement du débit. Pour cela, on introduit une longueur δ telle que

$$\delta Q_{\text{macro}} = 2\delta U_p, \quad (1.128)$$

ou encore, dans la version adimensionnelle,

$$\delta Q_{\text{macro}}^* = \frac{\delta}{D} = \delta^*. \quad (1.129)$$

La longueur δ s'interprète comme la distance dont il faudrait rapprocher ou reculer les parois afin que le débit dans ce nouveau canal soit égal à Q_{Darcy} si l'on ne prend pas en compte le frottement visqueux aux parois (FIG. 1.21). La relation $Q_{\text{macro}}^* = 1 - \delta^* > 0$ montre que $\delta^* < 1$; en revanche δ^* peut être positif si $U_{\text{paroi}}^* < 1$ (rapprochement des parois), ou éventuellement négatif si $U_{\text{paroi}}^* > 1$ (éloignement des parois).

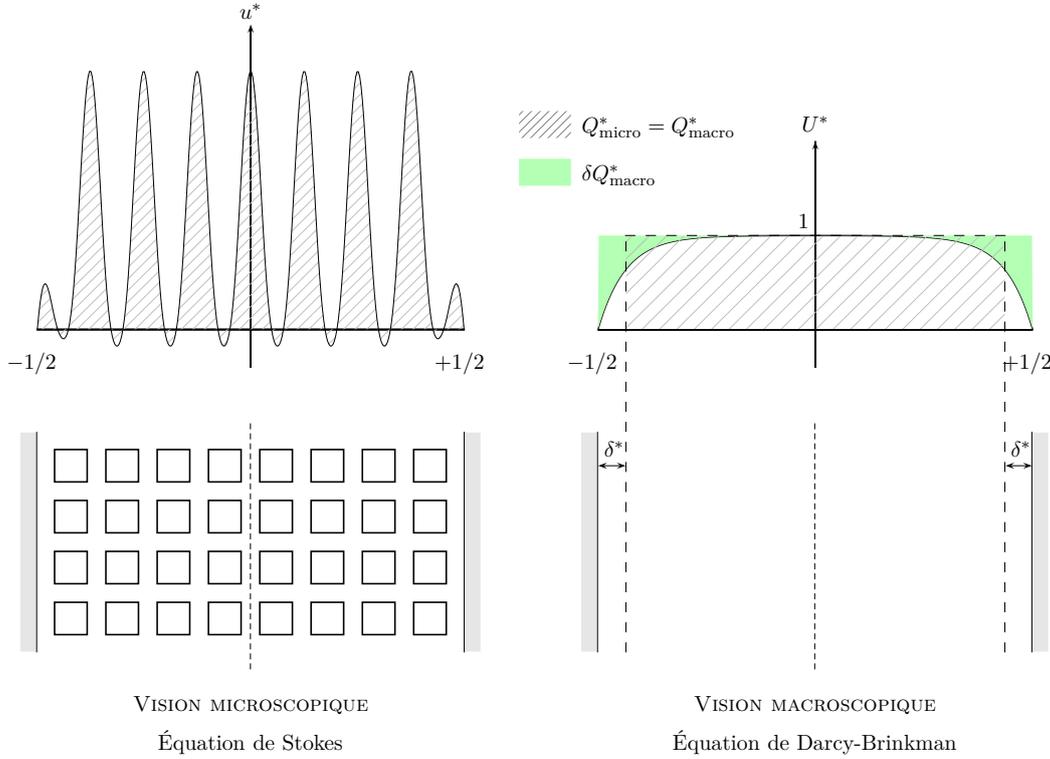


FIG. 1.21 – Interprétation graphique de la longueur δ^* . Elle est telle que l'aire hachurée est égale à l'aire sous la courbe U^* , la variation $\delta Q_{\text{macro}}^*$ étant égale à l'aire de la surface verte.

Avec (1.127), on obtient

$$U_{\text{paroi}}^* = 1 - \frac{\delta^*}{2\sqrt{\mu^* \text{Da}} \operatorname{th}\left(\frac{1}{2\sqrt{\mu^* \text{Da}}}\right)}. \quad (1.130)$$

On recherche finalement une condition de *Robin* liant le frottement pariétal à la vitesse pariétale sous la forme

$$\left. \frac{dU^*}{dY} \right|_{\text{paroi}} = \alpha^* U_{\text{paroi}}^*. \quad (1.131)$$

En dérivant (1.122) et en utilisant (1.130), on établit l'expression du coefficient de Robin

$$\alpha^* = \frac{1}{\sqrt{\mu^* \text{Da}}} \frac{\delta^* \operatorname{th}\left(\frac{1}{2\sqrt{\mu^* \text{Da}}}\right)}{\delta^* - 2\sqrt{\mu^* \text{Da}} \operatorname{th}\left(\frac{1}{2\sqrt{\mu^* \text{Da}}}\right)}. \quad (1.132)$$

Analysons l'ordre de grandeur du groupement $\sqrt{\mu^* \text{Da}}$: le nombre de Darcy Da est généralement très inférieur à l'unité, tandis que μ^* est de l'ordre de grandeur de l'unité¹. On aura donc

1. D'après [76] et [26], $\mu^* \simeq 1$ à 10.

$$\sqrt{\mu^* \text{Da}} \ll 1, \quad (1.133)$$

et

$$\alpha^* \simeq \frac{1}{\sqrt{\mu^* \text{Da}}} \frac{\delta^*}{\delta^* - 2\sqrt{\mu^* \text{Da}}}. \quad (1.134)$$

De plus, on peut faire les constats suivants :

- À porosité fixée, quelle que soit la vitesse à la paroi,

$$Q_{\text{macro}}^* \xrightarrow{\text{Da} \rightarrow 0} 1. \quad (1.135)$$

Ce comportement asymptotique confirme que plus le nombre n de carrés solides dans la largeur du canal est élevé – donc, plus le facteur de séparation d'échelles est faible – et plus les frottements à la paroi ont une influence négligeable sur le débit. La condition de Robin est alors proche d'une condition de symétrie, et l'équation de Darcy-Brinkman proche de l'équation de Darcy sans terme correctif de viscosité.

- Le coefficient de Robin peut être positif ou négatif. Plus précisément, les conditions $\alpha^* < 0$ et $0 < \delta^* < 2\sqrt{\mu^* \text{Da}}$ sont équivalentes.
- Il existe une singularité dans l'expression (1.134) : le coefficient de Robin est infini pour $\delta^* = 2\sqrt{\mu^* \text{Da}}$. Cette situation qui, contrairement aux apparences, est physiquement réaliste, correspond à une vitesse à la paroi nulle : d'après la relation (1.131), c'est en effet la seule situation assurant un frottement fini à la paroi. Plus généralement, la loi de Robin est dégénérée en (FIG. 1.22)

- ⑤ condition de symétrie pour $\delta^* = 0$ et $\alpha^* = 0$,

$$\left. \frac{dU^*}{dY} \right|_{\text{paroi}} = 0, \quad (1.136)$$

- ① condition d'adhérence pour $\delta^* = 2\sqrt{\mu^* \text{Da}}$ et $\alpha^* = \pm\infty$,

$$U_{\text{paroi}} = 0. \quad (1.137)$$

L'enjeu est maintenant de déterminer numériquement les valeurs de δ^* et de α^* .

1.3.3 Calcul numérique du coefficient de Robin

Les développements analytiques précédents ne font pas intervenir d'hypothèse sur la nature des grains. Cependant, pour le calcul numérique de δ^* et α^* , on prend en exemple le milieu de la FIG. 1.19. Deux séries de simulations d'une tranche de canal périodique, l'une à gradient de pression fixé et nombre de carrés variable, l'autre à nombre de carrés fixé et gradient de pression variable, montrent qu'en régime de Darcy, δ^* est indépendant du gradient de pression et du nombre de cubes. On peut donc calculer δ^* en ne simulant qu'une seule cellule. L'enchaînement des calculs est le suivant :

- on effectue la simulation d'une cellule située loin des parois, afin de déterminer la vitesse de Darcy U_p qui serait la vitesse du fluide dans un milieu *infini*. Pour cela on utilise le domaine de la FIG. 1.15 où l'on impose un gradient de pression uniforme selon la direction de périodicité. On détermine ensuite U_p *via* la relation (1.112) ;

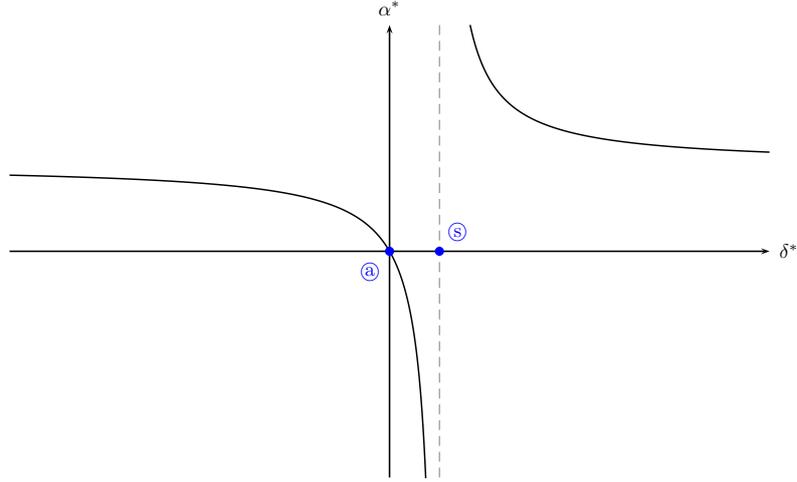


FIG. 1.22 – Coefficient α^* en fonction de δ^* . La condition de Robin devient une condition d'adhérence au point $\delta_{\text{a}}^* = 0$ et une condition de symétrie au point de singularité $\delta_{\text{S}}^* = 2\sqrt{\mu^* \text{Da}}$.

- (ii) on effectue la simulation d'une cellule de paroi (FIG. 1.23) en imposant un gradient de pression de même intensité qu'en (i) dans la direction tangentielle à la paroi. On post-traite la valeur du débit Q_{micro} , puis à partir des relations

$$Q_{\text{micro}} = Q_{\text{macro}} = 2DU_p - 2\delta U_p, \quad (1.138)$$

on déduit

$$\delta = D - \frac{Q_{\text{micro}}}{2U_p}, \quad (1.139)$$

où $D = \ell_0/2 + \ell_p$ et $\ell_p \geq 0$ est l'éloignement entre la paroi et la rangée de carrés la plus proche de la paroi (FIG. 1.23) ;

- (iii) on calcule α à l'aide de l'égalité (1.134).

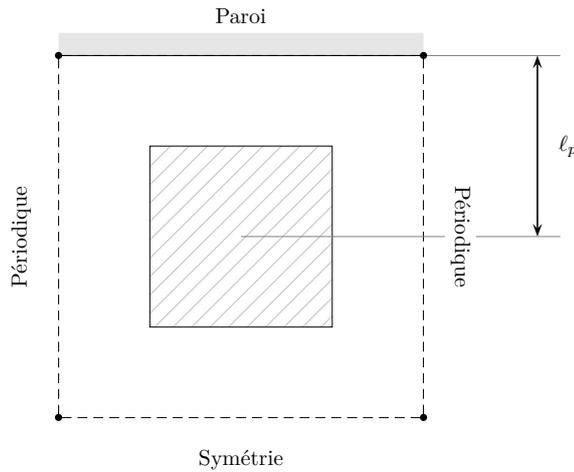


FIG. 1.23 – Cellule adjacente à la paroi pour le calcul de δ^* . La distance entre la paroi et le centre de la dernière rangée de grains est $\ell_p = \ell_0/2$ sur la figure.

Plusieurs simulations où l'on fait varier ℓ_p sont réalisées (FIG. 1.24). On observe que δ^* devient négatif à partir d'une certaine valeur de ℓ_p , et continue à décroître à mesure que

l'on éloigne la paroi. Si l'on repousse la paroi loin des grains, on est ramené à un problème d'interface entre un milieu libre et un milieu poreux. La condition de symétrie est obtenue pour $\ell_p = 0$, c'est-à-dire lorsque la paroi « coupe » en deux parts symétriques la dernière rangée de carrés.

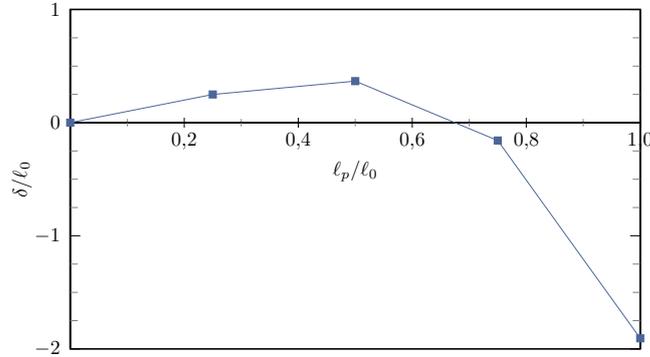


FIG. 1.24 – Variations de δ en fonction de la distance à la paroi ℓ_p , pour $\mu^* = 4/3$ et $\phi = 0,75$.

1.3.4 Implémentation et stabilité

Dans le code de calcul, on implémente la condition aux limites de Robin sous la forme d'un terme source. Dans la méthode des volumes finis, l'équation du problème est intégrée sur chaque élément du maillage. En particulier, en intégrant l'équation de Darcy-Brinkman sur une maille de bord (Fig. 1.25),

$$\int_{V_b} \left[-\vec{\nabla}P - \frac{\mu}{K} \vec{U} + \mu_{\text{eff}} \Delta \vec{U} \right] dV_b = 0, \quad (1.140)$$

d'où

$$\int_{V_b} -\vec{\nabla}P dV_b + \int_{V_b} -\frac{\mu}{K} \vec{U} dV_b + \int_{\partial V_b} \mu_{\text{eff}} \vec{\nabla} \vec{U} \cdot \vec{n} d\Sigma_b = 0. \quad (1.141)$$

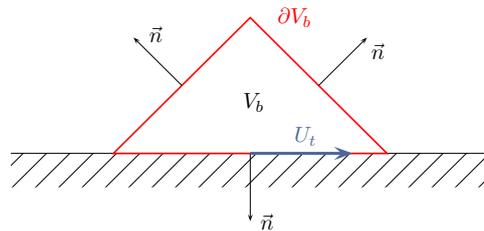


FIG. 1.25 – Un élément de bord V_b .

L'intégrale surfacique dans (1.141) comprend les contributions de chaque face de l'élément, dont la face Σ_b^{paroi} définissant la paroi. Dans le code, cette face est définie en tant que symétrie, c'est-à-dire

$$U = U_t, V = 0, \frac{\partial U_t}{\partial y} = 0, \quad (1.142)$$

afin que sa contribution à l'intégrale s'annule; elle est alors remplacée par le terme de Robin :

$$\int_{\partial V_b^{\text{paroi}}} \mu_{\text{eff}} \vec{\nabla} \vec{U} \cdot \vec{n} \, d\Sigma_b^{\text{paroi}} = \mu_{\text{eff}} \alpha U_t \Sigma_b^{\text{paroi}}. \quad (1.143)$$

Par ailleurs, le code de calcul résout une équation instationnaire qui s'écrit, compte tenu de la méthode d'implémentation de la condition de Robin et en supposant que toutes les faces de parois sont identiques,

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} = -\vec{\nabla} P + \underbrace{\left(\frac{\mu_{\text{eff}} \alpha_p}{\rho \Sigma_b^{\text{paroi}}} - \frac{\mu}{K} \right)}_k \vec{U} + \frac{\mu_{\text{eff}}}{\rho} \Delta \vec{U}, \quad (1.144)$$

où α_p vaut α à la paroi et zéro ailleurs. La solution recherchée est la solution de (1.144) convergée temporellement. Or, cette solution peut ne pas exister en fonction de la valeur du coefficient k . Des tests numériques indiquent en effet qu'il existe une valeur critique de k au-delà de laquelle l'équation (1.144) n'admet pas de régime permanent. À cette valeur de k correspond une valeur critique α_s de α qui dépend de la largeur du canal, de la perméabilité, de la viscosité effective, et dans une moindre mesure de la finesse du maillage aux parois. Si le coefficient de Robin calculé est supérieur à cette valeur critique, le code ne permet pas de trouver la solution de l'équation de Darcy-Brinkman à moins d'éliminer le terme d'évolution temporelle. Enfin, on constate un allongement du temps de convergence si α est proche de α_s tout en étant inférieur.

Afin de justifier cette condition d'existence d'un régime stationnaire, déterminons la solution analytique de

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} = G + kU + \mu_{\text{eff}} \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} & \mu_{\text{eff}} > 0, \mu_{\text{eff}} \text{ et } k \text{ constants,} \\ U(0, t) = U(H, t) = 0 & t > 0, \\ U(y, 0) = 0 & 0 < y < H. \end{cases} \quad (1.145)$$

On recherche les solutions sous la forme $U(y, t) = V(y, t)e^{kt}$. En introduisant cette forme dans (1.145), on est ramené à

$$\begin{cases} \frac{\partial V}{\partial t} = Ge^{-kt} + \mu_{\text{eff}} \frac{\partial^2 V}{\partial y^2}, \\ V(0, t) = V(H, t) = 0 & t > 0, \\ V(y, 0) = 0 & 0 < y < H. \end{cases} \quad (1.146)$$

La forme générale des solutions est

$$V(y, t) = \sum_{n=1}^{+\infty} \left(\int_0^t e^{-\mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2 (t-s)/H^2} G_n(s) ds \right) \sin\left(\frac{n\pi y}{H}\right) \quad (1.147)$$

avec

$$G_n(t) = \frac{2}{H} \int_0^H Ge^{-kt} \sin\left(\frac{n\pi y}{H}\right) dy = \frac{2G}{n\pi} [1 - (-1)^n] e^{-kt}. \quad (1.148)$$

D'où

$$\begin{aligned} \int_0^t e^{-\mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2 (t-s)/H^2} G_n(s) ds &= \frac{2G}{n\pi} [1 - (-1)^n] e^{-\mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2 t/H^2} \int_0^H e^{(\mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2 - kK^2)s/H^2} ds \\ &= \frac{2GH^2}{\pi} \frac{1 - (-1)^n}{n(\mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2 - kH^2)} \left[e^{-kt} - e^{-\mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2 t/H^2} \right] \end{aligned} \quad (1.149)$$

et

$$V(y, t) = \frac{2GH^2}{\pi} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1 - (-1)^n}{n(\mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2 - kH^2)} \left[e^{-kt} - e^{-\mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2 t/H^2} \right] \sin\left(\frac{n\pi y}{H}\right). \quad (1.150)$$

On a ainsi obtenu la solution

$$U(y, t) = \frac{2GH^2}{\pi} \sum_{n=1}^{+\infty} \underbrace{\frac{1 - (-1)^n}{n(\mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2 - kH^2)} \left[1 - e^{(kH^2 - \mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2)t/H^2} \right]}_{U_n(y, t)} \sin\left(\frac{n\pi y}{H}\right), \quad (1.151)$$

valable pour $k < 0$ ou pour $\sqrt{kH^2/\mu_{\text{eff}}\pi^2}$ non entier. Par conséquent, il existe un régime stationnaire, c'est-à-dire une limite à $U(y, t)$ lorsque t tend vers l'infini, à condition que le coefficient multiplicatif de la variable temporelle dans l'exponentielle soit toujours négatif, donc si

$$k \leq \frac{\mu_{\text{eff}}\pi^2}{H^2}. \quad (1.152)$$

Dans ce problème simplifié où k est constant, contrairement à l'équation (1.144), on retrouve cependant bien un critère sur la valeur de k où interviennent le coefficient de diffusion et la taille du domaine. Plus la diffusion est importante et plus l'existence d'un régime stationnaire est probable, ce que nous avons numériquement confirmé. De plus, comme

$$|U_n(y, t)| < \frac{2}{n(\mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2 - kH^2)} = a_n, \quad (1.153)$$

où $\sum_{n \geq 1} a_n$ converge, la solution stationnaire s'écrit

$$U_s(y) = \lim_{t \rightarrow +\infty} U(y, t) = \frac{2GH^2}{\pi} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1 - (-1)^n}{n(\mu_{\text{eff}} n^2 \pi^2 - kH^2)} \sin\left(\frac{n\pi y}{H}\right), \quad (1.154)$$

soit encore

$$U_s(y) = \begin{cases} \frac{G}{k} \left[-1 + \frac{\text{sh}\left(\sqrt{\frac{-k}{\mu_{\text{eff}}}} y\right) - \text{sh}\left(\sqrt{\frac{-k}{\mu_{\text{eff}}}} (y - H)\right)}{\text{sh}\left(\sqrt{\frac{-k}{\mu_{\text{eff}}}} H\right)} \right] & \text{si } k < 0, \\ \frac{G}{k} \left[-1 + \frac{\sin\left(\sqrt{\frac{k}{\mu_{\text{eff}}}} y\right) - \sin\left(\sqrt{\frac{k}{\mu_{\text{eff}}}} (y - H)\right)}{\sin\left(\sqrt{\frac{k}{\mu_{\text{eff}}}} H\right)} \right] & \text{si } k > 0. \end{cases} \quad (1.155)$$

Elle est bien solution du problème stationnaire

$$\begin{cases} 0 = G + kU_s + \mu_{\text{eff}} \frac{d^2 U_s}{dy^2}, \\ U_s(0) = U_s(H) = 0, \end{cases} \quad (1.156)$$

lequel admet des solutions pour toute valeur de k . C'est donc bien la résolution en temps qui génère une éventuelle absence de solution stationnaire.

1.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exposé le formalisme classique utilisé dans l'étude des milieux poreux, avec une large part accordée à la méthode de prise de moyenne volumique. Cette méthode donne accès assez aisément à une représentation macroscopique d'un milieu poreux, soit par filtrage direct d'un calcul à l'échelle microscopique (ce qui sera fait dans les cas-tests numériques du chapitre 3), soit par l'écriture d'équations macroscopiques qui font intervenir des coefficients traduisant le comportement mécanique et thermique moyen du milieu. Pour des écoulements à faibles nombres de Reynolds et de Prandtl, un calcul de cellule suffit à déterminer numériquement ces coefficients, qui ne dépendent alors que de la géométrie de la microstructure. Cependant, à nombres de Reynolds et de Prandtl plus élevés, les effets d'inertie et de dispersion deviennent prépondérants sur les effets visqueux et de diffusion. La résolution numérique des modèles macroscopiques demande alors d'établir des corrélations reliant ces coefficients effectifs aux différents paramètres géométriques et aux nombres adimensionnés de l'écoulement. En réalité, l'obtention même de modèles macroscopiques fermés pour ces écoulements représente encore un défi. À la lumière de ces éléments, il apparaît ainsi qu'une description continue à l'échelle macroscopique d'un assemblage de réacteur demeure délicate en raison de la complexité des écoulements et des phénomènes en jeu (écoulement périphérique, turbulence, fortes non-linéarités, convection naturelle), en particulier en vue de calculs multiples de dimensionnement. Obtenir une telle description ne constitue d'ailleurs pas l'objet de la thèse. On se tourne alors vers un tout autre type d'approche, les méthodes de calculs d'assemblage par modélisation semi-empirique implémentées dans l'approche projet « sous-canal », qui donnent accès à une description macroscopique discrète. Ce type de méthode est décrit dans le chapitre suivant, où le lien est également fait entre grandeurs moyennes continues issues de la prise de moyenne volumique et grandeurs moyennes issues de la méthodologie « sous-canal ».

Chapitre 2

Une description macroscopique des assemblages de réacteur au sodium

En dépit de leur caractère formel et rigoureux, les méthodes de changement d'échelle (au sens « upscaling ») précédemment explicitées se heurtent à plusieurs difficultés, comme par exemple la résolution des problèmes de fermeture ou la modélisation des conditions aux limites du système étudié à l'échelle macroscopique. Pour ces raisons, renforcées encore par d'autres éléments qui apparaîtront plus clairement dans ce chapitre, les ingénieurs en charge de la modélisation des assemblages des réacteurs au sodium ont développé une approche « métier » alternative, adaptée à la technologie des assemblages, et qui est couramment utilisée dans certaines études. Ce chapitre a pour objectif de présenter brièvement les idées générales qui sous-tendent cette approche alternative, celle-ci faisant l'objet d'une brève application au chapitre 4, et également de marquer certaines analogies et différences avec la prise de moyenne volumique vue au chapitre 1.

2.1 Échelle macroscopique au sens d'un sous-canal

2.1.1 Principes généraux

Avant de décrire cette nouvelle approche, il convient d'abord de rappeler sommairement la structure d'un assemblage de réacteur à aiguilles et fils espaceurs, déjà introduite dans le chapitre d'introduction. Un tel assemblage est constitué d'aiguilles de combustible de rayon R , disposées selon un pas triangulaire d , autour desquelles s'enroule un fil espaceur qui permet de maintenir la cohésion de la structure et d'éviter toute oscillation des aiguilles sous l'effet de l'écoulement. Le fil espaceur est une surface générée par déplacement d'un cercle de rayon constant le long d'une hélice dextre, le plan du cercle restant constamment normal à l'hélice. Compte tenu du faible angle α formé par l'hélice génératrice du fil espaceur et l'axe de l'aiguille, une coupe de fil espaceur par un plan normal à l'axe des aiguilles donne une ellipse de faible excentricité qui s'apparente donc à un cercle dont le rayon est noté e . Dans une vision idéalisée, le fil est parfaitement tangent à l'aiguille autour de laquelle il s'enroule (FIG. 2.1). Nous reviendrons sur cette hypothèse au chapitre 4.

L'approche « sous-canal », mise en œuvre par exemple dans le code CADET développé par le CEA à partir de 1979, est utilisée pour les études de dimensionnement et de sûreté des réacteurs à aiguilles et fils espaceurs, comme ceux de Phénix et Superphénix. Ces études s'attachent à déterminer les températures maximales atteintes par les gaines

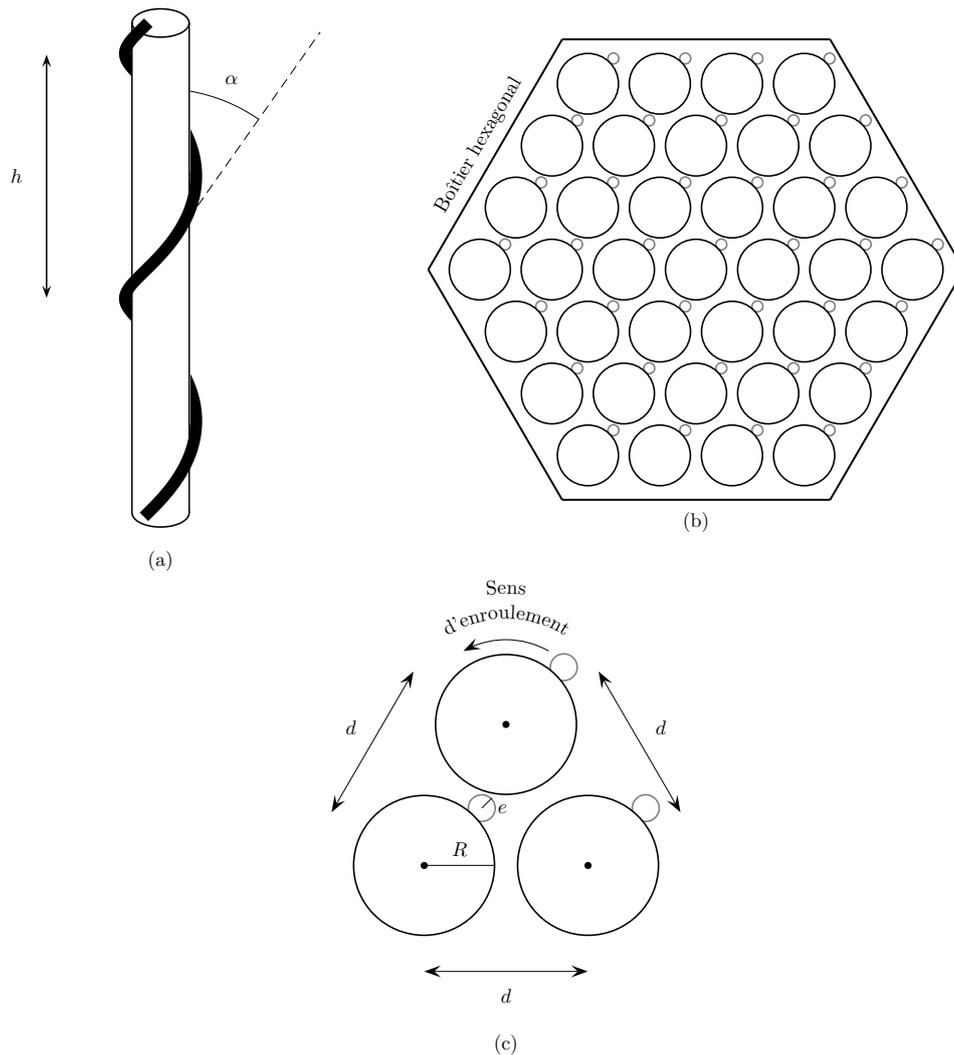


FIG. 2.1 – Éléments de caractérisation géométrique d'un assemblage à aiguilles et fils espaceurs : (a) une aiguille et son fil espaceur, (b) une coupe d'assemblage à 37 aiguilles, (c) un groupement de trois aiguilles en coupe (vue du dessus).

externes des aiguilles¹, en fonction des divers paramètres géométriques, des phénomènes physiques impliqués (turbulence, convection forcée ou mixte), ou encore de la puissance thermique dégagée par les aiguilles de combustible produite par réactions nucléaires. La modélisation « sous-canal » s'appuie sur une discrétisation en éléments appelés *sous-canaux* (546 éléments par coupe radiale pour un assemblage à 271 aiguilles) sans commune mesure avec celle que l'on adopterait en vue d'une résolution fine (plusieurs centaines de millions d'éléments dans l'assemblage entier, voir par exemple Bieder *et al.* [20]). La modélisation « sous-canal » utilise des corrélations et modélisations semi-empiriques éprouvées, basées sur une vaste littérature expérimentale. Outre son coût de résolution extrêmement faible – de l'ordre de la seconde de temps CPU pour un assemblage –, la grande force de cette approche est de traduire précisément les observations qualitatives et quantitatives en terme de flux de masse et d'énergie échangés entre sous-canaux. Cette force fait aussi sa faiblesse

1. Ces températures sont nommées *températures maximales de gaine* (T.M.G.) lorsque leur calcul tient compte de coefficients d'incertitude, et *températures nominales de gaine* (T.N.G.) hors incertitudes. Ces températures sont les grandeurs dimensionnantes, car on doit notamment faire la preuve que le sodium liquide dans l'assemblage n'atteindra pas son point d'ébullition.

car son cadre d'application est restreint à celui des expériences ; en sortir est susceptible de produire des résultats hasardeux. Aussi, l'utilisateur doit être conscient des limites d'application des différentes corrélations utilisées. Les critères de validation de la modélisation « sous-canal » sont fondés sur des comparaisons entre les résultats de calcul et divers résultats expérimentaux. La qualité des résultats est davantage évaluée par rapport aux températures calculées qu'aux vitesses, d'une part parce que la température est la grandeur primordiale en matière de sûreté, et d'autre part parce que la vitesse n'est qu'un intermédiaire de calcul.

La modélisation « sous-canal » est utilisée pour simuler les transferts thermiques turbulents dans les assemblages de réacteur à fils espaceurs et aiguilles. Pour les besoins de la modélisation, un assemblage est découpé en volumes de contrôle, les sous-canaux. Les sous-canaux internes sont des prismes triangulaires formés par les axes de trois aiguilles, et d'extension axiale égale au pas du fil (FIG. 2.2). Les sous-canaux de bord et de coin s'appuient respectivement sur deux aiguilles, et sur une aiguille et la paroi externe de l'assemblage. Le choix de ces volumes de contrôle est lié à leur aspect relativement intuitif et représentatif de l'assemblage. En particulier, chaque sous-canal interne est en contact avec trois sous-canaux latéraux avec lesquels s'effectuent des échanges de chaleur, ce qui facilite la modélisation. L'ensemble des sous-canaux forme un macromallage de la structure. Le modèle permet de déterminer les valeurs « moyennes » de vitesse et de température dans chaque sous-canal, en s'appuyant sur

- (i) des corrélations de perte de charge pour l'hydrodynamique axiale ¹ ;
- (ii) des bilans thermiques par sous-canal avec des hypothèses de longueur de conduction et de diffusion turbulente pour les échanges thermiques radiaux ¹.

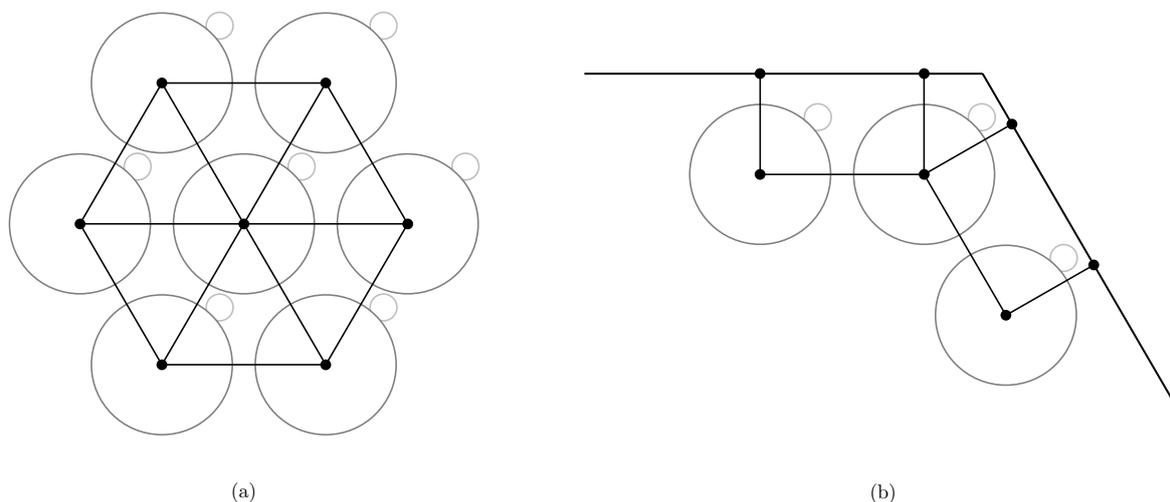


FIG. 2.2 – Coupes radiales des sous-canaux : (a) sous-canaux internes, (b) sous-canaux périphériques (bord et coin).

Dans la suite, ces quantités moyennes associées aux sous-canaux seront représentées surmontées d'un chapeau $\hat{\cdot}$. Le sous-canal dont la face d'entrée est située à l'altitude z_k

1. Selon la terminologie habituelle, la direction « axiale » est celle de l'axe des aiguilles tandis que les adjectifs « radial », « latéral » ou « transverse » font référence à des quantités ou phénomènes situés dans un plan normal à l'axe des aiguilles.

et dont le numéro dans une coupe radiale est i , est désigné par l'indice i et l'exposant k . Dans la modélisation, les sous-canaux de bord et de coin sont distingués des sous-canaux centraux (*internes*) car la région périphérique est soumise à de forts effets de paroi qui modifient substantiellement les échanges. Les diverses corrélations sont établies à l'aide d'expériences sur des maquettes éventuellement simplifiées d'assemblage. Par ailleurs, la densité, la viscosité et la conductivité thermique du sodium liquide sont prises uniformes dans l'assemblage – leurs valeurs sont alors déterminées en fonction de la température en entrée d'assemblage à l'aide des tables thermophysiques –, sauf quand la convection naturelle est prise en compte. La description qui suit s'appuie partiellement sur des notes techniques internes en diffusion restreinte.

2.1.2 Détermination des vitesses par sous-canal

Si w est la composante axiale de la vitesse microscopique, alors la vitesse axiale moyenne déterminée dans le sous-canal i d'altitude z_k s'apparente à la moyenne

$$\widehat{W}_i^k = \frac{1}{V_i^k} \int_{V_i^k} w \, dV, \quad (2.1)$$

où V_i^k est le volume de fluide contenu dans le sous-canal i , et w la composante axiale de la vitesse microscopique. À cause de leur forme hélicoïdale, la position des fils espaceurs (ou portions de fils espaceurs) dans la section de passage d'un sous-canal est fonction de l'altitude de cette section. Néanmoins, la section de passage d'un sous-canal contient toujours la même surface de fil, si bien que son aire est identique à toute altitude. En notant S_i^k cette aire et h le pas du fil, on a alors $V_i^k = h \times S_i^k$. Si l'on suppose que le débit axial traversant la section de passage dans un sous-canal est indépendant de l'altitude de la section, alors il en va de même pour la vitesse débitante. Par conséquent, la vitesse axiale moyenne n'est autre que la vitesse débitante :

$$\begin{aligned} \widehat{W}_i^k &= \frac{1}{h} \int_{z_k}^{z_k+h} \left(\frac{1}{S_i^k} \int_{S_i^k} w \, dS \right) dz \\ &= \frac{1}{S_i^k} \int_{S_i^k} w \, dS. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Cette vitesse est donc reliée au débit axial q_i^k par

$$\widehat{W}_i^k = \frac{q_i^k}{S_i^k}. \quad (2.3)$$

Les débits sont identiques dans tous les sous-canaux de même type (sous-canaux internes, sous-canaux de bord, sous-canaux de coin), car ils possèdent la même section de passage. On omettra donc l'indice k dans cette section traitant de l'hydrodynamique. Diverses hypothèses simplificatrices peuvent être émises pour obtenir une détermination au moindre coût des vitesses \widehat{W}_i ; nous en présentons deux :

- (i) L'hypothèse *isovitesse* : la vitesse moyenne axiale est supposée identique dans tous les sous-canaux. Le débit total dans l'assemblage est

$$\begin{aligned} Q_{\text{tot}} &= \sum_i q_i \\ &= \sum_i S_i \widehat{W}_i, \end{aligned} \quad (2.4)$$

d'où, avec $\widehat{W}_i = \widehat{W}$ pour tout i ,

$$\widehat{W} = \frac{Q_{\text{tot}}}{\sum_i S_i}. \quad (2.5)$$

La valeur de Q_{tot} est une donnée d'entrée du code renseignée par l'utilisateur. Cette hypothèse étant peu réaliste, on peut lui préférer l'alternative qui suit ;

- (ii) l'hypothèse *isobare* : chaque plan de coupe radial est considéré comme isobare. Soient deux plans de coupe situés respectivement aux cotes z_k et $z_k + \Delta z$. Dans chaque sous-canal i , l'écart de pression $\Delta P_i = P_i^{k+1} - P_i^k$ entre ces deux altitudes est piloté par les pertes de charge dues aux fils espaceurs et aux frottements du fluide contre la structure. En négligeant les effets gravitaires, la loi de Darcy-Weisbach permet de l'exprimer sous la forme

$$\Delta P_i = f_i \frac{\Delta z}{D_{h_i}} \rho \frac{\widehat{W}_i^2}{2}, \quad (2.6)$$

Dans cette relation, D_{h_i} est le diamètre hydraulique défini comme

$$D_{h_i} = 4 \frac{S_i}{P_i}, \quad (2.7)$$

avec P_i le périmètre « mouillé » par l'écoulement dans la section de passage S_i (voir FIG. 2.3), et f_i est le coefficient de frottement. Ce dernier est donné en fonction du nombre de Reynolds par des corrélations établies expérimentalement et disponibles dans la littérature. La modélisation « sous-canal » utilise généralement des corrélations données sous la forme

$$f_i = a \text{Re}_i^{-b}, \quad (2.8)$$

où le nombre de Reynolds de sous-canal est construit à partir du débit axial dans le sous-canal i :

$$\text{Re}_i = \frac{\rho \widehat{W}_i D_{h_i}}{\mu} = \frac{q_i D_{h_i}}{S_i \mu}. \quad (2.9)$$

La corrélation (2.8) est utilisée à la fois pour les sous-canaux internes et pour les sous-canaux périphériques, ce qui correspond à une approximation plus ou moins réaliste. En effet, il faut être conscient qu'expérimentalement, les corrélations de perte de charge sont presque toujours déterminées pour l'assemblage entier, et non par sous-canal. Donc, dans l'expression (2.8), on devrait écrire un nombre de Reynolds global Re calculé à partir de la vitesse débitante \widehat{W}_{tot} dans une section d'assemblage et du diamètre hydraulique D_h de l'assemblage :

$$\text{Re} = \frac{\rho \widehat{W}_{\text{tot}} D_h}{\mu}. \quad (2.10)$$

La loi (2.8) est similaire à celle des écoulements en conduite circulaire¹, mais avec des coefficients a et b fonctions de la topologie de l'aiguille et du fil espaceur. La détermination empirique du coefficient f_i peut être faite à partir de données de la

1. Dans le cas d'une conduite circulaire, $a = 64$ et $b = -1$ en régime laminaire, $a = 0,316$ et $b = -0,25$ en régime turbulent (loi de Blasius, valable pour des conduites lisses et $\text{Re} < 10^5$).

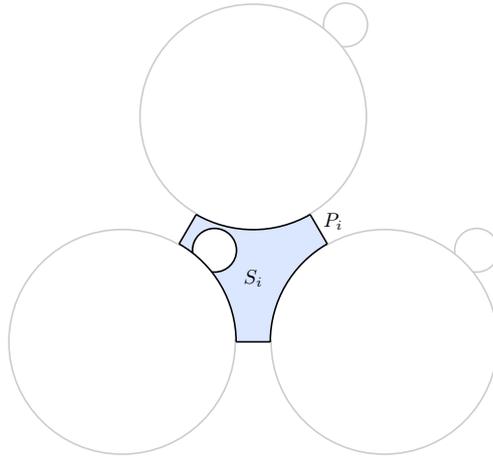


FIG. 2.3 – Surface de passage et périmètre « mouillé » d'un sous-canal interne.

littérature. On peut alors déterminer la répartition de débits et de vitesses axiales. En effet, en substituant les expressions (2.8), (2.9) et (2.3) dans la loi de Darcy-Weisbach (2.6), on a

$$\begin{aligned} \Delta P_i &= a \left(\frac{q_i D_{h_i}}{S_i \mu} \right)^{-b} \frac{\Delta z}{D_{h_i}} \rho \frac{q_i^2}{2 S_i^2} \\ &= \frac{a \mu^b \rho \Delta z}{2} \frac{1}{S_i^{2-b}} \frac{1}{D_{h_i}^{1+b}} q_i^{2-b}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

d'où

$$q_i = \underbrace{\left(\frac{2 \Delta P_i}{a \mu^b \rho \Delta z} \right)^{\frac{1}{2-b}}}_{A_i} S_i D_{h_i}^{\frac{1+b}{2-b}}. \quad (2.12)$$

Comme les plans radiaux sont isobares, l'écart de pression ΔP_i est identique dans tous les sous-canaux ; par conséquent le groupement A_i est en fait une constante A . La relation

$$Q_{\text{tot}} = \sum_i \underbrace{A S_i D_{h_i}^{\frac{1+b}{2-b}}}_{q_i} \quad (2.13)$$

implique alors

$$A = \frac{Q_{\text{tot}}}{\sum_i S_i D_{h_i}^{\frac{1+b}{2-b}}}, \quad (2.14)$$

puis

$$q_i = \frac{S_i D_{h_i}^{\frac{1+b}{2-b}}}{\sum_i S_i D_{h_i}^{\frac{1+b}{2-b}}} Q_{\text{tot}}. \quad (2.15)$$

2.1 Échelle macroscopique au sens d'un sous-canal

Le débit massique Q_{tot} est renseigné par l'utilisateur. Le nombre de Reynolds de l'écoulement correspondant à ce débit est

$$\text{Re} = \frac{Q_{\text{tot}} D_h}{\mu S}, \quad (2.16)$$

avec S l'aire de la section de passage de l'assemblage.

Dans le cas de la convection naturelle, on doit tenir compte des effets de flottabilité dans la perte de pression, ce qui se traduit par l'ajout de la contribution $\rho_i g \Delta z$ dans la loi de perte de charge (2.6). Nous ne développons pas, ici, les calculs qui s'ensuivent.

Bien que plus réaliste que l'hypothèse (i), l'hypothèse (ii) est critiquable notamment parce que les lois de perte de charge établies dans la littérature décrivent une perte de charge dans l'assemblage global, et non par sous-canal. Elle reste cependant d'intérêt, comme le montrent les résultats de qualification entrepris, et la remettre en cause pour les régimes d'écoulement visés n'est pas d'actualité.

Illustrons ces considérations théoriques par un calcul concret. La FIG. 2.4 montre la carte des vitesses obtenues dans un assemblage à 61 aiguilles et cinq pas de fil, pour un écoulement à $\text{Re} = 45\,400$. Dans cette configuration, les longueurs géométriques sont fictives, bien que le rapport plutôt faible du pas des aiguilles sur leur diamètre la rapproche d'un assemblage fertile. Compte tenu de la méthode de calcul exposée précédemment, il existe trois valeurs différentes de vitesse axiale dans tout l'assemblage : une pour les sous-canaux internes, une pour les sous-canaux de bord et une pour les sous-canaux de paroi.

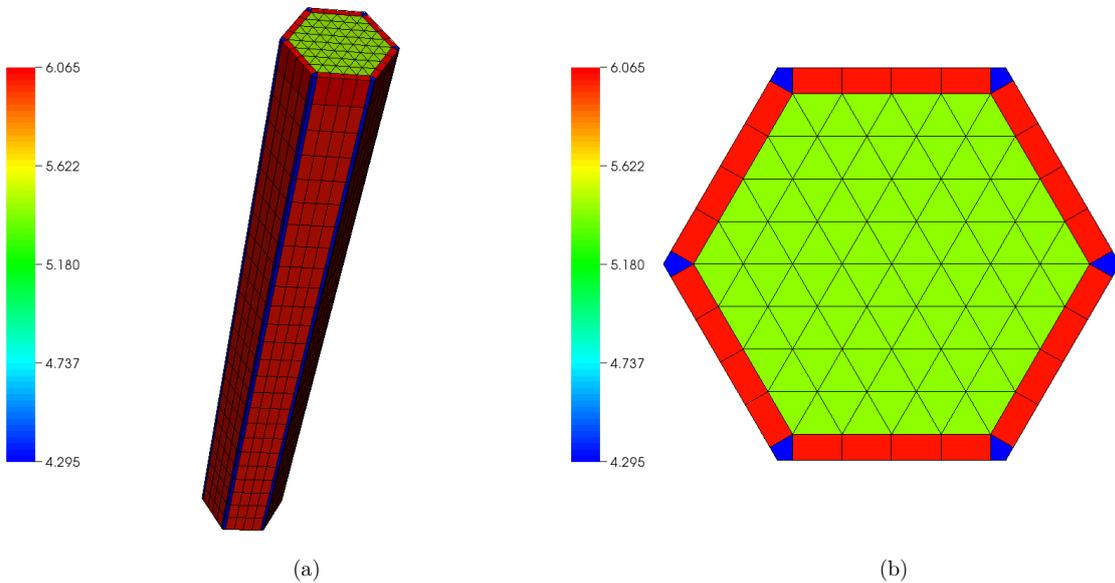


FIG. 2.4 – Répartition des vitesses axiales par sous-canal dans un assemblage à 61 aiguilles et cinq pas de fil, pour un nombre de Reynolds de 45 400. (a) Assemblage entier, (b) coupe radiale.

2.1.3 Détermination des températures par sous-canal

Le développement qui suit s'appuie en partie sur l'étude réalisée par Quéméré [96]. De façon analogue à la vitesse¹, la température calculée dans le sous-canal d'indice i et d'altitude k s'apparente à la moyenne sur ce sous-canal de la température microscopique θ :

1. La vitesse et la température sont des variables colocalisées.

$$\widehat{T}_i^k = \frac{1}{V_i^k} \int_{V_i^k} \theta \, dV. \quad (2.17)$$

Pour calculer les \widehat{T}_i , supposons que les champs moyens continus de vitesse et de température à l'échelle du sous-canal satisfont une équation de convection-diffusion analogue à (1.89) :

$$\widehat{\vec{U}} \cdot \vec{\nabla} \widehat{T} = \vec{\nabla} \cdot (D \vec{\nabla} \widehat{T}) + P, \quad (2.18)$$

où P est la puissance thermique volumique déposée par les aiguilles, et D est un coefficient traduisant les effets de la conduction thermique, de la dispersion thermique et de la turbulence. Les champs de vitesse et de température introduits dans l'équation (2.18) sont vus comme l'« équivalent » continu des moyennes discrètes \widehat{U}_i^k et \widehat{T}_i^k , mais n'ont pas exactement le même sens que les moyennes volumiques définies au chapitre 1. En effet ces dernières sont calculées sur un VER différent du volume de contrôle considéré ici. Il faut d'ailleurs noter qu'un sous-canal ne pourrait pas faire office de VER dans le cadre d'une méthode de changement d'échelle, car il ne satisfait pas les critères exposés au chapitre 1 ; en particulier, le volume d'un sous-canal n'est pas assez grand compte tenu de la topologie de la structure, ce qui conduirait à une porosité (c'est-à-dire un taux de fluide) dépendant de la position du VER.

On note respectivement $\widehat{T}_i^{k-1/2}$ et $\widehat{T}_i^{k+1/2}$ les températures (uniformes) sur les faces d'entrée et de sortie du sous-canal (FIG. 2.5), et Σ_i^k l'ensemble de ses faces (entrée, sortie et faces latérales). Intégrée sur le volume du sous-canal, l'équation de transport (2.18) devient

$$\int_{\Sigma_i^k} (\widehat{\vec{U}} \cdot \vec{n}) \widehat{T} \, d\Sigma = \int_{\Sigma_i^k} D \vec{\nabla} \widehat{T} \cdot \vec{n} \, d\Sigma + \int_{V_i^k} P \, dV. \quad (2.19)$$

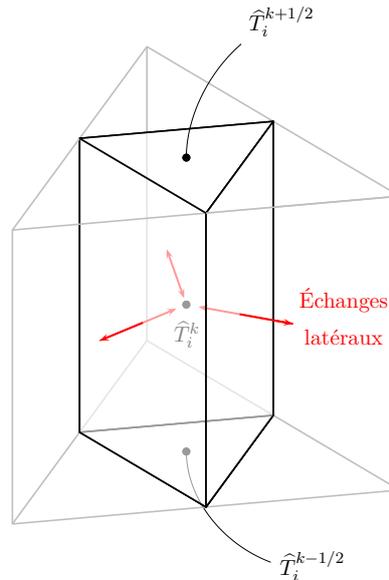


FIG. 2.5 – Températures moyennes associées au sous-canal i d'altitude k .

Évaluons chacun des termes de cette équation de bilan :

- Les débits de fluide radiaux échangés par un sous-canal avec ses sous-canaux adjacents sont en moyenne nuls sur un pas de fil. Cette hypothèse est valide pour les sous-canaux internes, mais pas pour les sous-canaux périphériques pour lesquels les effets de paroi tendent à privilégier une direction moyenne de l'écoulement transversal. Par conséquent, les composantes radiales du champ de vitesse sont nulles dans les sous-canaux internes, où le champ de vitesse moyen est seulement axial. D'où

$$\begin{aligned}
 \int_{\Sigma_i^k} \left(\widehat{\vec{U}} \cdot \vec{n} \right) \widehat{T} \, d\Sigma &= \underbrace{\sum_{\text{faces latérales}} \int_{\Sigma_i^k} \left(\widehat{\vec{U}} \cdot \vec{n} \right) \widehat{T} \, d\Sigma}_{=0} \\
 &+ \underbrace{\sum_{\text{entrée et sortie}} \int_{\Sigma_i^k} \left(\widehat{\vec{U}} \cdot \vec{n} \right) \widehat{T} \, d\Sigma}_{=\widehat{W}_i S_i \left(\widehat{T}_i^{k+1/2} - \widehat{T}_i^{k-1/2} \right)}.
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

- La seconde intégrale du bilan est simplifiée en estimant que les échanges de chaleur dans la direction axiale, en particulier la conduction, sont négligeables devant les échanges latéraux. Bien que la conduction axiale puisse être un phénomène relativement important dans les écoulements de métaux liquides¹, cette hypothèse est faite en régime de convection forcée et conduit à

$$\begin{aligned}
 \int_{\Sigma_i^k} D \vec{\nabla} \widehat{T} \cdot \vec{n} \, d\Sigma &= \underbrace{\sum_{\text{faces latérales}} \int_{\Sigma_{i \leftrightarrow j}^k} D \vec{\nabla} \widehat{T} \cdot \vec{n} \, d\Sigma}_{\text{échanges latéraux}} \\
 &+ \underbrace{\sum_{\text{entrée et sortie}} \int_{\Sigma_i^k} D \vec{\nabla} \widehat{T} \cdot \vec{n} \, d\Sigma}_{\simeq 0 \text{ (échanges axiaux négligés)}}.
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

Trois phénomènes contribuent aux échanges thermiques latéraux : la conduction, la dispersion, et la diffusion turbulente, ces deux derniers effets étant regroupés en un *mélange turbulent* ; Ro et Todreas [98] indiquent par ailleurs qu'en régime de convection forcée, le mélange turbulent est prépondérant devant la conduction. Le coefficient d'échange total peut être décomposé en $D = \alpha_{\text{cond}} + \alpha_{\text{mt}}$, de telle sorte que les échanges thermiques latéraux s'écrivent

$$\begin{aligned}
 \sum_{\text{faces latérales}} \int_{\Sigma_{i \leftrightarrow j}^k} D \vec{\nabla} \widehat{T} \cdot \vec{n} \, d\Sigma &= \underbrace{\sum_{\text{faces latérales}} \int_{\Sigma_{i \leftrightarrow j}^k} \alpha_{\text{cond}} \vec{\nabla} \widehat{T} \cdot \vec{n} \, d\Sigma}_{\text{échanges par conduction}} \\
 &+ \underbrace{\sum_{\text{faces latérales}} \int_{\Sigma_{i \leftrightarrow j}^k} \alpha_{\text{mt}} \vec{\nabla} \widehat{T} \cdot \vec{n} \, d\Sigma}_{\text{échanges par mélange turbulent}}.
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

Ces intégrales surfaciques sont discrétisées en écrivant le gradient de température entre le sous-canal i et l'un de ses trois voisins j sous la forme

$$\left. \frac{\partial \widehat{T}}{\partial r} \right|_{i \leftrightarrow j}^k = \frac{\widehat{T}_j^k - \widehat{T}_i^k}{d_{ij}}, \tag{2.23}$$

1. Les métaux liquides ont un faible nombre de Prandtl, donc de tels écoulements ont un nombre de Péclet relativement faible (Tsoi [114]). Voir également l'annexe A.

avec d_{ij} la distance entre les centres des sous-canaux i et j . Le coefficient de couplage conductif α_{cond} est déterminé en prenant en compte une longueur de conduction entre sous-canaux, afin d'avoir une représentation correcte du flux (Todreas et Kazimi [112] page 248). Le coefficient de mélange turbulent α_{mt} est estimé à l'aide de données expérimentales sur les écoulements dans les assemblages.

- Enfin, l'intégrale

$$\mathcal{P}_i^k = \int_{V_i^k} P \, dV \quad (2.24)$$

représente la puissance thermique déposée par les aiguilles. C'est une donnée renseignée par l'utilisateur, lequel peut définir une fonction de répartition de puissance radiale et axiale¹ uniforme ou non.

On introduit un coefficient de couplage entre sous-canaux, $B_{i \leftrightarrow j}(\widehat{W}_i, \dots)$ de telle sorte qu'avec une numérotation locale des trois sous-canaux adjacents à un sous-canal interne i (FIG. 2.6), l'équation de bilan thermique s'écrive sous la forme

$$\widehat{T}_i^{k+1/2} - \widehat{T}_i^{k-1/2} = \sum_{j=1}^3 B_{i \leftrightarrow j} (\widehat{T}_j^k - \widehat{T}_i^k) + \mathcal{P}_i^k. \quad (2.25)$$

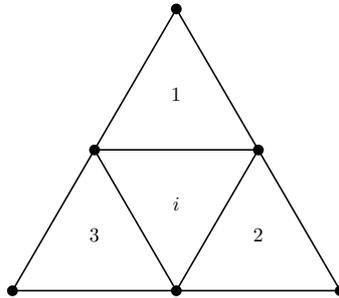


FIG. 2.6 – Numérotation locale des sous-canaux adjacents au sous-canal i .

En pratique, les températures sur les faces latérales $\widehat{T}_i^{k \pm 1/2}$ sont reliées aux moyennes par sous-canal \widehat{T}_i^k via une évaluation numérique. S'agissant des sous-canaux de coins et périphériques, des adaptations (non détaillées ici) des raisonnements précédents permettent d'obtenir une modélisation reposant sur les mêmes bases empiriques. Dans le modèle « sous-canal », le système formé par les équations (2.25) est alors formulé matriciellement, en faisant appel à une numérotation des sous-canaux telle que les coefficients non nuls dans la matrice du système ne soient pas trop dispersés, puis résolu numériquement par une technique numérique d'inversion. La FIG. 2.7 montre les températures obtenues dans un assemblage à 61 aiguilles et cinq pas de fil, pour un nombre de Reynolds de 45 400 et un profil cosinusoidal axial de puissance axiale (voir, au chapitre 4, la relation (4.8)). On précise que les sous-canaux sont discrétisés axialement en tranches, afin d'avoir une représentation correcte de ce profil.

1. Des considérations de neutronique permettent de montrer que le profil réel de puissance suit une loi en cosinus.

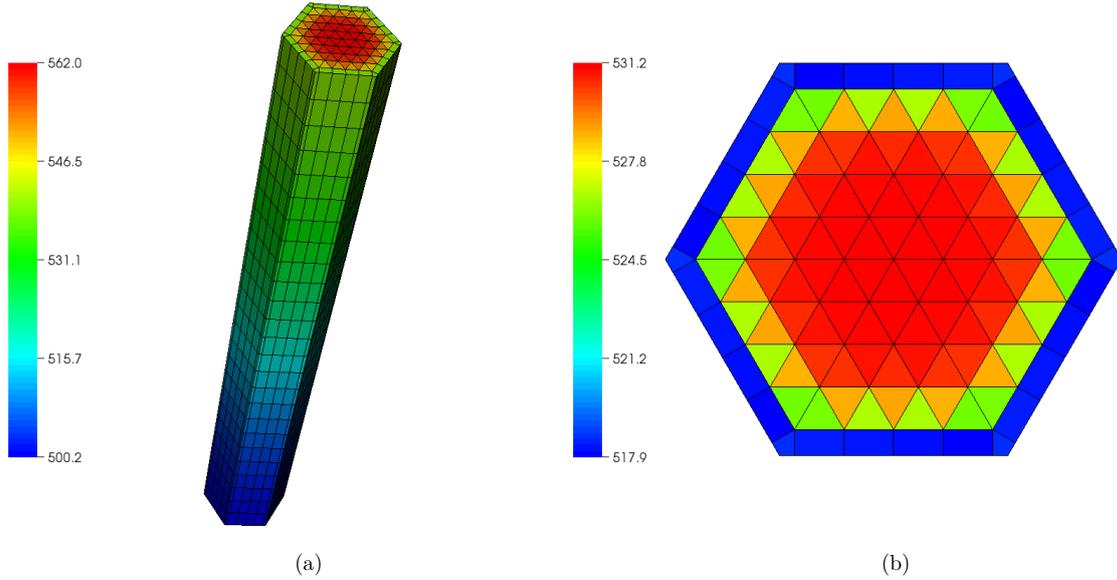


FIG. 2.7 – Visualisations de la température : (a) dans l’assemblage entier, (b) dans une coupe radiale à mi-hauteur. L’assemblage comporte ici 61 aiguilles déposant un profil cosinusoidal de puissance axiale, et cinq pas de fil. Le nombre de Reynolds de l’écoulement est $Re = 45\,400$.

2.2 Correspondance entre approches discrète et continue

2.2.1 Des moyennes par sous-canal aux moyennes cellulaires

Dans l’objectif de reconstruction des échelles microscopiques, nous avons notamment besoin (voir au chapitre 3) d’une information à l’échelle macroscopique sur les champs à reconstruire, sous la forme de moyennes de ces champs par cellule unitaire. Or, nous avons vu deux types d’approches pour obtenir un type d’information légèrement différent : l’approche par prise de moyenne volumique, qui fournit des champs moyens continus, et l’approche « sous-canal », qui fournit des champs moyennés sur des volumes de contrôle (les sous-canaux) différents des cellules. Nous devons donc établir un point de convergence entre ces deux méthodologies et montrer qu’il est possible d’en déduire les moyennes sur les cellules qui sont utilisées par la suite dans le problème de reconstruction.

On introduit donc un nouveau type de moyenne, que l’on appellera *moyenne cellulaire*, calculée sur le volume de la cellule périodique définissant le milieu. Pour un champ ψ , elle est notée $\bar{\psi}$ et définie par

$$\bar{\psi} = \frac{1}{V_f} \int_{\text{cellule}} \psi \, dV, \quad (2.26)$$

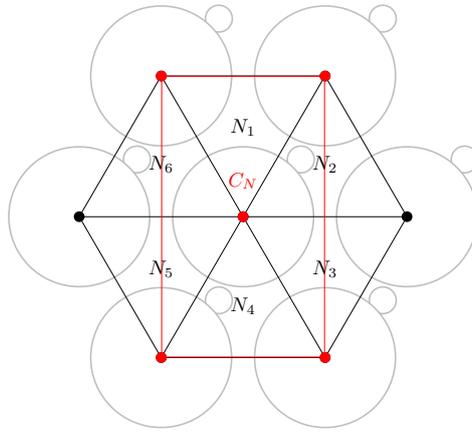
où V_f est le volume de fluide contenu dans la cellule périodique. Tout comme les moyennes par sous-canal, le volume d’intégration reste « fixe », à la différence des moyennes volumiques. Les moyennes $\hat{\psi}$ et $\bar{\psi}$ diffèrent par leur volume d’intégration, respectivement le sous-canal et la cellule unitaire. Le TAB. 2.1 propose un récapitulatif des différentes moyennes introduites jusqu’ici.

Pour passer d’un type de moyenne à l’autre, on est donc confronté à un simple problème d’interpolation d’un macromailage triangulaire (celui des sous-canaux) vers un macromailage carré (celui des cellules périodiques). Dans un assemblage, une cellule périodique N contient quatre sous-canaux internes – en réalité, deux sous-canaux internes entiers et quatre « demi-sous-canaux » si le centre de la cellule coïncide avec celui d’une

Moyenne	Notation	Volume de contrôle	Type
Volumique	$\langle \psi \rangle$	Cellule unitaire	Champ continu
« Sous-canal »	$\tilde{\psi}$	Sous-canal	Champ discret
Cellulaire	$\bar{\psi}$	Cellule unitaire	Champ discret

TAB. 2.1 – Les différents types de moyennes introduits et leurs principales caractéristiques.

aiguille. Les sous-canaux ayant une intersection non vide avec la cellule sont numérotés localement de N_1 à N_6 (FIG. 2.8).


 FIG. 2.8 – Cellule périodique de numéro N et sous-canaux associés.

Il n'y a pas d'interpolation à effectuer dans la direction axiale puisque l'extension des sous-canaux et des cellules périodiques est identique, égale au pas d'enroulement du fil. Si l'on suppose que la contribution à la moyenne cellulaire des demi-sous-canaux extérieurs à la cellule est négligeable – ce qui est d'autant plus acceptable que les valeurs de température dans ce groupement de six sous-canaux sont proches –, alors

$$\int_{V_N^k} \psi \, dV \simeq \sum_{i=1}^6 \int_{V_{N_i}^k} \psi \, dV, \quad (2.27)$$

d'où, en divisant par le volume de la cellule,

$$\bar{\psi}_N^k \simeq \frac{1}{V} \sum_{i=1}^6 \int_{V_{N_i}^k} \psi \, dV. \quad (2.28)$$

Comme le volume des cellules unitaires est quatre fois plus grand que celui des sous-canaux, on a

$$\bar{\psi}_N^k \simeq \frac{1}{4} \sum_{i=1}^6 \hat{\psi}_{N_i}^k. \quad (2.29)$$

Ce système linéaire peut être représenté matriciellement, en introduisant une matrice d'interpolation B , sous la forme

$$\overline{\chi}_{\substack{\square \\ \text{moyennes} \\ \text{cellulaires}}} = B \overline{\chi}_{\substack{\widehat{\square} \\ \text{moyennes} \\ \text{« sous-canal »}}} . \quad (2.30)$$

2.2.2 Des moyennes volumiques aux moyennes cellulaires

Après avoir relié les moyennes par sous-canal aux moyennes cellulaires, la question se pose de la relation existant entre ces dernières et la moyenne volumique. Plaçons-nous dans cadre plus général d'un milieu poreux périodique quelconque, de période ℓ_x (resp. ℓ_y, ℓ_z) dans la direction x (resp. y, z), tel que celui de la FIG. 2.9. Soit ψ une grandeur physique vectorielle ou scalaire à l'échelle microscopique. Comme précédemment, on note

$$\langle \psi \rangle_p = m_p * (\chi \psi). \quad (2.31)$$

La moyenne cellulaire de ψ dans la cellule (i, j, k) de centre $C_{ijk}(x_i, y_j, z_k)$, introduite dans la section précédente, est

$$\bar{\psi}_{ijk} = \frac{1}{\phi V} \int_{\text{cellule } ijk} \psi \, dV, \quad (2.32)$$

avec

$$V = \ell_x \times \ell_y \times \ell_z. \quad (2.33)$$

On notera par un indice i, j, k les champs évalués aux centres (x_i, y_j, z_k) , et par un indice $i + 1/2, j + 1/2, k + 1/2$ les champs évalués aux nœuds $(x_i + \ell_x/2, y_j + \ell_y/2, z_k + \ell_z/2)$.

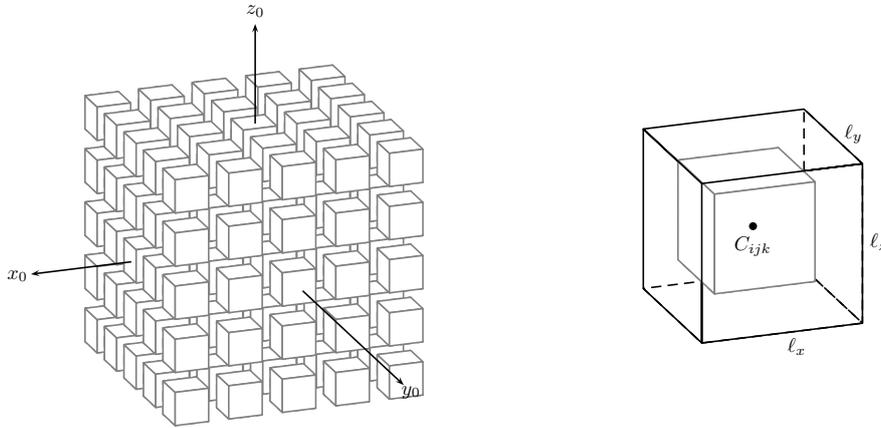


FIG. 2.9 – Modèle de milieu poreux tridimensionnel où les grains sont cubiques et la cellule unitaire est un cube de côté $\ell_x = \ell_y = \ell_z$. La cellule (i, j, k) est repérée par les coordonnées de son centre C_{ijk} , $x_i = x_0 + i\ell_x$, $y_j = y_0 + j\ell_y$, $z_k = z_0 + k\ell_z$ dans un repère orthogonal quelconque (O, x_0, y_0, z_0) .

Le raisonnement est ici mené dans le cas unidimensionnel, c'est-à-dire pour $\ell_y = \infty$ et $\ell_z = \infty$. Pour les cas 2D et 3D, on se reportera à l'annexe B. Par définition, la moyenne volumique de ψ calculée sur le filtre m_0 s'écrit

$$\langle \psi \rangle_0(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} m_0(x - y) \chi(y) \psi(y) \, dy, \quad (2.34)$$

d'où, en l'évaluant en x_i ,

$$\langle \psi \rangle_0 \Big|_i = \phi \bar{\psi}_i. \quad (2.35)$$

En incrémentant l'ordre du filtre, on a ensuite

$$\begin{aligned} \langle \psi \rangle_1(x) &= m_0 * \langle \psi \rangle_0(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} m_0(x-y) \langle \psi \rangle_0(y) dy \\ &= \frac{1}{\ell_x} \int_{x-\frac{\ell_x}{2}}^{x+\frac{\ell_x}{2}} \langle \psi \rangle_0(y) dy. \end{aligned} \quad (2.36)$$

On dérive la dernière équation,

$$\frac{d\langle \psi \rangle_1}{dx}(x) = \frac{1}{\ell_x} \langle \psi \rangle_0 \left(x + \frac{\ell_x}{2} \right) - \frac{1}{\ell_x} \langle \psi \rangle_0 \left(x - \frac{\ell_x}{2} \right), \quad (2.37)$$

puis on évalue cette dérivée en $x_i + 1/2$ pour obtenir

$$\frac{d\langle \psi \rangle_1}{dx} \Big|_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\phi}{V} \left[\bar{\psi}_{i+1} - \bar{\psi}_i \right]. \quad (2.38)$$

avec le « volume » $V = \ell_x$. En augmentant encore l'ordre du filtre, il vient

$$\begin{aligned} \langle \psi \rangle_2(x) &= m_0 * \langle \psi \rangle_1(x) \\ &= \frac{1}{\ell_x} \int_{x-\frac{\ell_x}{2}}^{x+\frac{\ell_x}{2}} \langle \psi \rangle_1(y) dy, \end{aligned} \quad (2.39)$$

et

$$\frac{d^2\langle \psi \rangle_2}{dx^2}(x) = \frac{1}{\ell_x} \frac{d\langle \psi \rangle_1}{dx} \left(x + \frac{\ell_x}{2} \right) - \frac{1}{\ell_x} \frac{d\langle \psi \rangle_1}{dx} \left(x - \frac{\ell_x}{2} \right), \quad (2.40)$$

soit

$$\frac{d^2\langle \psi \rangle_2}{dx^2} \Big|_i = \frac{\phi}{V^2} \left[\bar{\psi}_{i+1} - 2\bar{\psi}_i + \bar{\psi}_{i-1} \right]. \quad (2.41)$$

Par conséquent, les dérivées des moyennes volumiques évaluées aux centres ou aux nœuds des cellules sont reliées aux moyennes cellulaires par un système matriciel, où la matrice dépend du filtre m_p . Pour le filtre m_2 par exemple, en considérant $\bar{\psi}_0 = \bar{\psi}_{n+1} = 0$, le système pour un milieu de n cellules s'écrit

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \frac{d^2\langle \psi \rangle_2}{dx^2} \Big|_1 \\ \vdots \\ \frac{d^2\langle \psi \rangle_2}{dx^2} \Big|_n \end{pmatrix}}_Y = \frac{\phi}{V^2} \underbrace{\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}}_A \underbrace{\begin{pmatrix} \bar{\psi}_1 \\ \vdots \\ \bar{\psi}_n \end{pmatrix}}_X. \quad (2.42)$$

On reconnaît la matrice de discrétisation du laplacien en dimension un.

Plus généralement, on montre en annexe B qu'en dimension trois, les relations sont de la forme

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^{3p}\langle\psi\rangle_p}{\partial^p x \partial^p y \partial^p z} \Big|_{i,j,k} = \frac{\phi}{V^p} \sum_{N \in \mathbb{Z}} \beta_N(p) \bar{\psi}_N \quad \text{si } p \text{ est pair,} \\ \frac{\partial^{3p}\langle\psi\rangle_p}{\partial^p x \partial^p y \partial^p z} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} = \frac{\phi}{V^p} \sum_{N \in \mathbb{Z}} \beta_N(p) \bar{\psi}_N \quad \text{si } p \text{ est impair,} \end{array} \right. \quad (2.43)$$

où $(i, j, k) \mapsto N$ est une numérotation quelconque des cellules et où les coefficients $\beta_N(p)$ sont entiers. Ainsi, les valeurs aux nœuds ou aux centres des dérivées des moyennes volumiques sont des combinaisons linéaires des moyennes cellulaires sur les cellules avoisinantes. Par conséquent, si le champ $\langle\psi\rangle_p$ est connu en tout point – ce que permet la prise de moyenne volumique, soit des équations microscopiques dans les situations où les problèmes de fermeture peuvent être résolus, soit d'un champ microscopique préalablement connu –, alors ses dérivées peuvent être évaluées aux nœuds ou aux centres des cellules et les moyennes cellulaires déduites pour chaque cellule par inversion d'un système linéaire. Il existe une unique distribution $\bar{\psi}_N$ associée à un champ $\langle\psi\rangle_p$ et à une géométrie donnée¹. En pratique, le filtre m_0 est le choix le plus simple pour calculer les moyennes cellulaires puisqu'il n'y a pas de matrice à inverser, d'après les relations (2.35), (B.2), et (B.14).

Effectuons une application numérique de ces relations de correspondance entre types de moyennes : on considère un milieu de 100 cellules dans lequel un champ ψ satisfait le problème

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta\psi = 0 & \text{dans le domaine,} \\ \vec{\nabla}\psi \cdot \vec{n} = 1 & \text{sur les interfaces internes,} \\ \psi = 0 & \text{sur les frontières externes.} \end{array} \right. \quad (2.44)$$

On calcule numériquement sa solution ψ sur un *maillage microscopique* structuré comportant 300 éléments carrés par cellule² (FIG. 2.10). Puis, après avoir introduit une numérotation des cellules identique à celle de la FIG. B.1, on calcule de façon directe, c'est-à-dire en évaluant l'intégrale (2.32) discrétisée sur le maillage, les moyennes de ψ dans chaque cellule donnant le vecteur X_0 de l'égalité (B.9) (valeurs « exactes »).

Le produit de convolution (2.31) avec le filtre quadratique m_2 est ensuite discrétisé sur un *maillage de post-traitement* comportant $m \times m$ éléments carrés. Pour un entier m donné, le vecteur Y_m des dérivées – égalité (B.10) – est alors déduit du champ filtré (FIG. 2.11(a)). Enfin, on inverse le système liant dérivées et moyennes cellulaires et on compare la solution $X_m = A^{-1}Y_m$ de ce système avec les moyennes calculées de façon directe, rangées dans le vecteur X_0 (FIG. 2.11(b)).

On met ainsi en évidence une sensibilité importante au maillage. Si le maillage de post-traitement est plus grossier que le maillage microscopique (par exemple 10×10 mailles), on note un effet de lissage des dérivées qui s'ajoute au lissage intrinsèquement produit par

1. La géométrie de la microstructure intervient en effet par le biais de la fonction indicatrice de phase χ qui apparaît dans le produit de convolution $\langle\psi\rangle_p = m_p * (\chi\psi)$.

2. Soit au total $\phi \times 200 \times 200$ éléments, avec $\phi = 0,75$.

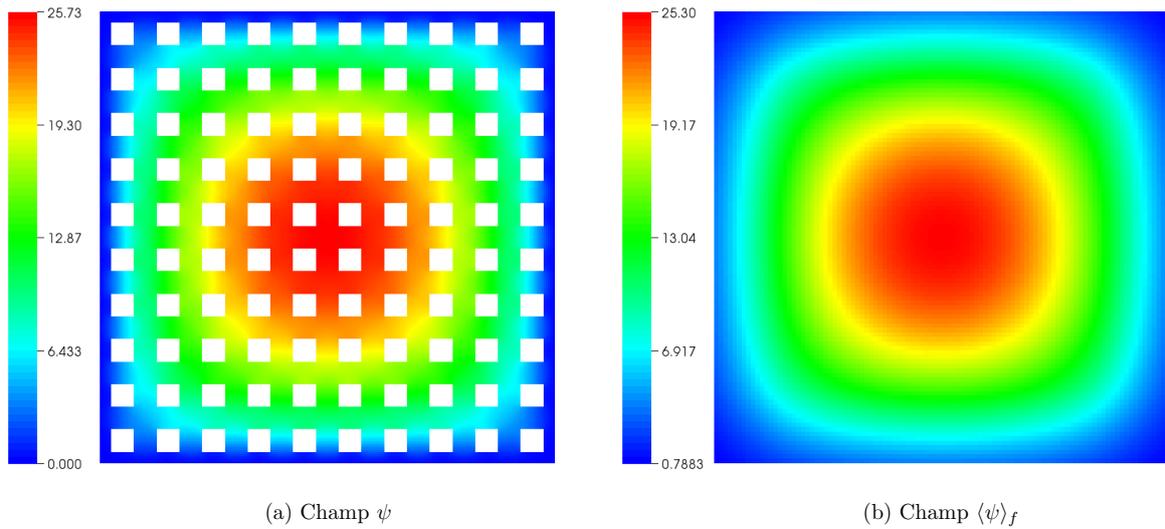


FIG. 2.10 – Solution simulée du problème (2.44) (à gauche), et moyenne volumique intrinsèque de cette solution calculée avec le filtre m_2 (à droite).

la convolution. L'écart entre les moyennes X_0 et X_m est alors important. Si, au contraire, le maillage de post-traitement est plus raffiné que le maillage microscopique (par exemple, 400×400 mailles), il y a un effet d'amplification du « bruit » induit par le calcul des dérivées, et la précision des moyennes X_m est dégradée. Enfin, si les deux maillages ont la même finesse – soit pour $m = 200$, le maillage de post-traitement coïncidant avec le maillage microscopique hormis dans les zones solides qui, à l'échelle microscopique, ne sont pas maillées –, alors la précision des moyennes X_m est très bonne.

En réalité, la validité des conclusions données ici dépend de la configuration étudiée, de la finesse du maillage microscopique et du maillage de filtrage ainsi que de leur nature structurée ou non structurée. D'une façon générale, l'imprécision sur le calcul numérique des dérivées provient d'une part des interpolations du maillage microscopique vers le maillage de post-traitement, et d'autre part de la méthode de calcul du produit de convolution. Pour un maillage structuré avec des mailles carrées, ces deux effets sont limités. En revanche, dans des configurations moins favorables où un tel maillage n'est pas possible, l'imprécision des interpolations est augmentée et le volume de prise de moyenne centré en tout point contient généralement un nombre non entier de mailles. D'autres tests numériques non présentés ici indiquent que ces effets de bruit sont aggravés par un raffinement du maillage de post-traitement, et demeurent très importants même si celui-ci est identique au maillage microscopique. Cela confirme que les relations (2.43) sont très souvent inexploitable en pratique, hormis pour $p = 0$.

2.2.3 Construction des gradients de champs moyens

On sait désormais passer des moyennes dans les sous-canaux, aux moyennes dans les cellules périodiques, données par la prise de moyenne volumique. La question se pose alors de la détermination des gradients moyens par cellule unitaire, dont la nécessité apparaîtra au chapitre 3. Les moyennes volumiques des champs microscopiques étant continues et dérivables dès lors que le filtre est d'ordre un au moins, le calcul numérique de leur gradient ne pose pas de difficulté si ces moyennes sont connues en tout point. En revanche, le gradient de $\langle \psi \rangle_0$ (moyenne volumique de ψ avec le filtre m_0) n'existe théoriquement pas puisque ce champ n'est pas dérivable (voir 1.2.1). Du point de vue numérique discret, cela

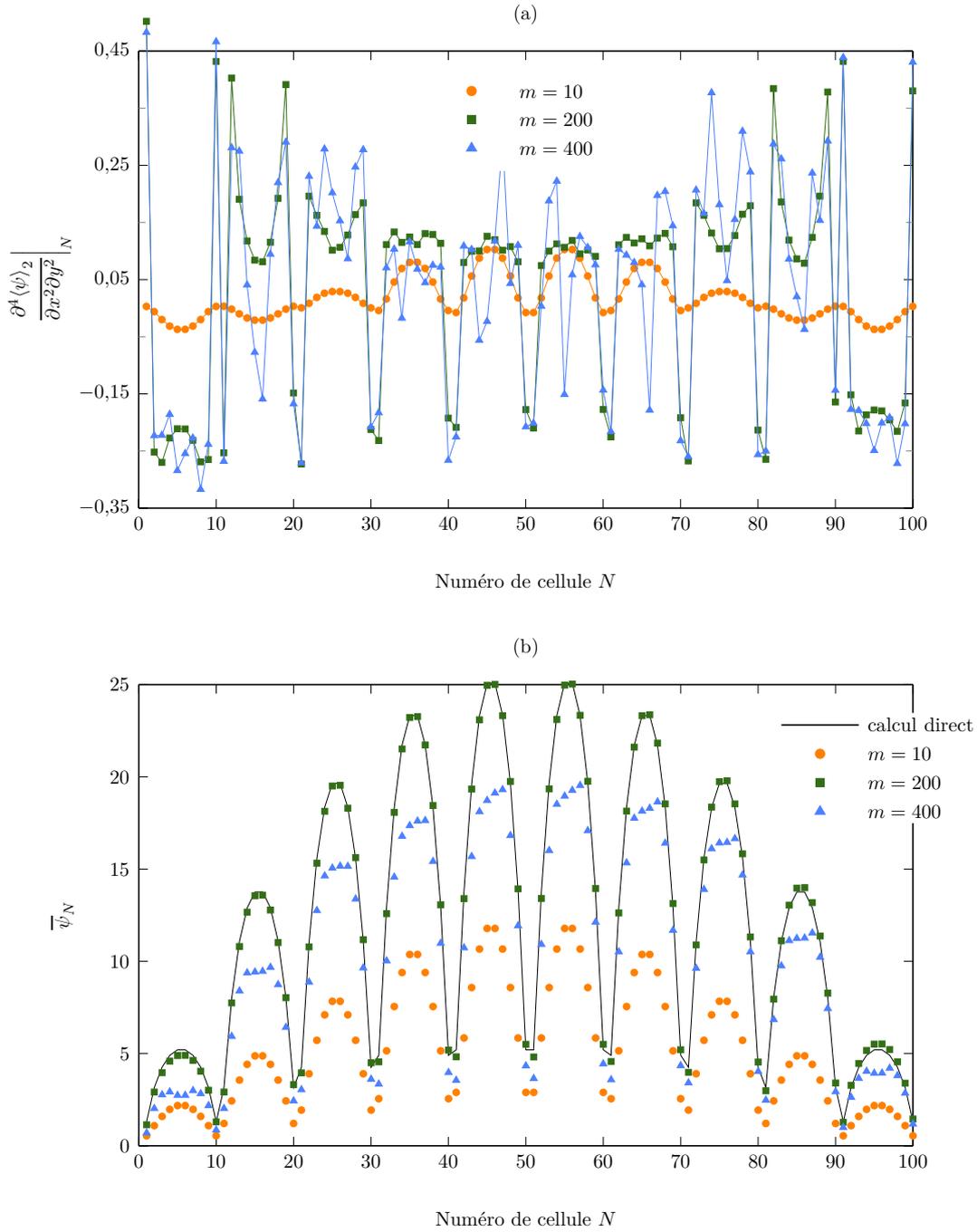


FIG. 2.11 – (a) Dérivées des moyennes volumiques de ψ calculées sur le filtre m_2 , et (b) moyennes cellulaires, pour différents maillages de post-traitement de $m \times m$ mailles carrées.

se traduit par des oscillations importantes lorsque l'on tente de calculer ce gradient. Pour illustrer ce fait, reprenons l'exemple numérique (2.44). Par prise de moyenne volumique, le problème macroscopique correspondant s'écrit

$$\begin{cases} \Lambda_{\text{eff}} \Delta \langle \psi \rangle + \mathcal{P} = 0 & \text{dans le domaine,} \\ \langle \psi \rangle = 0 & \text{sur les frontières externes,} \end{cases} \quad (2.45)$$

où $\mathcal{P} = 2$ (les carrés sont de côté 0,5) et où la valeur du coefficient effectif, déterminée

comme en 1.2.3, est $\Lambda_{\text{eff}} = 0,585$. La condition aux limites de type « Dirichlet homogène » choisie ici pour les bords externes du milieu n'affecte pas trop les gradients, au moins à partir d'une certaine distance des bords. Ce problème est résolu numériquement sur un maillage de 200×200 éléments, et le gradient de la solution est calculé au centre de chaque cellule. Les valeurs obtenues sont comparées au gradient du produit de convolution $\langle \psi \rangle_p$ évalué numériquement sur le même maillage (FIG. 2.12). Dans le cas $p = 1$, on retrouve des valeurs identiques (sauf sur les cellules de bord) à celles issues de la résolution du problème macroscopique (2.45). Dans le cas $p = 0$, les oscillations apparaissent nettement mais sont relativement limitées du fait de la régularité du maillage. En maillage non structuré, ce bruit serait largement amplifié.

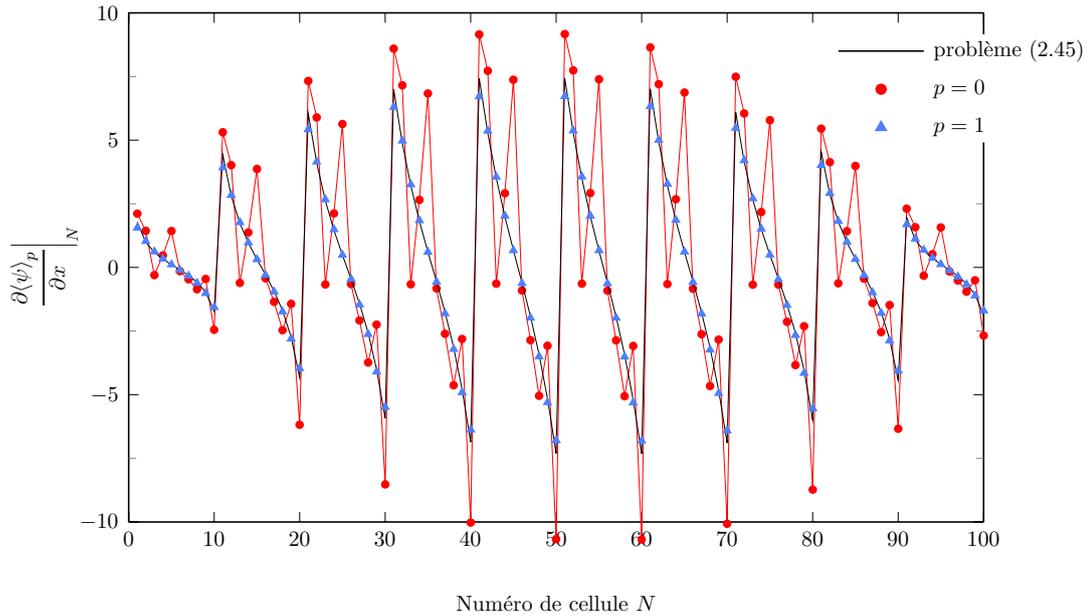


FIG. 2.12 – Gradients moyens évalués par résolution du modèle macroscopique (2.45) et par filtrage de la solution du problème macroscopique (2.44).

Le filtre boîte ne permet donc pas de déterminer numériquement un champ de gradient de $\langle \psi \rangle$ ayant un sens ; en revanche, on peut construire un gradient discrétisé sur le macromaillage des cellules périodiques, la taille importante des mailles induisant, comme on l'a déjà observé sur la FIG. 2.11, un lissage des valeurs. De façon équivalente, on peut également construire un gradient de température à partir des valeurs discrètes par sous-canal. Dans les calculs du gradient, on s'en tiendra ici aux sous-canaux internes, sachant que la démarche est similaire pour les sous-canaux périphériques. Le gradient d'une quantité « sous-canal » $\widehat{\psi}$, évalué au point $N_{i \rightarrow j}^k$ correspondant au centre de la face entre le sous-canal i et le sous-canal j (FIG. 2.13), et projeté selon l'axe passant par les centres des sous-canaux i et j et orienté dans le sens $i \rightarrow j$, s'écrit

$$\left. \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial r} \right|_{i \rightarrow j}^k = \frac{\widehat{\psi}_j^k - \widehat{\psi}_i^k}{d_{ij}}, \quad (2.46)$$

où $d_{ij} = \sqrt{3}d/3$ est la distance entre les centres de gravité des sous-canaux i et j . On peut déterminer de façon approchée le gradient au centre de la cellule périodique C_N^k en supposant qu'il est égal à la moyenne des gradients aux points $N_{i \rightarrow j}$. Ses projections selon les axes x et y de la FIG. 2.13 sont alors

$$\frac{\partial \langle \psi \rangle}{\partial x} \Big|_N^k \simeq \frac{1}{6} \frac{\sqrt{3}}{2} \left[\frac{\widehat{\psi}_{N_1}^k - \widehat{\psi}_{N_6}^k}{d_{ij}} + \frac{\widehat{\psi}_{N_2}^k - \widehat{\psi}_{N_1}^k}{d_{ij}} - \frac{\widehat{\psi}_{N_4}^k - \widehat{\psi}_{N_3}^k}{d_{ij}} - \frac{\widehat{\psi}_{N_5}^k - \widehat{\psi}_{N_4}^k}{d_{ij}} \right] \quad (2.47)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \psi \rangle}{\partial y} \Big|_N^k \simeq & \frac{1}{6} \left[\frac{1}{2} \frac{\widehat{\psi}_{N_1}^k - \widehat{\psi}_{N_6}^k}{d_{ij}} - \frac{1}{2} \frac{\widehat{\psi}_{N_2}^k - \widehat{\psi}_{N_1}^k}{d_{ij}} - \frac{\widehat{\psi}_{N_3}^k - \widehat{\psi}_{N_2}^k}{d_{ij}} - \frac{1}{2} \frac{\widehat{\psi}_{N_4}^k - \widehat{\psi}_{N_3}^k}{d_{ij}} \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \frac{\widehat{\psi}_{N_5}^k - \widehat{\psi}_{N_4}^k}{d_{ij}} + \frac{\widehat{\psi}_{N_6}^k - \widehat{\psi}_{N_5}^k}{d_{ij}} \right]. \end{aligned} \quad (2.48)$$

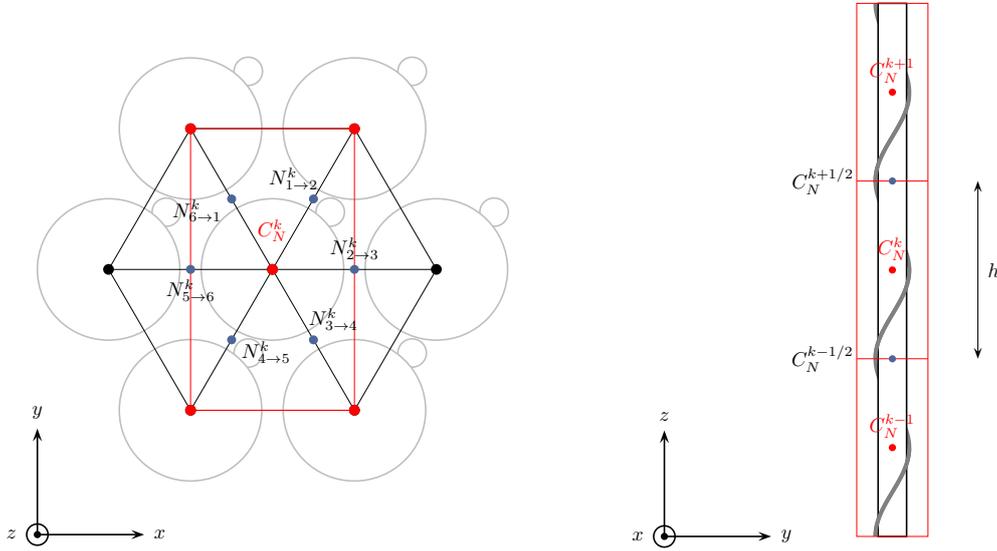


FIG. 2.13 – Paramétrisation des cellules et sous-canaux pour la construction des gradients moyens.

Dans la direction axiale, on calcule le gradient de $\langle \psi \rangle$ comme

$$\frac{\partial \langle \psi \rangle}{\partial z} \Big|_N^k = \frac{\langle \psi \rangle_N^{k+1/2} - \langle \psi \rangle_N^{k-1/2}}{h}. \quad (2.49)$$

Dans les codes de calcul intégrant la modélisation « sous-canal », un sous-canal est généralement découpé en plusieurs éléments dans la direction axiale, en particulier lorsque le profil de puissance axiale n'est pas uniforme. Dans ce cas, on peut alors avoir une estimation plus précise du gradient axial de $\langle \psi \rangle$. Mais si ce dernier est constant, le pas de la discrétisation n'a pas d'importance. On suppose que les valeurs aux faces $k \pm 1/2$ sont les moyennes des valeurs aux centres, d'où

$$\frac{\partial \langle \psi \rangle}{\partial z} \Big|_N^k = \frac{\langle \psi \rangle_N^{k+1} - \langle \psi \rangle_N^{k-1}}{2h}, \quad (2.50)$$

puis, en utilisant (2.29),

$$\left. \frac{\partial \langle \psi \rangle}{\partial z} \right|_N^k = \frac{1}{8h} \sum_{i=1}^6 \left(\widehat{\psi}_{N_i}^{k+1} - \widehat{\psi}_{N_i}^{k-1} \right). \quad (2.51)$$

En rassemblant et simplifiant les relations (2.47), (2.48) et (2.51), on a finalement, dans le repère cartésien $(Oxyz)$,

$$\vec{\nabla} \langle \psi \rangle \Big|_N^k = \begin{pmatrix} \frac{\widehat{\psi}_{N_2}^k + \widehat{\psi}_{N_3}^k - \widehat{\psi}_{N_5}^k - \widehat{\psi}_{N_6}^k}{4d} \\ \frac{2\widehat{\psi}_{N_1}^k + \widehat{\psi}_{N_2}^k - \widehat{\psi}_{N_3}^k - 2\widehat{\psi}_{N_4}^k - \widehat{\psi}_{N_5}^k + \widehat{\psi}_{N_6}^k}{4\sqrt{3}d} \\ \frac{1}{8h} \sum_{i=1}^6 \left(\widehat{\psi}_{N_i}^{k+1} - \widehat{\psi}_{N_i}^{k-1} \right) \end{pmatrix}. \quad (2.52)$$

2.2.4 Bilan

Une correspondance entre les moyennes volumiques et les moyennes par sous-canal sur lesquelles reposent les approches « métier » a été établie. Cette correspondance, synthétisée par la FIG. 2.14 se fait par l'intermédiaire des moyennes cellulaires :

- (i) les moyennes volumiques évaluées en des points imposés par la géométrie du milieu (c'est-à-dire aux centres ou aux nœuds des cellules unitaires) sont reliées aux moyennes cellulaires par un système linéaire où les coefficients dépendent du filtre choisi et peuvent être calculés de façon exacte pour la famille de filtres m_p considérée ;
- (ii) les moyennes par sous-canal peuvent être interpolées sur le macromailage des cellules unitaires.

L'application numérique de l'étape (i) peut conduire à un bruit numérique important, en fonction de la finesse des maillages utilisés et de leur caractère structuré ou non structuré. Enfin, on peut construire un gradient moyen par cellule dans un repère cartésien global $(Oxyz)$ à l'aide soit des moyennes volumiques, soit des moyennes par sous-canal. Dans ce dernier cas, on définit d'abord une valeur de gradient par face latérale d'un sous-canal, puis on en calcule la moyenne sur le groupement de six sous-canaux associés à une cellule unitaire.

2.3 Conclusion

Dans ce chapitre, on a introduit deux nouveaux types de moyennes, la moyenne « sous-canal » et la moyenne cellulaire. Contrairement aux moyennes volumiques définies au chapitre 1, ces moyennes ne sont pas définies de façon continue dans le milieu mais prennent une valeur par élément du macromailage constitué des sous-canaux pour l'une, et des cellules unitaires pour l'autre. Les moyennes cellulaires sont facilement rattachables au formalisme de prise de moyenne volumique dans les milieux poreux, alors que les moyennes par sous-canal ont été spécifiquement introduites dans le contexte de l'étude thermohydraulique des assemblages de réacteur à aiguilles et fils espaceurs (bien que leur concept puisse être étendu à d'autres types d'échangeurs de chaleur). À l'issue de ces deux premiers chapitres, on dispose donc de deux méthodes de modélisation de l'échelle macroscopique :

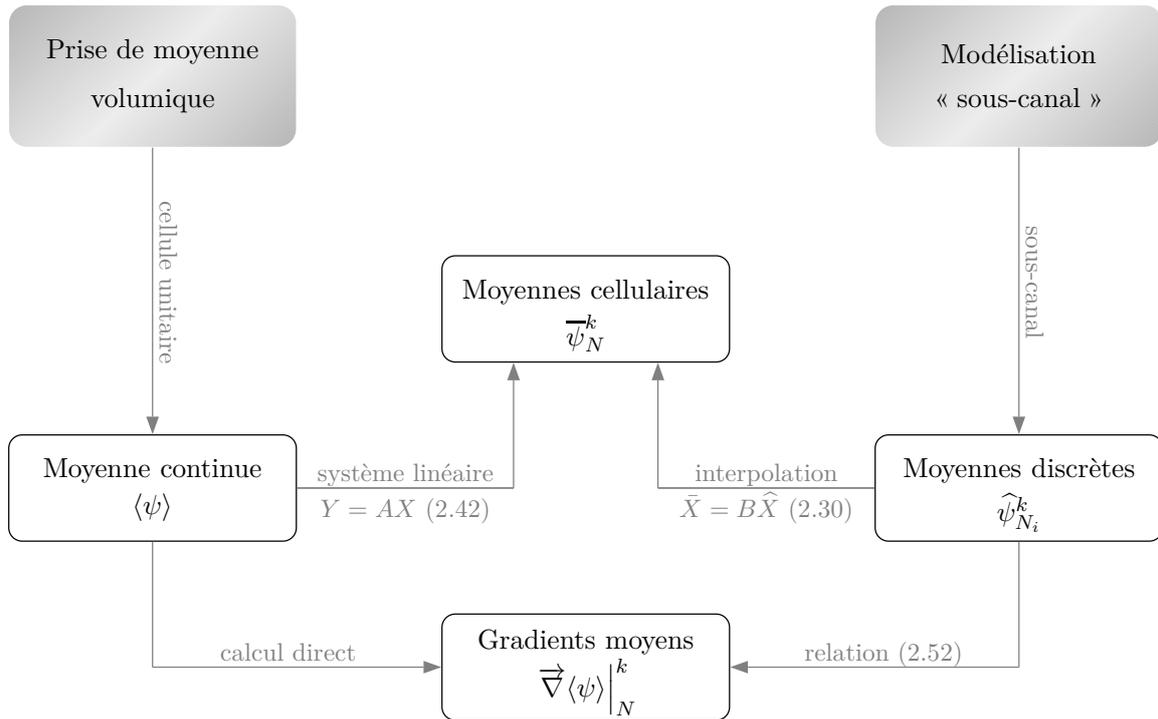


FIG. 2.14 – Schéma de correspondance entre l'approche par prise de moyenne volumique et l'approche « sous-canal ».

- (i) la prise de moyenne volumique, qui peut être appliquée soit aux équations microscopiques (des problèmes de fermeture apparaissent alors), soit directement aux champs microscopiques (à condition de connaître ces derniers) ;
- (ii) la modélisation « sous-canal », propre aux assemblages de réacteur à aiguilles et fils espaceurs, qui sera exploitée au chapitre 4.

Les liens simples établis entre ces types de moyennes montrent qu'elles apportent une information équivalente, bien que différente, sur les champs moyens. Cette information, et plus précisément les moyennes cellulaires de vitesse et de température ainsi que les gradients de température moyenne par cellule, sera nécessaire dans la méthodologie de reconstruction des échelles microscopiques développée au chapitre 3. Selon le type d'application envisagée et les capacités de calcul numérique disponibles, ces informations proviendront soit d'une approche de type « sous-canal », soit de la prise de moyenne volumique.

Chapitre 3

Retour à l'échelle locale à partir d'une description macroscopique

Dans ce chapitre central de la thèse, il s'agit de répondre à la problématique du changement d'échelle au sens « downscaling », sous l'angle de la modélisation numérique. Plus précisément, nous développons une approche à la fois théorique et numérique dans le but de reconstruire les champs microscopiques dans une partie d'un milieu ou système poreux, en utilisant la description macroscopique de ces champs supposée déterminée par l'une des méthodes de changement d'échelle des chapitres 1 et 2. Le chapitre est divisé en deux parties : dans la première, on détaille les aspects théoriques proposés pour ce type de couplage ; dans la seconde, on propose des applications numériques à des exemples académiques visant à se rapprocher progressivement d'une application « assemblage », à laquelle sera consacré le chapitre 4. Un nombre important de considérations apportées ici ont une portée relativement générique et trouveront une utilisation potentielle pour des écoulements autres que ceux se développant dans les assemblages de RNR-Na.

3.1 Remarques et développements préliminaires

Soit Ω un milieu poreux périodique délimité par une frontière externe Γ_{ext} , contenant une phase fluide Ω_f et une phase solide (en réalité, on ne considérera pas d'équation de conduction de la température à l'intérieur du solide). Le caractère périodique de ce milieu signifie qu'il est basé sur une cellule unitaire qui caractérise sa microstructure. Un champ ψ_0 défini dans le fluide, à l'échelle microscopique, est régi par une équation différentielle assortie de conditions aux limites sur les interfaces et sur la frontière avec le milieu extérieur, du type

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{L}(\psi_0) = 0 \quad \text{dans } \Omega_f, \\ \mathfrak{B}_i(\psi_0) = 0 \quad \text{sur } \Sigma_{\text{fs}}, \\ \mathfrak{B}_e(\psi_0) = 0 \quad \text{sur } \Sigma_{\text{ext}}, \end{array} \right. \quad (3.1)$$

où \mathfrak{L} est un opérateur différentiel traduisant les phénomènes de diffusion, de convection ou encore, éventuellement, de réaction, et \mathfrak{B}_i et \mathfrak{B}_e sont des opérateurs différentiels décrivant les conditions aux limites. Il peut s'agir, par exemple, de conditions de *Dirichlet* si elles portent sur la valeur de la solution ψ_0 , ou de *Neumann* si elles portent sur ses dérivées. Si la solution ψ_0 de (3.1) peut théoriquement être approchée numériquement, par discrétisation des opérateurs dans Ω_f à l'aide de schémas numériques, le temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une solution convergée risque, en pratique, d'être rédhibitoire, principalement en raison du grand nombre de points de discrétisation indispensable

pour une approximation précise de la solution. Ceci est particulièrement vrai pour les applications « assemblage » qui nous intéressent *in fine*. À défaut de pouvoir effectuer cette résolution numérique, on détermine alors l'évolution moyenne du champ ψ_0 dans le milieu. Rappelons que les méthodes à notre disposition sont

- (i) la résolution numérique d'un modèle macroscopique établi par une méthode de changement d'échelle. *A priori*, cette approche est beaucoup moins coûteuse en temps de calcul que la résolution numérique du problème (3.1), du fait du faible nombre de points de discrétisation nécessaire en comparaison¹. Néanmoins, la complexité des fermetures et de la détermination des coefficients effectifs dans le cadre d'équations non linéaires peut s'avérer problématique ;
- (ii) le calcul d'une valeur moyenne de ψ_0 par volume de contrôle, accessible uniquement pour les applications concernant les assemblages de réacteurs à aiguilles et fils espacés, à l'aide de l'approche « métier » présentée au chapitre 2, où les volumes de contrôle sont les sous-canaux.

Dans les premières applications numériques visant à valider le concept du retour à l'échelle microscopique, on emploiera une méthode dérivée de (i) où le problème (3.1) sera résolu numériquement, puis filtré à l'aide de l'opérateur de convolution. En effet, on étudiera des cas dans lesquels la résolution numérique fine est réalisable en un temps de calcul modeste ; la solution fine ψ_0 constituera la solution de référence qui permettra une comparaison avec la solution obtenue par la méthode de reconstruction. Mais naturellement, cette façon d'aborder les choses ne peut être intéressante que dans un objectif de validation sur des configurations modèles. Par construction, le champ macroscopique $\langle \psi_0 \rangle$, $\bar{\psi}_0$ ou $\hat{\psi}_0$ comporte moins d'information que le champ microscopique ψ_0 , puisqu'il ne contient pas les petites échelles spatiales. Pour des applications pratiques, ces éléments motivent le souhait de reconstruire le champ ψ_0 , non pas dans tout le domaine, puisqu'il cela reviendrait à résoudre finement le problème (3.1), mais localement, dans une partie de Ω_f . Ce domaine, ainsi que les champs qui y seront reconstruits, seront représentés dans la suite par un exposant « étoile ». Ainsi, le champ ψ^* satisfait dans Ω_f^* la même équation différentielle que ψ_0 , c'est-à-dire

$$\mathfrak{L}(\psi^*) = 0 \text{ dans } \Omega_f^*, \quad (3.2)$$

ainsi que la même condition aux limites sur les interfaces :

$$\mathfrak{B}_i(\psi^*) = 0 \text{ sur } \Sigma_{fs}. \quad (3.3)$$

La formulation d'un problème résoluble et bien posé dans Ω_f^* intervient après résolution de deux sous-problèmes :

- (i) Le premier sous-problème est celui des conditions à appliquer à ψ^* aux limites de Ω_f^* . Appellons Σ_a^* la frontière *artificielle* (car non physique) entre Ω_f^* et $\Omega_f \setminus \Omega_f^*$. Comme on souhaite que ψ^* soit très proche de ψ_0 , ces conditions doivent être au mieux telles que ψ^* soit la restriction à Ω_f^* de ψ_0 , ce que l'on écrira :

$$\psi^* = \psi_0|_{\Omega_f^*}. \quad (3.4)$$

1. En effet, le nombre de points de discrétisation doit être d'autant plus élevé que les échelles spatiales sont petites, l'exemple typique étant celui de la *simulation numérique directe*. Or, par construction, les échelles de variation des champs macroscopiques sont « grandes ».

3.1 Remarques et développements préliminaires

Des conditions aux limites entraînant (3.4) sont dites *transparentes*. Prenons un exemple élémentaire : le problème

$$\begin{cases} \psi_0''(x) = 0, \\ \psi_0(0) = 0, \\ \psi_0(1) = 1, \end{cases} \quad (3.5)$$

admet pour solution $\psi_0(x) = x$ sur $\Omega_f = [0, 1]$. Les conditions aux limites $\psi^*(a) = a$ et $\psi^*(b) = b$, où $0 \leq a < b \leq 1$, sur $\Sigma_a^* = \{a, b\}$ sont alors des conditions transparentes pour le problème restreint sur $\Omega_f^* = [a, b]$, dans la mesure où la solution de

$$\begin{cases} \psi^{*''}(x) = 0, \\ \psi^*(a) = a, \\ \psi^*(b) = b, \end{cases} \quad (3.6)$$

est la restriction à $[a, b]$ de la solution de (3.5) :

$$\psi^* = \psi_0|_{[a,b]}. \quad (3.7)$$

Étant donné la complexité des équations du problème, il n'est pas concevable en général de déterminer de façon exacte les conditions sur Σ_a^* qui satisfont la propriété (3.4), à partir de la seule connaissance de $\langle \psi \rangle$, $\bar{\psi}$ ou $\hat{\psi}$ dans le domaine Ω_f . On doit donc approcher ces conditions en se basant sur une analyse qualitative *a priori* de la nature du champ ψ_0 . Or, le milieu étant périodique, on peut faire l'hypothèse que cette propriété se transmet au champ ψ_0 ou à sa déviation spatiale $\tilde{\psi}_0$, la période correspondant alors à une cellule unitaire. Ainsi, une restriction de la méthode apparaît : le domaine de reconstruction Ω_f^* ne peut pas être quelconque ; il doit s'agir d'une cellule unitaire, ou d'un « multiple » d'une cellule unitaire. Il est donc imposé par la topologie du milieu. Reprenons les notations de Brenner [24] dans sa description des milieux poreux périodiques. Le *vecteur de périodicité* associé à une cellule unitaire (FIG. 3.1) est

$$\vec{R}_n = n_1 \ell_x \vec{e}_x + n_2 \ell_y \vec{e}_y + n_3 \ell_z \vec{e}_z, \quad (3.8)$$

avec $\forall i \in \{1, 2, 3\} : n_i \in \{-1, 0, 1\}$.

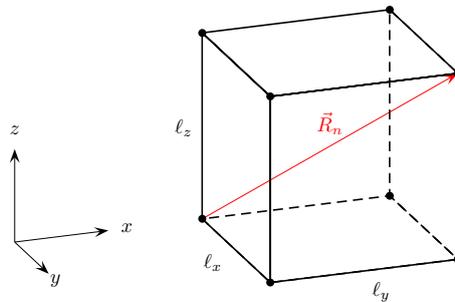


FIG. 3.1 – Une cellule unitaire et un vecteur \vec{R}_n , avec $n = (1, 1, 1)$.

Dans une cellule, on résoudra donc un problème du type

$$\begin{cases} \mathfrak{L}(\psi^*) = 0 & \text{dans } \Omega_f^*, \\ \mathfrak{B}_i(\psi^*) = 0 & \text{sur } \Sigma_{fs}, \\ \psi^*(\vec{x}) = \psi^*(\vec{x} + \vec{R}_n), \end{cases} \quad (3.9)$$

si la périodicité est portée par ψ^* , et

$$\begin{cases} \mathfrak{L}'(\tilde{\psi}^*) = 0 & \text{dans } \Omega_f^*, \\ \mathfrak{B}'_i(\tilde{\psi}^*) = 0 & \text{sur } \Sigma_{fs}, \\ \tilde{\psi}^*(\vec{x}) = \tilde{\psi}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), \end{cases} \quad (3.10)$$

si la périodicité est portée par $\tilde{\psi}^*$. On reviendra en 3.2.1 sur le choix de résoudre (3.9) ou (3.10). Dans le cas où l'on formule le problème en terme de déviation spatiale, il faut déterminer les opérateurs \mathfrak{L}' et \mathfrak{B}'_i . Dans un premier temps, on écrit la décomposition de Gray

$$\psi^* = \langle \psi^* \rangle_f + \tilde{\psi}^*. \quad (3.11)$$

Supposons à simple titre illustratif que les opérateurs \mathfrak{L} et \mathfrak{B}_i soient linéaires, alors

$$\mathfrak{L}(\psi^*) = \mathfrak{L}(\langle \psi^* \rangle_f) + \mathfrak{L}(\tilde{\psi}^*), \quad (3.12)$$

d'où

$$\mathfrak{L}'(\tilde{\psi}^*) = \mathfrak{L}(\langle \psi^* \rangle_f) + \mathfrak{L}(\tilde{\psi}^*). \quad (3.13)$$

De la même façon, on a

$$\mathfrak{B}'_i(\tilde{\psi}^*) = \mathfrak{B}_i(\langle \psi^* \rangle_f) + \mathfrak{B}_i(\tilde{\psi}^*). \quad (3.14)$$

Le problème (3.10) fait donc apparaître naturellement le champ macroscopique $\langle \psi^* \rangle_f$. Nous verrons en 3.2.1 comment exprimer $\mathfrak{L}(\langle \psi^* \rangle_f)$ en fonction des données macroscopiques à notre disposition, qu'il s'agisse des moyennes volumiques ou cellulaires et de leurs gradients. D'une façon générale, la validité de l'hypothèse de périodicité (que ce soit pour le champ de vitesse, le champ pression, le champ de température, ou leurs déviations spatiales) dépend de l'écoulement, de la géométrie, des bords externes et de la séparation d'échelles. Pour des champs suffisamment homogènes à l'échelle macroscopique, cette hypothèse de périodicité est admissible; en revanche, ce n'est plus le cas dans des régimes « accidentels », c'est-à-dire lorsque les champs à l'échelle microscopique subissent localement des gradients importants résultant de perturbations locales (FIG. 3.2). Dans le chapitre 5, nous développons quelques éléments de réflexion pour traiter ce type de situation.

- (ii) Le second sous-problème à envisager est celui du caractère bien posé des problèmes (3.9) ou (3.10). Potentiellement, cette propriété est liée au type de conditions aux limites \mathfrak{B}_i sur les interfaces internes. Ainsi, en reprenant notre exemple élémentaire avec $\Omega_f^* = [a, b]$ et en imposant une condition de Dirichlet en c tel que $a < c < b$, le problème

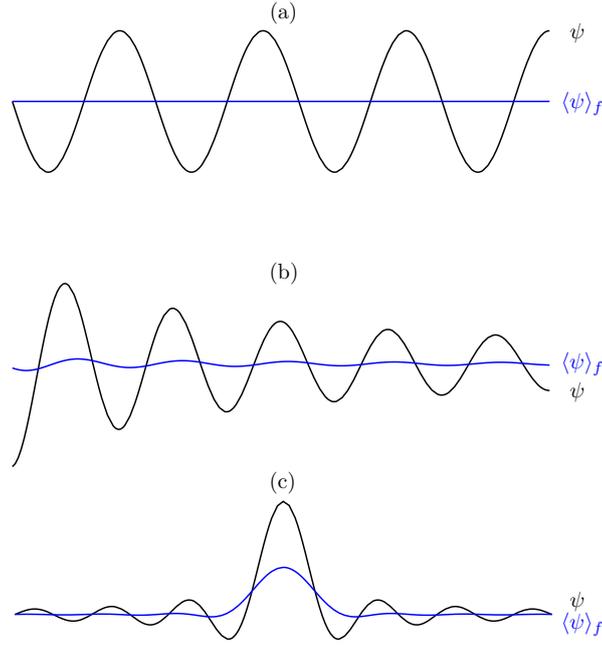


FIG. 3.2 – Représentation qualitative d'un champ ψ : (a) ψ est périodique, (b) ψ est « pseudo-périodique », (c) ψ est non périodique au voisinage de la perturbation.

$$\begin{cases} \psi^{*''}(x) &= 1, \\ \psi^*(c) &= d, \\ \psi^*(a) &= \psi^*(b), \end{cases} \quad (3.15)$$

admet sur $[a, b]$ une solution unique dont l'expression est

$$\psi^*(x) = \frac{x^2 - c^2}{2} + \frac{a + b}{2}(c - x) + d. \quad (3.16)$$

Pour une condition de Neumann en c , soit

$$\begin{cases} \psi^{*''}(x) &= 1, \\ \psi^{*'}(c) &= d, \\ \psi^*(a) &= \psi^*(b), \end{cases} \quad (3.17)$$

il existe deux cas : si $d \neq c - (a + b)/2$, alors (3.17) n'admet pas de solution ; si $d = c - (a + b)/2$, alors (3.17) admet une infinité de solutions décalées d'une constante K :

$$\psi^*(x) = \frac{x^2}{2} - \frac{a + b}{2}x + K. \quad (3.18)$$

Cependant, on recherche dans Ω_f^* un champ ψ^* qui soit non seulement périodique et satisfasse la même équation d'évolution que ψ_0 , mais dont la moyenne $\langle \psi^* \rangle$ (ou $\bar{\psi}^*$, ou $\hat{\psi}^*$) doit en plus être égale à $\langle \psi_0 \rangle$ (ou $\bar{\psi}_0$, ou $\hat{\psi}_0$), déterminée par ailleurs. Cette dernière contrainte constitue un critère supplémentaire sur la solution, qui permet d'en assurer l'existence et l'unicité. Par conséquent, en ajoutant au problème (3.17) l'équation

$$\frac{1}{b - a} \int_a^b \psi^*(x) dx = \bar{\psi}_0, \quad (3.19)$$

l'indétermination de la constante K est levée et la solution devient unique pour $d \neq c - (a + b)/2$. Numériquement, la contrainte (3.19) sera prise en compte à l'aide d'une méthode de pénalisation qui sera développée en 3.2.2.

Ces premières réflexions permettent de cerner les enjeux de la méthodologie de reconstruction : nous devons définir un problème périodique doté de conditions aux limites intelligentes, c'est-à-dire garantissant à la fois une solution unique, mais aussi une solution dont la moyenne correspond aux données d'entrée macroscopiques (préalablement déterminées) du problème de reconstruction.

3.2 Étapes détaillées de la méthodologie

3.2.1 Problème de reconstruction dans une cellule

On considère désormais un problème de Navier-Stokes avec température. Dans le milieu poreux, les champs de vitesse, de pression et de température en régime stationnaire sont régis par

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_0 = 0 & \text{équation de continuité,} & (3.20a) \\ \rho(\vec{u}_0 \cdot \vec{\nabla})\vec{u}_0 = -\vec{\nabla}p_0 + \mu\Delta\vec{u}_0 + \vec{G} & \text{équation de Navier-Stokes,} & (3.20b) \\ \rho C_p(\vec{u}_0 \cdot \vec{\nabla})\theta_0 = \lambda\Delta\theta_0 & \text{équation de l'énergie,} & (3.20c) \end{cases}$$

où \vec{G} est une éventuelle force volumique (par exemple pour la gravité, $\vec{G} = \rho\vec{g}$). Les restrictions de la vitesse, de la pression et de la température à une cellule unitaire quelconque Ω_f^* sont régies par les mêmes équations :

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}^* = 0, & (3.21a) \\ \rho(\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla})\vec{u}^* = -\vec{\nabla}p^* + \mu\Delta\vec{u}^* + \vec{G}, & (3.21b) \\ \rho C_p(\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla})\theta^* = \lambda\Delta\theta^*. & (3.21c) \end{cases}$$

Dans la suite, on appellera ce système le *problème de cellule*. Supposons que soient prescrites les conditions aux limites

$$\begin{cases} \vec{u}_0 = \vec{0} & \text{sur } \Sigma_{fs}, & (3.22a) \\ \theta_0 = \theta_{fs} \text{ ou } \lambda\vec{\nabla}\theta_0 \cdot \vec{n} = q & \text{sur } \Sigma_{fs}, & (3.22b) \end{cases}$$

où \vec{n} est la normale à l'interface dirigée vers l'extérieur du domaine fluide, alors \vec{u}^* et θ^* satisfont ces mêmes conditions sur les interfaces contenues dans la cellule unitaire. Évaluons la validité de l'hypothèse de périodicité des champs de vitesse, de pression et de température. Sous réserve d'une certaine « homogénéité » de l'écoulement (liée, par exemple, à l'uniformité du gradient de pression moyen ou du terme source \vec{G}), alors le champ de vitesse au sein du milieu peut être considéré comme périodique avec la même période que celle de la microstructure :

$$\vec{u}_0(\vec{x}) = \vec{u}_0(x + \vec{R}_n). \quad (3.23)$$

Autrement dit, le champ de vitesse est identique dans chaque cellule unitaire. Cette propriété implique de façon évidente que le champ de vitesse moyen $\langle \vec{u}_0 \rangle$ est constant à la fois en norme et en direction au sein du milieu, comme le fait remarquer Brenner [24]. En effet, le produit de convolution d'un champ périodique par un filtre dont le support correspond à la période du champ convolué est constant. Par conséquent, si la vitesse moyenne $\langle \vec{u}_0 \rangle$ n'est pas constante dans la cellule unitaire, alors la propriété de périodicité (3.23) n'est pas valide. Une illustration de ce cas est donnée dans l'application 3.3.2, où la source \vec{G} est prise non uniforme¹. Dans les applications « assemblage », l'écoulement moyen peut être considéré comme axial et d'intensité constante – c'est d'ailleurs ainsi qu'il est modélisé dans l'approche « sous-canal » – à l'exception des régions de proche paroi où il possède des composantes radiales. D'une façon générale, l'hypothèse (3.23) peut être remise en question près d'un bord, comme le montrera l'application 3.3.1. La question de la reconstruction des champs microscopiques au voisinage des bords du milieu sera abordée au chapitre 5. Le champ de pression n'est généralement pas périodique au sein du milieu, puisque cela impliquerait une pression moyenne $\langle p \rangle_f$ constante, donc un gradient de pression moyen $\vec{\nabla} \langle p \rangle_f$ nul. En l'absence de toute autre force volumique, il n'y aurait alors pas de moteur de l'écoulement et la vitesse du fluide resterait nulle. On se ramène à une propriété de périodicité en décomposant la pression comme

$$p^* = \langle p^* \rangle_f + \tilde{p}^*, \quad (3.24)$$

et en supposant que la déviation \tilde{p}^* est périodique. Ainsi, le problème hydrodynamique à l'échelle microscopique dans une cellule est défini par

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}^* = 0 & \text{dans } \Omega_f^*, \end{array} \right. \quad (3.25a)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho(\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla})\vec{u}^* = -\vec{\nabla}\tilde{p}^* + \mu\Delta\vec{u}^* - \vec{\nabla}\langle p^* \rangle_f & \text{dans } \Omega_f^*, \end{array} \right. \quad (3.25b)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{u}^* = \vec{0} & \text{sur } \Sigma_{fs}, \end{array} \right. \quad (3.25c)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{u}^*(\vec{x}) = \vec{u}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), & \end{array} \right. \quad (3.25d)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tilde{p}^*(\vec{x}) = \tilde{p}^*(\vec{x} + \vec{R}_n). & \end{array} \right. \quad (3.25e)$$

Par l'intermédiaire du gradient de pression moyen $-\vec{\nabla}\langle p^* \rangle_f$, on pourra assurer que la perte de charge (et donc le débit) dans la cellule est bien celle recherchée, grâce à une technique de pénalisation que nous détaillons en 3.2.2.

S'agissant de la température, on considérera uniquement des conditions de Neumann, c'est-à-dire où un flux thermique est imposé sur les interfaces fluide/solide. Ce flux produit une élévation de la température moyenne au sein même des cellules unitaires, puisque le fluide reçoit de l'énergie en traversant ces dernières². De façon analogue à la pression, on décompose alors le champ de température :

1. En dehors de cette application, la force motrice \vec{G} sera considérée comme nulle. En particulier, on ne prendra pas en compte la gravité.

2. Nous n'étudierons pas de cas particulier de conditions de Neumann telles que la puissance thermique délivrée au fluide par cellule soit nulle, ces situations n'étant pas réalistes dans les applications « assemblage » visées.

$$\theta^* = \langle \theta^* \rangle_f + \tilde{\theta}^*, \quad (3.26)$$

où la déviation $\tilde{\theta}^*$ est supposée périodique. Lorsque l'on simule numériquement un écoulement dans un canal chauffé par les parois, il est d'ailleurs habituel (voir par exemple Kawamura *et al.* [61]) d'imposer une condition de périodicité de la température retranchée de l'accroissement de température moyen le long du canal (cet accroissement étant calculé à l'aide d'un bilan thermique sur une tranche de canal). La méthodologie que nous développons ici est en fait une généralisation de cette procédure à des cas où le gradient de température moyen n'est plus seulement unidirectionnel. On obtient, en substituant la décomposition (3.26) dans l'équation (3.21c),

$$\rho C_p (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla})^* \tilde{\theta}^* = \lambda \Delta \tilde{\theta}^* + \lambda \Delta \langle \theta^* \rangle_f - (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}) \langle \theta^* \rangle_f. \quad (3.27)$$

La condition aux limites portant sur la déviation est modifiée. En effet, en substituant (3.26) dans

$$\lambda \vec{\nabla} \theta^* \cdot \vec{n} = q, \quad (3.28)$$

elle s'écrit

$$\lambda \vec{\nabla} \tilde{\theta}^* \cdot \vec{n} = \underbrace{q - \lambda \vec{\nabla} \langle \theta^* \rangle_f \cdot \vec{n}}_{\text{noté } \tilde{q}^*}. \quad (3.29)$$

Par conséquent, le problème thermique dans une cellule est défini par

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho C_p (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}) \tilde{\theta}^* = \lambda \Delta \tilde{\theta}^* + \lambda \Delta \langle \theta^* \rangle_f - \rho C_p (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}) \langle \theta^* \rangle_f & \text{dans } \Omega_f^*, \quad (3.30a) \\ \lambda \vec{\nabla} \tilde{\theta}^* \cdot \vec{n} = \tilde{q}^* & \text{sur } \Sigma_{fs}, \quad (3.30b) \\ \tilde{\theta}^*(\vec{x}) = \tilde{\theta}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), & (3.30c) \\ \theta^* = \langle \theta^* \rangle_f + \tilde{\theta}^*, & (3.30d) \end{array} \right.$$

où \vec{u}^* est le champ de vitesse solution de (3.25a) – (3.25e). À la suite de la décomposition des champs non périodiques (pression et température) en sommes d'un champ moyen et d'un champ de déviation, il apparaît que les problèmes de cellule (3.25a) – (3.25e) et (3.30a) – (3.30d) contiennent des représentations de ces champs à l'échelle macroscopique, qui sont

- $\vec{\nabla} \langle p^* \rangle_f$ dans l'équation (3.25b) ;
- $\lambda \Delta \langle \theta^* \rangle_f - (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}) \langle \theta^* \rangle_f$ dans l'équation (3.30a) ;
- $\tilde{q}^* = q - \lambda \vec{\nabla} \langle \theta^* \rangle_f \cdot \vec{n}$ dans l'équation (3.30b).

Les équations (3.25a) – (3.25e) et (3.30a) – (3.30d) ne peuvent donc pas être résolues en l'état. Elles sont alors couplées avec les champs de pression et de température macroscopiques (respectivement $\langle p_0 \rangle$ et $\langle \theta_0 \rangle$), déjà calculés par une méthode de changement d'échelle, ou *via* une modélisation « sous-canal » dans le cas d'un assemblage : ce couplage consiste à remplacer

3.2 Étapes détaillées de la méthodologie

- $\vec{\nabla}\langle p^* \rangle_f$ par $\vec{\nabla}\langle p_0 \rangle_f$ dans l'équation (3.25b) ;
- $\lambda\Delta\langle\theta^*\rangle_f - (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla})\langle\theta^*\rangle_f$ par $\lambda\Delta\langle\theta_0\rangle_f - (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla})\langle\theta_0\rangle_f$ dans l'équation (3.30a) ;
- $\tilde{q}^* = q - \lambda\vec{\nabla}\langle\theta^*\rangle_f \cdot \vec{n}$ par $\tilde{q}_0 = q - \lambda\vec{\nabla}\langle\theta_0\rangle_f \cdot \vec{n}$ dans l'équation (3.30b).

On simplifie ensuite ces trois termes à l'aide d'un développement de Taylor au voisinage du centre de la cellule unitaire considérée – ce centre est repéré par la position \vec{x}_c –, c'est-à-dire, pour un champ ψ_0 (pression ou température),

$$\langle\psi_0\rangle(\vec{x}) = \langle\psi_0\rangle(\vec{x}_c) + \vec{\nabla}\langle\psi_0\rangle(\vec{x}_c) \cdot (\vec{x} - \vec{x}_c) + \underset{\vec{x} \rightarrow \vec{x}_c}{\mathcal{O}}(\|\vec{x} - \vec{x}_c\|), \quad (3.31)$$

où $\langle\psi_0\rangle = \langle p \rangle_0$ ou $\langle\theta_0\rangle$. Supposons, en reprenant les notations du chapitre 2, que la cellule soit de numéro N dans le plan radial et d'altitude k , et que son centre soit repéré par le vecteur \vec{x}_N^k ; on a alors l'approximation au premier ordre suivante :

$$\langle\psi_0\rangle(\vec{x}) \simeq \overline{\psi_0}\Big|_N^k + \vec{\nabla}\langle\psi_0\rangle\Big|_N^k \cdot (\vec{x} - \vec{x}_N^k). \quad (3.32)$$

Il est légitime de stopper ce développement au premier ordre, car les champs moyens ne contiennent pas de variations spatiales à petites échelles, donc leurs dérivées aux ordres plus élevés sont négligeables. Par ailleurs, cette approximation revient à considérer comme constants les gradients des champs moyens dans chaque cellule, ce qui est à nouveau cohérent : l'échelle typique de variation des champs moyens est, par construction, de l'ordre la taille d'une cellule. L'intérêt cette étape de simplification est double :

- elle permet d'abord d'exprimer les problèmes de cellule en fonction des grandeurs cellulaires $\overline{\psi_0}\Big|_N^k$ et $\vec{\nabla}\langle\psi_0\rangle\Big|_N^k$. Celles-ci sont connues, ou du moins peuvent être déterminées quelle que soit l'approche de calcul de l'échelle macroscopique (prise de moyenne volumique ou modélisation « sous-canal »), grâce aux interpolations et/ou inversions de systèmes linéaires présentées au chapitre 2 ;
- elle permet ensuite d'anticiper et de contourner la difficulté numérique d'implémentation des problèmes de cellule. En effet, les champs macroscopiques continus qui interviennent dans ces problèmes sont de cette façon transformés en variables discrètes connues. De plus, ces champs macroscopiques continus ne seront généralement pas connus en tout point de la cellule ; si, malgré tout, ils l'étaient, ce serait sous une forme discrétisée sur un maillage *a priori* différent de celui utilisé pour résoudre numériquement les problèmes de cellule, rendant complexe la mise en œuvre numérique.

À l'aide de l'approximation (3.32),

- $\vec{\nabla}\langle p_0 \rangle_f$ devient $\vec{\nabla}\langle p_0 \rangle_f\Big|_N^k$ dans l'équation (3.25b) ;
- $\lambda\Delta\langle\theta_0\rangle_f - (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla})\langle\theta_0\rangle_f$ devient $-\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}\langle\theta_0\rangle_f\Big|_N^k$ dans l'équation (3.30a) ;
- $\tilde{q}_0 = q - \lambda\vec{\nabla}\langle\theta_0\rangle_f \cdot \vec{n}$ devient $\tilde{q}_0 = q - \lambda\vec{\nabla}\langle\theta_0\rangle_f\Big|_N^k \cdot \vec{n}$ dans l'équation (3.30b),

et les problèmes de cellule sont transformés en

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}^* = 0 & \text{dans } \Omega_f^*, \end{array} \right. \quad (3.33a)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho(\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla})\vec{u}^* = -\vec{\nabla} \tilde{p}^* + \mu \Delta \vec{u}^* - \vec{\nabla} \langle p_0 \rangle_f \Big|_N^k & \text{dans } \Omega_f^*, \end{array} \right. \quad (3.33b)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{u}^* = \vec{0} & \text{sur } \Sigma_{fs}, \end{array} \right. \quad (3.33c)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{u}^*(\vec{x}) = \vec{u}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), & \end{array} \right. \quad (3.33d)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tilde{p}^*(\vec{x}) = \tilde{p}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), & \end{array} \right. \quad (3.33e)$$

pour l'hydraulique, et en

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho C_p (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}) \tilde{\theta}^* = \lambda \Delta \tilde{\theta}^* - \rho C_p \vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N^k & \text{dans } \Omega_f^*, \end{array} \right. \quad (3.34a)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \lambda \vec{\nabla} \tilde{\theta}^* \cdot \vec{n} = q - \lambda \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N^k \cdot \vec{n} & \text{sur } \Sigma_{fs}, \end{array} \right. \quad (3.34b)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tilde{\theta}^*(\vec{x}) = \tilde{\theta}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), & \end{array} \right. \quad (3.34c)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \theta^* = \bar{\theta}_0 \Big|_N^k + \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N^k \cdot (\vec{x} - \vec{x}_N^k) + \tilde{\theta}^*, & \end{array} \right. \quad (3.34d)$$

pour la thermique.

3.2.2 Pénalisation

Une fois établis les problèmes de cellule (3.33a) – (3.33e) et (3.34a) – (3.34d), il convient de s'intéresser à l'existence et l'unicité de leurs solutions. Pour cela, nous nous en tiendrons à une analyse qualitative des équations sans rentrer dans des développements théoriques poussés. Un problème composé d'une équation différentielle munie de conditions aux limites et/ou initiales est dit « bien posé » au sens de Hadamard [52] si

- il admet une solution unique (dans une certaine classe de fonctions, par exemple les fonctions bornées, à support compact, de classe C^∞ , etc.);
- cette solution dépend continûment des données du problème : une « petite » variation sur les données initiales ou sur les conditions aux limites entraîne une « petite » variation sur la solution.

Le problème de cellule (3.33a) – (3.33e) pour l'hydrodynamique consiste à trouver les solutions périodiques de l'équation de Navier-Stokes avec une force volumique constante et des conditions aux limites de Dirichlet ; le caractère bien posé de ce type de problème est délicat (Koch et Tataru [64]). S'agissant du problème thermique (3.34a) – (3.34d), il n'est manifestement pas bien posé car l'unicité de la solution fait défaut. En effet, si un champ $\tilde{\theta}^*$ est solution de (3.34a) – (3.34c), alors $\tilde{\theta}^* + C$ en est aussi solution pour tout constante C . Pour lever cette difficulté, on adjoint alors au problème thermique de cellule une contrainte supplémentaire sur la solution : le champ de déviation $\tilde{\theta}^*$ recherché n'est pas de moyenne quelconque mais doit être tel que

$$\langle \tilde{\theta}^* \rangle = \langle \tilde{\theta}_0 \rangle, \quad (3.35)$$

ou encore, en terme de moyenne cellulaire¹,

$$\overline{\tilde{\theta}^*} = \overline{\tilde{\theta}_0} \simeq 0. \quad (3.36)$$

Avec cette nouvelle équation, le problème thermique de cellule est

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho C_p (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}) \tilde{\theta}^* = \lambda \Delta \tilde{\theta}^* - \rho C_p \vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N^k \quad \text{dans } \Omega_f^*, \end{array} \right. \quad (3.37a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda \vec{\nabla} \tilde{\theta}^* \cdot \vec{n} = q - \lambda \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N^k \cdot \vec{n} \quad \text{sur } \Sigma_{fs}, \end{array} \right. \quad (3.37b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\theta}^*(\vec{x}) = \tilde{\theta}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), \end{array} \right. \quad (3.37c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{\tilde{\theta}^*} = 0 \end{array} \right. \quad (3.37d)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \theta^* = \overline{\theta}_0 \Big|_N^k + \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N^k \cdot (\vec{x} - \vec{x}_N^k) + \tilde{\theta}^*. \end{array} \right. \quad (3.37e)$$

Il convient enfin d'expliciter la façon d'appréhender la résolution numérique de (3.37a) – (3.37e). À première vue, l'équation (3.37d) ne paraît pas évidente à implémenter dans un code de calcul. Pour y parvenir, il semble que la méthode la plus performante soit de recourir à une technique de pénalisation de l'équation (3.37a), qui consiste à intégrer dans cette dernière la contrainte (3.37d) *via* un terme de la forme

$$\mathcal{P}_\omega = \frac{1}{\omega} (\overline{\tilde{\theta}}_{\text{cible}} - \overline{\tilde{\theta}^*}), \quad (3.38)$$

où ω est un paramètre réel positif homogène à un temps, et $\overline{\tilde{\theta}}_{\text{cible}}$ la valeur moyenne à atteindre, qui est ici approximativement nulle (moyenne d'un champ de déviation), soit

$$\mathcal{P}_\omega = \frac{1}{\omega} (\overline{\tilde{\theta}_0} - \overline{\tilde{\theta}^*}) \simeq -\frac{\overline{\tilde{\theta}^*}}{\omega}. \quad (3.39)$$

On obtient de cette façon un problème thermique « pénalisé » dans chaque cellule Ω_N^k :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho C_p (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}) \tilde{\theta}^* = \lambda \Delta \tilde{\theta}^* + \mathcal{P}_\omega - \rho C_p \vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N^k \quad \text{dans } \Omega_f^*, \end{array} \right. \quad (3.40a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda \vec{\nabla} \tilde{\theta}^* \cdot \vec{n} = q - \lambda \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N^k \cdot \vec{n} \quad \text{sur } \Sigma_{fs}, \end{array} \right. \quad (3.40b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\theta}^*(\vec{x}) = \tilde{\theta}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), \end{array} \right. \quad (3.40c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \theta^* = \overline{\theta}_0 \Big|_N^k + \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N^k \cdot (\vec{x} - \vec{x}_N^k) + \tilde{\theta}^*. \end{array} \right. \quad (3.40d)$$

La pénalisation est une méthode puissante fréquemment mise en œuvre, notamment dans les problématiques de simulation numérique des fluides. Ainsi, Angot *et al.* [10],

1. On peut montrer, comme on l'avait déjà écrit (équation (1.78) page 43), que la moyenne d'un champ de déviation est approximativement nulle.

Sarthou *et al.* [105] et Liu et Vasilyev [73] l'emploient pour modéliser l'effet d'obstacles au sein d'un écoulement de fluide. Dans notre cas, cette méthode possède une portée pratique intéressante puisqu'elle permet d'intégrer la contrainte de moyenne à l'équation de convection-diffusion sous la forme d'un terme source, et donc une résolution par le code de calcul. De plus, l'implémentation de l'équation pénalisée est relativement simple. Cependant, la méthode a pour défaut d'introduire une condition de stabilité numérique supplémentaire, par l'intermédiaire du paramètre ω dont la valeur doit en pratique être spécifiée. Cette contrainte dépend des propriétés physiques ainsi que du pas de temps du calcul¹. La convergence numérique de la méthode a été largement étudiée (voir Paccou *et al.* [86], Bost *et al.* [22]). En annexe C, on s'intéresse à la stabilité numérique des problèmes pénalisés, en donnant en particulier des critères sur le choix de la valeur de ω . D'une façon générale, on peut observer que la précision sur la contrainte $\overline{\theta^*} = 0$ est d'autant meilleure que ω est proche de zéro. Cette observation peut être déduite de l'équation (3.40a) : en intégrant cette dernière sur le volume V_N^k de la cellule, on a

$$\int_{\Sigma_a^*} \rho C_p (\vec{u}^* \tilde{\theta}^*) d\Sigma = \int_{\Sigma_{fs}} \lambda \vec{\nabla} \tilde{\theta}^* \cdot \vec{n} d\Sigma - \int_{V_N^k} \frac{\overline{\theta^*}}{\omega} dV - \int_{V_N^k} \rho C_p \vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N^k dV, \quad (3.41)$$

soit

$$\frac{\overline{\theta^*}}{\omega} = \underbrace{\frac{1}{V_N^k} \int_{\Sigma_{fs}} \tilde{q}_0 d\Sigma - \rho C_p \vec{u}^* \Big|_N^k \cdot \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N^k}_{\text{constante indépendante de } \overline{\theta^*} \text{ et de } \omega}. \quad (3.42)$$

Donc si ω tend vers zéro, alors $\overline{\theta^*}$ également afin que le rapport $\overline{\theta^*}/\omega$ demeure constant.

Revenons maintenant au problème hydraulique de cellule (3.33a) – (3.33e). Dans un souci d'homogénéité des techniques de résolution des problèmes de cellule hydraulique et thermique, on adopte également une méthode de pénalisation de l'équation (3.33b) où le terme $-\vec{\nabla} \langle p_0 \rangle_f \Big|_N^k$ est remplacé par

$$\vec{G}_\omega = \frac{1}{\omega} (\vec{u}_0 - \vec{u}^*). \quad (3.43)$$

Le paramètre ω n'est pas nécessairement le même que pour le problème en température ; toutefois il repose sur les mêmes critères de choix (voir l'annexe C). Un autre argument en faveur de ce remplacement est que $\vec{\nabla} \langle p_0 \rangle_f \Big|_N^k$ n'est pas la donnée « brute » qu'on retiendra pour définir la physique des sous-canaux d'assemblage (même si le gradient de pression moyen est relié à la vitesse moyenne par la loi de perte de charge (2.6)). Le problème hydraulique à résoudre dans la cellule Ω_N^k sera donc :

1. En effet, une résolution temporelle est effectuée par le code Trio_U (brièvement présenté en introduction), la solution stationnaire étant obtenue comme limite de la solution transitoire ; cette résolution s'appuie donc sur une discrétisation temporelle faisant intervenir un pas de temps.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}^* = 0 & \text{dans } \Omega_f^*, \end{array} \right. \quad (3.44a)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho(\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla})\vec{u}^* = -\vec{\nabla}\tilde{p}^* + \mu\Delta\vec{u}^* + \vec{G}_\omega & \text{dans } \Omega_f^*, \end{array} \right. \quad (3.44b)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{u}^* = \vec{0} & \text{sur } \Sigma_{fs}, \end{array} \right. \quad (3.44c)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{u}^*(\vec{x}) = \vec{u}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), & \end{array} \right. \quad (3.44d)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tilde{p}^*(\vec{x}) = \tilde{p}^*(\vec{x} + \vec{R}_n). & \end{array} \right. \quad (3.44e)$$

Évaluons l'action du terme \vec{G}_ω , en considérant un problème de référence dans lequel le fluide remplissant la cellule est mis en mouvement par une force volumique \vec{G}_0 , et un problème pénalisé dans lequel cette force volumique est remplacée par le terme de pénalisation \vec{G}_ω , qui devient le moteur de l'écoulement :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho(\vec{u}_0 \cdot \vec{\nabla})\vec{u}_0 = -\vec{\nabla}p_0 + \mu\Delta\vec{u}_0 + \vec{G}_0 & : \text{ problème de référence,} \end{array} \right. \quad (3.45a)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho(\vec{u}_\omega \cdot \vec{\nabla})\vec{u}_\omega = -\vec{\nabla}p_\omega + \mu\Delta\vec{u}_\omega + \frac{1}{\omega}(\vec{u}_0 - \vec{u}_\omega) & : \text{ problème pénalisé.} \end{array} \right. \quad (3.45b)$$

Ces deux problèmes sont couplés *via* la vitesse moyenne \vec{u}_0 . Dans ces deux problèmes, une vitesse nulle est imposée aux interfaces et une condition de périodicité est imposée sur les faces AB/CD et AD/BC (FIG. 3.3), c'est-à-dire

$$\left\{ \begin{array}{ll} \forall x \in [-\ell_0/2, \ell_0/2], \vec{u}(x, -\ell_0/2) = \vec{u}(x, \ell_0/2) & : \text{ périodicité sur les faces AD/BC,} \\ \forall y \in [-\ell_0/2, \ell_0/2], \vec{u}(-\ell_0/2, y) = \vec{u}(\ell_0/2, y) & : \text{ périodicité sur les faces AB/CD.} \end{array} \right. \quad (3.46)$$

Les simulations numériques indiquent que

- les profils de $\|\vec{u}_\omega\|$ le long de AB se rapprochent du profil de $\|\vec{u}_0\|$ lorsque ω tend vers zéro (FIG. 3.5) ;
- la moyenne \vec{u}_ω tend vers la moyenne « cible » \vec{u}_0 lorsque ω tend vers zéro (FIG. 3.5) ;
- le terme de pénalisation \vec{G}_ω tend vers \vec{G}_0 lorsque ω tend vers zéro (FIG. 3.5) ;
- le terme de pénalisation \vec{G}_ω dépend de ω , contrairement au terme \mathcal{P}_ω du problème de pénalisation thermique (voir la relation (3.42)).

On peut donner plusieurs interprétations du terme de pénalisation \vec{G}_ω ; par exemple :

- (i) par analogie avec avec une force de rappel élastique de ressort, plus la « constante de raideur » ω^{-1} est élevée et plus le rappel est efficace. L'énergie de rappel associée à chaque composante du terme de pénalisation est

$$E_{p_i} = \frac{1}{2\omega}(\bar{u}_{i0} - \bar{u}_{i\omega})^2. \quad (3.47)$$

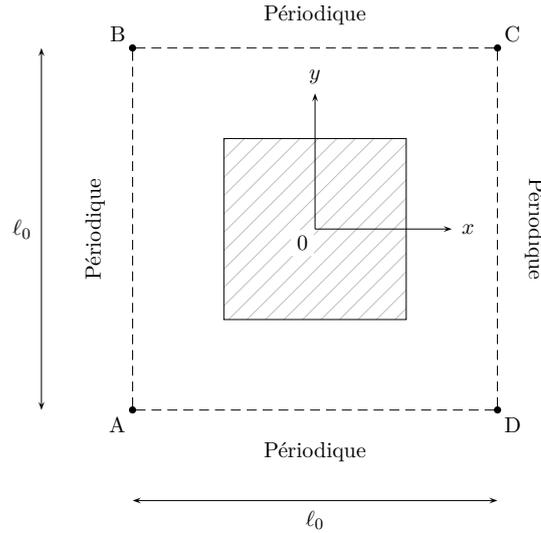


FIG. 3.3 – Cellule de calcul pour la simulation du problème hydraulique de référence (3.45a) et du problème hydraulique pénalisé (3.45b).

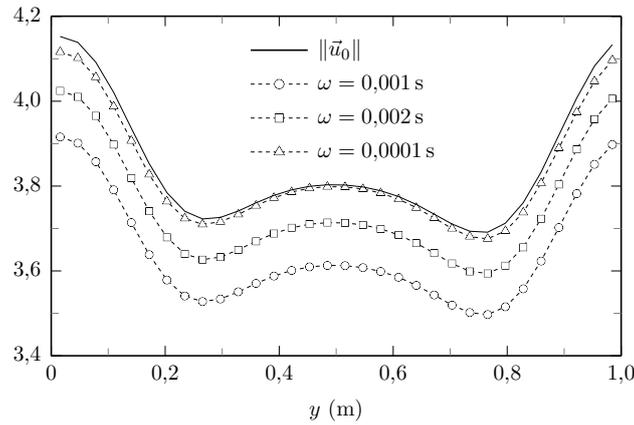


FIG. 3.4 – Profils le long de AB (FIG. 3.3) de la norme des vitesses \bar{u}_0 et \bar{u}_ω pour différents paramètres de pénalisation ω (problèmes (3.45a) et (3.45b)).

Ainsi, $\bar{u}_{i\omega} = \bar{u}_{i0}$ est une position d'équilibre stable si $\omega > 0$, et instable si $\omega < 0$, ce qui montre que ω doit être positif (pour davantage de détails, voir l'annexe C). D'ailleurs, si $\bar{u}_{i\omega} > \bar{u}_{i0}$, alors la force doit être négative pour contraindre $\bar{u}_{i\omega}$ à se rapprocher de \bar{u}_{i0} c'est-à-dire $\omega \geq 0$, sans quoi l'écart entre la moyenne et la moyenne « cible » est amplifié et le problème diverge ;

- (ii) il est relié aux multiplicateurs de Lagrange (à ce sujet, voir aussi Carey et Krishnan [30]). Considérons un problème de Stokes dans un domaine Ω , de bord $\partial\Omega$, défini dans l'espace \mathbb{H} des fonctions à divergence nulle :

$$\begin{cases} \vec{0} = -\vec{\nabla}p + \nu\Delta\vec{u} & \text{dans } \Omega, \\ \vec{u} = \vec{0} & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (3.48)$$

La fonctionnelle d'énergie associée à ce problème est

$$\forall \vec{v} \in \mathbb{H}, \mathcal{J}(\vec{v}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \nu \|\vec{\nabla}\vec{v}\|^2 dV. \quad (3.49)$$

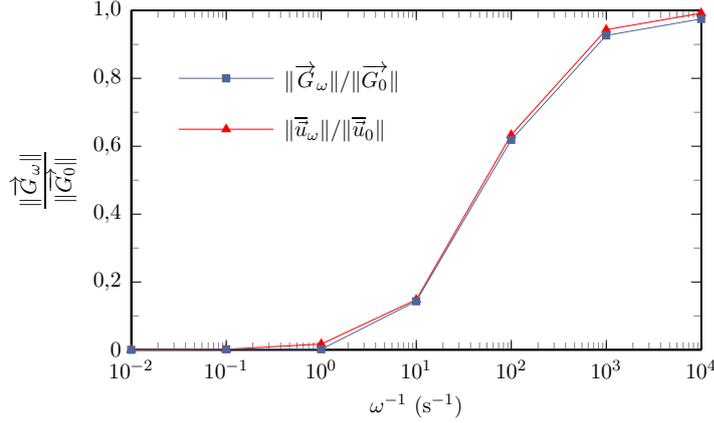


FIG. 3.5 – Évolution, en fonction du paramètre de pénalisation ω , du terme de pénalisation \vec{G}_ω et de la vitesse \vec{u}_ω . Pour $\omega^{-1} > 10^4 \text{s}^{-1}$, une instabilité numérique apparaît (problèmes (3.45a) et (3.45b)).

On recherche la vitesse \vec{u} qui, si elle existe, minimise cette fonctionnelle, tout en satisfaisant la contrainte d'égalité

$$\vec{u} = \vec{u}_0, \quad (3.50)$$

où \vec{u}_0 est une moyenne « cible » fixée. On définit la fonction vectorielle $\vec{\mathcal{K}}$ par

$$\forall \vec{v} \in \mathbb{H}, \vec{\mathcal{K}}(\vec{v}) = \vec{v} - \vec{u}_0. \quad (3.51)$$

La vitesse recherchée est donc telle que

$$\mathcal{J}(\vec{u}) = \min_{\vec{u} \in \mathcal{C}} \mathcal{J}(\vec{v}), \quad (3.52)$$

où \mathcal{C} est le sous-espace des contraintes :

$$\mathcal{C} = \{ \vec{v} \in \mathbb{H}, \vec{\mathcal{K}}(\vec{v}) = \vec{0} \}. \quad (3.53)$$

On introduit une nouvelle variable vectorielle, notée $\vec{\Gamma}$, appelée multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte (3.50), ainsi que la fonction de Lagrange \mathcal{L} définie par

$$\mathcal{L}(\vec{v}, \vec{\Gamma}) = \mathcal{J}(\vec{v}) + \vec{\Gamma} \cdot \vec{\mathcal{K}}(\vec{v}). \quad (3.54)$$

Comme la fonctionnelle \mathcal{J} est strictement convexe, positive, et définie sur l'ensemble \mathbb{H} lui-même convexe, elle admet un unique minimum global \vec{u} dans \mathcal{C} . Ce minimum est tel que $(\vec{u}, \vec{\Gamma})$ est un point stationnaire de la fonction de Lagrange \mathcal{L} , c'est-à-dire un point en lequel le gradient de cette dernière s'annule :

$$\vec{\nabla}_{\vec{u}} \mathcal{L}(\vec{u}, \vec{\Gamma}) = \vec{0} \text{ et } \vec{\nabla}_{\vec{\Gamma}} \mathcal{L}(\vec{u}, \vec{\Gamma}) = \vec{0}. \quad (3.55)$$

L'élément \vec{u} étant dans \mathcal{C} , la seconde égalité est automatiquement vérifiée puisque

$$\vec{\nabla}_{\vec{\Gamma}} \mathcal{L}(\vec{u}, \vec{\Gamma}) = \vec{\mathcal{K}}(\vec{u}) = \vec{0}. \quad (3.56)$$

Ainsi, le multiplicateur de Lagrange $\vec{\Gamma}$ satisfait la relation

$$\vec{\nabla}_{\vec{u}} \mathcal{J}(\vec{u}) + \vec{\Gamma} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{u}} \vec{\mathcal{K}}(\vec{u}) = \vec{0}. \quad (3.57)$$

On considère ensuite la fonctionnelle

$$\forall \vec{v} \in \mathbb{H}, \mathcal{J}_\omega(\vec{v}) = \mathcal{J}(\vec{v}) + \frac{1}{\omega} \frac{1}{2} \left\| \vec{\mathcal{K}}(\vec{v}) \right\|^2, \quad (3.58)$$

qui, compte tenu des propriétés énoncées plus haut, admet un minimum en un point unique noté \vec{u}_ω . Ce point de minimum est tel que

$$\vec{\nabla}_{\vec{u}} \mathcal{J}_\omega(\vec{u}_\omega) = \vec{0}. \quad (3.59)$$

Par la suite, des développements partant des relations (3.57) et (3.59) permettent d'obtenir la limite suivante :

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{\omega} \vec{\mathcal{K}}(\vec{u}_\omega) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{\omega} (\vec{u}_\omega - \vec{u}_0) = \vec{\Gamma}. \quad (3.60)$$

Le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte (3.50) est donc la limite lorsque ω tend vers zéro du terme de pénalisation. On peut prouver qu'il n'existe pas de paramètre $\omega > 0$ tel que la solution \vec{u}_ω du problème pénalisé soit égale à la solution \vec{u} du problème contraint. Cela montre que le problème pénalisé n'est pas strictement équivalent au problème contraint, mais en est une approximation. La résolution d'un problème contraint par pénalisation introduit donc toujours une erreur non nulle, quoique faible si le paramètre de pénalisation est choisi « suffisamment » petit. En contrepartie, la résolution numérique est facilitée.

3.2.3 Synthèse

Le schéma général de la méthodologie de détermination des champs à l'échelle microscopique est donné sur la FIG. 3.6. On notera que les problèmes de cellule diffèrent uniquement par leurs données d'entrée, c'est-à-dire par les valeurs de la vitesse moyenne, de la température moyenne et du gradient de température moyen dans la cellule considérée. Concluons cette partie en formulant deux remarques :

- on pourrait envisager de faire porter la pénalisation sur la moyenne volumique ou sur la moyenne « sous-canal » (dans le cas d'un calcul d'assemblage) plutôt que sur la moyenne cellulaire. Néanmoins on aurait dans le premier cas un terme de pénalisation variable en espace, et dans le second cas, la cellule de calcul devrait être un sous-canal, ce qui compliquerait la définition des périodicités. Utiliser la pénalisation en terme de moyenne cellulaire semble donc le choix le plus simple ;
- la démarche peut être généralisée à d'autres équations que celles de Navier-Stokes et de l'énergie. Ainsi, en 3.3.3, la méthodologie est appliquée à un écoulement turbulent dont le champ de vitesse est gouverné par les équations de Reynolds fermées à l'aide du modèle k-epsilon, et le champ de température par la moyenne statistique de l'équation de convection-diffusion fermée à l'aide d'un modèle de diffusivité turbulente.

La seconde partie de ce chapitre est consacrée à trois applications de la méthodologie. Leur but est d'en démontrer la faisabilité pratique, d'en estimer quantitativement les erreurs, et enfin de préparer le terrain à des applications plus concrètes. Pour faciliter cette étape de validation, les configurations étudiées sont très simplifiées par rapport à un assemblage réel, de sorte qu'une simulation fine de référence est possible et offre un point de comparaison avec les solutions numériques des problèmes de cellule.

3.2 Étapes détaillées de la méthodologie

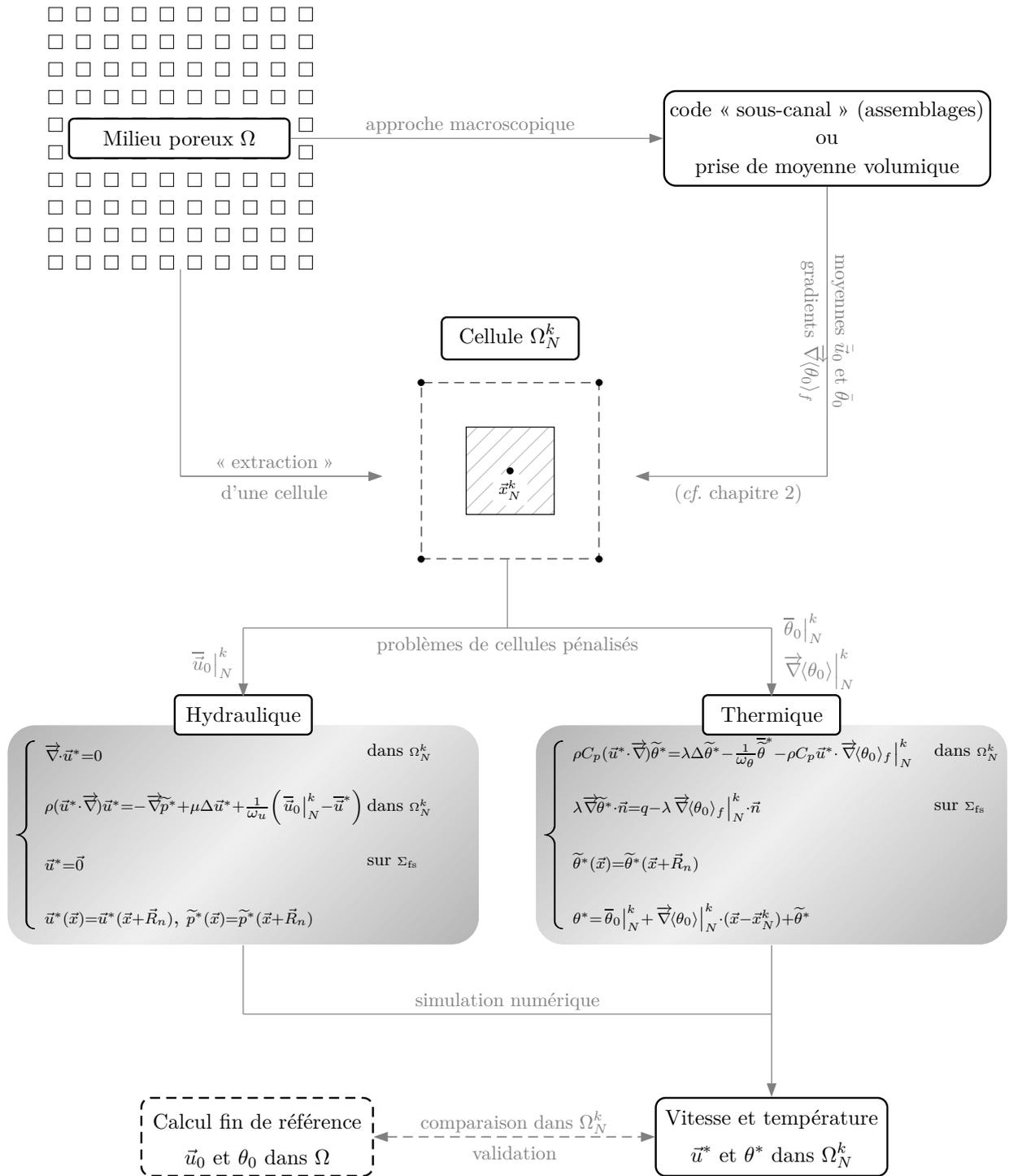


FIG. 3.6 – Schéma de synthèse de la méthode de retour à l'échelle locale : un milieu poreux est décrit à l'échelle macroscopique *via* la modélisation « sous-canal » ou la prise de moyenne volumique, qui fournissent les valeurs moyennes de vitesse, de température et de gradient de température dans chaque cellule unitaire. Ces valeurs permettent la simulation numérique des problèmes hydraulique et thermique dans une cellule quelconque, conduisant aux champs de vitesse et de température dans cette cellule. Ces champs sont comparés à ceux issus d'une simulation numérique du milieu entier, lorsque celle-ci est possible, donnant ainsi des éléments de validation de la méthodologie.

3.3 Premières applications

Dans les applications modèles présentées ici, qui visent uniquement à valider la méthodologie, nous manipulerons des températures « abstraites », sans rapport avec les niveaux de température rencontrés dans les assemblages de RNR-Na. En revanche, nous supposons que le fluide possède les propriétés du sodium liquide à 400 K, de façon à avoir un nombre de Prandtl réaliste permettant de reproduire qualitativement le comportement du sodium liquide au point de vue convectif et diffusif (TAB. 3.1).

Variable	Valeur	Unité
ρ	900	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
μ	$4,15 \cdot 10^{-4}$	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
λ	80	$\text{W} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{kg}^{-1}$
C_p	1334	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
Pr	$6,92 \cdot 10^{-3}$	–

TAB. 3.1 – Propriétés physiques du sodium liquide utilisées dans les simulations.

3.3.1 Écoulement en canal plan

Nous considérons pour cette première application un milieu bidimensionnel composé de 10×7 cellules périodiques, obstrué par des objets solides de forme circulaire qui délivrent un flux constant q (FIG. 3.7).

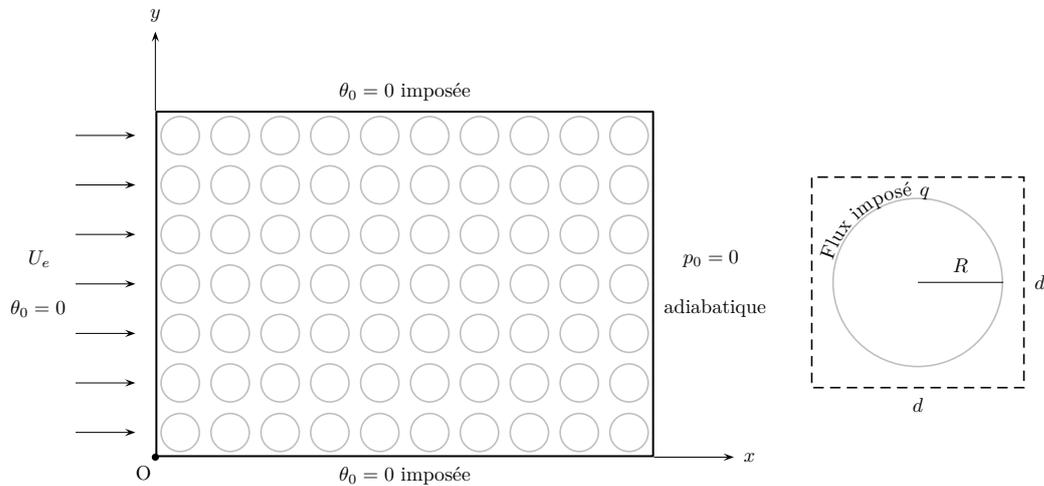


FIG. 3.7 – Géométrie et conditions aux limites.

Le fluide traverse ce milieu en arrivant avec une température uniforme nulle et une vitesse uniforme U_e sur la face d'entrée. La sortie est adiabatique et à pression nulle. Les parois du canal sont à température nulle. La vitesse est nulle sur toutes les parois et interfaces. La taille des grains circulaires ainsi que la période du milieu sont données dans le TAB. 3.2. La $i^{\text{ème}}$ cellule dans la direction x et $j^{\text{ème}}$ dans la direction y est repérée par le numéro $N = i + 10(j - 1)$ ($1 \leq i \leq 10$ et $1 \leq j \leq 7$). On étudie deux régimes d'écoulement : l'un à $Pe = 0,1$ et l'autre à $Pe = 1$ (TAB. 3.2).

3.3 Premières applications

Simulation	R	d	q	U_e	Re	Pe
1	0,06 m	0,15 m	$10^3 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$	$4,44 \cdot 10^{-5} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$	14,45	0,1
2	<i>id.</i>	<i>id.</i>	<i>id.</i>	$4,44 \cdot 10^{-4} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$	144,5	1

TAB. 3.2 – Propriétés géométriques et nombres de Péclet et de Reynolds de l'écoulement dans chaque simulation.

Dans le canal, les équations de transport s'écrivent

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_0 = 0, \\ \frac{\partial \vec{u}_0}{\partial t} + (\vec{u}_0 \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_0 = -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p_0 + \nu \Delta \vec{u}_0, \\ \frac{\partial \theta_0}{\partial t} + \vec{u}_0 \cdot \vec{\nabla} \theta_0 = \frac{\lambda}{\rho C_p} \Delta \theta_0. \end{array} \right. \quad (3.61)$$

Les champs stationnaires de référence \vec{u}_0 et θ_0 sont obtenus par une résolution numérique de ces équations, à l'aide du code Trio_U, pour $t \rightarrow +\infty$ (voir la note page 96). Préalablement, le domaine de calcul est discrétisé à l'aide d'un maillage non structuré de 40 040 éléments triangulaires, soit 572 éléments par cellule unitaire. Un schéma d'Euler implicite en temps est utilisé ; les termes de convection sont discrétisés selon un schéma amont ; enfin, le couplage vitesse-pression est réalisé *via* un algorithme de projection conduisant à une matrice de pression résolue à l'aide d'une factorisation de Cholesky (cf. Lascaux et Théodor [67]). Les simulations de référence étant effectuées, on réalise ensuite un filtrage spatial des champs obtenus, afin d'obtenir leurs moyennes volumiques. On utilise le filtre m_2 défini au chapitre 1. Pour chaque champ, le produit de convolution $\langle \psi \rangle = m_2 * (\chi \psi)$ est discrétisé sur un nouveau maillage, structuré, de 7000 mailles carrées, qui remplit également les zones solides du milieu.

La FIG. 3.8 montre quelques éléments de post-traitement de ces calculs. On notera que dans la simulation 1 ($Pe = 0,1$), la diffusion l'emporte sur la convection donc la sortie adiabatique influence fortement le champ de température à l'intérieur du canal, ce qui se traduit par un gradient de température moyen non linéaire dans la direction x . Dans la simulation 2 ($Pe = 1$), la convection et la diffusion sont du même ordre et la sortie adiabatique influe peu sur le champ de température – sauf très près de la sortie –, ce qui se traduit par une évolution linéaire de la température dans la direction de l'écoulement moyen (FIG. 3.9). Dans les deux cas cependant, l'approximation linéaire au premier ordre de la température moyenne est parfaitement acceptable à l'échelle d'une cellule.

On déduit des simulations précédentes les valeurs des moyennes cellulaires de vitesse et de température, c'est-à-dire $\vec{u}_0|_N$ et $\bar{\theta}_0|_N$, ainsi que des gradients de températures moyens $\vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f|_N$ dans chaque cellule Ω_N . Ces valeurs constituent les données d'entrée des problèmes de cellule instationnaires, que nous rappelons ci-dessous :

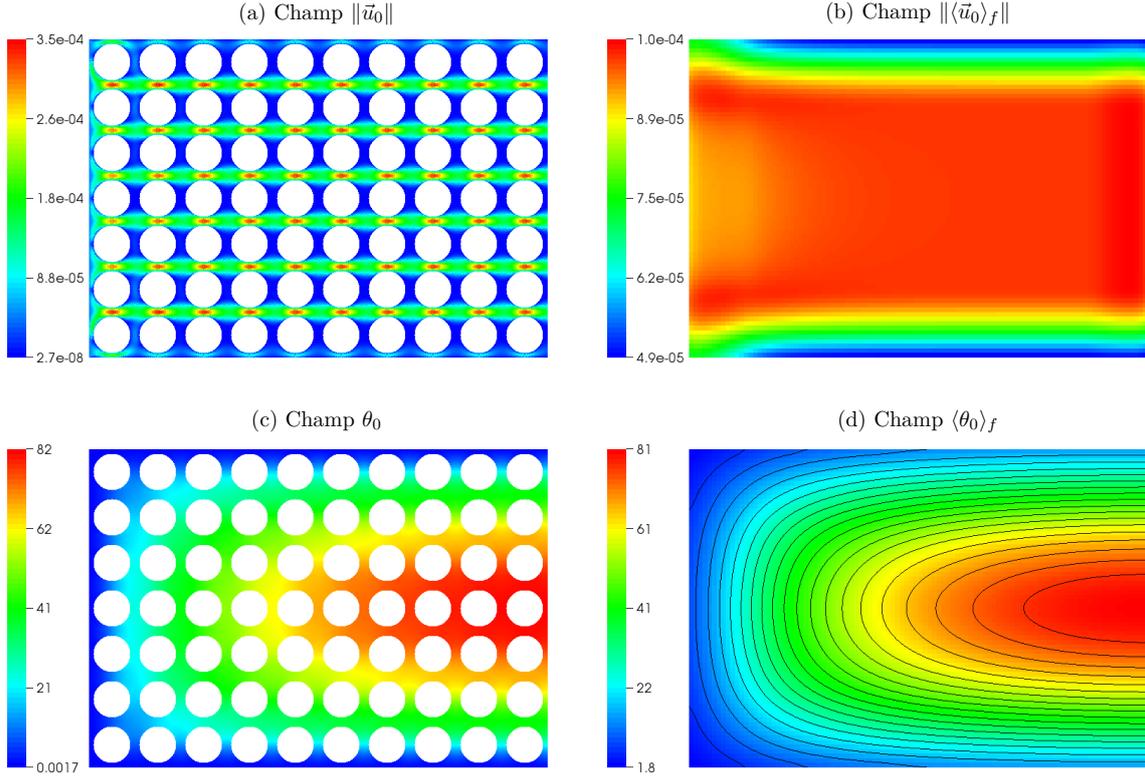
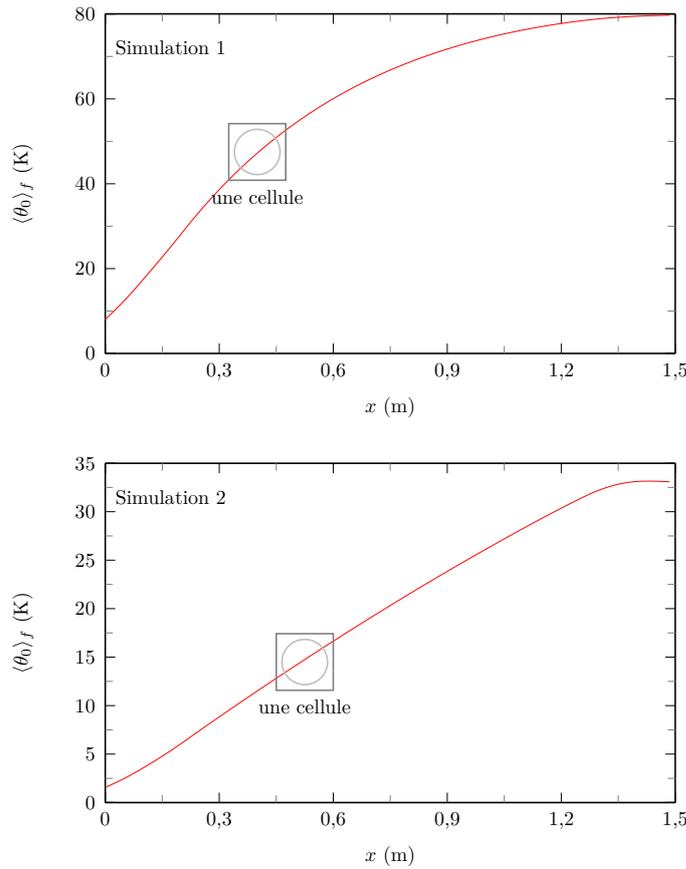


FIG. 3.8 – Champs de vitesse et de température de référence (avec superposition de lignes isothermes en (d)), aux échelles microscopique et macroscopique, résultats de la simulation 1 ($Pe = 0,1$).

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}^* = 0 & \text{dans } \Omega_N, \quad (3.62a) \\ \rho(\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla})\vec{u}^* = -\vec{\nabla} \tilde{p}^* + \mu \Delta \vec{u}^* + \frac{1}{\omega_u} (\vec{u}_0 - \vec{u}^*) & \text{dans } \Omega_N, \quad (3.62b) \\ \vec{u}^* = \vec{0} & \text{sur } \Sigma_{fs}, \quad (3.62c) \\ \vec{u}^*(\vec{x}) = \vec{u}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), \quad \tilde{p}^*(\vec{x}) = \tilde{p}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), & (3.62d) \end{array} \right.$$

et

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho C_p (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}) \tilde{\theta}^* = \lambda \Delta \tilde{\theta}^* - \frac{1}{\omega_\theta} \tilde{\theta}^* - \rho C_p \vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N & \text{dans } \Omega_N, \quad (3.63a) \\ \lambda \vec{\nabla} \tilde{\theta}^* \cdot \vec{n} = q - \lambda \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N \cdot \vec{n} & \text{sur } \Sigma_{fs}, \quad (3.63b) \\ \tilde{\theta}^*(\vec{x}) = \tilde{\theta}^*(\vec{x} + \vec{R}_n), & (3.63c) \\ \theta^* = \bar{\theta}_0 \Big|_N + \vec{\nabla} \langle \theta_0 \rangle_f \Big|_N \cdot (\vec{x} - \vec{x}_N) + \tilde{\theta}^*. & (3.63d) \end{array} \right.$$


 FIG. 3.9 – Profils horizontaux de température moyenne en $y = 3d$.

En suivant les conclusions de l'annexe C, on choisit des paramètres de pénalisation ω_u et ω_θ égaux aux pas de temps des simulations (on rappelle qu'une résolution instationnaire est menée avec Trio_U, donc avec introduction de pas de temps). On résout ces équations dans les cellules 32, 36, 42, 46, 52, et 56 représentées sur la FIG. 3.10, autrement dit des cellules localisées au cœur du milieu, ou près de l'entrée. Douze simulations de cellules sont ainsi réalisées. Précisons que le maillage adopté pour les cellules coïncide exactement avec le maillage du domaine, afin d'avoir la même finesse de résolution dans les deux cas¹. À titre illustratif, les solutions obtenues dans la cellule 56 sont montrées sur la FIG. 3.11, pour le régime $Pe = 0,1$.

Afin de valider les résultats de ces simulations, on superpose pour chaque nombre de Péclet et pour chaque groupe de trois cellules (32 – 52 et 36 – 56), les profils ABCD (définis sur la FIG. 3.10) de vitesse et de température (FIG. 3.12 et 3.13).

D'une façon générale, ces profils montrent que l'écart entre les champs de référence et les champs calculés dans les cellules est globalement faible. Sur la vitesse, il est nul ou insignifiant dans la rangée de cellules 36 – 46 – 56 à $Pe = 0,1$, de même que sur la température excepté dans la cellule 52. L'écart le plus important est trouvé dans les cellules proches de l'entrée du canal (32 – 42 – 52) et plus particulièrement d'une paroi (52). L'explication est double :

- en entrée, le champ de vitesse n'est pas hydrauliquement établi. On recherche donc dans ces cellules une solution \vec{u}^* périodique qui en réalité ne l'est pas tout à fait ;

1. Cette précaution ne sera pas toujours réalisable, comme nous en verrons une illustration dans le cas d'un assemblage de RNR-Na au chapitre 4.

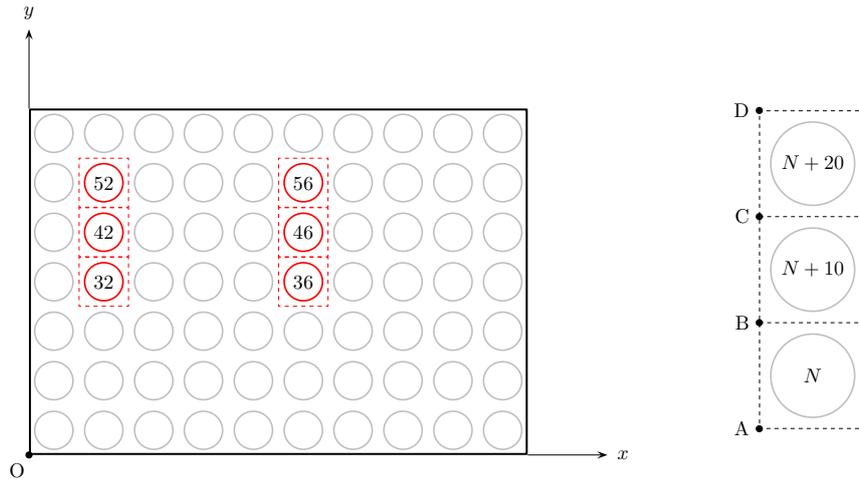


FIG. 3.10 – Cellules d'application de la méthodologie. On post-traitera les profils ABCD de vitesse et de température.

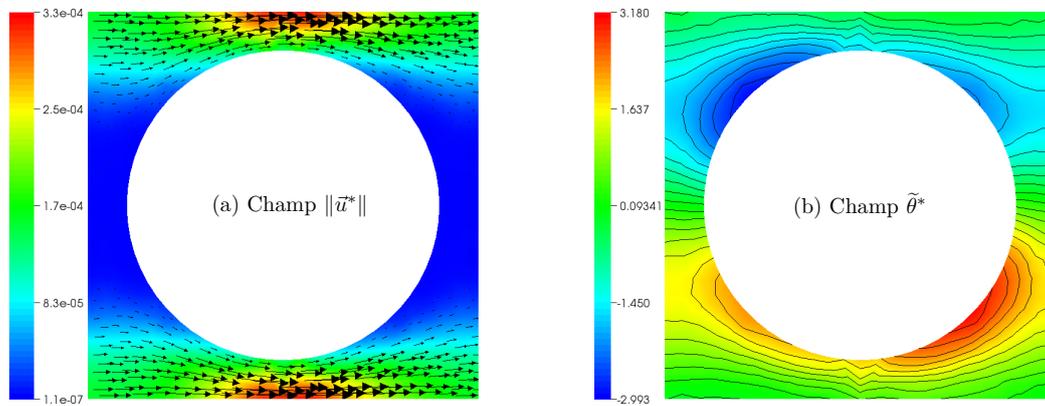


FIG. 3.11 – Solutions numériques à $Pe = 0,1$ dans la cellule 56 : vitesse et vecteurs vitesse (à gauche) et déviation de température avec lignes isodéviations (à droite).

- en entrée, le champ de température est également imparfaitement établi. De plus, l'utilisation d'une méthode de filtrage pour la détermination du gradient de température moyen est soumise à un « effet de bord » que l'on peut constater dans la cellule 52 à $Pe = 0,1$, où le gradient de température moyen dans la direction y est légèrement surestimé. Dans cette même cellule à $Pe = 1$, l'erreur commise sur la vitesse peut également aggraver l'erreur sur la température puisque la convection et la diffusion sont du même ordre.

On observe néanmoins, dans les cellules 36, 46 et 56 et à $Pe = 1$, un écart assez net sur le champ de vitesse. Dans ces cellules, c'est la résolution numérique qui est en cause : un effet de diffusion numérique lié à la discrétisation amont¹ dégrade les profils de vitesse. Cet effet, qui n'est pas visible à $Pe = 0,1$ car le terme convectif est faible, peut être réduit en augmentant le nombre de points de discrétisation, ou en sélectionnant un schéma numérique moins diffusif. On obtient ainsi confirmation du rôle de la diffusion

1. La discrétisation du terme de convection dans les équations de Navier-Stokes et d'énergie est responsable de l'apparition d'un terme ayant la forme d'une diffusion (Bianchi *et al.* [19]). Cette diffusion artificielle s'ajoute à la diffusion physique. Son importance dépend du schéma utilisé, de la finesse du maillage, du régime d'écoulement.

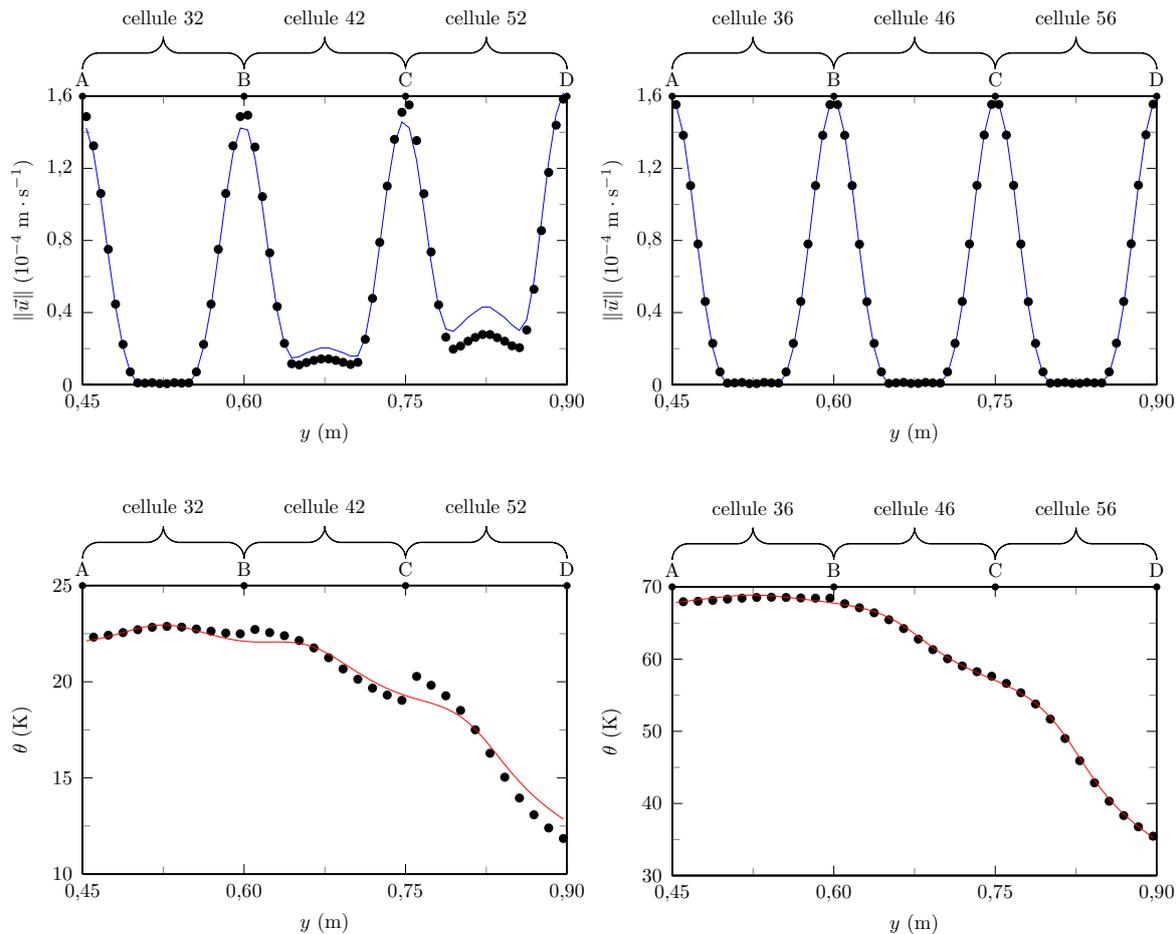


FIG. 3.12 – Profils de vitesse et de température obtenus dans les cellules 32, 36, 42, 46, 52 et 56, dans le cas à $Pe = 0,1$, pour un maillage à 572 éléments par cellule : champs de référence $\|\vec{u}_0\|$ et θ_0 (traits pleins) et champs solutions des problèmes de cellule $\|\vec{u}^*\|$ et θ^* (points).

numérique en renouvelant une simulation complète et des simulations de cellule avec un maillage beaucoup plus fin que le précédent (FIG. 3.14).

Cette nouvelle simulation numérique, plus fine, indique que la diffusion numérique est réduite dans les cellules 32, 42, 52 ; cependant, un écart demeure pour la raison invoquée plus haut : il s'agit de l'écart à la périodicité induit par les effets d'entrée (FIG. 3.15).

En conclusion de cette première application, on peut estimer que la méthodologie a correctement atteint son but, c'est-à-dire déterminer de façon approchée les restrictions aux cellules des champs de vitesse et de température de référence, avec une erreur minimale. Ainsi, la méthode mise au point est validée sur cette configuration simple. Toutefois, la qualité des résultats est légèrement dégradée à l'approche d'une paroi ou dans la zone d'établissement des champs de vitesse et de température. Il est à noter que ce cas de canal plan est qualitativement assez proche d'un assemblage : dans un assemblage, l'écoulement s'apparente, à l'échelle macroscopique, à un écoulement axial dans un canal (sauf près des parois où un mouvement moyen de rotation est observé). Les mêmes conclusions pourront donc être tirées, notamment en ce qui concerne les effets d'entrée.

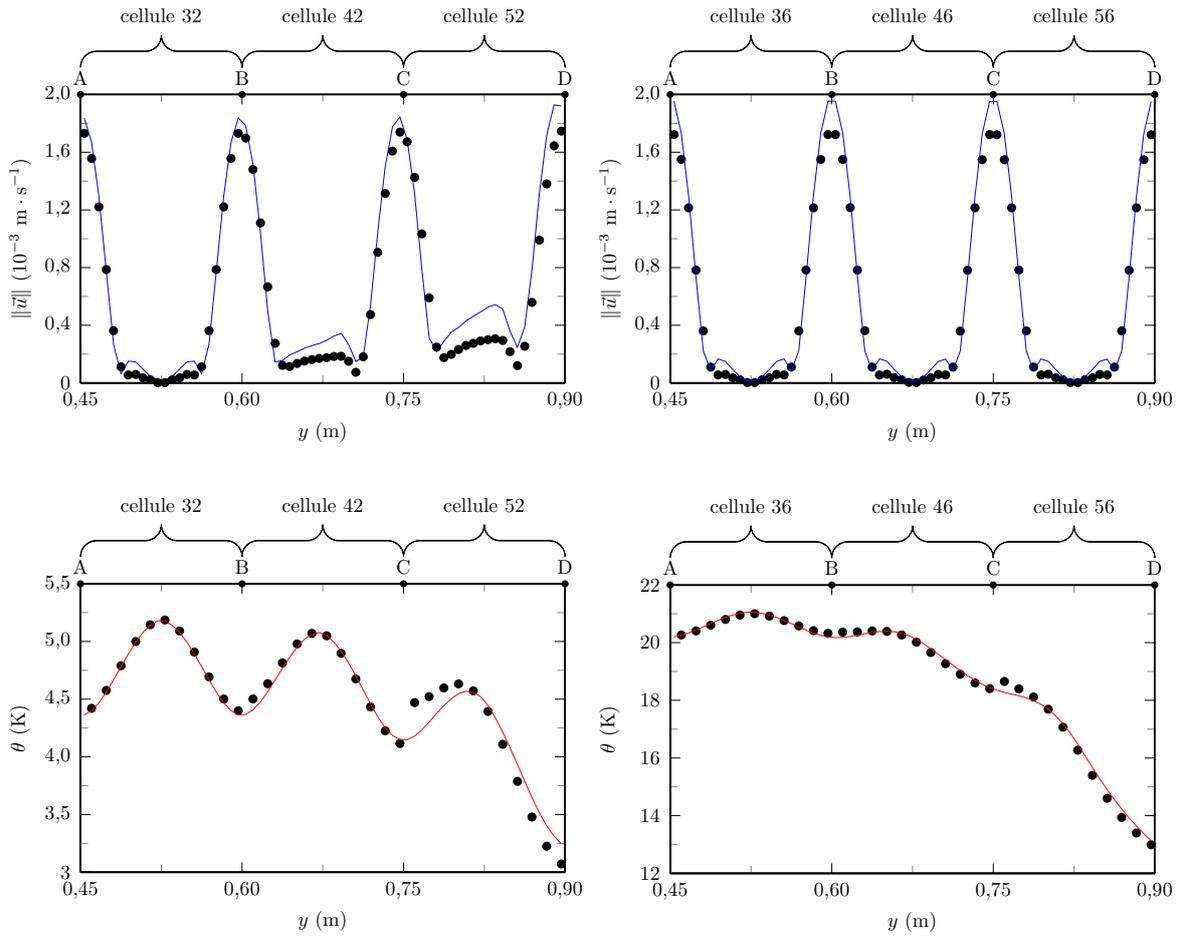


FIG. 3.13 – Profils de vitesse et de température obtenus dans les cellules 32, 36, 42, 46, 52 et 56, dans le cas à $Pe = 1$, pour un maillage à 572 éléments par cellule : champs de référence $\|\vec{u}_0\|$ et θ_0 (trait plein) et champs solutions des problèmes de cellule $\|\vec{u}^*\|$ et θ^* (points).

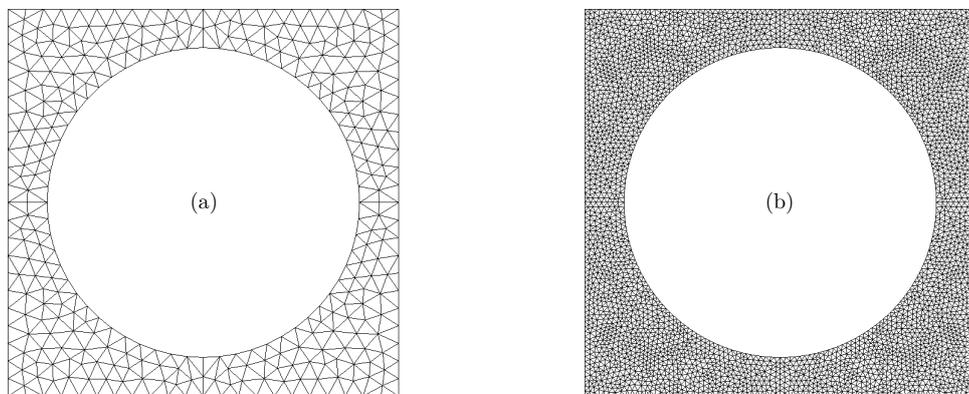


FIG. 3.14 – Comparaison des deux maillages de cellule utilisés. (a) 572 mailles, (b) 7160 mailles.

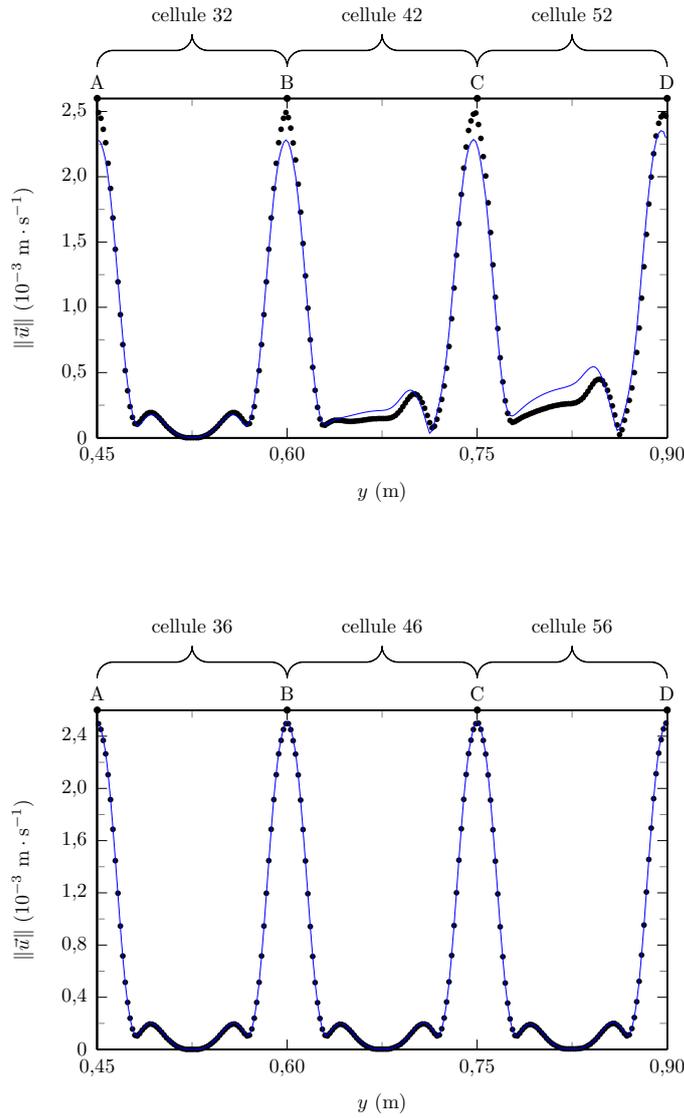


FIG. 3.15 – Profils de vitesse obtenus dans les cellules 32, 36, 42, 46, 52 et 56, dans le cas à $Pe = 1$, pour un maillage à 7160 éléments par cellule.

3.3.2 Écoulement tournant bidimensionnel

Le but de cette application est d'évaluer l'influence de la présence, dans l'équation de Navier-Stokes, d'une force volumique \vec{G} non uniforme en espace, sur la validité de la méthodologie. Considérons le milieu¹ de la FIG. 3.16, dans lequel le champ de vitesse \vec{u}_0 est régi par les équations

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_0 = 0, \end{array} \right. \quad (3.64a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho(\vec{u}_0 \cdot \vec{\nabla})\vec{u}_0 = -\vec{\nabla}p_0 + \mu\Delta\vec{u}_0 + \vec{G}, \end{array} \right. \quad (3.64b)$$

1. Le choix de ce milieu est inspiré de la géométrie d'un assemblage, bien qu'il soit très simplifié par rapport à celle-ci.

avec une force motrice \vec{G} de norme identique en tout point, de la forme

$$\frac{\vec{G}}{\|\vec{G}\|} = \begin{pmatrix} -\frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \\ \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \end{pmatrix}, \quad (3.65)$$

et un vecteur vitesse nul aux parois. Compte tenu de la faible intensité donnée à cette force (TAB. 3.3), l'écoulement est laminaire (TAB. 3.3). Les lignes de courant de \vec{G} sont des cercles concentriques centrés sur l'origine du repère (Oxy). Ainsi, compte tenu des conditions d'écoulement, les champs de vitesse et de pression sont invariants par rotation d'angle 60° et de centre l'origine du repère (Oxy).

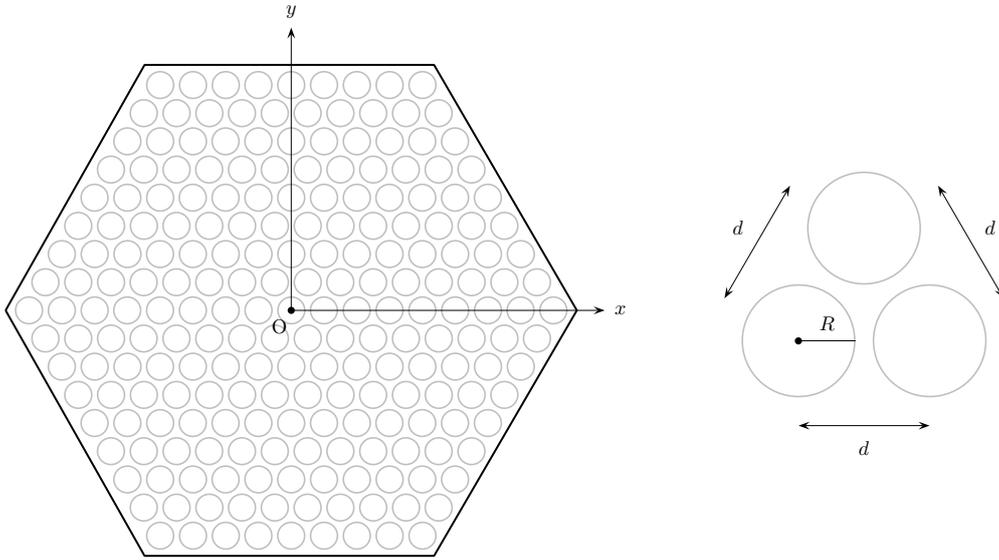


FIG. 3.16 – Définition géométrique du domaine de calcul.

Variable	Valeur	Unité
R	$6,17 \cdot 10^{-2}$	m
d	0,15	m
$\ \vec{G}\ $	10^{-6}	$\text{N} \cdot \text{m}^{-3}$
Re^a	≈ 27	–

a. Le calcul de Re est basé sur la longueur d et sur une vitesse moyenne évaluée *a posteriori*.

TAB. 3.3 – Propriétés physiques et géométriques de la simulation.

La résolution numérique des équations (3.64a) et (3.64b) est menée à l'aide de 72 processeurs en parallèle, sur un maillage comportant 1,6 millions d'éléments triangulaires. Les schémas et méthodes de résolution numériques sont identiques à ceux de l'application réalisée en 3.3.1. Une fois obtenu le champ de vitesse de référence \vec{u}_0 , on en détermine la moyenne volumique $\langle \vec{u}_0 \rangle$ basée sur le filtre m_2 . Afin que le facteur de séparation d'échelle soit suffisamment petit, la cellule unitaire choisie pour cette opération correspond à une demi-cellule périodique. Suivant ce choix, on a alors deux types de cellules dans le milieu : le type « ABMNHIJKL » (correspondant par exemple aux cellules 1, 3, 5 et 7 de

la FIG. 3.18) et le type « BCDEFGHNM » (correspondant par exemple aux cellules 2, 4, 6 et 8 à 15 FIG. 3.18), la véritable cellule périodique étant ABCDEFGHIJKL. L'une ou l'autre de ces deux cellules convient pour la prise de moyenne volumique, car elles sont suffisamment grandes pour être représentatives du milieu à l'échelle macroscopique (en particulier, chacune des deux permet de décrire complètement le milieu en la translatant, et est de porosité constante quelle que soit sa position). Suite à ces calculs, on post-traite les champs de vitesse microscopique \vec{u}_0 et moyen $\langle \vec{u}_0 \rangle$, ainsi que les lignes de courant de ce dernier et leur courbure (FIG. 3.17).

En notant $\langle u_0 \rangle$ et $\langle v_0 \rangle$ les composantes de $\langle \vec{u}_0 \rangle$ dans le repère (Oxy) , et en supposant que les lignes de courant admettent une représentation cartésienne explicite $(x, y(x))$, alors l'équation des lignes de courant est déterminée par la relation

$$\frac{dy}{dx} = \frac{\langle v_0 \rangle[x, y(x)]}{\langle u_0 \rangle[x, y(x)]}. \quad (3.66)$$

La courbure des lignes de courant de $\langle \vec{u}_0 \rangle$ est donc

$$\gamma_0 = \frac{\frac{1}{\langle u_0 \rangle} \left[\frac{\partial \langle v_0 \rangle}{\partial x} + \frac{\langle v_0 \rangle}{\langle u_0 \rangle} \frac{\partial \langle v_0 \rangle}{\partial y} - \frac{\langle v_0 \rangle}{\langle u_0 \rangle} \frac{\partial \langle u_0 \rangle}{\partial x} - \frac{\langle v_0 \rangle^2}{\langle u_0 \rangle^2} \frac{\partial \langle u_0 \rangle}{\partial y} \right]}{\left(1 + \frac{\langle v_0 \rangle^2}{\langle u_0 \rangle^2} \right)^{3/2}}. \quad (3.67)$$

Ces lignes de courant sont des cercles concentriques, sauf près de la paroi externe hexagonale où leur forme circulaire est progressivement dégénérée en une forme hexagonale. Il s'ensuit que l'hypothèse de champ de vitesse moyen uniforme, condition nécessaire d'application de conditions périodiques pour le champ de vitesse microscopique, est mise en défaut dans les cellules situées soit près du centre du domaine (où elle tend vers l'infini), soit près des coins, puisque sa direction et son intensité dépendent de la position. En dehors de ces zones, on peut considérer que la courbure de la vitesse moyenne varie peu au sein d'une cellule, les lignes de courant étant quasi rectilignes. Cette analyse laisse penser que l'erreur générée par la méthodologie peut être corrélée à la courbure du champ de vitesse moyen, ce que nous souhaitons vérifier. Le problème de cellule hydraulique (3.62a) – (3.62d) est résolu dans les cellules 1 à 15 de la FIG. 3.18, qui, compte tenu de l'invariance du champ de vitesse par rotation d'angle 60° et de centre O, peuvent être considérées comme représentatives du milieu. On effectue donc quinze simulations numériques. Comme dans la première application, le maillage utilisé pour ces simulations est identique dans chaque cellule au maillage du milieu entier.

Pour chacune des cellules considérées (de numéros $N = 1$ à 15), on caractérise l'erreur relative commise sur le champ de vitesse reconstruit \vec{u}_N^* par rapport au champ de vitesse de référence \vec{u}_0 , par

$$\mathcal{E}_N^* = \max_N \frac{\left| \|\vec{u}_N^*\| - \|\vec{u}_0\| \right|}{\|\vec{u}_0\|}. \quad (3.68)$$

On caractérise également la courbure dans une cellule N , par le rapport de la courbure $|\gamma_0|(\vec{x}_N)$ au centre de cette cellule et de la courbure dans la cellule où elle est maximale, c'est-à-dire la cellule 8 de la FIG. 3.18 :

$$\gamma_N^* = \frac{|\gamma_0|(\vec{x}_N)}{|\gamma_0|(\vec{x}_8)}. \quad (3.69)$$

Les résultats des simulations font effectivement apparaître une corrélation entre ces deux grandeurs (FIG. 3.19 et 3.20) : plus la courbure du champ de vitesse moyen est

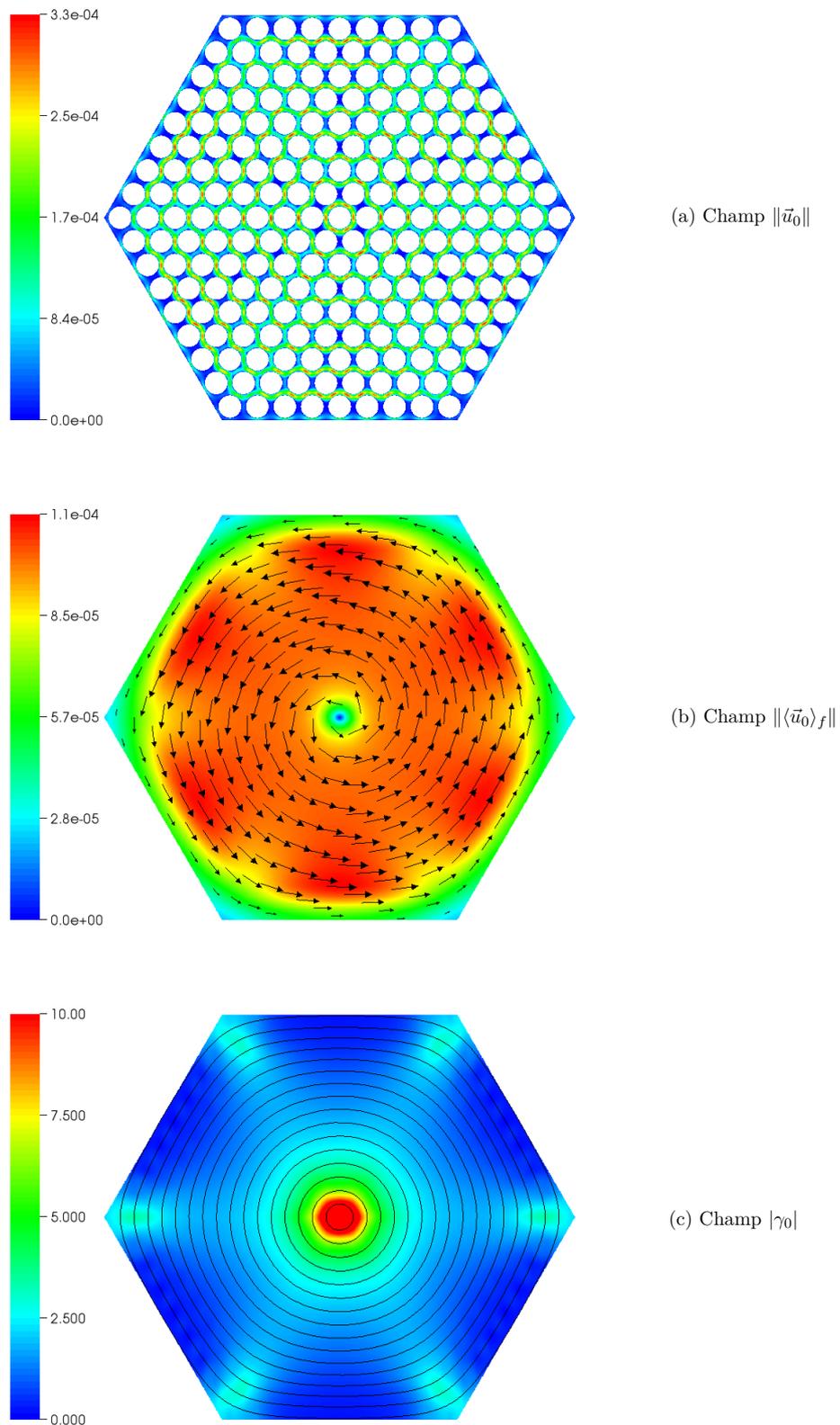


FIG. 3.17 – Visualisations (a) de la norme $\|\vec{u}_0\|$ du champ de vitesse de référence, (b) de la norme $\|\langle \vec{u}_0 \rangle_f\|$ de sa moyenne volumique intrinsèque avec superposition de vecteurs vitesse, (c) de la courbure $|\gamma_0|$ des lignes de courant du champ de vitesse moyen $\|\langle \vec{u}_0 \rangle_f\|$ avec superposition de lignes de courant.

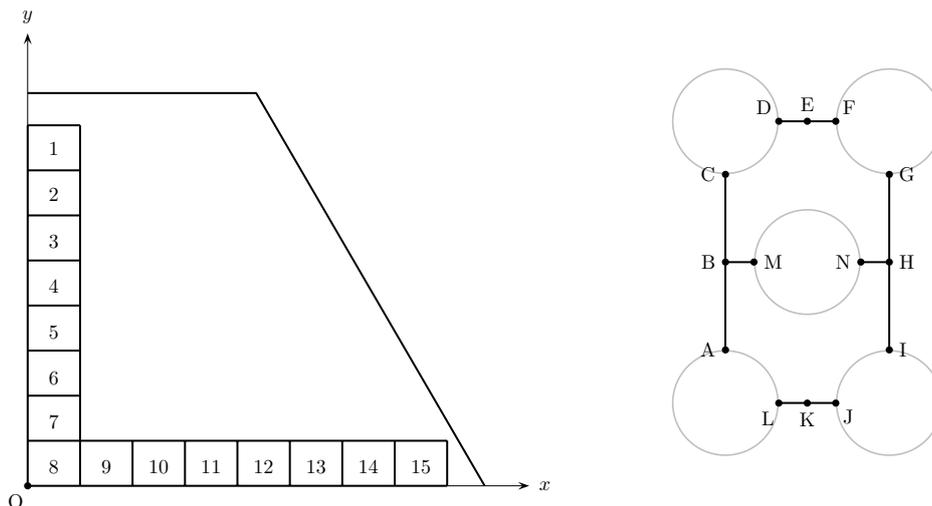


FIG. 3.18 – Position des quinze cellules d'application de la méthodologie de reconstruction, et définition de la périodicité « croisée » : les frontières périodiques sont AB/IH , BC/HG , BM/EF , NH/DE , KJ/BM et LK/NH . Les cellules 1, 3, 5 et 7 sont de type « ABMN-HIJKL », et les cellules 2, 4, 6 et 8 à 15 de type « BCDEFGHNM ».

élevée, et plus l'erreur l'est également. Comme on l'a vu, la nature rectiligne des lignes de courant du champ de vitesse moyen autorise l'utilisation de conditions de périodicité pour la vitesse dans le problème de cellule. Dans le cas contraire, cette hypothèse n'est pas valide, ce qui explique que l'erreur commise soit importante.

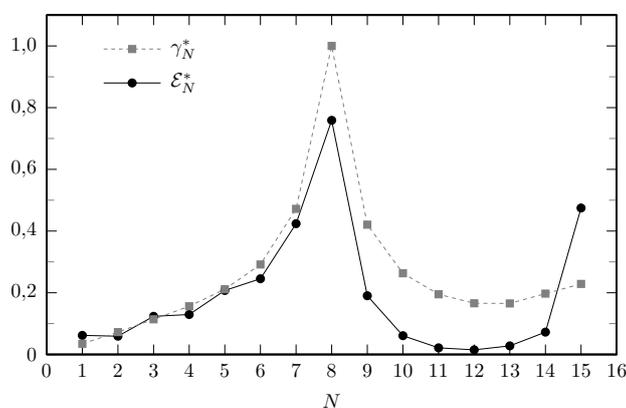


FIG. 3.19 – Superposition de la courbure du champ de vitesse moyen et de l'erreur commise par résolution des problèmes de cellule, dans chaque cellule simulée.

Dans cet exemple, le champ de vitesse à l'échelle microscopique est trop différent d'une cellule à l'autre pour pouvoir être considéré comme périodique, à cause de la force volumique \vec{G} non uniforme en espace. Autrement dit, l'écoulement à l'échelle macroscopique est trop inhomogène pour que la méthodologie fournisse des résultats corrects. Il faut toutefois souligner que cette nature homogène ou non des champs macroscopiques ne peut être définie qu'au regard de la notion de séparation d'échelle. Plus celle-ci est petite et plus le milieu compte de cellules unitaires, donc plus la taille d'une cellule est petite par rapport à l'échelle typique de variation des champs macroscopiques. Ainsi dans cet exemple, la périodicité du champ de vitesse deviendrait admissible en augmentant le nombre de cellules unitaires au sein du milieu, la paroi externe hexagonale restant fixée.

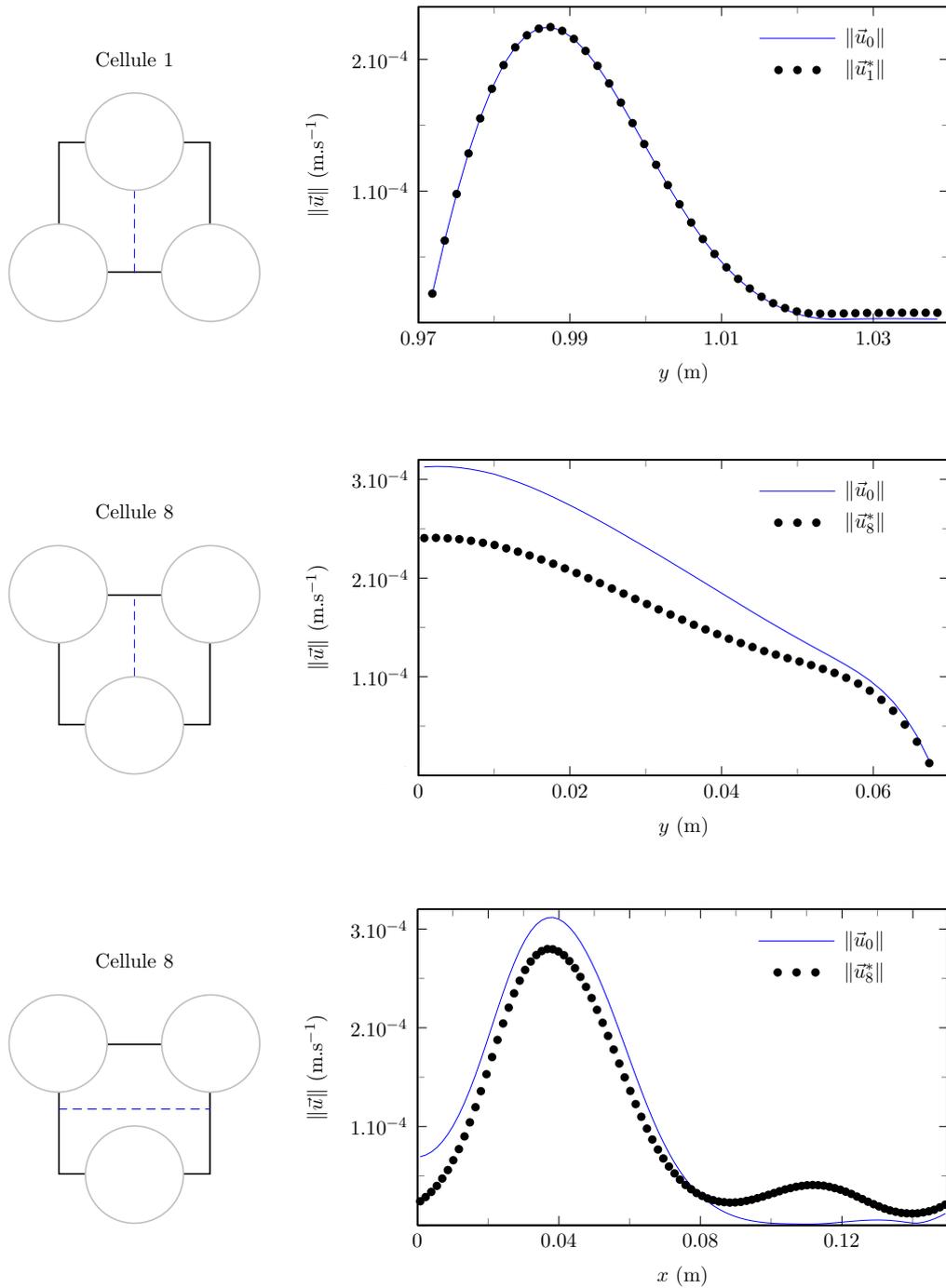


FIG. 3.20 – Profils de vitesse de référence et de vitesse solution des problèmes de cellule. Les profils tracés sont représentés en pointillés sur les cellules 1 et 8 à gauche.

Il est à noter que l'écoulement modèle traité dans cette section est finalement assez peu représentatif de l'écoulement radial dans un assemblage, où nous verrons au chapitre 4 que la vitesse radiale \vec{u}_r est telle que $\langle \vec{u}_r \rangle \approx \vec{0}$.

3.3.3 Écoulement turbulent tridimensionnel

L'objectif de cette troisième application est de valider la méthodologie de pénalisation pour un écoulement turbulent. Dans cette section, on notera \vec{U}_0 , P_0 et T_0 les moyennes statistiques des champs de vitesse \vec{u}_0 , de pression p_0 et de température θ_0 . On étudie un écoulement turbulent dans une cellule cubique de côté d contenant un « creux » cylindrique de rayon R , qui délivre par son interface un flux thermique q constant au fluide (FIG. 3.21 et TAB. 3.4). Le fluide circule selon la direction axiale.

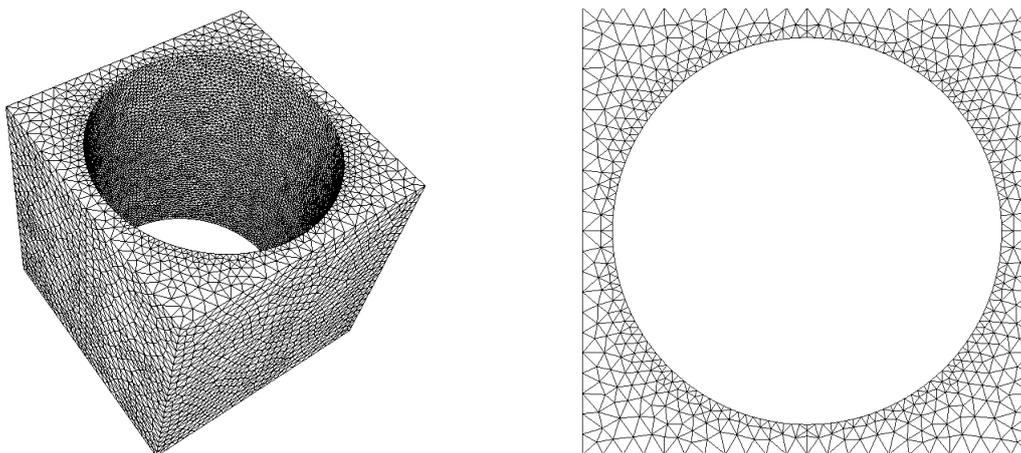


FIG. 3.21 – Maillage de la cellule vu en trois dimensions (à gauche), et coupe radiale (à droite).

Variable	Valeur	Unité
R	$6,5 \cdot 10^{-3}$	m
d	$1,5 \cdot 10^{-2}$	m
q	10^4	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$
Re^a	$1,7 \cdot 10^5$	–
Pe	1176	–

a. Le calcul de Re est basé sur le diamètre hydraulique et sur la vitesse moyenne dans la cellule.

TAB. 3.4 – Propriétés de la simulation.

Pour modéliser la turbulence, on choisit d'adopter ici le modèle $k - \varepsilon$ haut Reynolds. Cependant, il est bien connu (Cheng et Tak [35], Gajapathy *et al.* [48]) que les écoulements axiaux dans un assemblage de RNR-Na donnent naissance à des tourbillons secondaires dont l'obtention par simulation numérique n'est pas atteignable avec une modélisation $k - \varepsilon$ haut Reynolds, mais requiert l'emploi de modélisations du second ordre ($R_{ij} - \varepsilon$ par exemple), ou d'un modèle LES. Or, de telles modélisations ne sont pas accessibles dans le temps imparti (pour la LES) ou avec le code considéré (qui n'intègre pas de modèle du second ordre). L'objectif de cette section n'est donc pas de faire état d'une modélisation de référence de ce type de configuration mais simplement d'évoquer les questions relatives à l'extension des modèles précédents en turbulent RANS de type $k - \varepsilon$, puisque ce cas fait l'objet d'une application au chapitre 4.

Les équations du modèle $k - \varepsilon$ haut Reynolds en régime stationnaire sont rappelées

ci-dessous :

- pour l'hydraulique :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla} \cdot \vec{U}_0 = 0, \end{array} \right. \quad (3.70a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho(\vec{U}_0 \cdot \vec{\nabla})\vec{U}_0 = -\vec{\nabla}P_0 + \vec{\nabla} \cdot \left[\left(\mu + 2\rho C_\mu \frac{k_0^2}{\varepsilon_0} \right) \overline{\overline{D}} \right] + \vec{G}, \end{array} \right. \quad (3.70b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{U}_0 \cdot \vec{\nabla}k_0 = \vec{\nabla} \cdot \left[\left(\nu + C_K \frac{k_0^2}{\varepsilon_0} \right) \vec{\nabla}k_0 \right] + P_0 - \varepsilon_0, \end{array} \right. \quad (3.70c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{U}_0 \cdot \vec{\nabla}\varepsilon_0 = \vec{\nabla} \cdot \left[C_{\varepsilon_0} \frac{k_0^2}{\varepsilon_0} \vec{\nabla}\varepsilon_0 \right] + \frac{\varepsilon_0}{k_0} (C_{\varepsilon_1}P_0 - C_{\varepsilon_2}\varepsilon_0), \end{array} \right. \quad (3.70d)$$

où k_0 est l'énergie cinétique turbulente, ε_0 la dissipation d'énergie cinétique turbulente, $\overline{\overline{D}}$ le tenseur des taux de déformation du champ de vitesse moyen, de coefficients

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_{0i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_{0j}}{\partial x_i} \right), \quad (3.71)$$

et P_0 la production d'énergie cinétique turbulente, calculée comme

$$P_0 = 2C_\mu \frac{k_0^2}{\varepsilon_0} D_{ij} D_{ij}. \quad (3.72)$$

On utilise les valeurs couramment adoptées pour les constantes, qui sont $C_\mu = 0,09$, $C_K = 1$, $C_\varepsilon = 0,069$, $C_{\varepsilon_1} = 1,44$ et $C_{\varepsilon_2} = 1,92$;

- pour la thermique :

$$\vec{U}_0 \cdot \vec{\nabla}T_0 = \vec{\nabla} \cdot \left[(\alpha + \alpha_t) \vec{\nabla}T_0 \right] + \frac{\Phi}{\rho C_p}, \quad (3.73)$$

avec α_t la diffusivité thermique turbulente et Φ une source volumique de puissance thermique.

Dans la simulation de référence, on impose que les faces axiales et latérales de la cellule soient périodiques, c'est-à-dire que les champs \vec{U}_0 , P_0 , T_0 , k_0 et ε_0 soient identiques sur les faces en regard. La périodicité du champ de température T_0 est rendue possible par l'application d'une source volumique Φ exactement égale à l'opposée de la puissance thermique volumique délivrée par le cylindre ; ainsi, toute la puissance reçue par l'intermédiaire des interfaces est évacuée *via* ce terme source. La force volumique \vec{G} de l'équation (3.70b) permet d'avoir un champ de vitesse non nul. De plus, la périodicité des champs associée à l'invariance de la géométrie dans la direction axiale implique que les champs sont également indépendants de l'altitude (la cellule peut donc être d'extension axiale quelconque). Enfin, la vitesse au premier point de calcul près de la paroi est déterminée à l'aide de la loi logarithmique (von Kármán [117])

$$U_0^+ = \frac{1}{K} \ln y^+ + B, \quad (3.74)$$

où $K \simeq 0,4$ (constante de von Kármán) et $B \simeq 5,5$. Cette loi est applicable en pratique à partir d'une distance $y^+ \approx 30$ du premier point à la paroi, ce qui impose une contrainte sur

les mailles de paroi¹. Dans les simulations effectuées, la distance moyenne des points de calcul à la paroi est $y^+ \simeq 75$, autorisant effectivement l'utilisation de la loi logarithmique. Les champs de référence simulés numériquement sont représentés sur la FIG. 3.22.

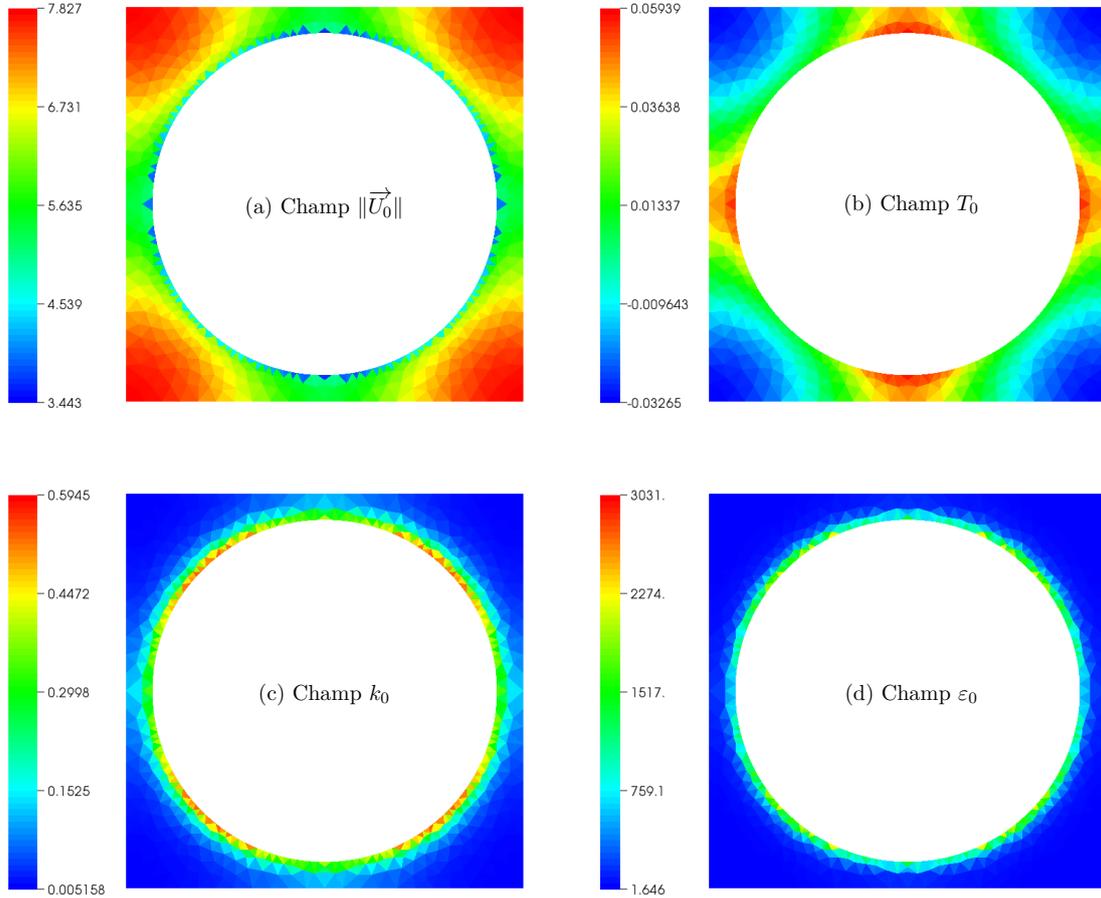


FIG. 3.22 – Visualisations des champs solutions du problème de référence.

D'une façon générale, pour établir les problèmes de cellule, on devrait écrire comme auparavant la décomposition de Gray pour les moyennes statistiques de pression et de température², ainsi que pour l'énergie cinétique turbulente et la dissipation d'énergie cinétique turbulente. Mais dans l'exemple traité ici, nous ne procédons pas à cette décomposition puisque les champs de référence sont eux-mêmes périodiques. On applique en revanche la méthode de pénalisation pour l'équation de Reynolds et pour l'équation de convection-diffusion, en remplaçant la force volumique \vec{G} et la source Φ par les termes de pénalisation :

1. La distance et la vitesse adimensionnées y^+ et U^+ sont respectivement définies par $y^+ = yU_f/\nu$ et $U_0^+ = U_0/U_f$, où $U_f = \sqrt{\nu \frac{\partial U}{\partial n} \Big|_{\text{paroi}}}$ est la vitesse de frottement.

2. Ces décompositions font donc intervenir deux types de moyennes, l'une statistique et l'autre spatiale, posant ainsi la question de leur ordre d'application. Sur cette question, qui ne nous concerne pas au premier plan, voir notamment Chandresis [31] et Drouin [40].

$$\begin{cases} (\vec{U}^* \cdot \vec{\nabla}) \vec{U}^* = -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} P^* + \vec{\nabla} \cdot \left[\left(\nu + 2C_\mu \frac{k^{*2}}{\varepsilon^*} \right) \overline{\overline{D}} \right] + \frac{1}{\omega_U} (\overline{\overline{U}}_0 - \overline{\overline{U}}^*), & (3.75a) \\ \rho C_p \vec{U}^* \cdot \vec{\nabla} T^* = \rho C_p \vec{\nabla} \cdot \left[(\alpha + \alpha_t) \vec{\nabla} T^* \right] - \frac{\overline{\overline{T}}_0}{\omega_T}. & (3.75b) \end{cases}$$

Pour la résolution des équations de transport de k^* et de ε^* , on ne fait pas appel à la technique de pénalisation comme c'est le cas pour l'hydrodynamique et la thermique ; en effet :

- la pénalisation de la vitesse suffit à obtenir le niveau de vitesse recherché, et donc, compte tenu des définitions de k et ε , les niveaux d'énergie cinétique turbulente et de dissipation turbulente recherchés. Il semble d'ailleurs que pénaliser les équations de transport de k et ε nuirait considérablement à leur stabilité numérique ;
- pour pénaliser ces équations, il faudrait disposer des valeurs moyennes d'énergie cinétique turbulente et de dissipation turbulente. Or ces quantités ne sont pas disponibles dans le cas présent, ni même en général dans les approches de changement d'échelle en milieu poreux.

En conséquence des deux remarques ci-dessus, nous pensons que l'on peut remplacer le modèle k-epsilon par la plupart des modélisations de la turbulence de type RANS pour la quantité de mouvement.

Les profils superposés, le long de l'une des arêtes de la cellule dans le plan radial, des champs de référence et des champs solutions du problème pénalisé montrent une parfaite concordance de ces champs, ce qui valide la méthode de pénalisation des équations de Reynolds et de convection-diffusion dans le cadre du modèle $k - \varepsilon$ (FIG. 3.23).

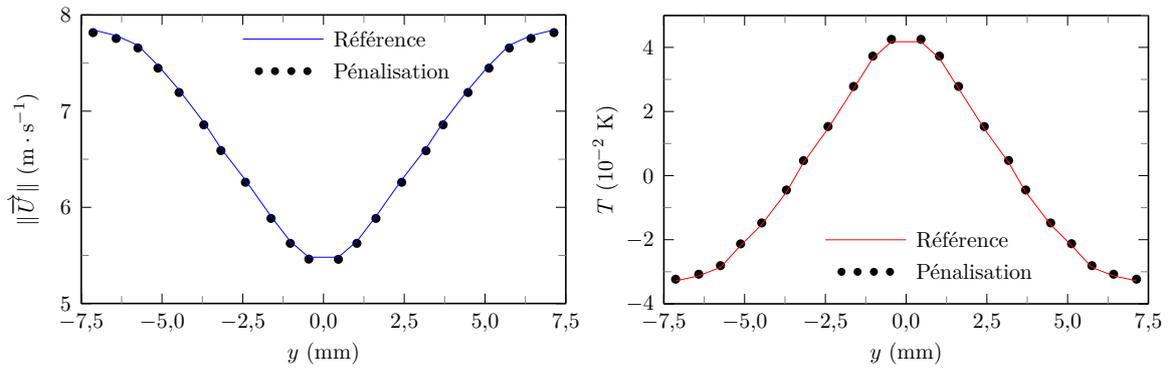


FIG. 3.23 – Profils de vitesse et de température le long d'une arête de la cellule dans le plan radial.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons en premier lieu exposé les points-clés de la méthodologie permettant la détermination « locale » – c'est-à-dire, « dans une cellule unitaire » – des champs à l'échelle microscopique à partir de leur représentation macroscopique. En second lieu, nous avons étudié plusieurs configurations modèles pour divers régimes hydrodynamiques et thermiques, dans un but de validation numérique. Dans ces configurations, un

3.4 Conclusion

calcul fin de référence a pu être mené, servant de comparaison avec les champs issus de la méthodologie. Il ressort de cette étude que la méthodologie donne d'excellents résultats si les champs recherchés sont effectivement périodiques, ce qui ne sera jamais rigoureusement le cas sauf si l'on traitait des configurations théoriques de milieu infini. Néanmoins, compte tenu de la nature des écoulements dans les assemblages à aiguilles et fils espaceurs, on peut considérer que ceux-ci se prêtent bien à l'application de la méthodologie développée à condition de se trouver dans des régimes nominaux, c'est-à-dire sans perturbation locale. Il semble en effet que dans ces configurations, l'hypothèse de périodicité des champs ou de leurs déviations spatiales constitue une bonne approximation. Au chapitre 4, des applications à ces assemblages sont mises en œuvre numériquement.

Chapitre 4

Applications à des assemblages de réacteur à neutrons rapides

L’ambition de ce chapitre est d’appliquer la méthode de retour à l’échelle microscopique, exposée précédemment (chapitre 3), à des configurations d’assemblage de réacteur à neutrons rapides. On rappelle que l’enjeu majeur de ce type d’application est de proposer à terme une CFD applicable à une portion d’assemblage, décrit dans son intégralité avec une approche macroscopique. Ces applications numériques montrent essentiellement qu’une simulation de cellule périodique discrétisée finement est réalisable en un temps de calcul modéré (et donc, est facilement reproductible dans une vision « projet »), et reproduit fidèlement les conditions de vitesse et de température régnant au sein de cette même cellule de la structure complète. Les deux premières applications s’intéressent à un régime d’écoulement laminaire et conduisent à une discussion sur les maillages utilisés. La troisième application consiste en un couplage d’un calcul de cellule avec un calcul de type « sous-canal » – ce dernier fournissant les valeurs moyennes utilisées dans le calcul de cellule – dans un régime de thermohydraulique turbulent.

4.1 Écoulement laminaire dans un assemblage à 61 aiguilles

4.1.1 Simulation numérique de l’assemblage complet

On considère une portion d’assemblage de réacteur à neutrons rapide de type « Phénix », comportant 61 aiguilles de combustible (soit quatre « couronnes » d’aiguilles autour de l’aiguille centrale), et un seul pas d’enroulement de fil espaceur (FIG. 4.1). Les valeurs des paramètres géométriques (définis sur la FIG. 2.1 page 64) sont données dans le TAB. 4.1. De plus, on conserve les propriétés physiques du sodium liquide utilisées jusqu’ici (TAB. 3.1 page 102).

La création du modèle géométrique par CAO, ainsi que du maillage est compliquée par la présence des fils espaceurs et représente une difficulté non négligeable. On souhaite de plus éviter un nombre de mailles trop conséquent. La géométrie du fil a donc été simplifiée : le fil n’est pas tangent à l’aiguille mais présente un contact arrondi avec celle-ci. Cette simplification nous évite un raffinement important du maillage, comme dans le cas d’un contact fil/aiguille anguleux. Cette simplification géométrique est souvent pratiquée mais ses effets ne sont pas tous investigués (Hamman et Berry [55], Péniguel *et al.* [87]).

Dans le plan radial, l’espace entre deux aiguilles adjacentes est discrétisé avec deux mailles (voir la FIG. 4.5 de gauche). Malgré la relative grossièreté du maillage, on aboutit à un total de 18,133 millions d’éléments tétraédriques, ce que nous considérons comme correct afin premièrement d’obtenir une solution convergée dans un temps suffisamment court, et deuxièmement de permettre un post-traitement du calcul pas trop lourd. Dans

la simulation numérique, on impose une condition de périodicité du champ de vitesse dans la direction axiale (exactement comme dans le modèle « sous-canal », où la vitesse axiale moyenne est indépendante de l'altitude). La périodicité permet de simuler un milieu « infini » dans la direction axiale, sans effets d'entrée ni de sortie. Le débit de la simulation est maintenu à l'aide d'un terme de forçage tel que celui introduit par Deschamps [39] (voir aussi l'annexe C, relation (C.24)). Ce débit « cible » Q_0 est calculé à partir de la condition initiale de vitesse uniforme W_0 , et du diamètre hydraulique D_h de l'assemblage entier. Ce dernier est défini par

$$D_h = \frac{4S}{P}, \quad (4.1)$$

où S est la surface de passage de l'assemblage et P le périmètre « mouillé » par l'écoulement dans une section transversale. Ainsi, en supposant que le fil est tangent à l'aiguille, on a

$$S = \underbrace{\frac{3\sqrt{3}}{2}H^2}_{\text{surface hexagone}} - \underbrace{n\pi(R^2 + e^2)}_{\text{surface aiguilles et fils}} \quad (4.2)$$

et

$$P = \underbrace{6H}_{\text{périmètre hexagone}} + \underbrace{2\pi n(R + e)}_{\text{périmètre aiguilles et fils}}, \quad (4.3)$$

où n est le nombre d'aiguilles (ici, $n = 61$). On aura donc

$$D_h \simeq \frac{3\sqrt{3}H^2 - 2n\pi(R^2 + e^2)}{3H + n\pi(R + e)}, \quad (4.4)$$

puis

$$Q_0 = W_0 S. \quad (4.5)$$

On définit un nombre de Reynolds global dans l'assemblage :

$$\text{Re} = \frac{\rho W_0 D_h}{\mu}. \quad (4.6)$$

Variable	Valeur	Unité
R	$6,7 \cdot 10^{-3}$	m
d	$1,457 \cdot 10^{-2}$	m
e	$5,5 \cdot 10^{-4}$	m
h	0,2	m
H	$6,726 \cdot 10^{-2}$	m
D_h	$3,888 \cdot 10^{-3}$	m
W_0	$1,256 \cdot 10^{-2}$	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
Q_0	$3,965 \cdot 10^{-5}$	$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$
Re	106	–

TAB. 4.1 – Propriétés géométriques de l'assemblage et propriétés de l'écoulement (voir aussi la FIG. 2.1 page 64).

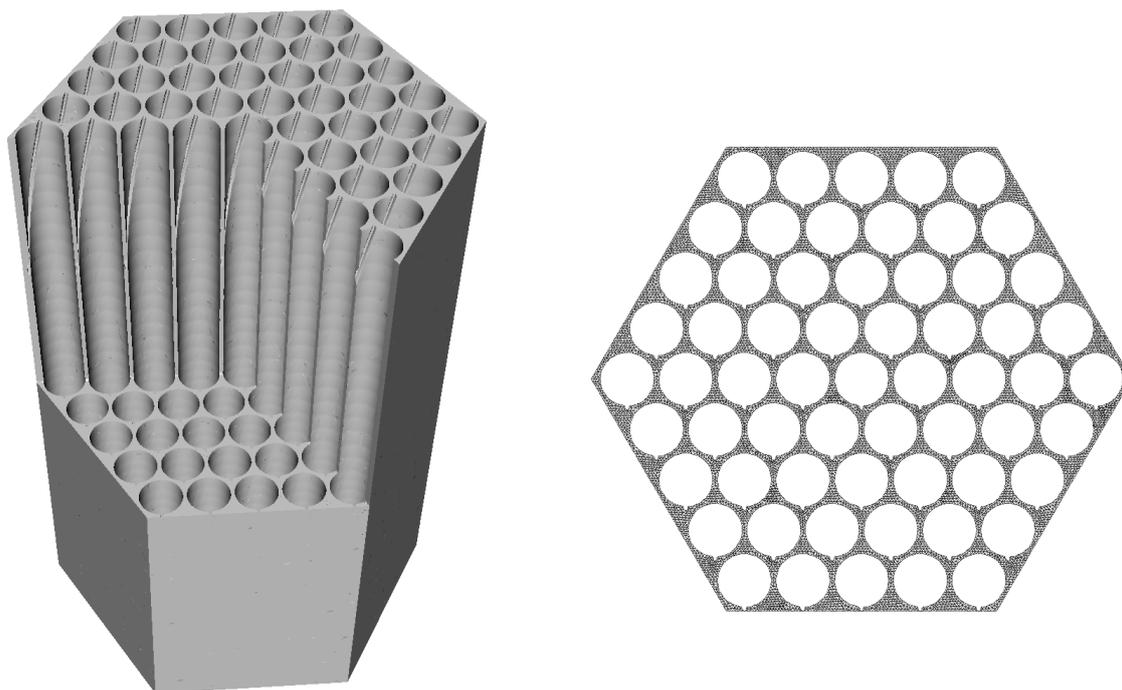


FIG. 4.1 – Coupe partielle de la structure (à gauche) et coupe radiale du maillage (à droite).

La simulation numérique a été réalisée sur 512 processeurs en parallèle, une convergence acceptable ayant été atteinte en près de 12 heures de calcul. Le schéma temporel est un schéma d'Euler implicite, avec un facteur multiplicatif du pas de temps variant de 10 à environ 400 au cours de la simulation, afin d'arriver plus rapidement au régime permanent. Le couplage vitesse-pression est pris en compte par l'intermédiaire d'un algorithme de projection suivie d'une résolution par la méthode itérative du gradient de conjugué (cf. Lascaux et Théodor [68]), dont le seuil de convergence a été fixé à l'aide de quelques tests numériques préalables. Le terme de convection de l'équation de Navier-Stokes est discrétisé par un schéma amont. Pour plus de détails sur la méthode de résolution numérique, on se reportera à Bieder *et al.* [20].

On visualise le champ de vitesse axiale w sur la FIG. 4.2. Il apparaît que la vitesse axiale est plus importante dans la dernière couronne d'aiguilles (près de la paroi) qu'au cœur de l'assemblage puisque les sections de passage y sont plus faibles, et qu'elle est uniforme dans les autres couronnes.

Lorsque le champ de vitesse à l'échelle macroscopique est déterminé, on applique le procédé déjà exposé dans les chapitres précédents, qui consiste à définir un maillage de post-traitement pour le calcul numérique des moyennes volumiques. Ce maillage comporte ici 2,16 millions de mailles parallélépipédiques, sur lequel est calculée numériquement la moyenne volumique du champ de vitesse. En raison des effets de bord liés au filtrage, on notera que seule une coupe transversale à mi-hauteur fournit un champ de vitesse moyen ayant un sens physique (le volume de prise de moyenne possède une extension axiale identique à celle de l'assemblage considéré, c'est-à-dire correspondant à un pas de fil). Ce calcul de moyenne volumique permet de confirmer visuellement l'existence d'un mouvement de fluide radial moyen en périphérie de l'assemblage, qui est dû à la paroi externe hexagonale : en effet, le débit entrant dans un sous-canal périphérique ne peut être dévié que dans la direction de la paroi, contrairement aux sous-canaux internes où il peut être dévié dans

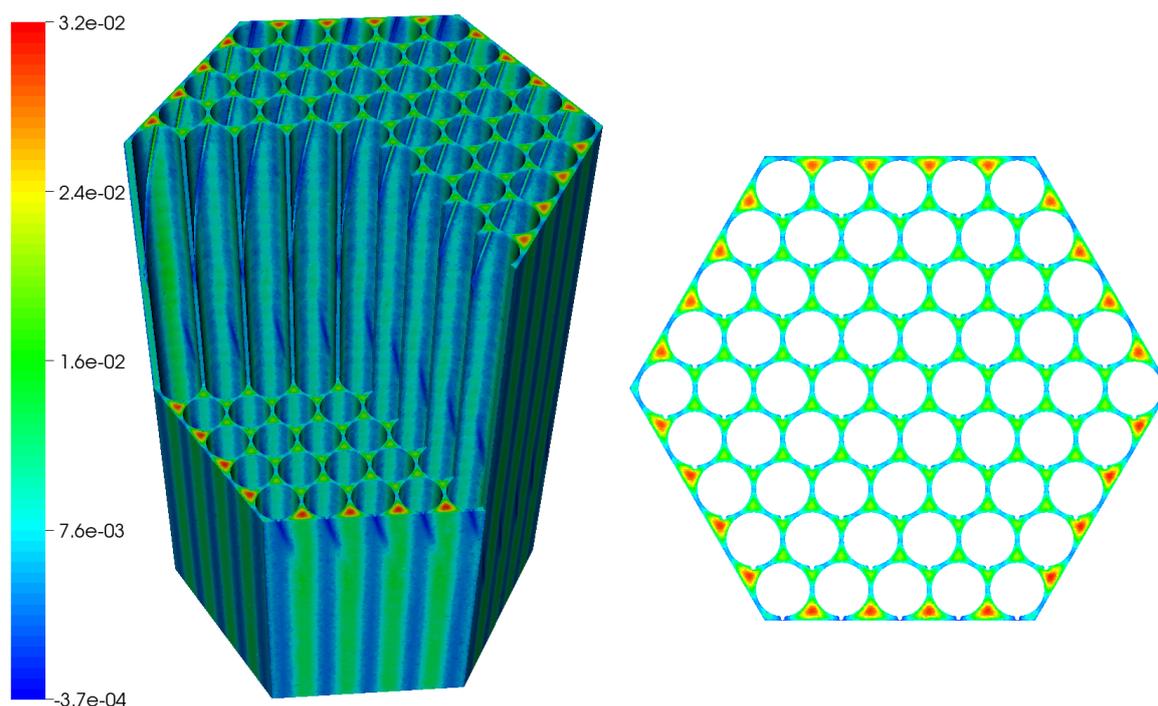


FIG. 4.2 – Champ de vitesse axiale dans l’assemblage de 61 aiguilles : vue 3D (à gauche) et coupe transversale dans la section d’entrée ou de sortie.

l’un ou l’autre des sous-canaux adjacents. Ce mouvement périphérique s’effectue dans le sens de la rotation du fil, puisque le fluide « suit » le fil (FIG. 4.3 (a)). D’autre part, étant donné que la vitesse moyenne radiale $\langle \vec{u}_r \rangle$ devient approximativement nulle jusqu’à l’avant-dernière couronne d’aiguilles avant la paroi (FIG. 4.3 (b)), la séparation d’échelles paraît suffisamment bonne pour que le cœur de l’assemblage ne soit pas influencé par les bords (bien qu’il y ait seulement huit cellules unitaires au maximum dans la direction x , et quatre dans la direction y).

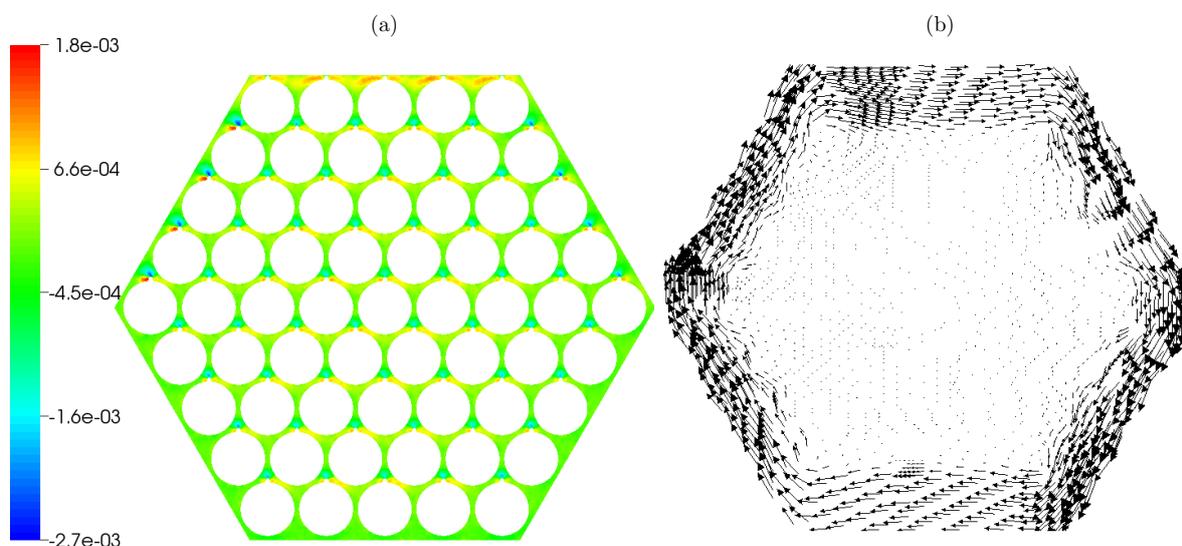


FIG. 4.3 – (a) Coupe radiale à mi-hauteur de la composante u de la vitesse à l’échelle microscopique. (b) Vecteurs de vitesse moyenne radiale dans le même plan.

4.1.2 Simulation numérique d'une cellule

La cellule de périodicité retenue ici est représentée sur la FIG. 4.4 (voir également la FIG. 2.8 page 74). Pour reconstruire le champ de vitesse à l'échelle microscopique dans une telle cellule, on applique la procédure développée au chapitre 3, consistant à utiliser des conditions de périodicité du champ de vitesse sur chaque face de la cellule, et à remplacer le terme de forçage du débit de la simulation complète par un terme de pénalisation impliquant la moyenne de vitesse dans la cellule. On isole la cellule centrale de l'assemblage (FIG. 4.4), loin des parois externes : ainsi, la condition de périodicité dans les directions radiales est correctement satisfaite. La périodicité axiale dans la cellule, quant à elle, est numériquement acquise, puisque le champ de vitesse de référence est lui-même imposé périodique dans la simulation complète. La moyenne « cible » intervenant dans le terme de pénalisation est calculée à partir de la simulation complète.

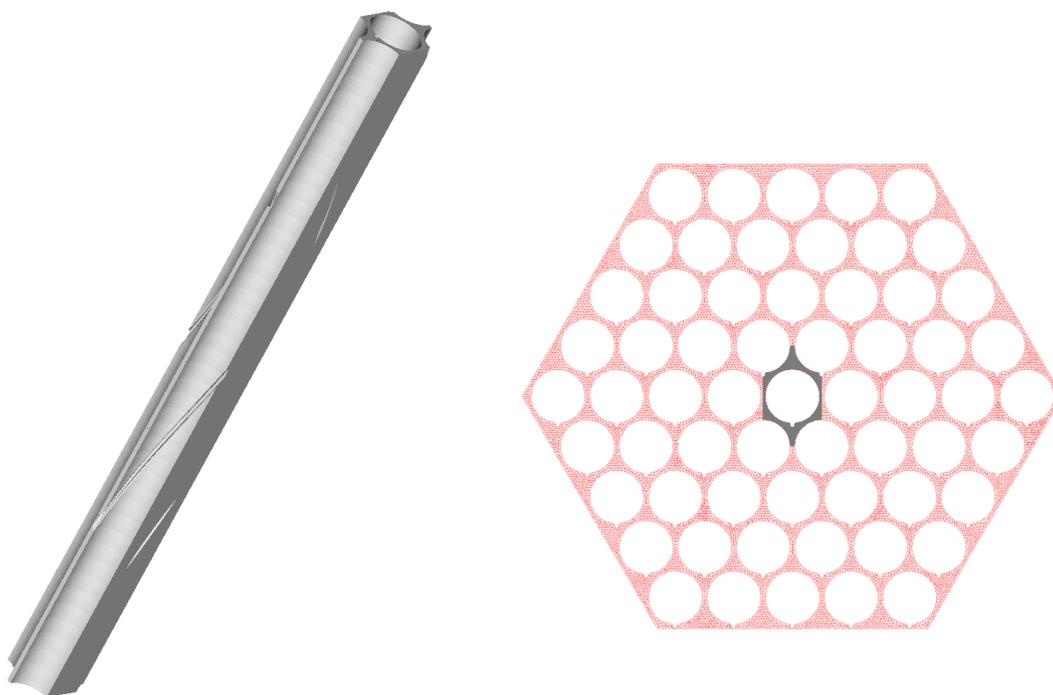


FIG. 4.4 – Cellule d'application de la méthodologie de retour à l'échelle microscopique, en gris : vue 3D isolée (à gauche) et coupe radiale au sein de l'assemblage (à droite).

Plus encore que pour l'assemblage entier, le maillage de la cellule représente un défi important. La géométrie est d'abord obtenue par extraction à partir de l'assemblage entier. Ensuite, le maillage est créé en imposant que les faces parallèles entre elles de la cellule soient maillées de façon identique, ce qui représente la difficulté essentielle. La périodicité du maillage est une condition indispensable à une résolution numérique périodique dans le code `Trio_U`. *In fine*, le maillage obtenu est beaucoup plus fin que celui de la simulation complète (FIG. 4.5), car il comporte quatre mailles entre aiguilles adjacentes pour un total de 6,127 millions de mailles. Si l'on avait maillé toute la structure avec une telle finesse, on aurait obtenu environ 220 millions de mailles (contre, rappelons-le, un peu plus de 18 millions pour le maillage retenu).

Les paramètres de la simulation de cellule sont identiques à ceux de la simulation complète, hormis l'inversion de la matrice de pression qui utilise une méthode de Cholesky. Le calcul est mené sur 48 processeurs en parallèle ; la convergence est atteinte en approxi-

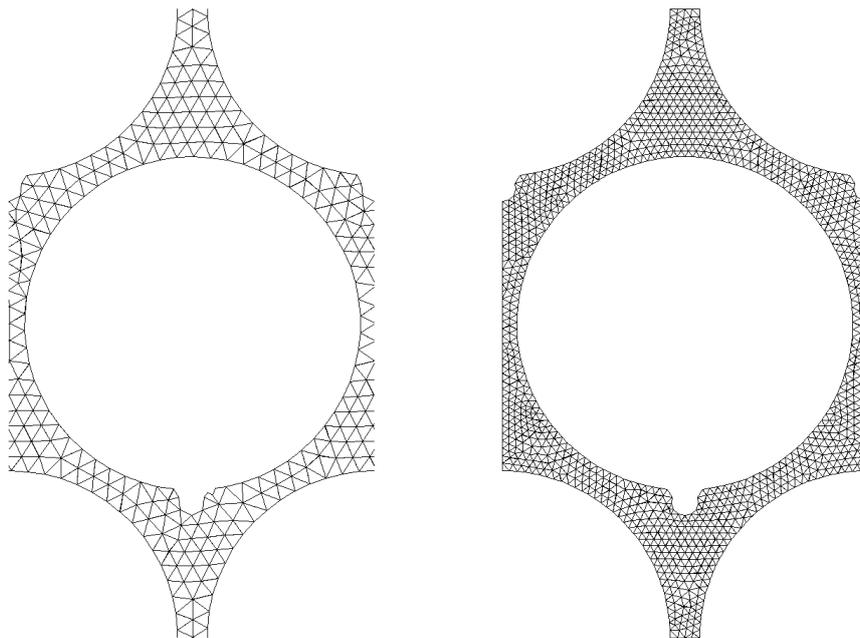


FIG. 4.5 – Coupe radiale du maillage de l’assemblage complet (à gauche) et de la cellule unitaire (à droite).

mativement 36 heures de calcul. Quelques visualisations du champ de vitesse obtenu sont données sur la FIG. 4.6.

4.1.3 Résultats et interprétation

Le tracé des profils axiaux sur la FIG. 4.7 fait apparaître que la composante de vitesse radiale est presque identique dans les deux simulations¹, alors que la composante axiale présente un écart de l’ordre de 20 %. Cette observation tend à montrer que dans le régime d’écoulement considéré, l’intensité des vitesses radiales est pas ou peu dépendante du débit axial. La qualité des résultats nous semble donc décevante.

Cependant, ces résultats sont à prendre avec précaution : en effet, compte tenu des observations faites à propos de la première application du chapitre 3 (section 3.3.1), un fort effet de maillage est suspecté pour expliquer l’écart constaté sur les vitesses axiales. La forme globalement plus aplatie des profils de vitesse axiale dans la simulation complète laisse penser à un effet d’uniformisation par diffusion numérique, ce qui concorde avec le relatif manque de finesse du maillage dans cette simulation. De plus, le calcul de la moyenne « cible » de vitesse à partir de la simulation de référence est lui-même soumis à une incertitude non négligeable parce que la cellule extraite de l’assemblage complet coupe en effet un grand nombre de mailles. Afin de confirmer ces éléments d’explication sur les écarts entre simulation complète et simulation de cellule, on effectue un nouveau calcul avec un maillage identique entre les deux simulations à comparer.

1. Les oscillations constatées sur ces profils, plus importantes dans la simulation complète que dans la simulation de cellule, proviennent uniquement du post-traitement sur des maillages différents. On a défini un nombre identique de points de « sonde » dans les deux simulations, le champ de vitesse étant extrapolé en chaque point.

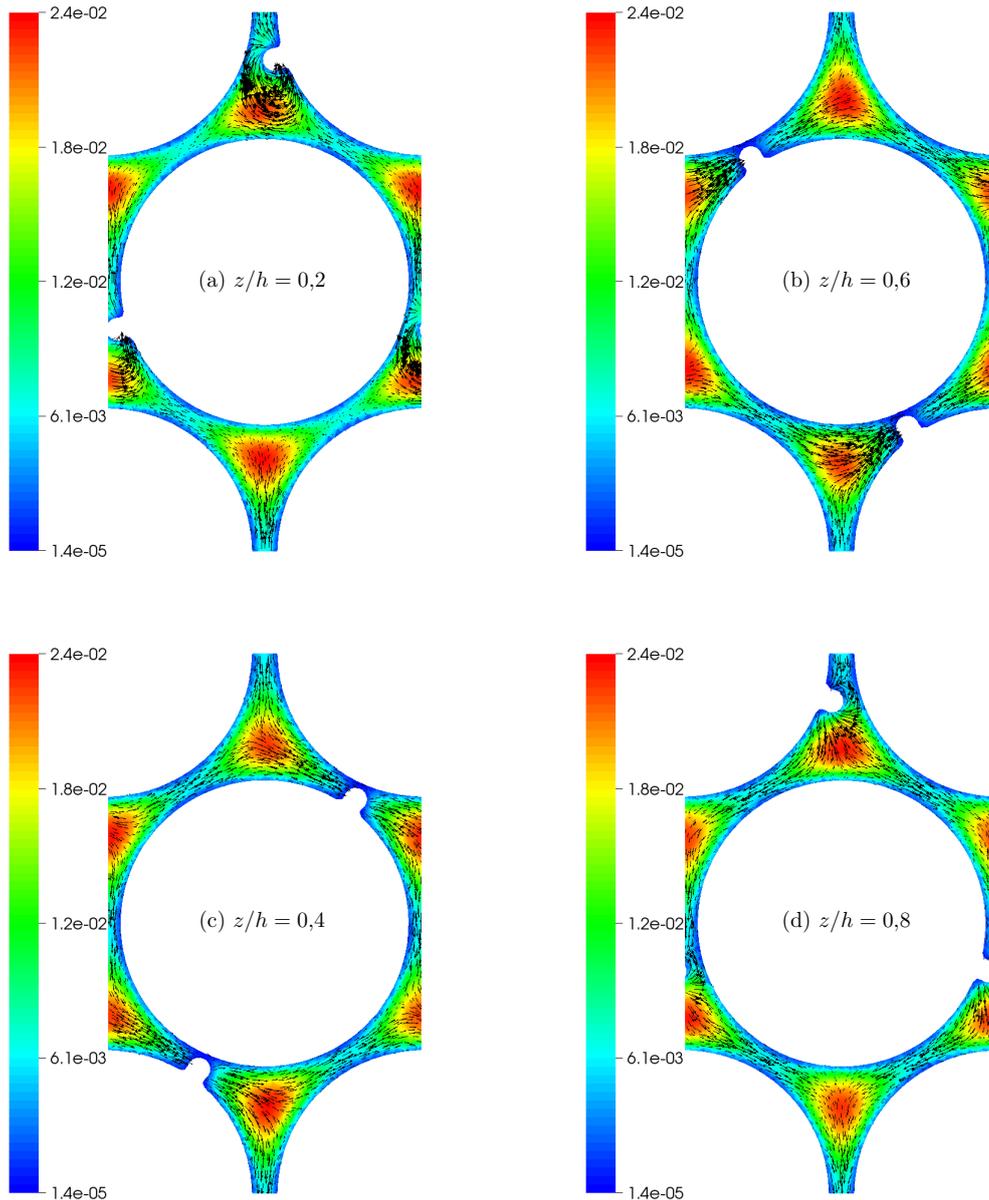


FIG. 4.6 – Coupes de vitesse axiale à différentes altitudes, avec superposition des vecteurs de vitesse radiale.

4.2 Écoulement laminaire dans une configuration modèle d'assemblage

4.2.1 Simulations de référence et de cellule

Dans l'application précédente, un biais introduit dans la démarche, lié au maillage, empêche de conclure de manière définitive sur la qualité des résultats : le maillage de la simulation complète est trop différent de celui de la cellule, conduisant à comparer des calculs de finesse très différente. La nouvelle application développée ici prolonge donc l'application précédente en tentant de s'affranchir de tout effet de maillage. Nous étudions une configuration « isomaillage », où le maillage de la simulation complète de référence est obtenu par duplication du maillage de cellule déjà créé pour la première application. Comme nous l'avons déjà mentionné, il n'est pas envisageable de mailler tout l'assemblage de la

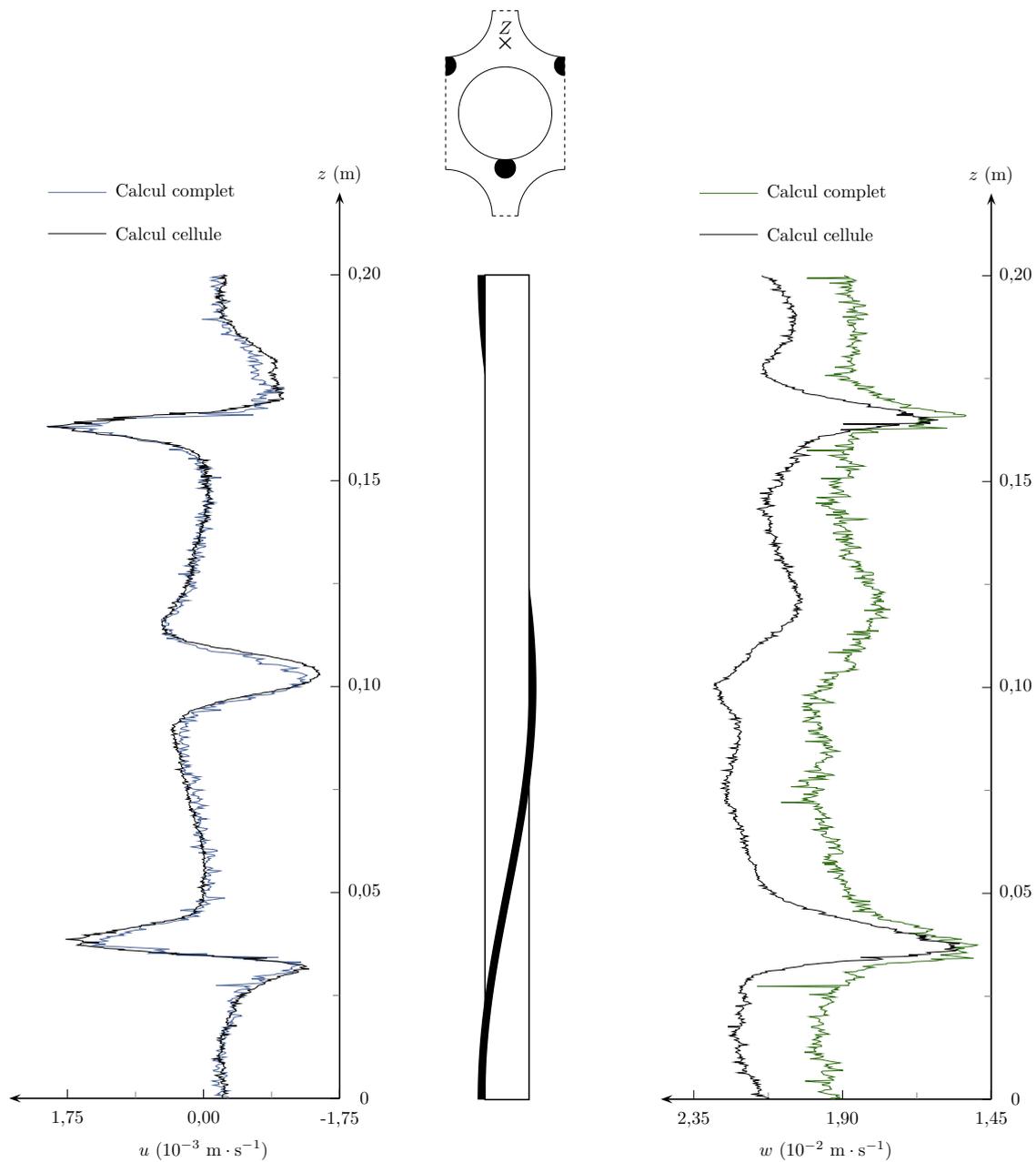


FIG. 4.7 – Profils le long de « Z » de la composante radiale u de vitesse (à gauche) et de la composante axiale w (à droite), obtenus dans la simulation complète et dans la simulation de cellule (assemblage de 61 aiguilles).

même façon que la cellule, non seulement à cause de la taille trop importante du maillage résultant, mais surtout à cause de la difficulté de raccord avec les zones périphériques de l'assemblage. Le choix est donc fait de considérer une configuration simplifiée d'assemblage définie comme un bloc parallélépipédique constitué de 3×3 cellules (et toujours une seule cellule dans la direction axiale), et qui contient ainsi 55,143 millions de mailles (FIG. 4.8).

Les caractéristiques de cette nouvelle simulation sont les mêmes que celles données dans le TAB. 4.1. Une condition de vecteur vitesse nul est imposée sur le « boîtier » externe. La simulation est réalisée en parallèle sur 1024 processeurs. Les autres paramètres de la simulation demeurent inchangés par rapport à la première application de ce chapitre.

Une solution convergée est obtenue en 20 heures de calcul environ. la FIG. 4.8 montre le champ de vitesse axial dans l'assemblage, qui présente dans la région centrale une relative similarité avec le champ de vitesse dans l'assemblage à 61 aiguilles.

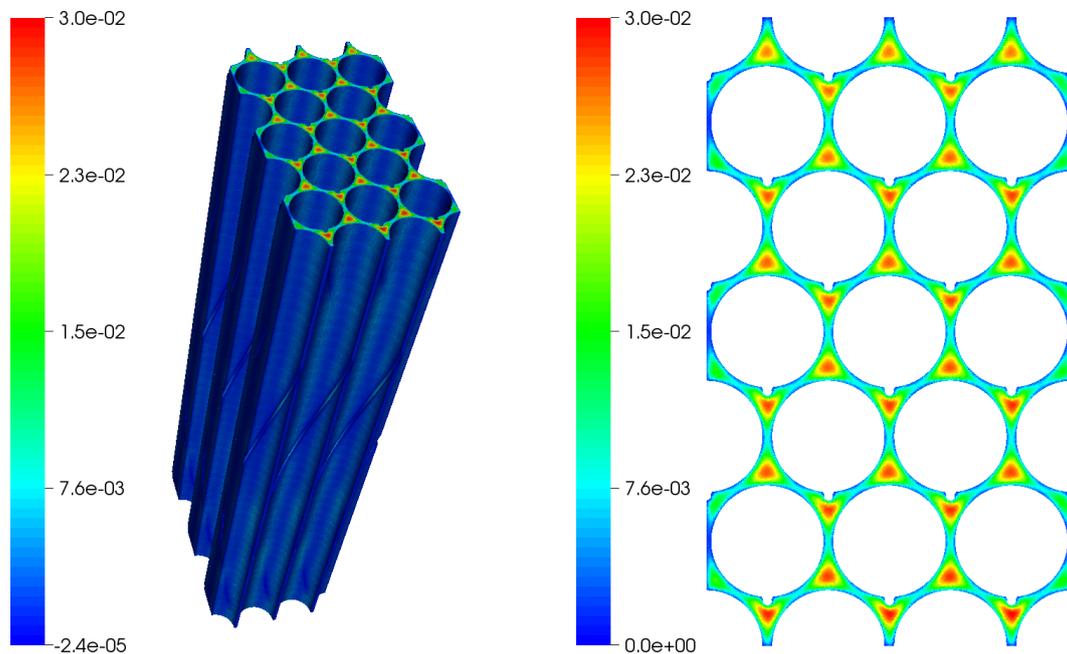


FIG. 4.8 – Champ de vitesse axiale dans la configuration modèle : vue 3D (à gauche) et coupe transversale dans la section d'entrée ou de sortie.

On déduit de ce calcul de référence la moyenne du champ de vitesse dans la cellule centrale de l'assemblage 3×3 , puis on réalise la simulation numérique de cette cellule en appliquant la même procédure qu'en 4.1.2 : seule la moyenne « cible » intervenant dans le terme de pénalisation est modifiée. Les schémas numériques demeurent inchangés.

4.2.2 Résultats et discussion

À l'issue de ces deux calculs menés avec une discrétisation strictement identique, on superpose à nouveau les profils radiaux et axiaux de vitesse (FIG. 4.9). L'écart qui avait été constaté sur la FIG. 4.7 se trouve nettement atténué. Cela confirme le rôle important joué par la finesse de discrétisation, qui influence la perte de charge dans le faisceau. Néanmoins, un écart assez faible subsiste à la fois sur la composante axiale et sur la composante radiale : il trouve vraisemblablement son origine dans l'hypothèse de périodicité adoptée dans le calcul de cellule, hypothèse rendue imparfaite par la proximité du « boîtier » externe, qui ne se trouve qu'à une cellule de distance de la cellule centrale. Malgré tout, le calcul de cellule – avec périodicité et pénalisation – paraît correctement validé dans cette configuration modèle.

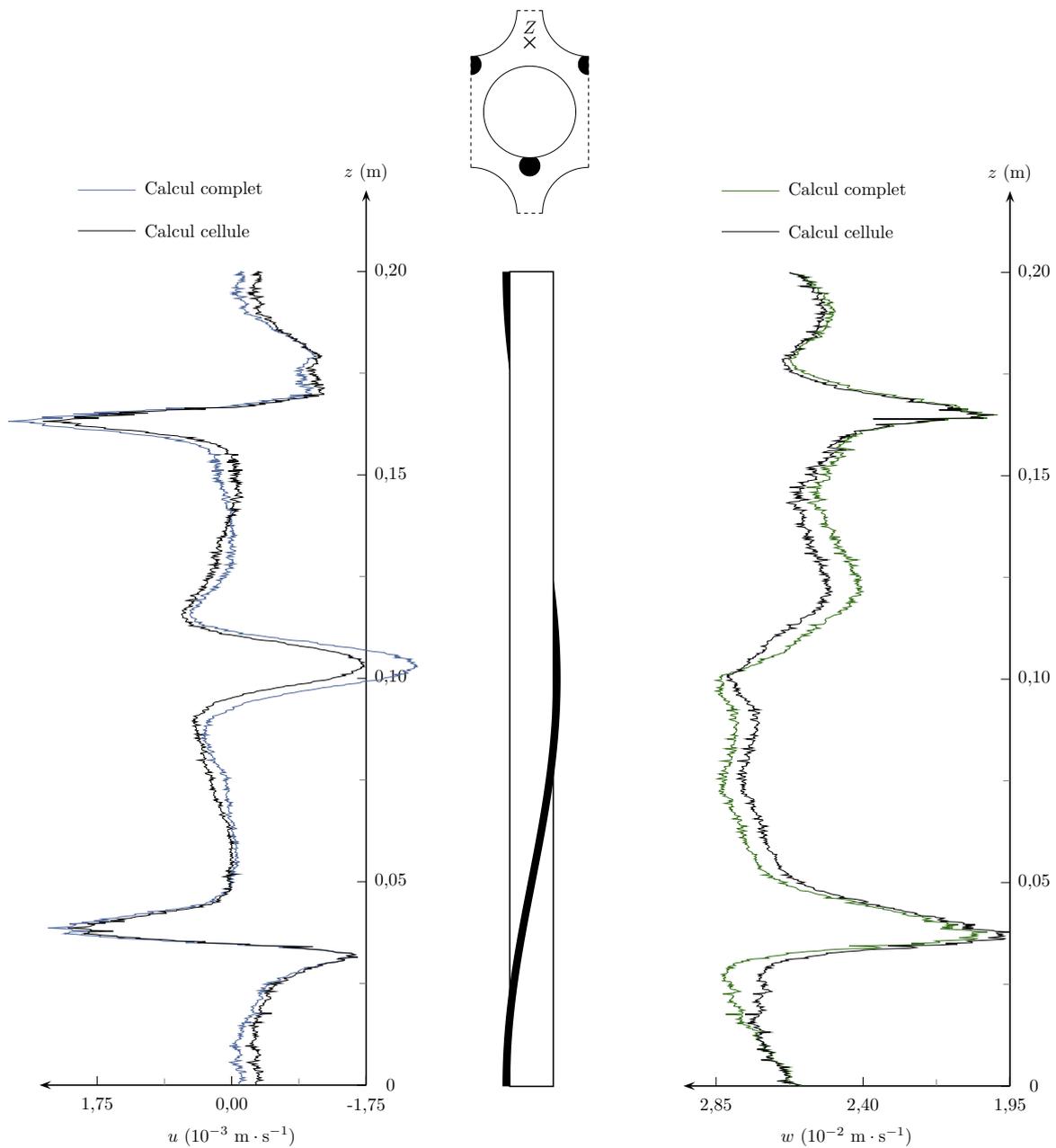


FIG. 4.9 – Profils le long de « Z » de la composante radiale u de vitesse (à gauche) et de la composante axiale w (à droite), obtenus dans la simulation complète et dans la simulation de cellule (assemblage modèle).

4.3 Couplage « sous-canal »/cellule en régime turbulent

4.3.1 Simulation « sous-canal »

Dans les applications développées jusqu'ici, les données macroscopiques nécessaires aux problèmes de cellules provenaient d'un calcul fin de référence. Or, dans les applications liées aux assemblages de RNR-Na, un tel calcul est difficilement réalisable. Il semble donc intéressant d'étudier une situation où les données macroscopiques proviennent d'une modélisation « sous-canal », ce qui permet en particulier de faire intervenir la tempéra-

ture¹. Cette configuration correspond d'ailleurs à la véritable application cible pour les assemblages de RNR-Na.

Le couplage proposé ne conduira pas à une réelle validation de la méthodologie de retour à l'échelle locale, en raison de l'absence d'un calcul de référence auquel comparer nos résultats, mais montrera que sa mise en œuvre sur un écoulement complexe dans une géométrie complexe est relativement aisée. Nous reprenons la modélisation « sous-canal » exposée au chapitre 2, et l'appliquons à un assemblage toujours composé de 61 aiguilles, mais avec cinq pas de fil espaceur (voir les FIG. 2.4 et 2.7). Dans le modèle « sous-canal », on impose un débit massique Q_{tot} (TAB. 4.2). Rappelons que le nombre de Reynolds global correspondant à ce débit est défini par la relation

$$\text{Re} = \frac{Q_{\text{tot}} D_h}{\mu S}. \quad (4.7)$$

Variable	Valeur	Unité
Q_{tot}	15,286	$\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$
Re	45 400	–
Pe	314	–

TAB. 4.2 – Caractéristiques de la simulation de couplage « sous-canal »/cellule.

La surface des aiguilles délivre un flux thermique variable axialement suivant une loi en cosinus (FIG. 4.10) :

$$q(z) = 2,2 \cdot 10^4 \cos [0,855\pi (z - 2,5h)] \text{ en } \text{W} \cdot \text{m}^{-2}. \quad (4.8)$$

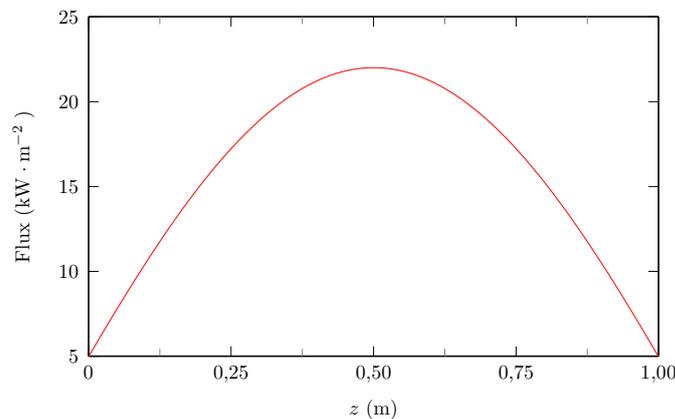


FIG. 4.10 – Profil de flux thermique surfacique dégage par les aiguilles (équation (4.8)).

4.3.2 Simulation numérique d'une cellule

Bien que le modèle « sous-canal » ne prenne pas en compte les notions d'énergie cinétique turbulente et de dissipation turbulente (les effets de la turbulence sont pris en compte *via* des corrélations de diffusivité turbulente), on adopte un modèle k-epsilon pour

1. Dans les deux applications précédentes, nous n'avons pas pris en compte le champ de température, sans quoi la convergence numérique aurait été très lente, particulièrement dans le régime laminaire considéré.

la simulation de cellule. Dans le cadre de cette approche de la turbulence, largement répandue à l'échelle industrielle, une étude de la pénalisation a déjà été proposée en 3.3.3 (page 115) pour une géométrie constituée de tubes, sans fils espaceurs. On considère la cellule unitaire dont le centre coïncide avec le centre de l'assemblage (FIG. 4.11) ; le maillage de cette cellule est identique à celui utilisé dans les applications précédentes de ce chapitre. Soulignons qu'une simulation de l'assemblage entier avec une telle résolution de maillage aurait impliqué environ 1,125 milliards de mailles, ce qui aurait paru difficilement réalisable pendant la thèse et d'un post-traitement excessivement délicat. Le régime d'écoulement imposé dans la simulation « sous-canal » a en fait été déterminé en fonction du maillage de la cellule. En effet, en supposant que ce dernier ne soit pas modifiable à cause de la difficulté liée à sa création, on doit se placer dans un régime qui autorise l'utilisation de la loi standard logarithmique afin que le modèle k-epsilon renvoie des valeurs correctes de viscosité turbulente en proche paroi. Pour le régime choisi, la distance adimensionnée de la première maille à la paroi est en moyenne de $y^+ = 58$.

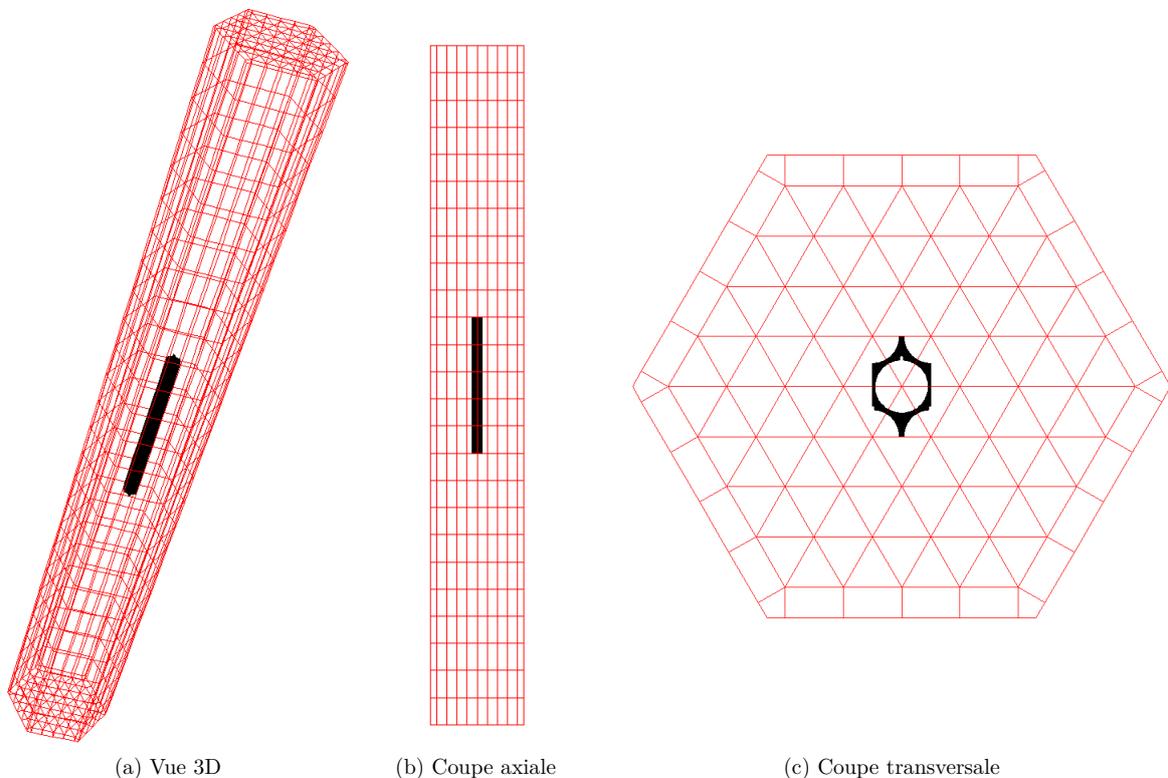


FIG. 4.11 – Positionnement de la cellule considérée (en noir) dans l'assemblage (en rouge).

4.3.3 Analyse des résultats

La FIG. 4.12 montre une coupe du champ de vitesse axiale ainsi que du champ de température. Dans cette coupe de température, l'amplitude de la déviation $\tilde{\theta}^*$ est d'environ 4,5 K pour une température moyenne de l'ordre de 535 K. Ainsi, la température microscopique s'identifie à la température moyenne dans la section et peut être considérée comme quasi uniforme dans chaque section transversale.

La FIG. 4.13 indique que la température microscopique obtenue par la simulation numérique de cellule se superpose avec la température macroscopique obtenue par la simulation « sous-canal » (cette dernière possède un point d'inflexion au centre de l'assemblage

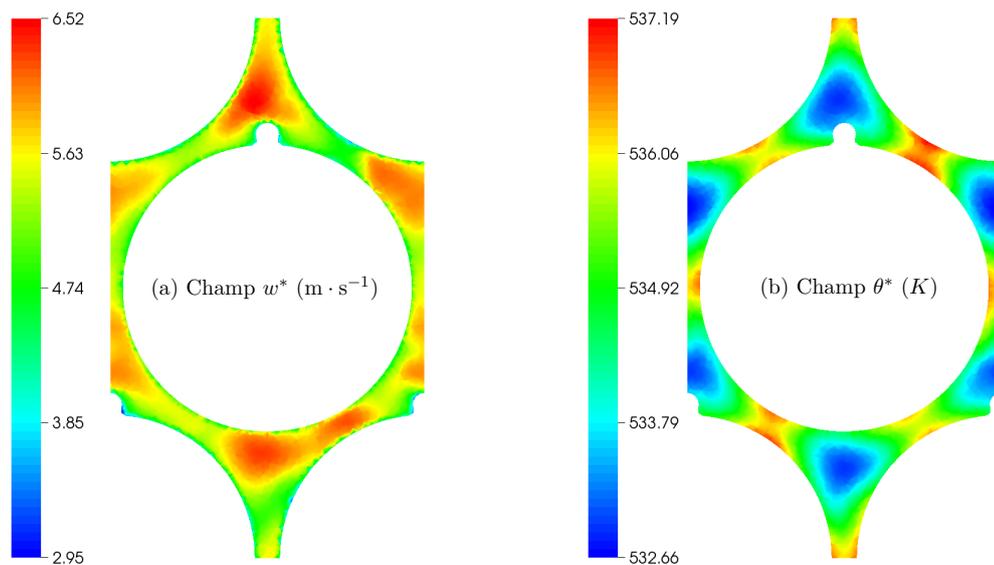


FIG. 4.12 – Coupes de vitesse axiale et de température à mi-hauteur.

en raison du profil de flux surfacique imposé sur les aiguilles). Mais cette observation est en fait d'une portée assez limitée : comme on impose, dans le problème de cellule, un gradient de température moyen dont la valeur est tirée de la simulation « sous-canal », et que la déviation spatiale de température est faible, il est facilement concevable de retrouver le même profil de température avec la simulation de cellule qu'avec le modèle « sous-canal ». Enfin, on complète le post-traitement par le tracé des profils axiaux de ces champs sur la FIG. 4.14.

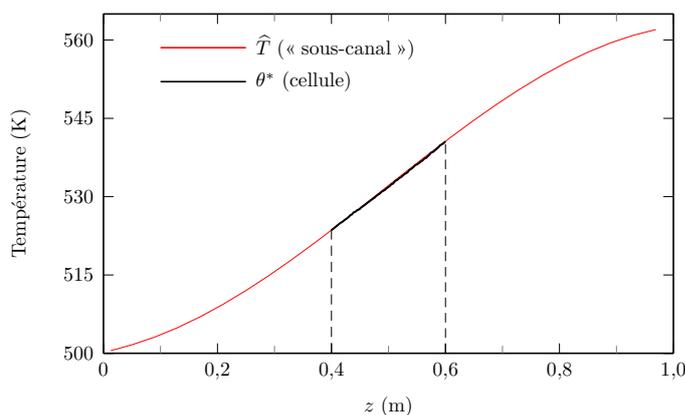


FIG. 4.13 – Profils axiaux de température issus du modèle « sous-canal » (température macroscopique) et de la simulation de cellule (température microscopique), au centre de l'assemblage.

Évidemment, la méthode est tributaire de la pertinence du modèle « sous-canal », qui fournit les données d'entrée de la simulation de cellule. C'est pourquoi l'application présentée ici ne constitue qu'un élément très partiel de validation du couplage « sous-canal »/cellule. Pour achever cette validation, il semble incontournable de réaliser une ou plusieurs simulations fines de référence de tout l'assemblage. Cette application nous semble néanmoins constituer une preuve de la faisabilité de ce couplage en contexte industriel.

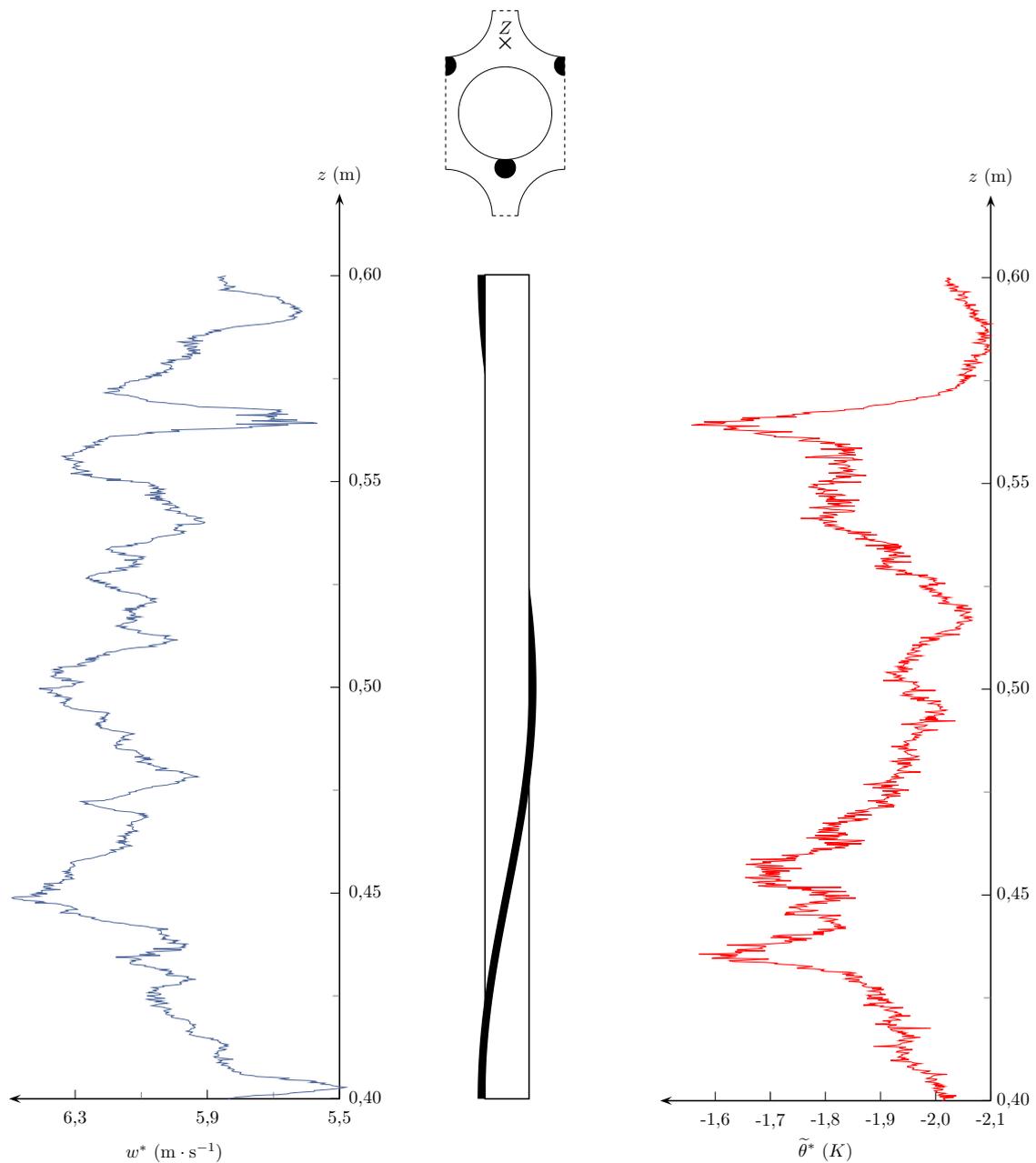


FIG. 4.14 – Profils le long de « Z » de la composante axiale w de vitesse (à gauche) et de la déviation de température $\tilde{\theta}^*$ (à droite) obtenues dans la simulation de cellule.

4.4 Conclusion

Consacré à des applications de type « assemblage » de la méthode de retour à l'échelle locale, ce quatrième chapitre a notamment permis de mettre en lumière les points suivants :

- (i) le passage à des applications tridimensionnelles aussi complexes accroît à l'évidence la difficulté de validation de la méthodologie : contrairement au chapitre précédent et ses domaines de calcul bidimensionnels, un calcul complet de référence, sur un domaine suffisamment étendu et avec une finesse de discrétisation suffisante, est apparu irréaliste dans le cadre de cette thèse, ce qui nous a conduit à relâcher le

maillage ou à étudier un modèle géométrique plus réduit d'assemblage. Nous avons abouti dans ce dernier cas à une validation satisfaisante de la méthodologie ;

- (ii) indépendamment des difficultés liées à la validation de la procédure, ces applications ont montré qu'un calcul de cellule pouvait être mené à convergence en un temps raisonnable (moins de 24 heures sur 256 processeurs en parallèle), et pouvait donc être reproduit dans le cadre d'études paramétriques. L'objectif n'était pas tant de valider la physique de l'écoulement que de mettre en œuvre la méthodologie de reconstruction des champs fins dans une cellule unitaire ;
- (iii) le couplage « sous-canal »/cellule réalisé reste partiellement en suspens et possède ici un intérêt essentiellement illustratif. Il aurait été matériellement encore plus difficile d'achever un calcul de convection forcée turbulente dans un assemblage complet, avec plusieurs enroulements de fil espaceur. Cependant, un tel calcul sera à l'avenir incontournable pour valider complètement la reconstruction et le couplage « sous-canal »/CFD. Parallèlement, il pourra aussi servir à valider numériquement la modélisation « sous-canal ».

On peut d'autre part souligner que le passage à des modélisations turbulentes ne pose pas de problème : la modélisation $k - \varepsilon$ haut Reynolds est ici utilisée à titre d'exemple mais d'autres types de modélisations (bas Reynolds, $R_{ij} - \varepsilon$, LES) sont aussi envisageables. Enfin, le principal enjeu de l'industrialisation de la méthodologie dans le cadre des assemblages de RNR-Na se heurte à deux limitations : le traitement de la reconstruction en proche paroi (qui est une zone d'intérêt en raison de l'existence de forts gradients des champs), et la génération « automatique » de maillages.

Dans le cinquième et dernier chapitre, une méthode de couplage itératif utilisant la méthodologie retour à l'échelle locale est développée dans le but de simuler des situations accidentelles d'écoulement.

Chapitre 5

Vers un couplage multiéchelle itératif

Dans les chapitres qui précèdent, la méthodologie de retour à l'échelle locale a été appliquée dans des cellules unitaires, sans rétroaction des champs microscopiques sur les champs macroscopiques. Une telle rétroaction n'était en effet pas nécessaire puisque la description macroscopique de l'ensemble du système était supposée préalablement connue. Dans ce chapitre, nous cherchons à intégrer cette étape préliminaire de résolution des champs moyens dans le processus de reconstruction, en envisageant un aller-retour itératif entre échelle microscopique et échelle macroscopique. Il s'agit, d'une part, d'exploiter les résultats de la méthodologie « one-way » initiale (chapitre 3) afin d'en extraire des conditions aux limites permettant de réaliser la simulation numérique du domaine dans lequel on recherche les champs microscopiques, et d'autre part de réaliser une rétroaction du problème microscopique sur le problème macroscopique par l'intermédiaire d'un terme de pénalisation dans l'équation macroscopique. Comme l'illustre l'application en fin de chapitre, cette approche « two-way » trouve un intérêt dans le cadre de régimes « accidentels », c'est-à-dire lorsque les champs physiques à l'échelle microscopique sont soumis à des « perturbations » ponctuelles, comme par exemple une modification locale de la microstructure ou un pic de flux thermique localisé sur une interface fluide/solide particulière.

5.1 Positionnement du problème

Dans la méthodologie de retour à l'échelle locale développée et appliquée jusqu'ici, les champs de vitesse et de température microscopiques périodiques sont reconstruits dans des cellules unitaires choisies. Pour effectuer cette reconstruction dans un « bloc » de plusieurs cellules, on peut donc réaliser des simulations numériques de chaque cellule contenue dans ce bloc séparément, mais une alternative envisageable consiste à reconstruire les champs microscopiques dans les cellules adjacentes à ce bloc, puis à utiliser les champs de vitesse et de température obtenus sur les frontières de ces cellules comme conditions aux limites (de Dirichlet) du bloc, et enfin à réaliser une simulation numérique de ce dernier à l'aide de ces conditions aux limites. Dans la suite, on notera Ω_z ce bloc de cellules¹, Ω_i les cellules adjacentes à Ω_z , et $\partial\Omega_{z_i}$ l'interface entre Ω_i et Ω_z , comme illustré sur la FIG. 5.1. Par souci de simplification, on considérera des blocs rectangulaires comportant $n_x \times n_y$ cellules unitaires, avec donc $2(n_x + n_y)$ cellules adjacentes.

1. L'indice « z » renvoie au terme « zoom ». Bien que les équations résolues soient différentes selon l'échelle considérée, cette terminologie semble adaptée car la méthode consiste bien à accéder aux petits détails de l'écoulement à partir d'une vue « de loin ».

L'intérêt majeur de cette nouvelle approche apparaît lorsqu'il existe une perturbation locale des champs de vitesse ou de température dans le domaine Ω_z , que le modèle poreux n'est éventuellement pas apte à représenter correctement. En effet, dans ce cas, l'hypothèse de périodicité de la vitesse ou des déviations de pression et de température sous-jacente à la méthodologie de retour à l'échelle locale est mise en défaut, car cette hypothèse est sous-tendue par une certaine homogénéité des champs moyens : si, par exemple, le champ de température microscopique présente un « pic », alors ce dernier est atténué par le processus de prise de moyenne de telle sorte que la déviation de température – définie comme la différence entre température et température moyenne – présente également un pic et ne peut plus être considérée comme périodique. Des illustrations concrètes sont données en 5.3.1. Notons que si l'on ne considère pas de perturbation locale dans Ω_z , il n'y a pas de raison de particulariser les cellules du bloc Ω_z (l'hypothèse de périodicité restant valable dans ces cellules au même titre que dans les autres cellules du milieu) et cette nouvelle approche est assez peu pertinente : dans ce cas, en effet, il est préférable de calculer séparément toutes les cellules du bloc (soit $n_x n_y$ simulations numériques), plutôt que $2(n_x + n_y)$ calculs de cellules adjacentes suivis du calcul de Ω_z .

Les perturbations locales dont il a été fait mention peuvent être, par exemple un bouchage partiel du faisceau (dans les RNR-Na, il peut s'agir du gonflement d'une aiguille, impliquant une mauvaise évacuation de l'énergie et une augmentation conséquente de la température), ou l'apparition d'une source locale de chaleur, ou encore l'augmentation brutale et localisée du flux thermique délivré par les aiguilles de combustible. Dans la suite, nous prendrons ce dernier cas comme exemple, dans le milieu modèle de la FIG. 5.1. La prise en compte de ce type de situations accidentelles, c'est-à-dire d'événements soudains et inattendus qui peuvent conduire à de graves dommages sur la structure, est bien évidemment d'une importance cruciale dans les études de sûreté et de dimensionnement des réacteurs nucléaires.

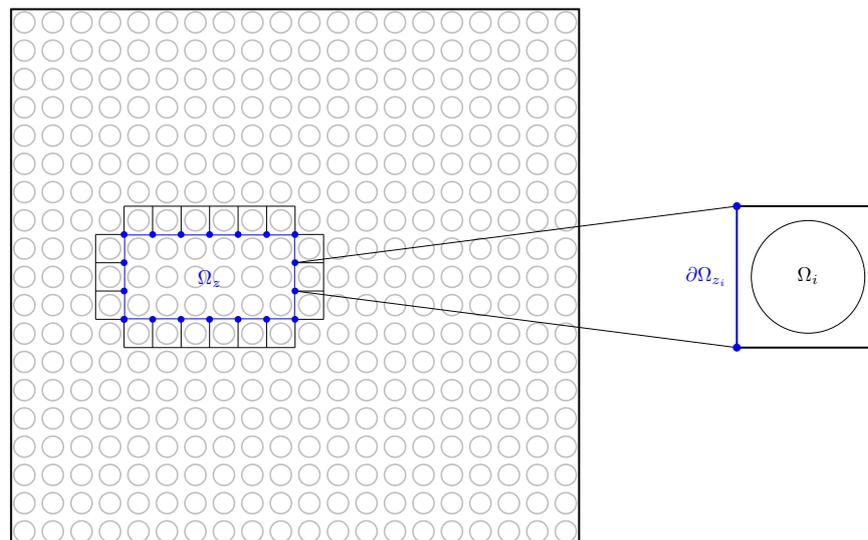


FIG. 5.1 – Exemple d'un bloc de cellules Ω_z avec les cellules adjacentes Ω_i , dans un milieu poreux modèle. Le bloc est composé ici de 6×3 cellules. L'interface entre une cellule Ω_i et Ω_z est $\partial\Omega_{z_i}$.

Le domaine Ω_z doit être d'une taille adaptée, c'est-à-dire suffisamment grand pour que la méthodologie de reconstruction puisse être considérée comme applicable à ses cellules adjacentes, mais suffisamment petit par rapport au domaine entier pour que le gain en terme de temps de calcul soit significatif par rapport à une simulation numérique com-

plète. Dans la seconde partie, on analysera d’abord qualitativement, puis à l’aide de tests numériques, la taille appropriée pour le domaine de zoom. Deux types de couplage peuvent être examinés :

- (i) un couplage « one-way », c’est-à-dire uniquement une action de l’échelle macroscopique sur l’échelle microscopique : le problème microscopique dans Ω_z ne rétroagit pas sur les données macroscopiques utilisées dans les problèmes de cellules. C’est l’approche développée et appliquée dans les chapitres 3 et 4. Une variante consiste à résoudre les champs fins dans le domaine de zoom à l’aide des conditions aux limites sur les cellules adjacentes, sans rétroaction sur les champs macroscopiques dans le reste du domaine. On peut convenir que la mise en œuvre de cette méthode ne pose pas de problème théorique majeur, mais des problèmes réels d’adaptation du code que l’on retrouve dans le point (ii) suivant ;
- (ii) un couplage « two-way », c’est-à-dire un couplage itératif avec interaction du problème microscopique et du problème macroscopique. C’est l’approche développée dans la suite de ce chapitre dans le cadre de régimes accidentels d’écoulement. Elle fait appel à des domaines de résolution recouvrants : un domaine décrit à l’échelle macroscopique, un domaine de zoom et ses cellules adjacentes décrits à l’échelle microscopique.

La procédure que l’on souhaite mettre en place est donc un zoom avec raffinement local multigrille, cette problématique étant très classique dans la littérature multiéchelle (citons notamment Khadra *et al.* [63], Coré *et al.* [36], Ramière *et al.* [97]). Dans les deux sections suivantes, l’algorithme de couplage employé est d’abord exposé, puis appliqué numériquement à diverses situations d’écoulement.

5.2 Description du couplage

5.2.1 Problèmes constitutifs

On reprend le milieu de la FIG. 5.1, constitué de 20×19 cellules, et on suppose que les interfaces fluide-solide sont adiabatiques, à l’exception de l’interface située dans la cellule (6, 10), qui délivre un flux thermique noté q_{acc} . Avant de décrire en détail la méthodologie de couplage, précisons les problèmes en jeu aux différentes échelles. On note Ω_p le domaine poreux décrit à l’échelle macroscopique, et on rappelle que Ω_z et Ω_i sont respectivement le domaine de zoom et ses cellules adjacentes, décrits à l’échelle microscopique. À ces domaines sont associés respectivement les champs \vec{U}_p et T_p (moyennes volumiques intrinsèques de vitesse¹ et de température dans Ω_p), \vec{u}_z et θ_z (champs de vitesse et de température dans Ω_z), \vec{u}_i^* et θ_i^* (champs de vitesse et de température dans les Ω_i).

Pour simplifier, on impose un champ de vitesse microscopique périodique, ce qui implique un champ de vitesse moyen \vec{U}_p constant dans le milieu. Dans un premier temps, on détermine la solution de référence de notre problème. Compte tenu des conditions aux limites spécifiées sur la FIG. 5.2, les champs de référence \vec{u}_0 , p_0 et θ_0 dans le domaine fluide Ω_f obéissent aux équations suivantes :

1. Nous soulignons ici un léger changement de notation par rapport au chapitre 1, où U_p désignait la moyenne volumique *superficielle* de vitesse, et non *intrinsèque* (relation (1.111) page 50).

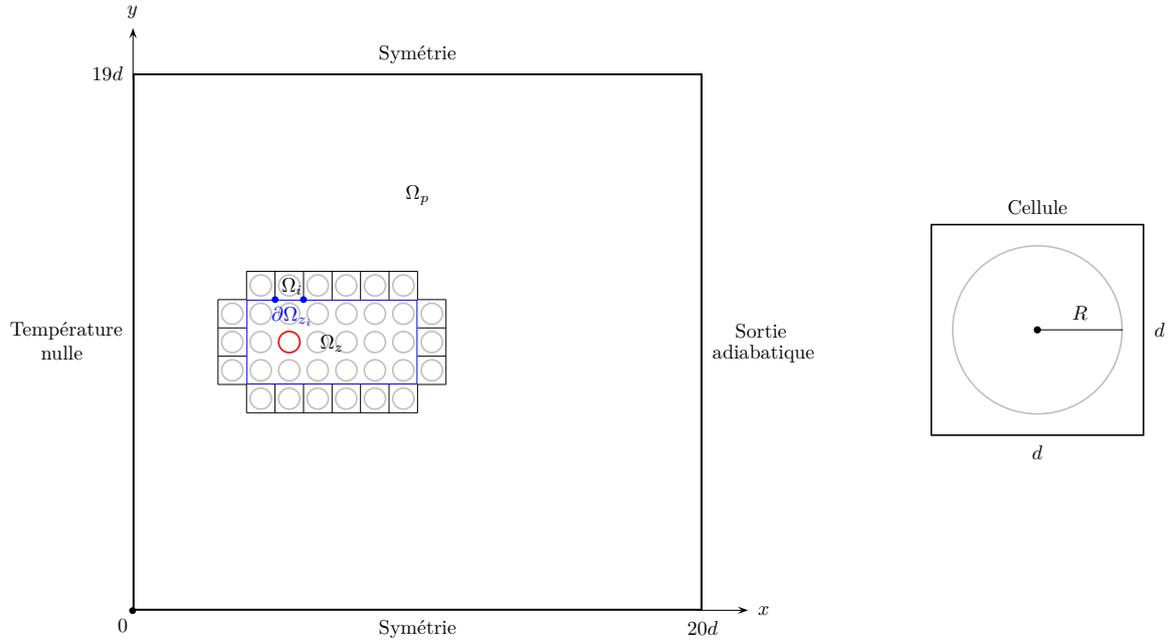


FIG. 5.2 – Problèmes en jeu dans la procédure de couplage. En rouge, l'interface chauffante délivrant le flux thermique q_{acc} , représentant l'accident choisi comme exemple.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_0 = 0 & \text{dans } \Omega_f, \quad (5.1a) \\ \rho(\vec{u}_0 \cdot \vec{\nabla})\vec{u}_0 = -\vec{\nabla} p_0 + \mu\Delta\vec{u}_0 & \text{dans } \Omega_f, \quad (5.1b) \\ \rho C_p(\vec{u}_0 \cdot \vec{\nabla})\theta_0 = \lambda\Delta\theta_0 & \text{dans } \Omega_f, \quad (5.1c) \\ \vec{u}_0 = \vec{0} \text{ et } \lambda\vec{\nabla}\theta_0 \cdot \vec{n} = q_{acc} & \text{sur } \Sigma_{fs}, \quad (5.1d) \\ \lambda\vec{\nabla}\theta_0 \cdot \vec{n} = 0 & \text{en } y = 0, y = 19d \text{ et } x = 20d, \quad (5.1e) \\ \theta_0 = 0 & \text{en } x = 0, \quad (5.1f) \\ \vec{u}_0 \text{ périodique,} & \quad (5.1g) \end{array} \right.$$

avec

$$q_{acc} = \begin{cases} q_0 & \text{dans la cellule } 6 \times 10, \\ 0 & \text{dans les autres cellules.} \end{cases} \quad (5.2)$$

La méthodologie de couplage multiéchelle met en jeu trois problèmes distincts :

- le problème à l'échelle macroscopique dans Ω_p est la version moyennée du problème de référence à l'échelle microscopique (5.1a) – (5.1g) ; il s'écrit¹ :

1. Se reporter à l'équation (1.89), page 44.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{U}_p \text{ constant} & \text{dans } \Omega_p, \end{array} \right. \quad (5.3a)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho C_p (\vec{U}_p \cdot \vec{\nabla}) T_p = \vec{\nabla} \cdot (\Lambda_{\text{eff}} \vec{\nabla} T_p) + \mathcal{R}_p & \text{dans } \Omega_p, \end{array} \right. \quad (5.3b)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Lambda_{\text{eff}} \vec{\nabla} T_p \cdot \vec{n} = 0 & \text{en } y = 0, y = 19d \text{ et } x = 20d, \end{array} \right. \quad (5.3c)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} T_p = 0 & \text{en } x = 0. \end{array} \right. \quad (5.3d)$$

où, de façon similaire aux problèmes de cellules, l'équation (5.3b) est pénalisée à l'aide du terme

$$\mathcal{R}_p = \frac{1}{\omega_p} (\bar{\theta}_z - T_p), \quad (5.4)$$

qui vient en remplacement de la puissance moyenne

$$\frac{\mathcal{P}}{\phi} = \frac{1}{V_f} \int_{\Sigma_{\text{fs}}} q_{\text{acc}} dS \quad (5.5)$$

apparaissant naturellement au cours de la prise de moyenne (équation (1.62) page 40). L'objectif de la pénalisation est que la température moyenne T_p , solution du problème poreux (5.3a) – (5.3d), soit proche d'une température de consigne $\bar{\theta}_z$. Cette dernière correspond à la température microscopique solution du problème dans Ω_z (voir ci-après) moyennée sur les cellules qui constituent Ω_z . Le terme de pénalisation \mathcal{R}_p défini par la relation (5.4) prend donc une unique valeur par cellule contenue dans Ω_z , au cours d'une itération donnée.

D'autre part, ce modèle macroscopique ne prend pas en compte de coefficient de dispersion thermique ; on se limitera donc dans les tests numériques à des écoulements à nombres de Péclet inférieurs à l'unité ;

- les problèmes microscopiques des cellules adjacentes à Ω_z , d'après le chapitre 3, sont, pour tout i compris entre 1 et $2(n_x + n_y)$,

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_i^* = 0 & \text{dans } \Omega_i, \end{array} \right. \quad (5.6a)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho (\vec{u}_i^* \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}_i^* = -\vec{\nabla} \tilde{p}_i^* + \mu \Delta \vec{u}_i^* + \frac{1}{\omega_u} (\vec{U}_p - \vec{u}_i^*) & \text{dans } \Omega_i, \end{array} \right. \quad (5.6b)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho C_p (\vec{u}_i^* \cdot \vec{\nabla}) \tilde{\theta}_i^* = \lambda \Delta \tilde{\theta}_i^* - \rho C_p \vec{u}_i^* \cdot \vec{\nabla} T_p(\vec{x}_i) - \frac{\tilde{\theta}_i^*}{\omega_\theta} & \text{dans } \Omega_i, \end{array} \right. \quad (5.6c)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{u}_i^* = \vec{0} \text{ et } \lambda \vec{\nabla} \tilde{\theta}_i^* \cdot \vec{n} = -\lambda \vec{\nabla} T_p(\vec{x}_i) \cdot \vec{n} & \text{sur } \Sigma_{\text{fs}}, \end{array} \right. \quad (5.6d)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tilde{p}_i^*, \vec{u}_i^* \text{ et } \tilde{\theta}_i^* \text{ périodiques,} & \end{array} \right. \quad (5.6e)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \theta_i^* = \bar{T}_p(\vec{x}_i) + \vec{\nabla} T_p(\vec{x}_i) \cdot (\vec{x} - \vec{x}_i) + \tilde{\theta}_i^*. & \end{array} \right. \quad (5.6f)$$

Ces problèmes sont alimentés par des données macroscopiques provenant du problème macroscopique (5.3a) – (5.3d) : il s'agit de \vec{U}_p (constante) dans l'équation

(5.6b), de $\vec{\nabla}T_p(\vec{x}_i)$ (où \vec{x}_i est le centre de la cellule Ω_i) dans les équations (5.6c), (5.6d) et (5.6f), et enfin de $\bar{T}_p(\vec{x}_i)$ dans l'équation (5.6f) ;

- le problème microscopique de zoom dans Ω_z ,

$$\left\{ \begin{array}{ll} \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_z = 0 & \text{dans } \Omega_z, \end{array} \right. \quad (5.7a)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho(\vec{u}_z \cdot \vec{\nabla})\vec{u}_z = -\vec{\nabla}p_z + \mu\Delta\vec{u}_z & \text{dans } \Omega_z, \end{array} \right. \quad (5.7b)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho C_p(\vec{u}_z \cdot \vec{\nabla})\theta_z = \lambda\Delta\theta_z & \text{dans } \Omega_z, \end{array} \right. \quad (5.7c)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \lambda\vec{\nabla}\theta_z \cdot \vec{n} = q_{\text{acc}} & \text{sur } \Sigma_{\text{fs}}, \end{array} \right. \quad (5.7d)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \forall i, 1 \leq i \leq 2(n_x + n_y) : \vec{u}_z = \vec{u}_i^* & \text{sur } \partial\Omega_{z_i}, \end{array} \right. \quad (5.7e)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \forall i, 1 \leq i \leq 2(n_x + n_y) : \theta_z = \theta_i^* & \text{sur } \partial\Omega_{z_i}, \end{array} \right. \quad (5.7f)$$

prend en compte l'accident thermique dans la cellule (6, 10), ainsi que les champs de vitesse et de température solutions des problèmes de cellules (5.6a) – (5.6f) comme conditions aux limites de Dirichlet aux interfaces avec les cellules adjacentes à Ω_z .

On souligne que la modélisation à l'échelle macroscopique ne voit pas directement la physique responsable de la singularité, mais indirectement *via* le terme de forçage (5.4). Ceci ne correspond pas nécessairement à la situation industrielle envisageable, où le code « poreux » pourrait lui-même tenir compte de la singularité.

5.2.2 Algorithme de couplage

Les problèmes à résoudre dans les différents domaines étant désormais spécifiés, le cœur de la méthodologie de couplage consiste à préciser de quelle façon ces problèmes vont itérativement communiquer entre eux. Deux approches assez usuelles, qui diffèrent essentiellement par l'ordre de résolution et d'interaction des problèmes, font l'objet d'une abondante littérature scientifique ayant pour cadre les méthodes de décomposition de domaine¹ :

- (i) l'algorithme de *Schwarz multiplicatif* ou *alterné* (Lions [70]), dans lequel les problèmes sont résolus dans un ordre bien précis à chaque itération n : d'abord (par exemple) le problème poreux, puis les problèmes de cellules (qui utilisent les résultats du problème poreux précédent), puis le problème de zoom (qui utilise les résultats des problèmes de cellules précédents). Ainsi, les problèmes de cellules et le problème de zoom utilisent les résultats à l'itération courante du problème précédent. La convergence de cet algorithme est assurée, mais son inconvénient principal est de ne pas être aisément parallélisable.
- (ii) l'algorithme de *Schwarz additif* (Dryja et Widlund [41]), dans lequel à une itération quelconque n , tous les problèmes sont résolus dans un ordre arbitraire en utilisant les données $\bar{\theta}_z$, $\vec{\nabla}T_p(\vec{x}_i)$ et $\vec{\nabla}T_p(\vec{x}_i)$ calculées à l'itération précédente. Le schéma de

1. La particularité par rapport aux problèmes résolus classiquement en décomposition de domaine est toutefois que les équations sont ici différentes dans les sous-domaines considérés.

fonctionnement de cet algorithme est donné sur la FIG. 5.3. La convergence, si elle a lieu, est moins rapide que celle de l'algorithme multiplicatif; on choisira néanmoins cet algorithme qui nous semble plus compétitif en raison d'une parallélisation plus simple. Son implémentation est également un peu plus simple. À noter que dans les deux cas, les cellules adjacentes font office de zone de recouvrement entre l'échelle microscopique (problème de zoom) et l'échelle macroscopique (problème poreux).

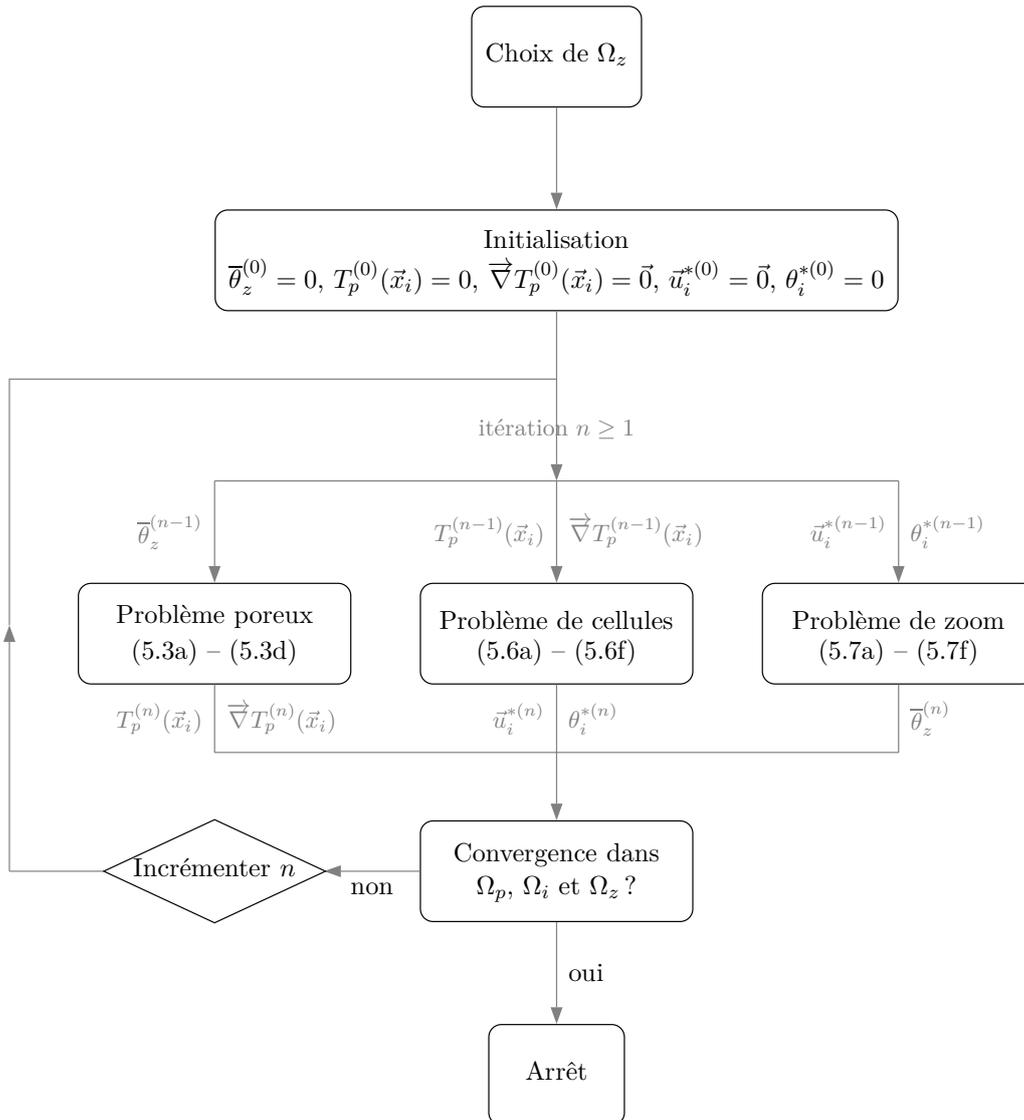


FIG. 5.3 – Algorithme de couplage itératif. À l'itération n , les problèmes dans les domaines Ω_p , Ω_i et Ω_z sont résolus dans un ordre indifférent en utilisant les données θ_z , $T_p(\vec{x}_i)$, $\vec{\nabla}T_p(\vec{x}_i)$, \vec{u}_i^* et θ_i^* calculées à l'itération précédente (algorithme de *Schwarz additif*).

5.3 Simulations numériques

5.3.1 Discussion sur le choix de Ω_z

La première étape avant l'application pratique de la méthodologie consiste à choisir un domaine de zoom Ω_z . Comme on recherche, dans les cellules adjacentes à Ω_z , des champs de vitesse et de déviation périodiques, on doit s'assurer de la validité de cette hypothèse pour le domaine Ω_z choisi. Or, la présence d'une perturbation locale (du champ de température, dans l'exemple considéré sur la FIG. 5.2) dans Ω_z , qui se retrouve également sur le champ de déviation, est susceptible de nuire à cette hypothèse de périodicité. Néanmoins, l'écart entre la température réelle non strictement périodique dans les cellules, et la température périodique solution des problèmes de cellules, devient de plus en plus faible si l'on considère des cellules situées de plus en plus loin de la perturbation, donc pour un domaine de zoom de plus en plus grand. Connaissant le champ microscopique, on pourrait donner un critère mesurable : le domaine de zoom serait par exemple celui dans lequel l'écart maximum entre le champ perturbé et le champ non perturbé serait inférieur à une certaine valeur. Mais le champ microscopique n'étant pas supposé connu en général, la taille de Ω_z doit être choisie qualitativement en fonction du régime thermique et hydraulique, donc notamment du nombre de Péclet :

- à faible nombre de Péclet, la diffusion l'emporte sur la convection et le pic de température s'étale dans toutes les directions (la diffusion tend à uniformiser la température dans tout le domaine) ;
- à nombre de Péclet élevé, la convection l'emporte sur la diffusion et le pic de température est transporté dans la direction de l'écoulement, en aval de la perturbation locale, alors que la zone amont est peu impactée.

Ces remarques qualitatives sont illustrées sur la FIG. 5.4, où sont visualisés les champs de température microscopiques et macroscopiques solutions du problème de référence (5.1a) – (5.1g), pour différentes valeurs du nombre de Péclet. Dans ces simulations, on modifie le nombre de Péclet en jouant sur la valeur de la conductivité effective, les autres propriétés restant fixées. Les propriétés géométriques et le nombre de Reynolds sont donnés dans le TAB. 5.1.

Variable	Valeur	Unité
R	0,06	m
d	0,15	m
q_0	100	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$
U_p	10^{-4}	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
Re	26	–

TAB. 5.1 – Paramètres géométriques et nombre de Reynolds des simulations numériques en régime accidentel.

On trace les profils de déviation de température le long des segments P_1 et P_2 représentés sur la FIG. 5.5, c'est-à-dire des profils passant approximativement dans le pic de température, dans les directions axiale et transversale. Ces profils (FIG. 5.6) montrent que

- le domaine de zoom Ω_z doit être large d'au moins trois cellules (de façon à englober le pic principal) afin que l'hypothèse de périodicité de la déviation commence à devenir acceptable ;

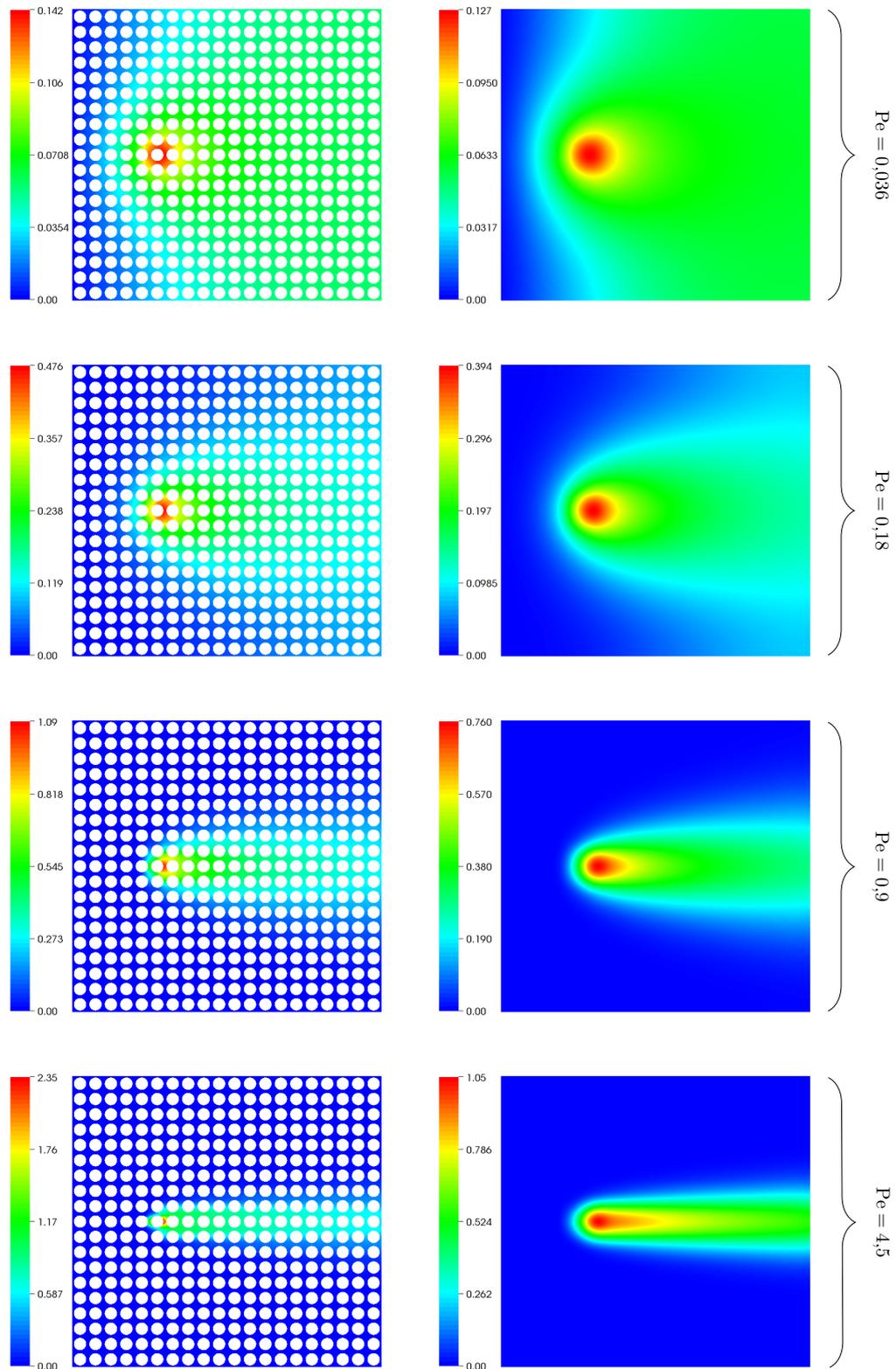


FIG. 5.4 – Champs de température solutions du problème de référence avec perturbation locale (5.1a) – (5.1g) : échelle microscopique à gauche, et échelle macroscopique (moyenne volumique intrinsèque calculée avec le filtre m_2) à droite. À nombre de Péclet croissant, la convection prend le dessus sur la diffusion et la largeur de la zone perturbée diminue tandis que sa longueur augmente.

- le domaine de zoom Ω_z doit être de plus en plus « long » à mesure que le nombre de Péclet augmente, puisque le champ de déviation subit la perturbation loin derrière cette dernière.

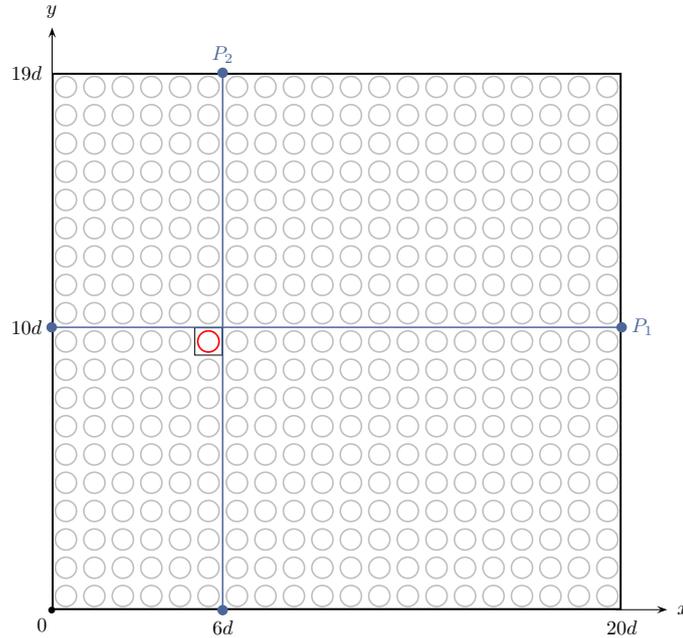


FIG. 5.5 – Profils P_1 et P_2 de post-traitement du champ de température. En rouge, la cellule (6, 10) contenant le flux thermique accidentel.

En résumé, il faut *a priori* trouver un compromis entre une taille du zoom entraînant une validité satisfaisante des hypothèses de périodicité (taille la plus grande possible) et une taille du zoom optimisant les temps de calcul (taille la plus petite possible). On peut également mentionner un critère de symétrie du domaine par rapport à l'accident, sans lequel une dissymétrie des solutions apparaîtrait. En tout état de cause, une taille appropriée de Ω_z ne peut être estimée qu'après une analyse qualitative *a priori* de l'écoulement. Les tests numériques sont menés en 5.3.3 pour différents nombres de Péclet et pour différentes tailles du domaine de zoom.

5.3.2 Remarques sur la discrétisation

D'un point de vue numérique, la coexistence de plusieurs problèmes dans la procédure de couplage amène à s'interroger sur d'éventuels effets de maillage. Les deux points suivants méritent en particulier d'être soulignés :

- (i) le fait d'imposer comme conditions aux limites de Dirichlet pour le problème de zoom, les solutions issues des problèmes de cellules, introduit la nécessité d'une interpolation des profils de vitesse \vec{u}_i^* sur $\partial\Omega_i$ lors de la lecture des conditions aux limites de Ω_z , dans le cas où ces frontières sont discrétisées différemment dans le problème de zoom et dans les problèmes de cellules. Ainsi, le débit total entrant dans Ω_z peut être légèrement différent du débit sortant¹, provoquant d'éventuelles difficultés de convergence numérique : en effet, le code de calcul recherche un champ

1. À cela s'ajoute que rien ne garantit un bilan de masse correct même dans le cas d'une discrétisation parfaitement identique, les problèmes de cellules étant résolus séparément. Mais cet effet paraît en général négligeable devant celui d'une discrétisation différente de Ω_z et des Ω_i .

5.3 Simulations numériques

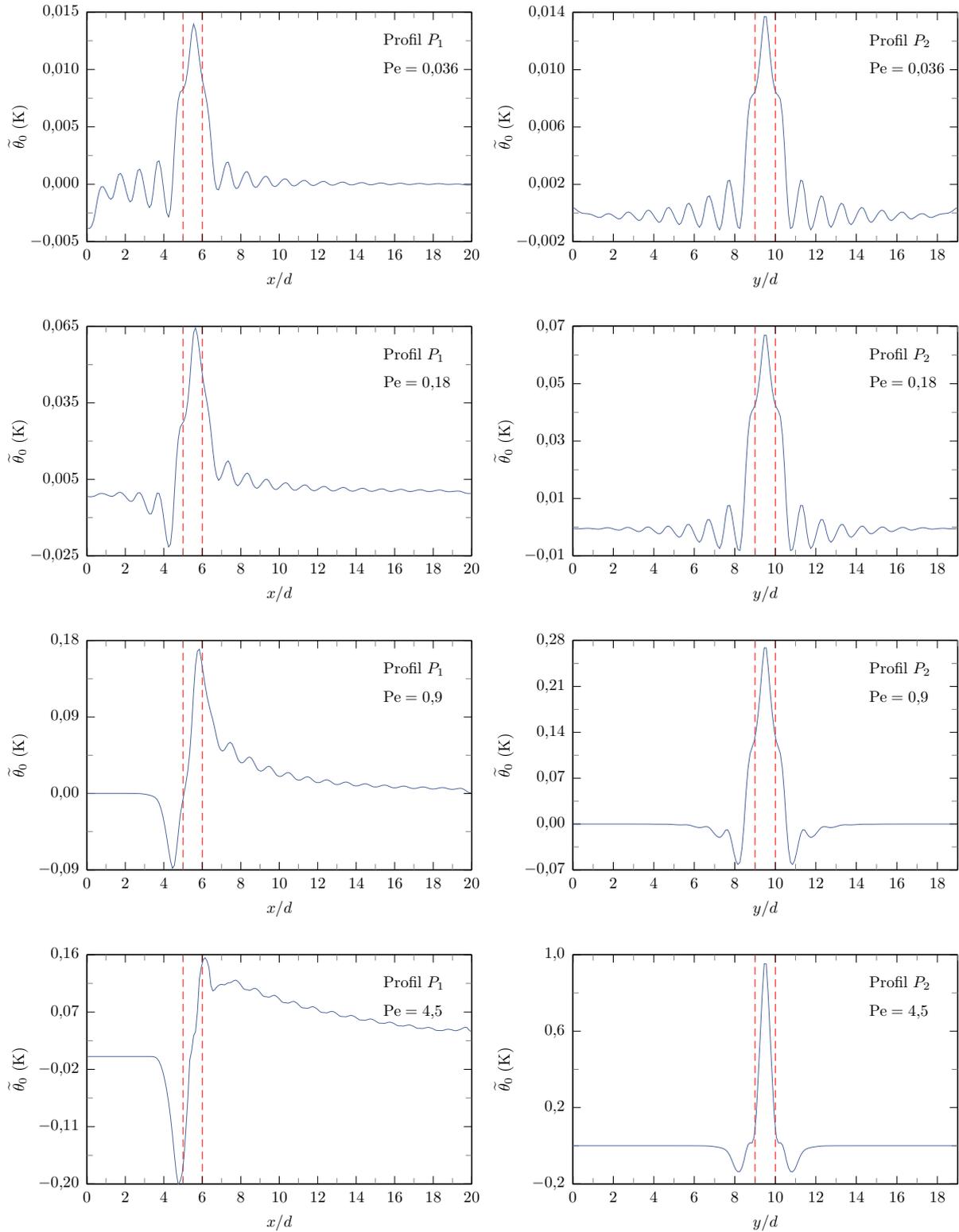


FIG. 5.6 – Profils de déviation $\tilde{\theta}_0 = \theta_0 - \langle \theta_0 \rangle_f$ le long des segments P_1 et P_2 de la FIG. 5.5, pour les différents nombres de Péclet de la FIG. 5.4. La cellule (6, 10) contenant le flux thermique accidentel est délimitée par les traits pointillés rouges.

de vitesse à divergence nulle, alors qu'on impose un champ à divergence non nulle *via* les conditions aux limites. Une solution simple consiste alors à répartir le débit excédentaire ou déficitaire en modifiant légèrement les valeurs de vitesse lues aux

interfaces ;

- (ii) les débits de masse et d'énergie attendus dans Ω_z (valeurs issues du problème de référence, pour une discrétisation donnée de ce dernier) peuvent être entachés d'une erreur de discrétisation dans le problème de zoom dans Ω_z , si les maillages du problème de référence et du problème de zoom ne sont pas coïncidants dans Ω_z . Cet écart, qui provient de la différence de précision dans la résolution des problèmes de référence et de zoom, est susceptible de nuire à la qualité de la solution.

Concernant le point (ii), des méthodes de correction des erreurs de discrétisation, de type « Local Defect Correction » ou « Coarse Grid Correction » (Hackbusch [51], Minero *et al.* [79]) sont envisageables. Prenons l'exemple, pour simplifier, d'une équation de diffusion de la température, que l'on écrit sous la forme

$$\mathfrak{D}(\theta) = 0. \quad (5.8)$$

Notons formellement \mathcal{M}_0 et \mathcal{M}_z le maillage du problème de référence et le maillage du problème de zoom, respectivement. Par abus de notation, on désigne aussi par θ_0 (resp. θ_z) les champs de vitesse et de température *discrétisés* sur le maillage \mathcal{M}_0 (resp. \mathcal{M}_z). Sous forme discrétisée, l'équation (5.8) dans Ω_z s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{D}_0(\theta_0) = 0 \quad : \text{ problème de référence sur } \mathcal{M}_0, \end{array} \right. \quad (5.9a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{D}_z(\theta_z) = \mathcal{F}_z \quad : \text{ problème de zoom sur } \mathcal{M}_z, \end{array} \right. \quad (5.9b)$$

où \mathcal{F}_z est un terme correctif visant à faire coïncider les solutions θ_0 et θ_z malgré la différence de discrétisation des deux problèmes. On introduit l'opérateur $\mathcal{R} : \mathcal{M}_0 \rightarrow \mathcal{M}_z$, qui projette ou interpole sur \mathcal{M}_z un champ discrétisé sur \mathcal{M}_0 . Dans un premier temps, on projette l'équation (5.9a) sur \mathcal{M}_z , ce qui permet de la retrancher à l'équation (5.9b). L'équation (5.9b) - $\mathcal{R}[(5.9a)]$ est alors :

$$\mathcal{F}_z = \mathfrak{D}_z(\theta_z) - \mathcal{R}(\mathfrak{D}_0(\theta_0)). \quad (5.10)$$

Or, on souhaite que

$$\theta_z = \mathcal{R}(\theta_0), \quad (5.11)$$

d'où

$$\mathcal{F}_z = \mathfrak{D}_z(\mathcal{R}(\theta_0)) - \mathcal{R}(\mathfrak{D}_0(\theta_0)). \quad (5.12)$$

Donc \mathcal{F}_z s'interprète comme l'erreur de commutation entre les opérateurs \mathfrak{D} et \mathcal{R} . Si les maillages \mathcal{M}_0 et \mathcal{M}_z sont identiques, cette erreur est nulle parce que \mathcal{R} est l'application identité et que $\mathfrak{D}_z = \mathfrak{D}_0$. On peut obtenir une expression de \mathcal{F}_z plus facilement exploitable dans une résolution numérique en formulant les deux hypothèses suivantes :

$$(\mathcal{H}_1) \quad \mathcal{R} \text{ conserve l'intégrale : } \int_V \mathcal{R}(\psi) dV \simeq \int_V \psi dV ;$$

$$(\mathcal{H}_2) \quad \mathcal{F}_z \text{ est uniforme dans } \Omega_z.$$

On obtient par conséquent, en intégrant la relation (5.10) sur Ω_z ,

$$\mathcal{F}_z \times V_z \simeq \underbrace{\int_{\Omega_z} \mathfrak{D}_z(\theta_z) dV}_{\text{noté } \mathcal{P}_z} - \underbrace{\int_{\Omega_z} \mathfrak{D}_0(\theta_0) dV}_{\text{noté } \mathcal{P}_0}, \quad (5.13)$$

soit

$$\mathcal{F}_z = \frac{\mathcal{P}_z - \mathcal{P}_0}{V_z}. \quad (5.14)$$

Sous cette forme, \mathcal{F}_z apparaît clairement comme une correction du bilan de puissance dans le problème de zoom.

Cette méthode trouve un intérêt important dans les applications de couplage où interagissent un problème sur un maillage fin Ω_0 et un problème sur un maillage grossier Ω_z . Cependant, dans notre cas, le problème sur Ω_0 (c'est-à-dire le problème de référence) n'intervient pas dans le couplage mais seulement dans le processus de validation du couplage. On pourrait appliquer une méthode correctrice en vue d'une validation du couplage sur des maillages de référence et de zoom différents ; mais plus simplement, on s'affranchira de tout effet de maillage en se plaçant dans un cas idéal « isomaillage ¹ » $\mathcal{M}_z = \mathcal{M}_0$, assurant la même finesse entre les champs de référence et les solutions numériques du couplage.

5.3.3 Tests numériques

On effectue une série de tests dont les caractéristiques sont regroupées dans le TAB. 5.2. L'objectif est d'observer l'effet du nombre de Péclet et de la taille du domaine de zoom Ω_z (qui est, rappelons-le, un bloc de $n_x \times n_y$ cellules) sur la qualité des solutions, comparées aux solutions de référence de la FIG. 5.4. Nous n'effectuons pas de simulation à $Pe = 0,036$ en raison du temps de calcul important (transfert essentiellement diffusif), ni à $Pe = 4,5$ car cela nécessiterait une modification du modèle macroscopique (5.3a) – (5.3d) afin de prendre en compte la dispersion thermique. On considère donc les cas $Pe = 0,18$ et $Pe = 0,9$ auxquels on associe deux tailles de zoom (3×3 cellules et 5×5 cellules) centré sur la cellule « chauffante ». Comme on l'a dit précédemment, le maillage du problème de zoom résulte de la duplication du maillage d'une cellule unitaire, et coïncide exactement avec le maillage du problème de référence. Le maillage du problème poreux, composé de quatre éléments triangulaires par cellule, est construit de la même façon (FIG. 5.7).

Simulation	Pe	Zoom
1a	0,18	3×3
1b	0,18	5×5
2a	0,9	3×3
2b	0,9	5×5

TAB. 5.2 – Caractéristiques des tests numériques de couplage.

Une première analyse du régime transitoire de la simulation 1 (FIG. 5.8) indique que la taille réduite du domaine de zoom n'empêche pas l'étalement progressif de la tache de température, y compris hors de celui-ci, signe que le couplage des différents problèmes fonctionne. De plus, la forme « finale » de la tache dans les cas à $Pe = 0,18$ et $Pe = 0,9$

1. Cette précaution est d'ailleurs généralement réalisable en pratique, en créant d'abord un maillage de cellule, puis en le dupliquant pour former le maillage du domaine entier et celui du zoom.

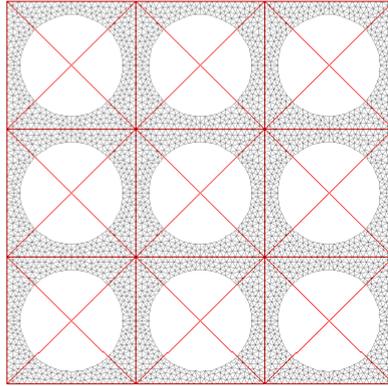


FIG. 5.7 – Superposition du maillage du problème poreux (en rouge) et du maillage du problème de zoom (en gris), pour une taille du zoom de 3×3 cellules unitaires.

(FIG. 5.9) est, d'un point de vue qualitatif, d'autant plus allongée que le nombre de Péclet est grand, et semble ainsi être conforme aux calculs de référence de la FIG. 5.4.

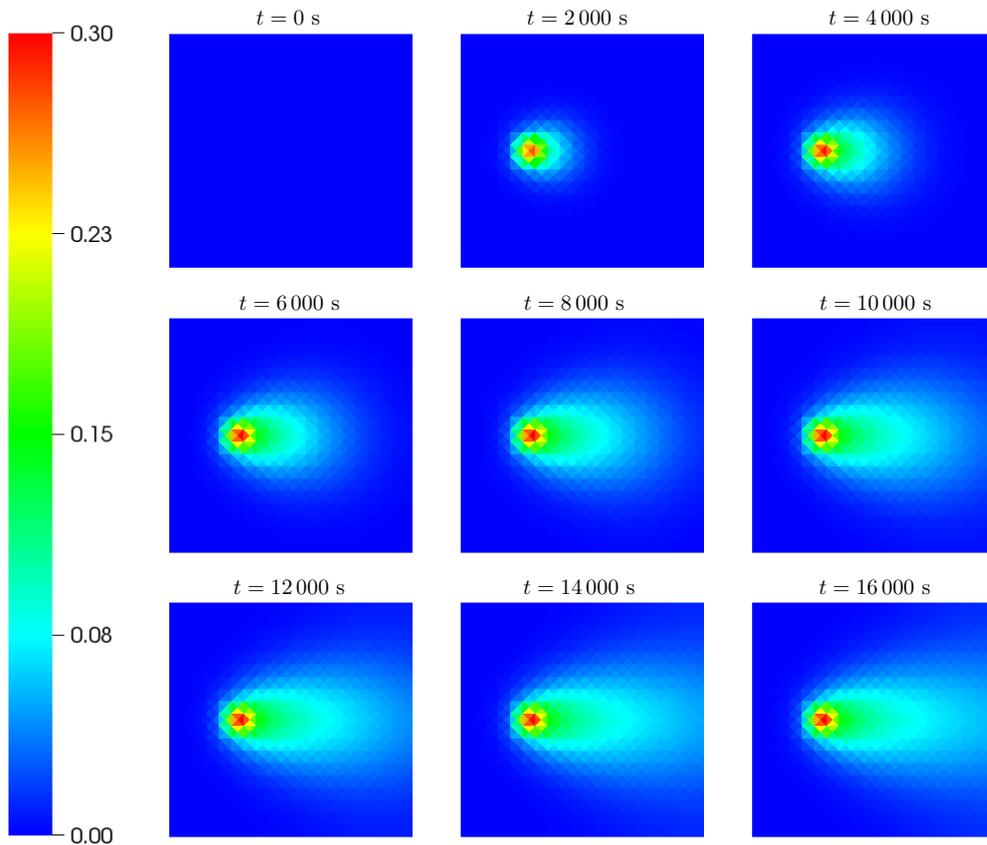


FIG. 5.8 – Évolution temporelle du champ de température macroscopique dans la simulation 1, de $t = 0$ s (état initial) à $t = 16000$ s (état stationnaire convergé).

Plus particulièrement, l'observation des FIG. 5.10 et 5.11, représentant les coupes P_1 et P_2 (voir FIG. 5.5) de température microscopique et macroscopique, amène les réflexions suivantes :

- augmenter la taille de zoom améliore les résultats (l'écart avec les courbes de température de référence est plus faible avec le zoom 5×5 qu'avec le zoom 3×3). En

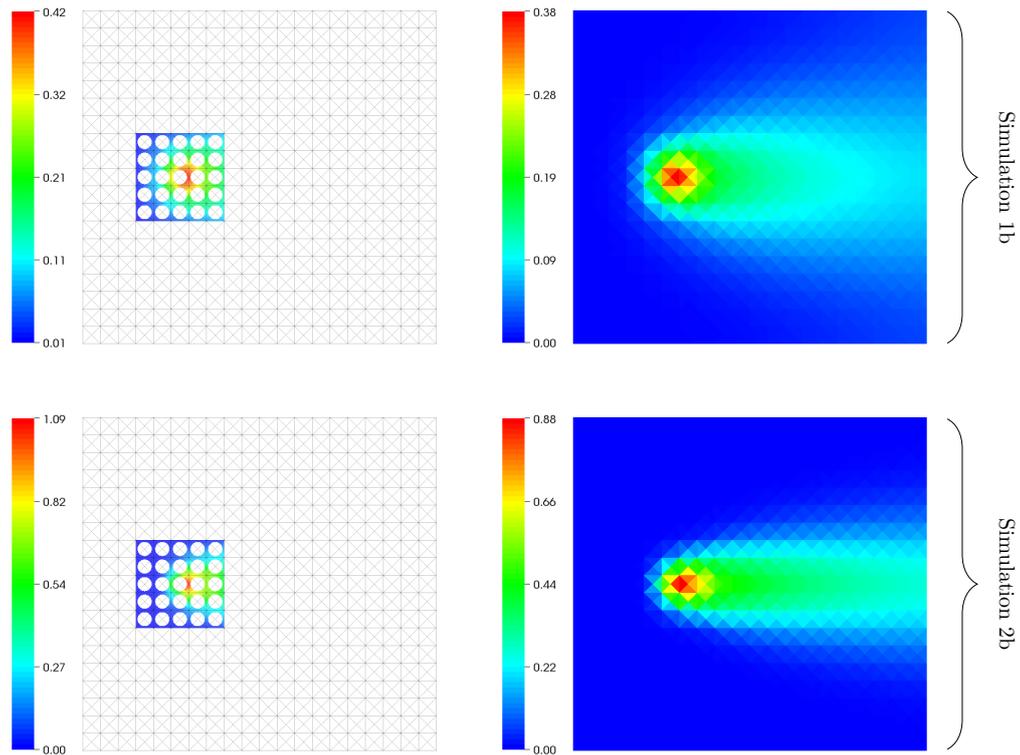


FIG. 5.9 – Champs de température obtenus par la procédure de couplage : problème de zoom (à gauche) et problème poreux (à droite).

effet, les cellules adjacentes se déplacent alors vers des zones où les gradients de température ont une intensité assez faible, ce qui améliore l'hypothèse de périodicité de la déviation de température, et par suite, la précision des conditions aux limites de Ω_z issues des cellules adjacentes. Néanmoins, le gain fourni par un zoom plus grand est manifestement plus net à $Pe = 0,18$ qu'à $Pe = 0,9$;

- les profils de température obtenus dans Ω_z par application de la procédure de couplage se superposent mieux aux profils de référence en amont de l'accident qu'en aval, cet effet étant plus marqué à fort nombre de Péclet qu'à faible nombre de Péclet. Cela s'explique par l'action de la convection : la tache de température est transportée en aval de la cellule où elle trouve sa source, et la zone amont est ainsi moins impactée par la singularité que la zone aval.

En résumé, comme le domaine de zoom tronque la zone impactée par la singularité, les conditions aux limites de Ω_z ne peuvent être considérées comme parfaitement transparentes. Cependant, si la taille du zoom est assez grande pour englober la tache de température, alors l'énergie fournie au domaine Ω_z par l'intermédiaire de ses frontières avec les cellules adjacentes est une approximation correcte de sa valeur de référence.

Ces premières simulations montrent ainsi qu'il est possible, par couplage, de reproduire correctement le pic de température, avec une assez bonne précision sur la valeur maximale locale. Malgré tout, des investigations supplémentaires de cette méthode de couplage sont nécessaires : on pourra s'intéresser à d'autres variations du domaine de zoom, à d'autres configurations d'écoulement et de singularité, et éventuellement mener une étude en maillage (en particulier, évaluer l'impact d'un maillage macroscopique différent). Une étude approfondie du gain en temps CPU passera par la parallélisation du calcul, qui à

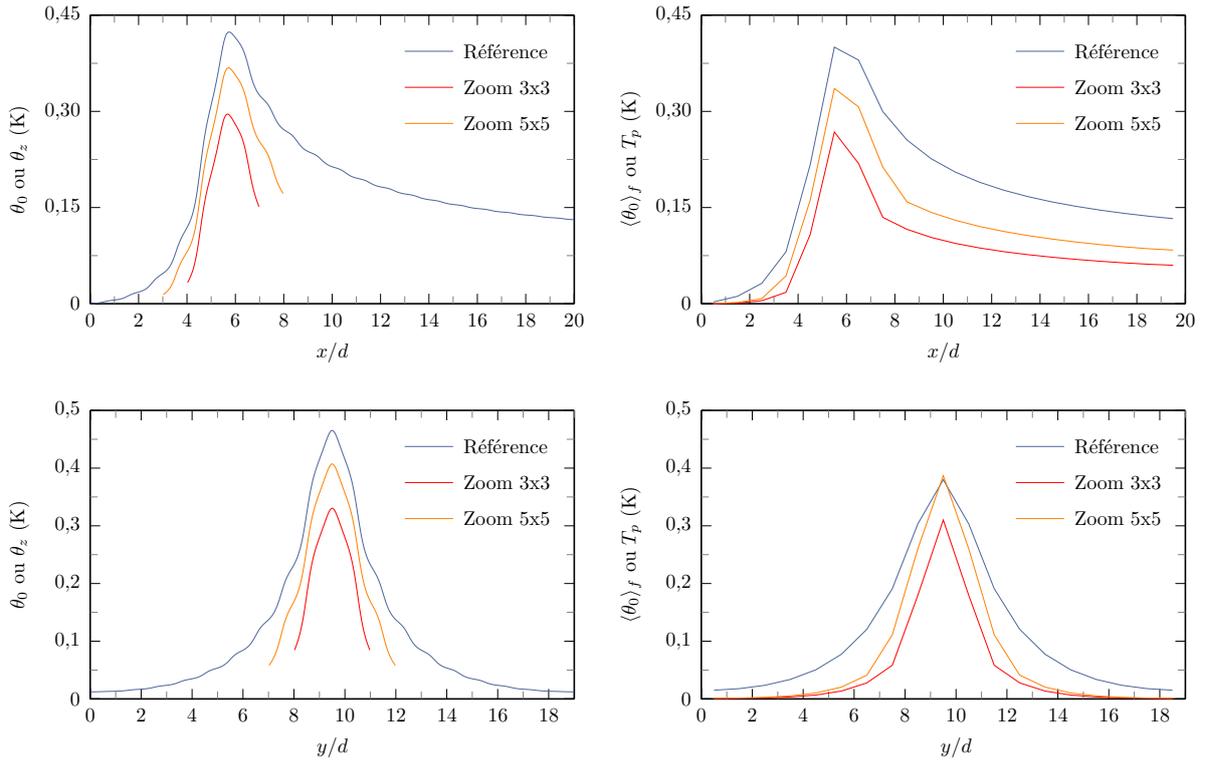


FIG. 5.10 – Comparaison des profils P_1 et P_2 de température microscopique (à gauche) et macroscopique (à droite) issus du couplage (simulations 1a et 1b, TAB. 5.2), avec les profils de référence.

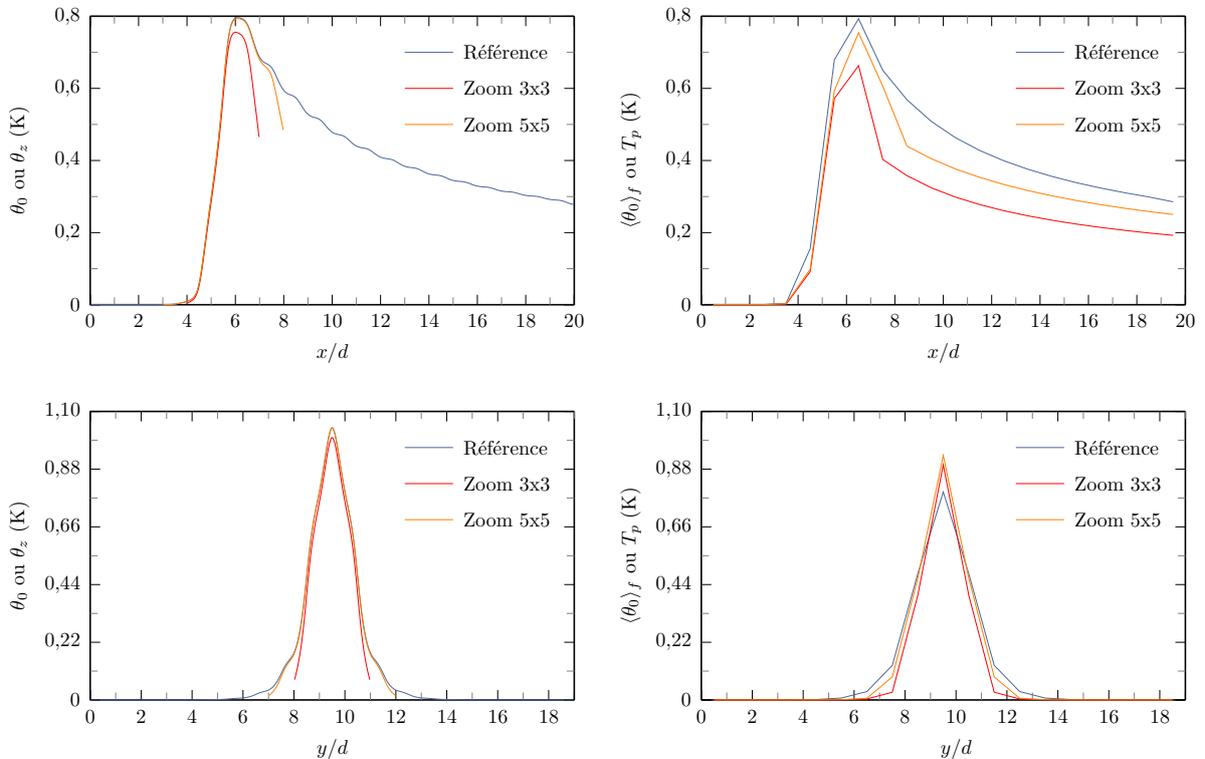


FIG. 5.11 – Comparaison des profils P_1 et P_2 de température microscopique (à gauche) et macroscopique (à droite) issus du couplage (simulations 2a et 2b, TAB. 5.2), avec les profils de référence.

l'heure actuelle n'est pas codée. Enfin, d'un point de vue pratique, on pourra perfectionner la mise en œuvre en scriptant la génération des maillages ainsi que les jeux de données définissant la simulation numérique de couplage, de façon à faciliter leur appréhension par un utilisateur.

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons envisagé une variation de la méthodologie de retour à l'échelle locale, sous la forme d'un couplage d'échelle rétroactif, par lequel la reconstruction est effectuée dans un domaine quelconque constitué de plusieurs cellules. L'intérêt majeur de cette nouvelle approche est d'étudier des situations accidentelles qui échappent à notre méthodologie initiale. En effet, cette dernière repose sur une certaine homogénéité des gradients des variables reconstruites, donc en l'absence d'évènement local. Une première approche, de type « one-way », consiste à résoudre un modèle poreux prenant en compte l'accident local (par le biais, par exemple d'une conductivité effective modifiée, ou d'une perméabilité modifiée, ou encore d'une source thermique égale au flux surfacique local convolué), puis à effectuer le retour à l'échelle locale dans un domaine de zoom par l'intermédiaire de ses cellules adjacentes fournissant des conditions aux limites ; cette méthode n'a pas été mise application. Une seconde approche, de type « two-way », consiste à faire interagir un problème macroscopique ne « voyant » pas l'accident et un problème microscopique de zoom par l'intermédiaire de cellules adjacentes et de pénalisation des équations. Bien que cette méthodologie en soit encore à un stade partiellement expérimental, les calculs réalisés dans ce chapitre montrent qu'il est possible d'approcher assez précisément la température maximale atteinte dans le milieu en considérant un domaine de zoom petit en comparaison de la taille du milieu entier. Bien que non répétée pour d'autres régimes et d'autres configurations, le principe du retour d'information du fin vers le poreux semble validé. On pourra envisager des applications à des régimes accidentels dans des assemblages. De telles applications possèdent clairement une importance fondamentale, en particulier dans le domaine de la sûreté des réacteurs nucléaires.

Conclusion générale

Le but de ce travail de thèse était de formuler une méthode de simulation numérique multiéchelle d'un assemblage de réacteur à neutrons rapides – l'un des concepts de réacteur du futur actuellement à l'étude –, partant du double constat qu'une simulation fine d'un assemblage complet est encore excessivement chère en temps de calcul, en dépit de l'évolution rapide de la puissance des ordinateurs, et que les modèles macroscopiques sont éventuellement incomplets. Dans un contexte de recherche et développement, l'intérêt de disposer d'une telle méthode est de pouvoir accéder au comportement moyen de l'assemblage (plus particulièrement sous l'aspect thermique) pour un faible coût de calcul, tout en étant capable de reconstruire les champs locaux dans des parties restreintes de l'assemblage. Dans un assemblage, il y a coexistence de fines échelles spatiales (de l'ordre de l'espace entre aiguilles) et de grandes échelles spatiales (de l'ordre de la taille de la structure), justifiant le recours à une modélisation multiéchelle. Nous sommes partis du principe qu'un assemblage pouvait être décrit comme un milieu poreux : en effet, sa structure est constituée de zones solides (les aiguilles de combustible) et d'un espace vide entre celles-ci, saturé par du fluide caloporteur. De ce fait, nous avons pu bénéficier du formalisme usuel d'étude des phénomènes de transport en milieux poreux. L'ensemble du travail entrepris conduit à deux synthèses : tout d'abord, nous avons développé, testé et mis en œuvre sur un cas d'application concret une méthode de « déconvolution ». Ensuite, nous sommes en situation de constater que les acquis ouvrent de nombreuses perspectives.

(i) Synthèse des acquis et contributions

En premier lieu, nous avons exposé diverses techniques de changement d'échelle. La méthode de « prise de moyenne volumique » (chapitre 1) permet l'établissement d'équations à l'échelle macroscopique, dans lesquelles toutes les échelles spatiales ont été filtrées. Cette méthode est bien adaptée à l'étude de milieux poreux périodiques sans autres particularités et offre un cadre mathématique rigoureux. Cependant, son application à un écoulement réel dans un assemblage, avec des phénomènes aussi complexes que la turbulence et la dispersion par exemple, demeure délicate. Une alternative à la prise de moyenne volumique, l'approche « sous-canal » (chapitre 2), a été historiquement développée pour l'étude spécifique des assemblages de réacteur à neutrons rapides. Elle se base sur un empirisme constitué par de nombreuses observations expérimentales, et a fait ses preuves depuis de nombreuses années. L'une ou l'autre de ces méthodologies de description macroscopique fournit la connaissance de moyennes des champs sur des volumes de contrôle différents ; les moyennes provenant de la prise de moyenne volumique peuvent être déduites des moyennes provenant de l'approche « sous-canal » par un jeu d'interpolations (chapitre 2).

Notre contribution essentielle (chapitre 3) a consisté à reconstruire, dans des cellules unitaires caractérisant le milieu poreux étudié, les champs de l'échelle microscopique à partir des moyennes discrètes issues soit de la prise de moyenne volumique, soit de la

modélisation « sous-canal ». Cette reconstruction d'une information fine à partir d'une information moyenne s'appuie sur des hypothèses de périodicité des champs fins reconstruits, ainsi que sur une technique de pénalisation permettant d'assurer la compatibilité de la solution reconstruite avec les informations macroscopiques. Elle consiste à résoudre un problème fin, restreint à une cellule unitaire, et contraint par les moyennes des champs recherchés. De premiers tests numériques ont été réalisés sur des configurations simplifiées, afin de démontrer la viabilité de la démarche et illustrer son cadre de validité.

Des applications à des configurations d'assemblage ont été proposées (chapitre 4). Elles ont montré essentiellement que la méthodologie de reconstruction du chapitre 3 peut être appliquée sur des cas industriels avec succès, c'est-à-dire avec des résultats précis pour des coûts de calcul acceptables. Néanmoins, ces applications ont aussi mis en lumière les difficultés de validation de la méthodologie sur ces configurations complexes : en effet, la validation requiert des calculs de référence des champs microscopiques dans toute la structure d'assemblage ; or de telles simulations numériques demandent un maillage extrêmement fin et un temps de calcul particulièrement élevé, si bien qu'elles ne sont pas reproductibles « à volonté ».

La méthode de reconstruction décrite au chapitre 3 constitue un couplage d'échelle dans le sens de l'échelle macroscopique vers l'échelle microscopique, puisque les informations moyennes sont utilisées pour contraindre un problème fin. Nous avons généralisé ce couplage en ajoutant une rétroaction de l'échelle microscopique vers l'échelle macroscopique (chapitre 5). Naturellement, cette rétroaction est plus directe que le premier sens, ce dernier revenant formellement à appliquer un opérateur de moyenne volumique « inverse ». La méthode de communication des problèmes microscopique et macroscopique a constitué l'enjeu principal ; nous avons opté pour un algorithme de type *Schwarz additif*. L'intérêt essentiel de ce couplage « two-way » est d'être capable d'appréhender des situations « accidentelles », ce que ne permet pas le couplage « one-way » du chapitre 3, qui repose sur une certaine homogénéité macroscopique des champs (c'est-à-dire en l'absence de forts gradients). Enfin, ce couplage « two-way » a été appliqué avec succès sur un cas-test académique. L'application à un assemblage tel que ceux du chapitre 4 n'a pas été réalisée.

(ii) Perspectives

Ce travail de thèse ouvre de nombreuses perspectives, qui peuvent être classées soit en tant qu'améliorations des méthodologies, soit en tant qu'élargissement de leur cadre d'application, soit en tant qu'« industrialisation » des méthodes proposées.

- Améliorations : la question de la reconstruction près des bords externes de l'assemblage, à laquelle ce travail n'a pas apporté de réponse approfondie, constitue un problème à part entière. Il est néanmoins d'une grande importance, puisque c'est dans ces régions périphériques qu'apparaissent les plus forts gradients de vitesse et de température. On peut néanmoins donner quelques éléments de réflexion : le problème à résoudre, dans une cellule de bord ou de coin, peut être contraint par les données macroscopiques issues de la modélisation « sous-canal », qui est en mesure de déterminer les champs moyens dans les sous-canaux périphériques. La difficulté identifiée est donc uniquement celle des conditions aux limites à appliquer aux bords d'une telle cellule, qui possède quatre types de faces : une face correspondant au boîtier externe, des faces « axiales », des faces « radiales », et une face « interne »

correspondant à la frontière fluide/fluide avec la cellule interne adjacente. La condition à la paroi est connue car c'est une donnée imposée. Ensuite, il semble réaliste de conserver une périodicité axiale du champ considéré ou de sa déviation. La condition « interne » peut être obtenue par application de la reconstruction dans la cellule interne adjacente (à l'exemple des problèmes dans Ω_i , au chapitre 5). Il reste donc à traiter la question des conditions aux limites « radiales ».

Dans tout le travail reporté dans ce document, nous n'avons considéré ni modèle de conduction dans les aiguilles, ni convection naturelle, ni effets instationnaires, ni effets de compressibilité. Or il semblerait intéressant de parvenir à une prise en compte de ces phénomènes dans la méthodologie de reconstruction, afin de pouvoir traiter des écoulements plus réalistes dans les assemblages.

Enfin, des améliorations d'ordre informatique dans la mise en œuvre sont à prévoir : génération de maillage, des jeux de données, parallélisation, etc.

- Autres applications : la méthodologie de forçage peut être appliquée à des écoulements répondant à d'autres systèmes d'équations que ceux considérés dans la thèse, ce qui ouvre potentiellement le champ des applications. Ainsi, des applications sont envisageables dans des domaines aussi divers que le changement de phase (solidification), les milieux réactifs, la croissance des biofilms ou encore la pyrolyse de la biomasse.

Des applications à d'autres types d'échangeurs de chaleur à structure périodique sont également concevables, comme par exemple les générateurs de vapeur des centrales nucléaires (on introduit alors une problématique diphasique), ou certains dispositifs de stockage de déchets nucléaires (fûts disposés « périodiquement » dans des salles d'entreposage), ou encore un cœur de réacteur entier¹.

- Industrialisation : la question pratique d'une chaîne de calcul intégrant cette capacité de retour d'échelle se pose. Supposons que la description de l'ensemble du cœur avec une approche « sous-canal » soit acquise, ainsi que la CFD d'une partie d'assemblage, alors l'industrialisation de la procédure de retour d'échelle soulève la question du sous-domaine dans lequel effectuer un raffinement d'échelle. Selon les besoins, ce sous-domaine peut être le lieu des températures maximales, le lieu où la modélisation à l'échelle du sous-canal est la moins bien validée, etc.

1. En effet, de façon imagée, un cœur est une structure en nid d'abeille. De la même façon qu'un assemblage, cette structure est donc périodique et caractérisée par une cellule unitaire. Il est donc possible de procéder à une reconstruction des champs fins dans des cellules, à condition de disposer d'une description à l'échelle macroscopique du cœur. L'inconvénient resterait cependant le coût de calcul de cette reconstruction, puisque la taille de la cellule est similaire à celle d'un assemblage entier, même si cette contrainte est progressivement relâchée avec l'amélioration des performances CPU.

Annexe A

La conduction axiale dans les écoulements de métaux liquides

Le sodium liquide possède la particularité, au même titre que tous les métaux liquides, d'avoir un nombre de Prandtl exceptionnellement faible en raison notamment d'une conductivité thermique élevée. L'ordre de grandeur du nombre de Prandtl pour les métaux liquides se situe entre 0,001 et 0,1 (environ 0,07 pour le sodium liquide à 400 K, voir TAB. 3.1), contre environ 0,7 pour l'air et 7 pour l'eau à 300 °C (Chassaing [32]). Le sodium liquide est donc un bon candidat dans les applications où l'on recherche à la fois un haut niveau de transfert de chaleur et de faibles frottements visqueux, justifiant son utilisation comme fluide caloporteur dans les assemblages de RNR-Na, en dépit des difficultés liées à sa haute inflammabilité au contact de l'air et explosivité au contact de l'eau (Cretté [37]).

L'objectif de cette annexe est d'évaluer analytiquement l'influence de la conduction axiale (c'est-à-dire dans le sens de l'écoulement moyen) sur le profil de température macroscopique dans une conduite poreuse en régime laminaire. En supposant une conductivité effective isotrope et uniforme, en négligeant l'effet de la dispersion thermique, et en l'absence de source de puissance, l'équation macroscopique de convection-diffusion de la température moyenne (équation (1.89) page 44) s'écrit

$$\rho C_p \langle \vec{u} \rangle_f \cdot \vec{\nabla} \langle \theta \rangle_f = \Lambda_{\text{eff}} \Delta \langle \theta \rangle_f. \quad (\text{A.1})$$

On note respectivement $\vec{U} = \langle \vec{u} \rangle_f$ (de composante axiale U) et $T = \langle \theta \rangle_f$ les champs de vitesse et de température intrinsèques. Dans le cas de l'écoulement de la FIG. A.1, où pour simplifier, la vitesse macroscopique de transport U est supposée uniforme dans tout le canal, l'équation devient

$$\underbrace{\rho C_p U \frac{\partial T}{\partial x}}_{\text{convection}} = \underbrace{\Lambda_{\text{eff}} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}}_{\text{conduction axiale}} + \underbrace{\Lambda_{\text{eff}} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}}_{\text{conduction transversale}}. \quad (\text{A.2})$$

On suppose de plus que les parois du canal sont maintenues à une température T_p et que le fluide entre dans le canal en $x = 0$ à une température uniforme $T_e \neq T_p$. À l'échelle macroscopique, on peut définir un nombre de Péclet Pe_p comme le produit d'un nombre de Reynolds Re_p et d'un nombre de Prandtl Pr_p macroscopiques :

$$\text{Pe}_p = \underbrace{\frac{2D\rho U_p}{\mu}}_{\text{Re}_p} \times \underbrace{\frac{\mu C_p}{\Lambda_{\text{eff}}}}_{\text{Pr}_p}. \quad (\text{A.3})$$

À l'aide de cette définition du nombre de Péclet et en adimensionnant l'équation (A.2) au moyen des changements de variables

$$T^* = \frac{T - T_p}{T_e - T_p}, \quad X = \frac{x}{2DPe_p}, \quad Y = \frac{y}{2D}, \quad (\text{A.4})$$

on obtient alors le problème suivant ¹ :

$$\begin{cases} \frac{\partial T^*}{\partial X} = \frac{1}{Pe_p^2} \frac{\partial^2 T^*}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial Y^2}, \\ T_p^* = T^*(X, \pm 1/2) = 0, \\ T_e^* = T^*(0, Y) = 1. \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

L'importance de la conduction axiale dépend donc du nombre de Péclet tel que défini par la relation (A.3) ; elle devient prépondérante sur les autres modes de transfert lorsque Pe_p diminue.

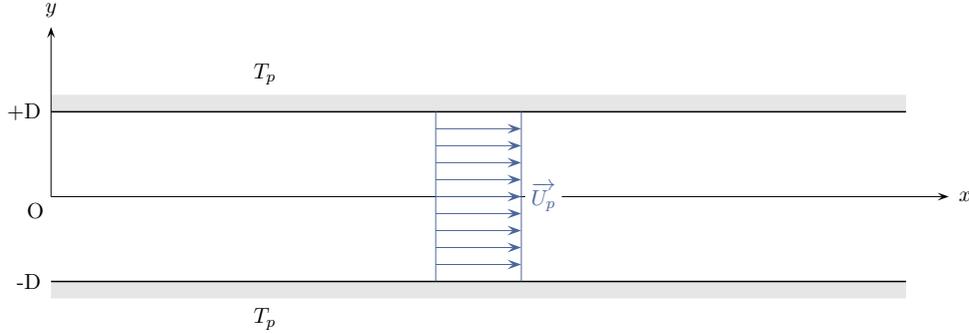


FIG. A.1 – Schéma d'un canal plan poreux avec une vitesse moyenne uniforme et une température uniforme imposée aux parois.

Une résolution analytique de ce type de problème est proposée par Minkowycz et Haji-Sheikh [80] et Nield *et al.* [84], mais dans le cas d'un champ de vitesse non uniforme, et avec prise en compte, dans [84], de la dissipation visqueuse. Ici, la résolution du problème (A.5) est beaucoup plus simple ; elle consiste à rechercher la solution sous la forme d'une série de Fourier :

$$T^*(X, Y) = \sum_{n=1}^{+\infty} T_n^*(X) \sin\left(n\pi Y + \frac{n\pi}{2}\right). \quad (\text{A.6})$$

On développe la condition d'entrée en série de Fourier, soit

$$T_e^* = \sum_{n=1}^{+\infty} T_{e,n}^* \sin\left(n\pi Y + \frac{n\pi}{2}\right), \quad (\text{A.7})$$

où $T_{e,n}^*$ sont les coefficients de Fourier calculés de la façon suivante :

$$T_{e,n}^* = 2 \int_{-1/2}^{1/2} T_e^* \sin\left(n\pi Y + \frac{n\pi}{2}\right) dY = \frac{2}{\pi} \frac{1 - (-1)^n}{n}. \quad (\text{A.8})$$

1. On notera l'existence d'une discontinuité du champ de température aux points $(0, \pm 1/2)$ à cause des conditions aux limites adoptées, mais cette discontinuité n'a pas d'importance pour la suite de l'analyse.

En calculant les dérivées de la série (A.6) et en les substituant dans l'équation (A.5), puis en évaluant (A.6) en $X = 0$ et en utilisant (A.7), on obtient les deux égalités :

$$\begin{cases} \sum_{n=1}^{+\infty} \left[\frac{dT_n^*}{dX} - \frac{1}{\text{Pe}_p^2} \frac{d^2T_n^*}{dX^2} + n^2\pi^2 T_n^* \right] \sin\left(n\pi Y + \frac{n\pi}{2}\right) = 0, \\ \sum_{n=1}^{+\infty} [T_n^*(0) - T_{e,n}^*] \sin\left(n\pi Y + \frac{n\pi}{2}\right) = 0. \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

D'où l'équation différentielle

$$-\frac{1}{\text{Pe}_p^2} \frac{d^2T_n^*}{dX^2} + \frac{dT_n^*}{dX} + n^2\pi^2 T_n^* = 0, \quad (\text{A.10})$$

avec la condition d'entrée

$$T_n^*(0) = T_{e,n}^* = \frac{2}{\pi} \frac{1 - (-1)^n}{n}. \quad (\text{A.11})$$

Le discriminant de l'équation linéaire du second ordre à coefficients constants (A.10) est

$$\Delta = 1 + \frac{4n^2\pi^2}{\text{Pe}_p^2} > 0. \quad (\text{A.12})$$

La positivité de ce discriminant implique alors que les solutions de (A.10) sont

$$T_n^*(X) = C_1 e^{\alpha_n X} + C_2 e^{\beta_n X}, \quad (\text{A.13})$$

où C_1 et C_2 sont des constantes et où les coefficients α_n et β_n ont pour expressions

$$\begin{cases} \alpha_n = \frac{\text{Pe}_p^2}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4n^2\pi^2}{\text{Pe}_p^2}} \right) > 0, \\ \beta_n = \frac{\text{Pe}_p^2}{2} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4n^2\pi^2}{\text{Pe}_p^2}} \right) < 0. \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

Or $T_n^*(X)$ admet nécessairement une limite finie lorsque $X \rightarrow +\infty$, donc la constante C_1 est nulle. En utilisant la condition d'entrée (A.11), on obtient

$$C_2 = \frac{2}{\pi} \frac{1 - (-1)^n}{n}, \quad (\text{A.15})$$

puis la solution de l'équation (A.5) :

$$T^*(X, Y) = \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1 - (-1)^n}{n} e^{\frac{\text{Pe}_p^2}{2} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4n^2\pi^2}{\text{Pe}_p^2}} \right) X} \sin\left(n\pi Y + \frac{n\pi}{2}\right). \quad (\text{A.16})$$

On peut distinguer deux cas limites :

- si $\text{Pe}_p \gg 1$, alors la conduction axiale est négligeable (mais à fort nombre de Péclet, des effets de dispersion thermique non pris en compte ici apparaissent à l'échelle macroscopique), et $\beta_n \simeq -n^2\pi^2$;
- $\text{Pe}_p \ll 1$, alors la conduction axiale est prépondérante sur les autres modes de transfert, et $\beta_n \simeq -n\pi\text{Pe}_p$.

La longueur d'établissement du régime thermique dépend classiquement du nombre de Péclet (FIG. A.2 et A.3) : à une distance donnée de l'entrée, la température sur l'axe est d'autant plus proche de la température de paroi que Pe_p est élevé, puisque le transfert thermique dans le fluide est alors essentiellement transversal. Pour de faibles valeurs de Pe_p , le transfert thermique axial (conduction et convection) devient prépondérant et la longueur d'établissement est plus grande.

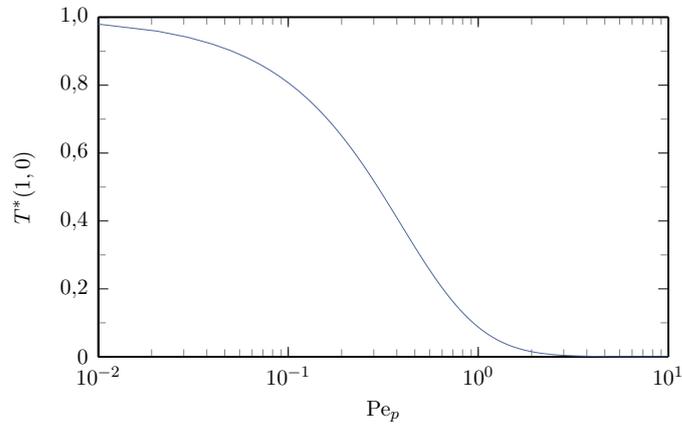


FIG. A.2 – Évolution de la température au point situé sur l'axe à la distance $X = 1$ de l'entrée du canal en fonction du nombre de Péclet.

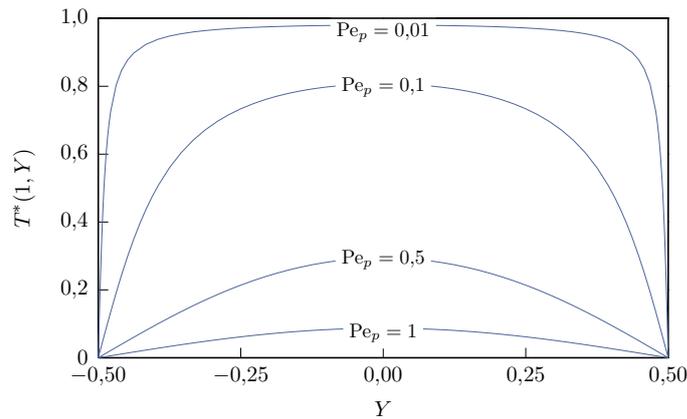


FIG. A.3 – Profils transverses de température à la distance $X = 1$ de l'entrée du canal à différentes valeurs du nombre de Péclet.

En conclusion, la conduction axiale est susceptible de jouer un rôle important en particulier dans les écoulements de métaux liquides, car à nombre de Reynolds fixé, ils ont un nombre de Péclet plus faible que pour les fluides classiques. Les écoulements dans les assemblages de RNR-Na rentrent dans le cadre d'écoulements de métaux liquides en conduite poreuse (l'écoulement moyen se fait dans une direction privilégiée, la direction axiale), et sont donc susceptibles d'être concernés par l'analyse développée dans cette annexe.

Annexe B

Correspondance entre moyennes volumiques et cellulaires

Dans cette annexe, on généralise aux cas des dimensions deux et trois, les relations entre les moyennes volumiques et les moyennes cellulaires établies au chapitre 2 en dimension un.

B.1 Calculs en dimension deux

Considérons un milieu bidimensionnel, c'est-à-dire avec $\ell_z = \infty$ (voir la FIG. 2.9 page 75). On a

$$\begin{aligned}\langle \psi \rangle_0(x, y) &= \int_{\mathbb{R}^2} m_0(x - x_p) m_0(y - y_p) \chi(x_p, y_p) \psi(x_p, y_p) dx_p dy_p \\ &= \frac{1}{V} \int_{y - \frac{\ell_y}{2}}^{y + \frac{\ell_y}{2}} \int_{x - \frac{\ell_x}{2}}^{x + \frac{\ell_x}{2}} \chi(x_p, y_p) \psi(x_p, y_p) dx_p dy_p,\end{aligned}\tag{B.1}$$

où le « volume » est ici $V = \ell_x \times \ell_y$. Ainsi,

$$\langle \psi \rangle_0 \Big|_{i,j} = \phi \bar{\psi}_{ij}.\tag{B.2}$$

En utilisant $\langle \psi \rangle_1 = m_0 * \langle \psi \rangle_0$, on a ensuite

$$\begin{aligned}\langle \psi \rangle_1(x, y) &= \int_{\mathbb{R}^2} m_0(x - x_p) m_0(y - y_p) \langle \psi \rangle_0(x_p, y_p) dx_p dy_p \\ &= \frac{1}{V} \int_{y - \frac{\ell_y}{2}}^{y + \frac{\ell_y}{2}} \int_{x - \frac{\ell_x}{2}}^{x + \frac{\ell_x}{2}} \langle \psi \rangle_0(x_p, y_p) dx_p dy_p.\end{aligned}\tag{B.3}$$

On dérive par rapport à x puis par rapport à y ,

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \langle \psi \rangle_1}{\partial x \partial y}(x, y) &= \frac{1}{V} \langle \psi \rangle_0 \left(x + \frac{\ell_x}{2}, y + \frac{\ell_y}{2} \right) - \frac{1}{V} \langle \psi \rangle_0 \left(x + \frac{\ell_x}{2}, y - \frac{\ell_y}{2} \right) \\ &\quad - \frac{1}{V} \langle \psi \rangle_0 \left(x - \frac{\ell_x}{2}, y + \frac{\ell_y}{2} \right) + \frac{1}{V} \langle \psi \rangle_0 \left(x - \frac{\ell_x}{2}, y - \frac{\ell_y}{2} \right),\end{aligned}\tag{B.4}$$

et on évalue cette dérivée en $(x_i + \ell_x/2, y_j + \ell_y/2)$:

$$\left. \frac{\partial^2 \langle \psi \rangle_1}{\partial x \partial y} \right|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{\phi}{V} \left[\bar{\psi}_{i,j} - \bar{\psi}_{i+1,j} - \bar{\psi}_{i,j+1} + \bar{\psi}_{i+1,j+1} \right]. \quad (\text{B.5})$$

On itère :

$$\begin{aligned} \langle \psi \rangle_2(x, y) &= \int_{\mathbb{R}^2} m_0(x - x_p) m_0(y - y_p) \langle \psi \rangle_1(x_p, y_p) dx_p dy_p \\ &= \frac{1}{V} \int_{x-\frac{\ell_x}{2}}^{x+\frac{\ell_x}{2}} \int_{y-\frac{\ell_y}{2}}^{y+\frac{\ell_y}{2}} \langle \psi \rangle_1(x_p, y_p) dx_p dy_p. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

On dérive cette expression deux fois par rapport à x puis deux fois par rapport à y , et enfin on l'évalue en (x_i, y_j) pour obtenir

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^4 \langle \psi \rangle_2}{\partial x^2 \partial y^2} \right|_{i,j} &= \frac{\phi}{V^2} \left[4\bar{\psi}_{i,j} - 2\bar{\psi}_{i+1,j} - 2\bar{\psi}_{i,j+1} - 2\bar{\psi}_{i,j-1} - 2\bar{\psi}_{i-1,j} \right. \\ &\quad \left. + \bar{\psi}_{i+1,j+1} + \bar{\psi}_{i+1,j-1} + \bar{\psi}_{i-1,j+1} + \bar{\psi}_{i-1,j-1} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Naturellement, le nombre de termes dans le membre de droite croît non seulement avec la dimension spatiale mais aussi avec l'ordre du filtre. En effet, plus la dimension spatiale augmente et plus une cellule possède de nombreuses cellules adjacentes (deux en dimension un, quatre en dimension deux, et six en dimension trois). D'autre part, le support du filtre m_p augmente avec son ordre, donc la moyenne volumique dans une cellule est fonction des valeurs du champ moyenné dans des cellules de plus en plus lointaines. À partir de la dimension deux, il faut numéroter les éléments pour pouvoir écrire le système sous forme matricielle. On attribue par exemple à la cellule i, j le numéro $N = i + (j - 1)n$, où n est le nombre de cellules périodiques selon x et selon y (FIG. B.1). Chaque cellule possède donc un numéro N variant de 1 à n^2 , et on a dans le cas du filtre m_2 :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^4 \langle \psi \rangle_2}{\partial x^2 \partial y^2} \right|_N &= \frac{\phi}{V^2} \left[4\bar{\psi}_N - 2\bar{\psi}_{N+1} - 2\bar{\psi}_{N+n} - 2\bar{\psi}_{N-n} - 2\bar{\psi}_{N-1} \right. \\ &\quad \left. + \bar{\psi}_{N+n+1} + \bar{\psi}_{N+n-1} + \bar{\psi}_{N-n+1} + \bar{\psi}_{N-n-1} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

En notant

$${}^t X = \left(\underbrace{\bar{\psi}_{11} \text{---} \bar{\psi}_{n1}}_{\text{Bloc 1}}, \underbrace{\bar{\psi}_{11} \text{---} \bar{\psi}_{n2}}_{\text{Bloc 2}}, \text{---}, \underbrace{\bar{\psi}_{11} \text{---} \bar{\psi}_{nn}}_{\text{Bloc n}} \right) \quad (\text{B.9})$$

et

$${}^t Y = \left(\left. \frac{\partial^4 \langle \psi \rangle_2}{\partial x^2 \partial y^2} \right|_{1,1} \text{---} \left. \frac{\partial^4 \langle \psi \rangle_2}{\partial x^2 \partial y^2} \right|_{n,1}, \text{---}, \left. \frac{\partial^4 \langle \psi \rangle_2}{\partial x^2 \partial y^2} \right|_{1,n} \text{---} \left. \frac{\partial^4 \langle \psi \rangle_2}{\partial x^2 \partial y^2} \right|_{n,n} \right), \quad (\text{B.10})$$

le système matriciel s'écrit

$$Y = AX, \quad (\text{B.11})$$

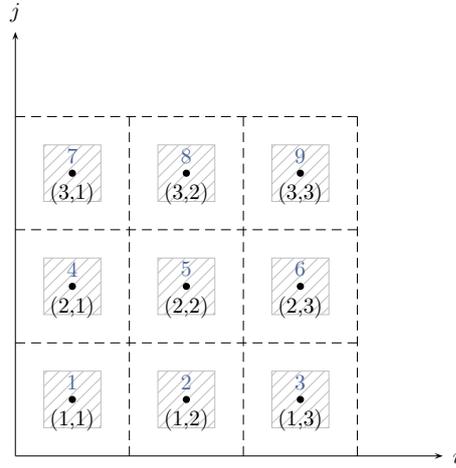


FIG. B.1 – Exemple de numérotation des cellules : l'élément (i, j) a pour numéro $N = i + (j-1)n$.

où A est la matrice tridiagonale par blocs

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 & 0 & \dots & 0 \\ & A_2 & & & \\ & 0 & & & \\ & & & & \\ 0 & & & 0 & A_2 & A_1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.12})$$

les blocs étant eux-mêmes tridiagonaux :

$$A_1 = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 & \dots & 0 \\ & -2 & & & \\ & 0 & & & \\ & & & & \\ 0 & & & 0 & -2 & 4 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad A_2 = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ & 1 & & & \\ & 0 & & & \\ & & & & \\ 0 & & & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.13})$$

B.2 Calculs en dimension trois

De façon analogue, on obtient les relations dans le cas d'un milieu tridimensionnel, soit

$$\langle \psi \rangle_0(x_i, y_j, z_k) = \phi \bar{\psi}_{ijk} \quad (\text{B.14})$$

pour le filtre m_0 ,

$$\left. \frac{\partial^3 \langle \psi \rangle_1}{\partial x \partial y \partial z} \right|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} = \frac{\phi}{V} \left[\begin{aligned} & \bar{\psi}_{i+1, j+1, k+1} - \bar{\psi}_{i+1, j+1, k} - \bar{\psi}_{i+1, j, k+1} + \bar{\psi}_{i+1, j, k} \\ & - \bar{\psi}_{i, j+1, k+1} + \bar{\psi}_{i, j+1, k} + \bar{\psi}_{i, j, k+1} - \bar{\psi}_{i, j, k} \end{aligned} \right] \quad (\text{B.15})$$

pour le filtre m_1 , et

$$\left. \frac{\partial^6 \langle \psi \rangle_2}{\partial x^2 \partial y^2 \partial z^2} \right|_{i, j, k} = \frac{\phi}{V^2} \left[\begin{aligned} & -8\bar{\psi}_{i, j, k} + 4\bar{\psi}_{i+1, j, k} + 4\bar{\psi}_{i, j+1, k} + 4\bar{\psi}_{i, j, k+1} + 4\bar{\psi}_{i, j, k-1} \\ & + 4\bar{\psi}_{i, j-1, k} + 4\bar{\psi}_{i-1, j, k} - 2\bar{\psi}_{i+1, j+1, k} - 2\bar{\psi}_{i+1, j, k+1} \\ & - 2\bar{\psi}_{i, j+1, k+1} - 2\bar{\psi}_{i+1, j, k-1} - 2\bar{\psi}_{i, j+1, k-1} - 2\bar{\psi}_{i+1, j-1, k} \\ & - 2\bar{\psi}_{i, j-1, k+1} - 2\bar{\psi}_{i, j-1, k-1} - 2\bar{\psi}_{i-1, j+1, k} - 2\bar{\psi}_{i-1, j, k+1} \\ & - 2\bar{\psi}_{i-1, j, k-1} - 2\bar{\psi}_{i-1, j-1, k} + \bar{\psi}_{i+1, j+1, k-1} + \bar{\psi}_{i+1, j-1, k+1} \\ & + \bar{\psi}_{i+1, j-1, k-1} + \bar{\psi}_{i-1, j+1, k+1} + \bar{\psi}_{i-1, j+1, k-1} \\ & + \bar{\psi}_{i-1, j-1, k+1} + \bar{\psi}_{i-1, j-1, k-1} + \bar{\psi}_{i+1, j+1, k+1} \end{aligned} \right] \quad (\text{B.16})$$

pour le filtre m_2 . Si le milieu est composé de n cellules périodiques dans chaque direction, on a un système de n^3 équations et n^3 inconnues, qui se résout après l'avoir écrit sous forme matricielle. Pour cela, on introduit une fonction de numérotation, par exemple $N = i + (j-1)n + (k-1)n^2$. Le système devient

$$\left. \frac{\partial^6 \langle \psi \rangle_2}{\partial x^2 \partial y^2 \partial z^2} \right|_N = \frac{\phi}{V^2} \left[\begin{aligned} & -8\bar{\psi}_N + 4\bar{\psi}_{N+1} + 4\bar{\psi}_{N+n} + 4\bar{\psi}_{N+n^2} + 4\bar{\psi}_{N-n^2} + 4\bar{\psi}_{N-n} \\ & + 4\bar{\psi}_{N-1} - 2\bar{\psi}_{N+n+1} - 2\bar{\psi}_{N+n^2+1} - 2\bar{\psi}_{N+n^2+n} \\ & - 2\bar{\psi}_{N-n^2+1} - 2\bar{\psi}_{N-n^2+n} - 2\bar{\psi}_{N-n+1} - 2\bar{\psi}_{N+n^2-n} \\ & - 2\bar{\psi}_{N-n^2-n} - 2\bar{\psi}_{N+n-1} - 2\bar{\psi}_{N+n^2-1} - 2\bar{\psi}_{N-n^2-1} \\ & - 2\bar{\psi}_{N-n-1} + \bar{\psi}_{N-n^2+n+1} + \bar{\psi}_{N+n^2-n+1} + \bar{\psi}_{N-n^2-n+1} \\ & + \bar{\psi}_{N+n^2+n-1} + \bar{\psi}_{N-n^2+n-1} + \bar{\psi}_{N+n^2-n-1} + \bar{\psi}_{N-n^2-n-1} \\ & + \bar{\psi}_{N+n^2+n+1} \end{aligned} \right]. \quad (\text{B.17})$$

Avec X le vecteur des inconnues tel que

$${}^t X = (\underbrace{\bar{\psi}_{111} \dots \bar{\psi}_{n11}}_{\text{Bloc 1}}, \dots, \underbrace{\bar{\psi}_{1n1} \dots \bar{\psi}_{nn1}}_{\text{Bloc n}}, \dots, \underbrace{\bar{\psi}_{1nn} \dots \bar{\psi}_{nnn}}_{\text{Bloc } n^2}), \quad (\text{B.18})$$

Annexe C

Analyse numérique de la pénalisation

Le but poursuivi dans cette annexe est d'établir, par des considérations d'algèbre linéaire, divers résultats ayant trait à la convergence et la stabilité des termes de pénalisation introduits au chapitre 3. On étudie séparément l'influence du forçage seul (section C.1), puis du forçage associé à des opérateurs d'advection et de diffusion (section C.2).

C.1 Problème temporel pénalisé

On considère le problème d'évolution temporelle suivant, d'inconnue $u(t)$:

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = F, \\ u(0) = u_{\text{init}}, \\ F(0) = F_{\text{init}}. \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

On cherche à définir le terme de forçage (ou de pénalisation) $F(t)$ de telle sorte que la solution stationnaire de (C.1) soit égale à une valeur « cible » u_0 . Les termes de pénalisation introduits au chapitre 3 sont écrits sous la forme

$$F(t) = \frac{1}{\omega}(u_0 - u(t)), \quad (\text{C.2})$$

où ω est un paramètre qui doit être positif. En effet la solution du problème (C.1) est alors

$$u(t) = u_0 + (u_{\text{init}} - u_0)e^{-t/\omega}, \quad (\text{C.3})$$

et remplit bien la condition recherchée,

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} u(t) = u_0, \quad (\text{C.4})$$

à condition que ω soit positif. Nous cherchons dans cette section à étudier la stabilité et la convergence du problème (C.1), ce qui constitue un approfondissement de l'étude initiée par Deschamps [39].

On discrétise l'équation différentielle du problème (C.1) au temps $n\delta t$, où δt est le pas de temps (arbitraire) :

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} + \delta t F^{(n)}, \quad (\text{C.5})$$

puis on transforme l'écriture en faisant intervenir la valeur u_0 à atteindre :

$$\underbrace{u_0 - u^{(n+1)}}_{U^{(n+1)}} = \underbrace{u_0 - u^{(n)}}_{U^{(n)}} - \delta t F^{(n)}. \quad (\text{C.6})$$

Comme Deschamps [39], recherchons le terme F sous la forme générale suivante :

$$F^{(n+1)} = \gamma F^{(n)} + \alpha U^{(n+1)} + \beta U^{(n)}, \quad (\text{C.7})$$

où α, β, γ sont des coefficients. On en déduit alors la relation matricielle

$$\underbrace{\begin{pmatrix} U^{(n+1)} \\ F^{(n+1)} \end{pmatrix}}_{V^{(n+1)}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -\delta t \\ \alpha + \beta & \gamma - \alpha \delta t \end{pmatrix}}_{\text{matrice d'amplification } A} \underbrace{\begin{pmatrix} U^{(n)} \\ F^{(n)} \end{pmatrix}}_{V^{(n)}}. \quad (\text{C.8})$$

Le terme général $V^{(n)}$ de cette suite (de type « géométrique ») est relié au vecteur du temps initial V_{init} par

$$V^{(n)} = A^n V_{\text{init}}. \quad (\text{C.9})$$

On s'intéresse dans la suite aux propriétés de convergence, de vitesse de convergence, et de stabilité de la suite $(V^{(n)})_{n \geq 0}$.

C.1.1 Convergence

La suite $(V^{(n)})_{n \geq 0}$ converge si et seulement si la suite $(A^n)_{n \geq 0}$ converge. Or la convergence de la suite $(A^n)_{n \geq 0}$ est liée au rayon spectral de la matrice A , défini comme la plus grande des valeurs absolues des valeurs propres de A :

$$\rho(A) = \max \{ |\lambda|, \lambda \in \text{Sp}(A) \}. \quad (\text{C.10})$$

En effet, pour toute norme matricielle $\|\cdot\|$ subordonnée à la norme vectorielle¹ $\|\cdot\|$, on a la relation

$$\|A^n\| \underset{n \rightarrow +\infty}{\sim} \rho(A)^n, \quad (\text{C.11})$$

d'où les équivalences suivantes :

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow +\infty} A^n = 0 &\iff \lim_{n \rightarrow +\infty} \|A^n\| = 0 \\ &\iff \lim_{n \rightarrow +\infty} \rho(A)^n = 0 \\ &\iff \rho(A) < 1. \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

Si $\rho(A) = 1$, il est possible que la suite $(A^n)_{n \geq 0}$ admette une limite finie (qui sera alors non nulle). Par conséquent, le critère

$$\rho(A) \leq 1 \quad (\text{C.13})$$

est une condition nécessaire de convergence, appelée *condition de von Neumann* (Allaire [5]). Si le schéma de différences finies converge, alors cette condition est satisfaite. On cherche à présent pour quelles valeurs des coefficients α, β, γ du schéma (C.7) l'inégalité (C.13) est vérifiée. Le polynôme caractéristique de A est

1. Le choix de la norme n'a pas d'importance, car dans \mathbb{R}^N toutes les normes sont équivalentes.

$$\begin{aligned} P(X) &= \det(A - XI) \\ &= X^2 - (1 + \gamma - \alpha\delta t)X + \gamma + \beta\delta t, \end{aligned} \tag{C.14}$$

de discriminant

$$\Delta = \delta^2 = (1 + \gamma - \alpha\delta t)^2 - 4(\gamma + \beta\delta t). \tag{C.15}$$

Le rayon spectral de A est donc

$$\rho(A) = \max(|\lambda_1|, |\lambda_2|), \tag{C.16}$$

où les valeurs propres de A , λ_1 et λ_2 , sont les solutions de (C.14) :

$$\begin{cases} \lambda_1 = \frac{1 + \gamma - \alpha\delta t + \delta}{2}, \\ \lambda_2 = \frac{1 + \gamma - \alpha\delta t - \delta}{2}. \end{cases} \tag{C.17}$$

Les valeurs de α , β , γ satisfaisant la condition de von Neumann sont obtenues par résolution de l'inéquation $\rho(A) < 1$. Il existe une infinité de solutions ; par exemple, le triplet $(\alpha, \beta, \gamma) = (1/\delta t, -3/4\delta t, 1/\delta t)$ est solution car il est tel que $\rho(A) = 1/2$.

Le cas particulier $\rho(A) = 1$ fournit trois solutions conduisant à trois matrices d'amplification possibles :

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & -\delta t \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, A_2 = \begin{pmatrix} 1 & -\delta t \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, A_3 = \begin{pmatrix} 1 & -\delta t \\ 4/\delta t & -3 \end{pmatrix}. \tag{C.18}$$

Or A_1^n , A_2^n et A_3^n divergent¹ quand $n \rightarrow +\infty$: cela confirme que la condition de von Neumann est seulement nécessaire et non suffisante².

C.1.2 Vitesse de convergence

D'après l'équivalence (C.11), la vitesse de convergence de $\|A^n\|$ est la même que celle de $\rho(A)^n$; elle est donc d'autant plus rapide que $\rho(A)$ est petit. On en déduit un critère d'amplification minimale qui permet une convergence optimale (c'est-à-dire en un nombre d'itérations minimal) :

$$\rho(A) = 0, \tag{C.19}$$

ce qui est équivalent à $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$. La résolution avec le logiciel Maple fournit

$$\begin{cases} \alpha = \frac{\gamma + 1}{\delta t}, \\ \beta = -\frac{\gamma}{\delta t}, \\ \gamma \text{ quelconque.} \end{cases} \tag{C.20}$$

Si α , β , γ sont choisis tels que (C.20), alors la matrice A ne dépend plus de γ :

1. Les normes $\|A_1^n\|$ et $\|A_3^n\|$ ont une limite infinie, tandis que $\|A_2^n\|$ reste bornée car A_2^2 est alternativement égale à A_2 (puissances impaires) ou à Id (puissances paires).

2. La condition de von Neumann devient nécessaire et suffisante si A est une matrice normale, c'est-à-dire telle que ${}^tAA = A{}^tA$.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -\delta t \\ 1/\delta t & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.21})$$

Bien que non diagonalisable, cette matrice peut être trigonalisée :

$$A = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1/\delta t & 1 \end{pmatrix}}_P \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -\delta t \\ 0 & 0 \end{pmatrix}}_T \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1/\delta t & 1 \end{pmatrix}}_{P^{-1}}, \quad (\text{C.22})$$

de telle sorte que, pour tout n ,

$$A^n = PT^n P^{-1}. \quad (\text{C.23})$$

Or la matrice T^n est nulle dès $n = 2$: la convergence est donc atteinte au temps $n = 2$, c'est-à-dire à la seconde itération (voir les FIG. C.1 et C.2). En pratique, il suffit de choisir une valeur de γ et de fixer α et β conformément à (C.20). Examinons deux choix possibles :

- Si l'on choisit $\gamma = 1$, on retrouve une forme classique du terme de forçage (Deschamps [39], Rollet-Miet [100], Ackermann [2], Lenormand *et al.* [69], Chatelain [33], Benarafa [17]) :

$$F^{(n+1)} = F^{(n)} + \frac{2(u_0 - u^{(n+1)}) - (u_0 - u^{(n)})}{\delta t}. \quad (\text{C.24})$$

- Si l'on choisit $\gamma = 0$, on retrouve la forme (C.2) du terme de forçage, avec le paramètre $\omega = \delta t$:

$$F^{(n)} = \frac{u_0 - u^{(n)}}{\delta t}. \quad (\text{C.25})$$

En réalité, on peut toujours se ramener à cette forme (C.25) quel que soit γ . En effet, en partant de

$$F^{(n+1)} = \gamma F^{(n)} + \frac{\gamma + 1}{\delta t} U^{(n+1)} - \frac{\gamma}{\delta t} U^{(n)} \quad (\text{C.26})$$

et en remplaçant $U^{(n)}$ à l'aide de (C.6), on obtient

$$F^{(n+1)} = \frac{U^{(n+1)}}{\delta t}. \quad (\text{C.27})$$

Reprenons l'expression (C.2) en conservant un paramètre ω quelconque¹. D'après l'analyse précédente, les valeurs propres de la matrice A sont

$$\begin{cases} \lambda_1 = 0, \\ \lambda_2 = 1 - \frac{\delta t}{\omega}. \end{cases} \quad (\text{C.28})$$

Par conséquent, le schéma converge si et seulement si le pas de temps et le paramètre ω vérifient

$$\rho(A) = \left| 1 - \frac{\delta t}{\omega} \right| < 1 \iff 0 < \frac{1}{\omega} < \frac{2}{\delta t}. \quad (\text{C.29})$$

1. C'est-à-dire le schéma (C.7) avec $\alpha = 1/\omega$, $\beta = 0$ et $\gamma = 0$.

C.1 Problème temporel pénalisé

Si $\omega < 0$, on a une divergence physique car la solution du problème est une exponentielle qui ne converge pas en temps (voir l'expression (C.3)); si $0 < \omega < \delta t/2$, la divergence est numérique (FIG. C.1). Le pas de temps dit de « stabilité » Δt_a associé au terme de forçage F , s'exprime donc comme

$$\Delta t_a = 2\omega. \quad (\text{C.30})$$

Le problème converge numériquement si le pas de temps δt utilisé (toujours positif) est strictement inférieur à Δt_a .

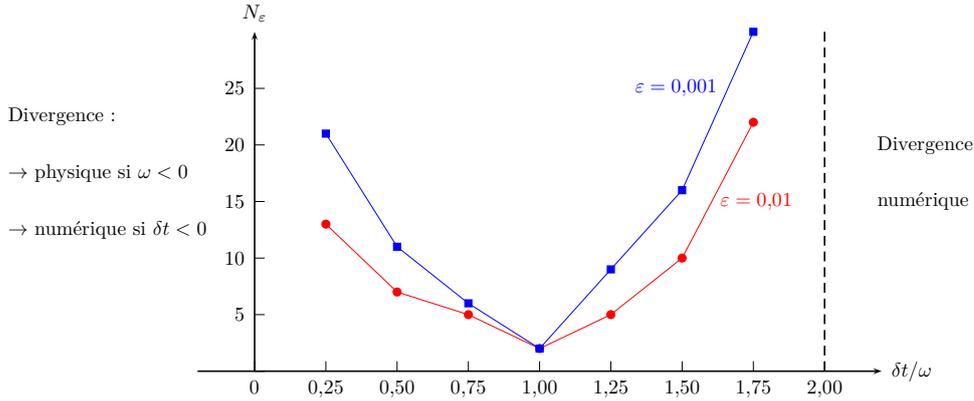


FIG. C.1 – Nombre d'itérations N_ε à partir duquel $\|V^{(n)}\| < \varepsilon$ (où $V^{(n)}$ est défini dans la relation (C.8)), en fonction $\delta t/\omega$. La convergence est optimale au point $\delta t/\omega = 1$, correspondant à $\rho(A) = 0$. Si $\rho(A) > 1$, le problème diverge.

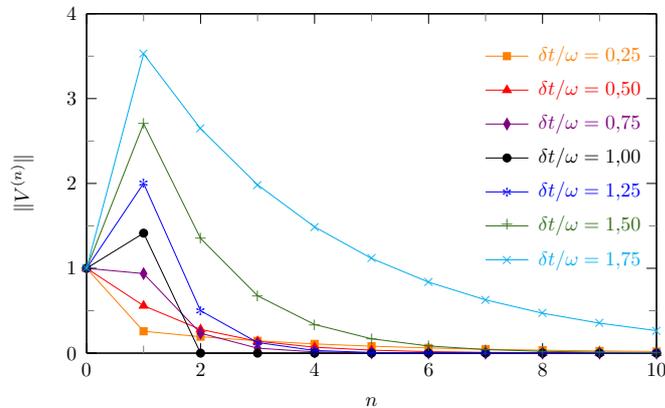


FIG. C.2 – Convergence de $\|V^{(n)}\|$ (défini dans la relation (C.8)) en fonction du nombre d'itérations n et pour différentes valeurs de $\delta t/\omega$, en partant d'une condition initiale $\|V_{\text{init}}\| = 1$. Pour $\delta t/\omega = 1$, la convergence a lieu en un nombre fini d'itérations.

C.1.3 Stabilité

La stabilité est une notion différente de la convergence. On dira que le problème est stable au cours du calcul pour la norme $\|\cdot\|$ si la norme des puissances de A est bornée :

$$\exists K > 0, \forall n \geq 0 : \|A^n\| \leq K. \quad (\text{C.31})$$

Cette condition est équivalente à $\|V^{(n)}\|$ bornée. Si la condition de von Neumann est satisfaite, alors le schéma est stable pour la norme $\|\cdot\|_2$ mais pas nécessairement pour la norme $\|\cdot\|_\infty$ (Allaire [5]). Par exemple si A est une matrice symétrique telle que $\rho(A) \leq 1$, on a bien $\|A^n\|_2$ bornée car

$$\left. \begin{aligned} \|A\|_2 = \sqrt{\rho(tAA)} = \rho(A) \leq 1 \\ \|A^n\|_2 \leq \|A\|_2^n = \rho(A)^n \end{aligned} \right\} \implies \|A^n\|_2 \leq 1. \quad (\text{C.32})$$

Notons G_n le facteur d'amplification à l'itération n défini, par

$$G_n = \frac{\|V^{(n+1)}\|}{\|V^{(n)}\|}. \quad (\text{C.33})$$

Cette grandeur caractérise l'existence ou non d'oscillations de la solution : elles apparaissent lorsque G_n prend des valeurs supérieures et inférieures à un. Si, pour tout n , on a $G_n \leq 1$, alors la norme $\|V^{(n)}\|$ ne peut pas augmenter au cours du temps : elle décroît de façon monotone et il ne peut pas y avoir d'oscillations non physiques. De la même façon, si le facteur d'amplification est toujours supérieur à un, il ne peut pas y avoir d'oscillations de la norme $\|V^{(n)}\|$ car celle-ci croît de façon monotone. Cela peut être relié à la stabilité du schéma, en effet :

$$\begin{aligned} \forall n \geq 0 : V^{(n+1)} = AV^{(n)} &\implies \forall n \geq 0 : \|V^{(n+1)}\| = \|AV^{(n)}\| \leq \|A\| \|V^{(n)}\| \\ &\implies \forall n \geq 0 : G_n \leq \|A\|. \end{aligned} \quad (\text{C.34})$$

Par conséquent, si $\|A\| \leq 1$ alors on a à la fois $G_n \leq 1$ et $\|A^n\| \leq \|A\|^n \leq 1$: le schéma est donc stable et non oscillant. Ainsi, une condition suffisante pour qu'il n'y ait pas d'oscillations est $\|A\| \leq 1$. La réciproque n'étant pas vraie, il est possible que $\|A\| > 1$ et que le problème soit tout de même stable et non oscillant. Par exemple, en prenant $\delta t/\omega = 1/2$, $\beta = 0$ et $\gamma = 0$, la matrice A est

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -\delta t \\ 1/2\delta t & -1/2 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.35})$$

et on a vu (équations (C.28) et (C.29)) qu'alors le problème converge et est stable sans oscillations (FIG. C.2), bien que les normes $\|\cdot\|_2$ et $\|\cdot\|_\infty$ de A soient supérieures à un :

$$\left\{ \begin{aligned} \|A\|_2 = \sqrt{\rho(tAA)} = \sqrt{\frac{5}{4} + \frac{1}{4\delta t^2} + \delta t^2} \geq \frac{3}{2}, \\ \|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq N} \sum_{j=1}^N |a_{ij}| = \max \left\{ 1 + \delta t, \frac{1}{2} + \frac{1}{2\delta t} \right\} > 1. \end{aligned} \right. \quad (\text{C.36})$$

Si l'on s'intéresse uniquement au régime stationnaire, la présence ou non d'oscillations du régime transitoire importe peu et le critère de convergence est suffisant. À la suite de cette première analyse du terme de pénalisation pris isolément, on considère dans la section suivante un problème pénalisé d'advection-diffusion afin d'évaluer comment les résultats de convergence et de stabilité sont modifiés par l'ajout d'opérateurs spatiaux.

C.2 Problème d'advection-diffusion pénalisé

On étudie le problème instationnaire unidimensionnel d'advection-diffusion d'un champ u entre $x = 0$ et $x = L$, en conservant la forme (C.2) du terme de forçage. En posant $U = \bar{u}_0 - u$, on se ramène à l'équation

$$\frac{\partial U}{\partial t} + V_0 \frac{\partial U}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \frac{\bar{U}}{\omega}, \quad (\text{C.37})$$

où $V_0 \geq 0$ est la vitesse d'advection (constante).

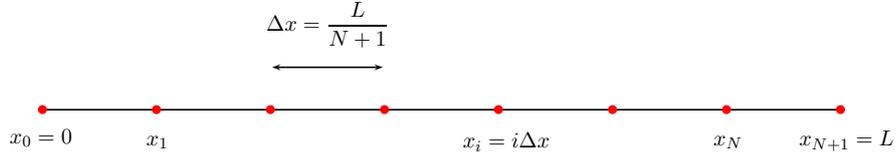


FIG. C.3 – Découpage du domaine $[0, L]$ en éléments réguliers.

On découpe le domaine $[0, L]$ en $N + 1$ éléments de même longueur (FIG. C.3) et on discrétise l'équation par la méthode des différences finies. On utilise un schéma explicite en temps pour la dérivée temporelle, un schéma amont pour le terme d'advection, un schéma centré pour le terme de diffusion et une méthode des trapèzes (schéma qui présente l'avantage d'être symétrique) pour le terme de forçage. On obtient :

$$\begin{aligned} \frac{U_i^{(n+1)} - U_i^{(n)}}{\Delta t} + V_0 \frac{U_i^{(n)} - U_{i-1}^{(n)}}{\Delta x} &= \nu \frac{U_{i+1}^{(n)} - 2U_i^{(n)} + U_{i-1}^{(n)}}{\Delta x^2} \\ &\quad - \frac{1/\omega}{N+1} \left(\sum_{j=1}^N U_j^{(n)} + \frac{U_0^{(n)} + U_{N+1}^{(n)}}{2} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.38})$$

Puis en posant

$$a = \frac{1}{N+1} \frac{\Delta t}{\omega}, \quad b = \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2}, \quad c = \frac{V_0 \Delta t}{\Delta x}, \quad (\text{C.39})$$

le système linéaire (C.38) devient

$$U_i^{(n+1)} = [b + c] U_{i-1}^{(n)} + [1 - 2b - c] U_i^{(n)} + [b] U_{i+1}^{(n)} - a \sum_{j=1}^N U_j^{(n)} - a \frac{U_0^{(n)} + U_{N+1}^{(n)}}{2}. \quad (\text{C.40})$$

Considérons le cas de conditions aux limites de Dirichlet homogènes, c'est-à-dire

$$\forall n \geq 0 : U_0^{(n)} = U_{N+1}^{(n)} = 0. \quad (\text{C.41})$$

On a alors, pour tout i , $1 \leq i \leq N$:

$$U_i^{(n+1)} = [-a + b + c] U_{i-1}^{(n)} + [1 - a - 2b - c] U_i^{(n)} + [-a + b] U_{i+1}^{(n)} - a \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i-1 \\ j \neq i \\ j \neq i+1}}^N U_j^{(n)}. \quad (\text{C.42})$$

Matriciellement, le système à résoudre se traduit donc par

$$\underbrace{\begin{pmatrix} U_0^{(n+1)} \\ U_1^{(n+1)} \\ \vdots \\ U_N^{(n+1)} \\ U_{N+1}^{(n+1)} \end{pmatrix}}_{U^{(n+1)}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & & & & 0 \\ 1-a-2b-c & -a+b & -a & & -a \\ -a+b+c & & & & -a \\ -a & & & & -a+b \\ -a & & & & -a+b+c \\ -a & -a & -a+b+c & 1-a-2b-c & 0 \\ 0 & & & & 0 \end{pmatrix}}_{M(a,b,c)} \underbrace{\begin{pmatrix} U_0^{(n)} \\ U_1^{(n)} \\ \vdots \\ U_N^{(n)} \\ U_{N+1}^{(n)} \end{pmatrix}}_{U^{(n)}} \quad (\text{C.43})$$

d'où

$$U^{(n+1)} = M^{n+1}U^{(0)}. \quad (\text{C.44})$$

On sait que

$$\begin{cases} (U^{(n)})_{n \geq 0} \text{ converge} \iff \rho(M) \leq 1, \\ \rho(M) < 1 \implies (U^{(n)})_{n \geq 0} \text{ converge vers } 0. \end{cases} \quad (\text{C.45})$$

Pour étudier la convergence de $(U^{(n)})_{n \geq 0}$, on considère d'abord chacun des opérateurs séparément, ce qui revient à étudier le rayon spectral des matrices $M(a, 0, 0)$ (forçage seul), $M(0, b, 0)$ (diffusion seule) et $M(0, 0, c)$ (advection seule) successivement. On examine ensuite le cas où au moins deux des trois opérateurs sont présents :

(i) Forçage seul : l'ensemble des valeurs propres de $M(a, 0, 0)$ est

$$\text{Sp}[M(a, 0, 0)] = \{0; 1; 1 - Na\}, \quad (\text{C.46})$$

donc, étant donnée l'expression (C.39) de a ,

$$\begin{aligned} \rho[M(a, 0, 0)] \leq 1 &\iff 0 \leq a \leq \frac{2}{N} \\ &\iff 0 \leq \Delta t \leq 2\omega \left(1 + \frac{1}{N}\right). \end{aligned} \quad (\text{C.47})$$

On retrouve évidemment le critère $\Delta t \leq \Delta t_a$ (cf. (C.30)), avec néanmoins un facteur correctif lié à l'introduction d'une discrétisation spatiale (ce facteur tend vers 1 lorsque le nombre de points de discrétisation N tend vers l'infini). Comme 1 est valeur propre de $M(a, 0, 0)$ pour toute valeur de a , alors $\rho[M(a, 0, 0)] \geq 1$; d'après (C.45), la convergence n'est donc possible que si $\rho[M(a, 0, 0)] = 1$.

Par ailleurs, on a aussi $\|M(a, 0, 0)\|_\infty \geq 1$, ce qui rend possible l'existence d'oscillations de $F = -\bar{U}^{(n)}/\omega$ et de $\|U^{(n)}\|_\infty$ au cours du temps : une simulation numérique

indique que si $\Delta t/\omega = 2$, alors -1 est valeur propre de $M(a, 0, 0)$ et il n'y a pas convergence (on a un phénomène d'oscillations bornées), tandis que les oscillations disparaissent si $\Delta t/\omega \leq 1$ (FIG. C.4). D'autre part, la vitesse de convergence est la plus rapide pour $\Delta t/\omega = 1$.

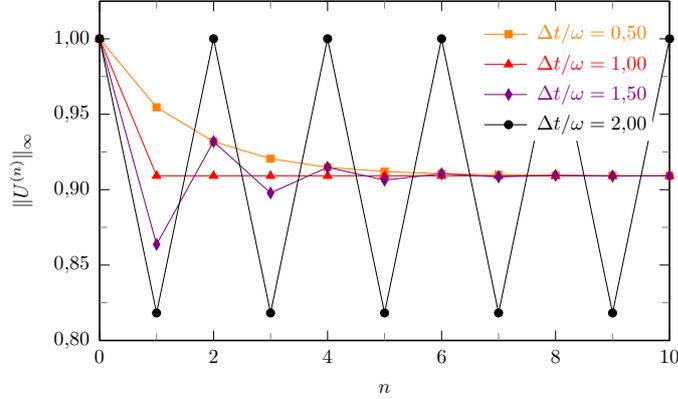


FIG. C.4 – Évolution temporelle de la norme $\|U^{(n)}\|_\infty$ pour différentes valeurs de $\Delta t/\omega$, avec $N = 10$ et $b = c = 0$.

(ii) Diffusion seule : d'après Yueh [122], l'ensemble des valeurs propres de $M(0, b, 0)$ est

$$\text{Sp}\left[M(0, b, 0)\right] = \left\{0; 1 - 2b + 2b \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right), 1 \leq k \leq N\right\}, \quad (\text{C.48})$$

donc, étant donnée l'expression (C.39) de b ,

$$\begin{aligned} \rho[M(0, b, 0)] \leq 1 &\iff \forall k \in [1; N], \left|1 - 2b + 2b \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right)\right| \leq 1 \\ &\iff \forall k \in [1; N], 0 \leq b \leq \frac{1}{1 - \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right)} \\ &\iff 0 \leq b \leq \frac{1}{1 - \cos\left(\frac{N\pi}{N+1}\right)} \\ &\iff 0 \leq \Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{\nu \left[1 - \cos\left(\frac{N\pi}{N+1}\right)\right]}. \end{aligned} \quad (\text{C.49})$$

En notant

$$\Delta t_b = \frac{\Delta x^2}{2\nu} \quad (\text{C.50})$$

le pas de temps de « stabilité » associé au terme de diffusion, la condition de convergence pour un nombre de points de discrétisation tendant vers l'infini devient

$$0 \leq \Delta t \leq \Delta t_b. \quad (\text{C.51})$$

D'autre part, on a

$$\|M(0, b, 0)\|_\infty \leq 1 \iff \Delta t \leq \Delta t_b, \quad (\text{C.52})$$

qui n'est autre que la condition de stabilité de Fourier. Si cette condition est satisfaite, alors il y a convergence sans oscillations de $\|U\|_\infty$. En revanche, si le pas de temps est tel que

$$\Delta t_b \leq \Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{\nu \left[1 - \cos \left(\frac{N\pi}{N+1} \right) \right]}, \quad (\text{C.53})$$

alors on observe numériquement des oscillations de $\|U\|_\infty$ (FIG. C.5).

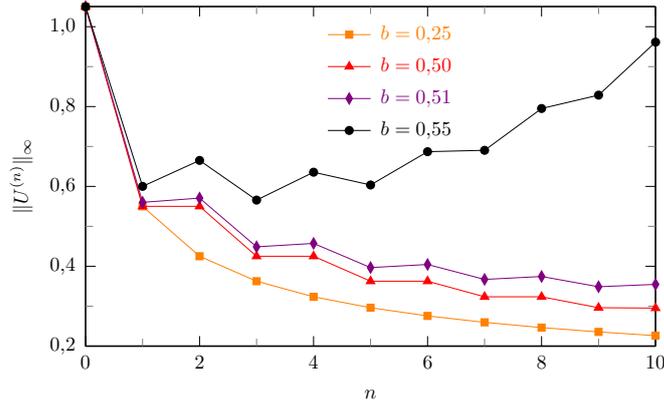


FIG. C.5 – Évolution temporelle de la norme $\|U^{(n)}\|_\infty$ pour différentes valeurs de b , avec $N = 10$, $a = 0$, $c = 0$. Pour $b \leq 1 / \left[1 - \cos \left(\frac{N\pi}{N+1} \right) \right] \approx 0,510\,336$, la convergence a lieu. Si $0,5 \leq b \leq 0,510\,336$, on observe de faibles oscillations qui n'existent plus pour $b \leq 0,5$.

(iii) Convection seule : l'ensemble des valeurs propres de $M(0, 0, c)$ est

$$\text{Sp}[M(0, 0, c)] = \{0; 1 - c\}, \quad (\text{C.54})$$

donc, étant donnée l'expression (C.39) de c ,

$$\begin{aligned} \rho[M(0, 0, c)] \leq 1 &\iff 0 \leq c \leq 2 \\ &\iff 0 \leq \Delta t \leq 2 \frac{\Delta x}{V_0}. \end{aligned} \quad (\text{C.55})$$

La condition de convergence dépend du nombre de points de discrétisation N par l'intermédiaire de Δx . De plus,

$$\begin{aligned} \|M(0, 0, c)\|_\infty \leq 1 &\iff |1 - c| + |c| \leq 1 \\ &\iff 0 \leq c \leq 1 \\ &\iff \Delta t \leq \Delta t_c, \end{aligned} \quad (\text{C.56})$$

où le pas de temps de stabilité associé au terme d'advection s'exprime comme

$$\Delta t_c = \frac{\Delta x}{V_0}. \quad (\text{C.57})$$

La condition (C.56) est la condition bien connue de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). Si cette condition est satisfaite, alors il y a convergence sans oscillations de $\|U\|_\infty$. En revanche, si le pas de temps est tel que

$$\Delta t_c \leq \Delta t \leq 2\Delta t_c, \quad (\text{C.58})$$

alors il y a convergence avec oscillations du problème de différences finies (FIG. C.6).

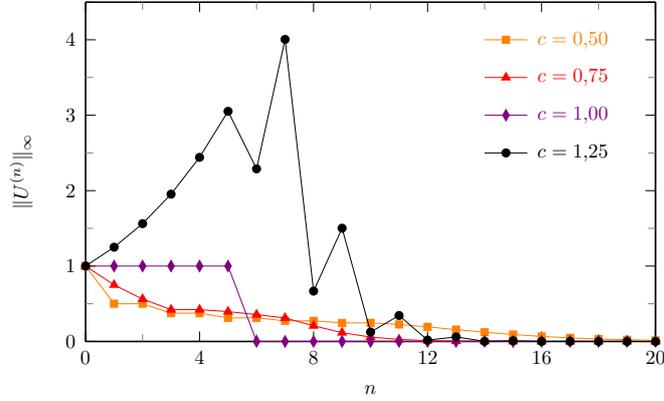


FIG. C.6 – Évolution temporelle de la norme $\|U^{(n)}\|_\infty$ pour différentes valeurs de c , avec $N = 10$, $a = 0$ et $b = 0$. La convergence a lieu pour $c \leq 2$. Si $c \leq 1$, on n'observe pas d'oscillations. Si $1 \leq c \leq 2$, on constate l'apparition d'oscillations qui peuvent être très amplifiées au cours des premières itérations (en particulier si c est proche de deux) mais qui s'atténuent au bout d'un temps éventuellement assez long.

- (iv) Advection et diffusion sans forçage : d'après Yueh [122], l'ensemble des valeurs propres de $M(0, b, c)$ est

$$\text{Sp}[M(0, b, c)] = \left\{ 0; 1 - 2b - c + 2\sqrt{b(b+c)} \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right), 1 \leq k \leq N \right\}, \quad (\text{C.59})$$

d'où la condition de convergence :

$$\begin{aligned} \rho[M(0, b, c)] \leq 1 &\iff \forall k \in [1; N], \left| 1 - 2b - c + 2\sqrt{b(b+c)} \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) \right| \leq 1 \\ &\iff \forall k \in [1; N], 0 \leq 2b + c - 2\sqrt{b(b+c)} \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) \leq 2. \end{aligned} \quad (\text{C.60})$$

En écrivant que

$$b = \frac{\Delta t}{2\Delta t_b} \text{ et } c = \frac{\Delta t}{\Delta t_c}, \quad (\text{C.61})$$

on obtient

$$\rho[M(0, b, c)] \leq 1 \iff 0 \leq \Delta t \leq \frac{2}{\frac{1}{\Delta t_b} + \frac{1}{\Delta t_c} - 2\sqrt{\frac{1}{\Delta t_b} \left(\frac{1}{\Delta t_b} + \frac{1}{\Delta t_c}\right)} \cos\left(\frac{N\pi}{N+1}\right)}. \quad (\text{C.62})$$

D'autre part, la norme *infini* de $M(0, b, c)$ étant

$$\|M(0, b, c)\|_\infty = |b| + |b+c| + |1-2b-c| = 2b+c + |1-2b-c|, \quad (\text{C.63})$$

la condition suffisante d'absence d'oscillations s'écrit

$$\begin{aligned} \|M(0, b, c)\|_\infty \leq 1 &\iff |1 - 2b - c| \leq 1 - 2b - c \\ &\iff 2b + c \leq 1 \\ &\iff \Delta t \leq \frac{1}{\frac{1}{\Delta t_b} + \frac{1}{\Delta t_c}}. \end{aligned} \tag{C.64}$$

Le pas de temps doit donc être inférieur à la moitié de la moyenne harmonique de Δt_b et de Δt_c . Ainsi, lorsqu'on ajoute des termes (autres que des constantes) à l'équation, on diminue le pas de temps de stabilité global, car celui-ci est inférieur au pas de temps de stabilité de chacun des termes.

- (v) Dans tous les autres cas, l'expression analytique des valeurs propres et de la norme *infini* est plus délicate. On s'appuie donc sur des tests numériques. On calcule $\Delta t/\omega$ tel que $\rho(M) \leq 1$, dans les cas $a, b \neq 0$ et $c = 0$ (FIG. C.7), $a, c \neq 0$ et $b = 0$ (FIG. C.9), et $a, b, c \neq 0$ (FIG. C.10). On trace également le rayon spectral $\rho[M(a, b, 0)]$ en fonction de $\Delta t/\omega$ (FIG. C.8).

À condition que l'inéquation (C.64) soit satisfaite, on peut observer dans les trois cas traités (diffusion-forçage, advection-forçage et diffusion-advection-forçage) que $\Delta t/\omega \leq 2$ est une condition suffisante de convergence, car elle implique $\rho(M) \leq 1$. Le dépassement de la valeur $\Delta t/\omega$ que l'on peut s'autoriser tout en conservant la convergence dépend du nombre de points N . Lorsque N tend vers l'infini, les FIG. C.7, C.9 et C.10 tendent à montrer que $\Delta t/\omega \leq 2$ devient une condition nécessaire et suffisante de convergence.

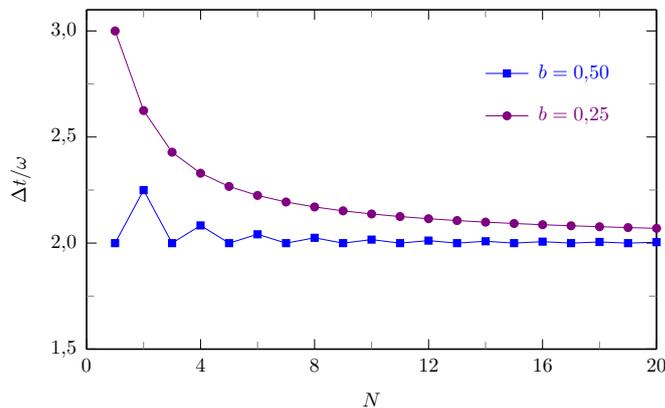


FIG. C.7 – Valeurs de $\Delta t/\omega$ telles que $\rho[M(a, b, 0)] \leq 1$ en fonction du nombre de points de discrétisation, pour $b = 0,25$ et $b = 0,5$. On observe que $\Delta t/\omega$ tend vers 2 lorsque l'on augmente le nombre de points N .

C.3 Conclusion

D'après l'analyse proposée dans cette annexe, une équation pénalisée d'advection-diffusion converge numériquement à condition que le pas de temps Δt et le paramètre de pénalisation ω satisfassent les inégalités

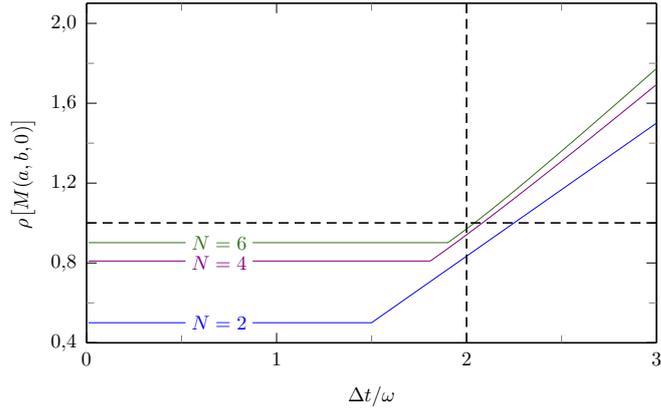


FIG. C.8 – Rayon spectral $\rho[M(a,b,0)]$ en fonction de $\Delta t/\omega$, pour $b = 0,5$ et pour différentes valeurs de N .

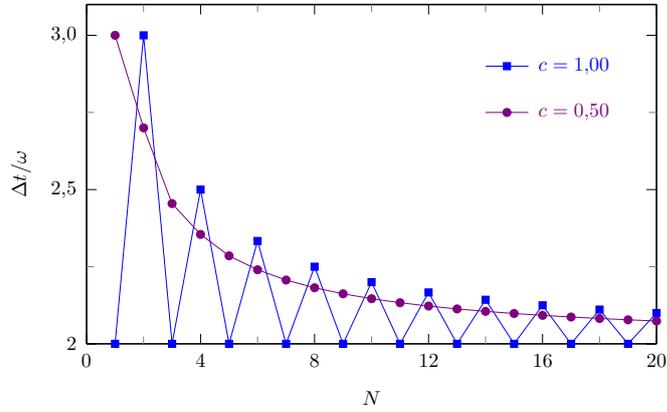


FIG. C.9 – Valeurs de $\Delta t/\omega$ telles que $\rho[M(a,0,c)] \leq 1$ en fonction du nombre de points de discrétisation, pour $c = 0,5$ et $c = 1$. On observe que $\Delta t/\omega$ tend vers 2 lorsque l'on augmente le nombre de points N .

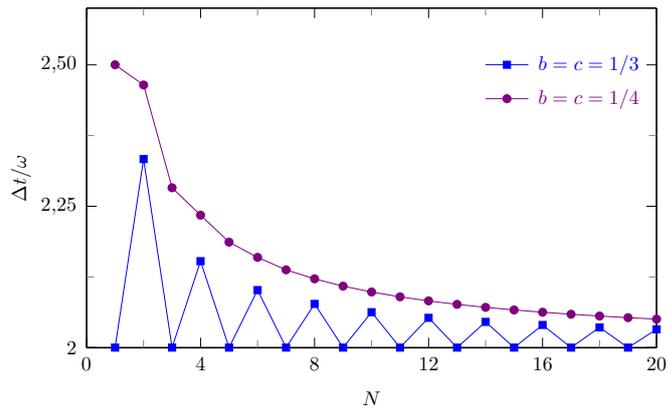


FIG. C.10 – Valeurs de $\Delta t/\omega$ telles que $\rho[M(a,b,c)] \leq 1$ en fonction du nombre de points de discrétisation, pour $b = c = 1/4$ et $b = c = 1/3$. On observe que $\Delta t/\omega$ tend vers 2 lorsque l'on augmente le nombre de points N .

$$0 \leq \Delta t/\omega \leq 2 \text{ et } \Delta t \leq \frac{1}{\frac{1}{\Delta t_b} + \frac{1}{\Delta t_c}}. \quad (\text{C.65})$$

Ce résultat demeure valable même en l'absence d'advection et/ou de diffusion, et est également confirmé par les diverses applications numériques bidimensionnelles menées au chapitre 3. D'autres tests ont montré qu'il reste vrai pour un schéma implicite en temps. De plus, d'après les diverses expériences numériques effectuées, il apparaît que la valeur de ω correspondant à une convergence numérique optimale est proche de Δt (cette valeur est même exactement Δt dans le cas du problème (C.1)). En conclusion, on retiendra que le choix $\omega = \Delta t$ est satisfaisant à la fois pour optimiser la vitesse de convergence et pour approcher avec une précision suffisante la valeur cible.

Références bibliographiques

- [1] Les systèmes nucléaires du futur. *Clefs CEA*, 55, été 2007.
- [2] C. ACKERMANN. *Développements et validation de Simulation des Grandes Échelles d'écoulements turbulents dans un code industriel*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2000.
- [3] M. AIT SAADA, S. CHIKH et A. CAMPO. Analysis of hydrodynamic and thermal dispersion in porous media by means of a local approach. *Heat Mass Transf.*, 42 : 995–1006, 2006.
- [4] G. ALLAIRE. Homogenization and two-scale convergence. *SIAM J. Math. Anal.*, 23 : 1482–1518, 1992.
- [5] G. ALLAIRE. *Analyse numérique et optimisation - Une introduction à la modélisation mathématique et à la simulation numérique*. Éditions de l'École Polytechnique, 2005.
- [6] H.P. AMARAL SOUTO et C. MOYNE. Dispersion in two-dimensional periodic porous media. Part I. Hydrodynamics. *Phys. Fluids*, 9 : 2243–2252, 1997.
- [7] H.P. AMARAL SOUTO et C. MOYNE. Dispersion in two-dimensional periodic porous media. Part II. Dispersion tensor. *Phys. Fluids*, 9 : 2253–2263, 1997.
- [8] B. AMAZIANE, S. ANTONTSEV, L. PANKRATOV et A. PIATNITSKI. Homogenization of immiscible compressible two-phase flow in porous media : application to gas migration in a nuclear waste repository. *Multiscale Model. Simul.*, 8 : 2023–2047, 2010.
- [9] T.B ANDERSON et R. JACKSON. A fluid mechanical description of fluidized beds. Equations of motion. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 6 : 527–539, 1967.
- [10] P. ANGOT, C.-H. BRUNEAU et P. FABRIE. A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numer. Math.*, 81 : 497–520, 1999.
- [11] J.-L. AURIAULT. Upscaling heterogeneous media by asymptotic expansions. *J. Eng. Mech.*, 128 : 812–822, 2002.
- [12] J.-L. AURIAULT. On domain of validity of Brinkman's equation. *Transp. Porous Media*, 79 : 215–223, 2009.
- [13] J.-L. AURIAULT et J. LEWANDOWSKA. Homogenization analysis of diffusion and adsorption macrotransport in porous media : macrotransport in the absence of advection. *Géotechnique*, 43 : 457–469, 1993.
- [14] Y. BACHMAT et J. BEAR. Macroscopic modelling of transport phenomena in porous media : the continuum approach. *Transp. Porous Media*, 1 : 213–240, 1986.

- [15] J. BARRÈRE, O. GIPOULOUX et S. WHITAKER. On the closure problem for Darcy's law. *Transp. Porous Media*, 7 : 209–222, 1992.
- [16] J. BEAR. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Dover Publications, 1988.
- [17] Y. BENARAFÀ. *Application du couplage RANS/LES aux écoulements turbulents à haut nombre de Reynolds de l'industrie nucléaire*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 2005.
- [18] A. BENSOUSSAN, J.-L. LIONS et G. PAPANICOLAOU. *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*. North-Holland, 1978.
- [19] A.M. BIANCHI, Y. FAUTRELLE et J. ETAY. *Transferts Thermiques*. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, 2004.
- [20] U. BIEDER, F. DUCROS, G. FAUCHET et P. QUÉMÉRÉ. CFD investigations of a full scale helical wire-wrapped 61-pin fuel bundle by using the code TRIO_U. *In Annual Meeting on Nuclear Technology*, Dresde, Allemagne, mai 2009.
- [21] Y.G. BIRAUD. Les méthodes de déconvolution et leurs limitations fondamentales. *Rev. Phys. Appl.*, 11 : 203–214, 1976.
- [22] C. BOST, G.-H. COTTET et E. MAITRE. Convergence analysis of a penalization method for the three-dimensional motion of a rigid body in an incompressible viscous fluid. *SIAM J. Numer. Anal.*, 48 : 1313–1337, 2010.
- [23] A. BOURGEAT, M. QUINTARD et S. WHITAKER. Éléments de comparaison entre la méthode d'homogénéisation et la méthode de prise de moyenne avec fermeture. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II* : 463–466, 1988.
- [24] H. BRENNER. Dispersion resulting from flow through spatially periodic porous media. *Phil. Trans. Roy. Soc. London*, 297 : 81–133, 1980.
- [25] W.-P. BREUGEM. *The Influence of Wall Permeability on Laminar and Turbulent Flows : Theory and Simulations*. Thèse de doctorat, Technische Universiteit Delft, 2005.
- [26] W.-P. BREUGEM. The effective viscosity of a channel-type porous medium. *Phys. Fluids*, 19 : 103104.1–103104.8, 2007.
- [27] H.C. BRINKMAN. A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles. *Appl. Sci. Res.*, A1 : 27–34, 1947.
- [28] H.C. BRINKMAN. On the permeability of media consisting of closely packed porous particles. *Appl. Sci. Res.*, A1 : 81–86, 1947.
- [29] C. CALVIN, O. CUETO et P. ÉMONOT. An object-oriented approach to the design of fluid mechanics software. *Math. Model. Numer. Anal.*, 36 : 907–921, 2002.
- [30] G.F. CAREY et R. KRISHNAN. Penalty approximation of Stokes flow. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 35 : 169–206, 1982.
- [31] M. CHANDESRIIS. *Modélisation des écoulements dans les milieux poreux et à l'interface avec un milieu libre*. Thèse de doctorat, Université Paris VI, 2006.
- [32] P. CHASSAING. *Mécanique des fluides. Éléments d'un premier parcours. 2^e édition*. Cépaduès-Éditions, Toulouse, 2000.

- [33] A. CHATELAIN. *Simulation des Grandes Échelles d'écoulements turbulents avec transferts de chaleur*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2004.
- [34] Z. CHEN, S.L. LYONS et G. QIN. Derivation of the Forchheimer law via homogenization. *Transp. Porous Media*, 44 : 325–335, 2001.
- [35] X. CHENG et N.I. TAK. CFD analysis of thermal-hydraulic behavior of heavy liquid metals in sub-channels. *Nucl. Eng. Des.*, 236 : 1874–1885, 2006.
- [36] X. CORÉ, P. ANGOT et J.-C. LATCHÉ. A multilevel local mesh refinement projection method for low Mach number flows. *Math. Comput. Simul.*, 61 : 477–488, 2003.
- [37] J.-P. CRETTE. Réacteurs à neutrons rapides refroidis au sodium. *Techniques de l'Ingénieur*, juillet 2005.
- [38] H.P.G. DARCY. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon : exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau*. Victor Dalmont, Paris, 1856.
- [39] V. DESCHAMPS. *Simulation numérique de la turbulence inhomogène incompressible dans un écoulement de canal plan*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1988.
- [40] M. DROUIN. *Modélisation des écoulements turbulents anisothermes en milieu macroporeux par une approche de double filtrage*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2010.
- [41] M. DRYJA et O. WIDLUND. Some Domain Decomposition Algorithms for Elliptic Problems. In L. HAYES et D. KINCAID, éditeurs. *Iterative Methods for Large Linear Systems*, pages 273–291. Academic Press, San Diego, 1989.
- [42] J. DUFRÊCHE, M. PRAT et P. SCHMITZ. A two-scale domain decomposition method for computing the flow through a porous layer limited by a perforated plate. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 42 : 623–639, 2003.
- [43] N. DUKHAN et J. RATOWSKI. Velocity profile for Darcy flow in porous media : a two-dimensional solution. In *Third International Conference on Porous Media and its Application in Science and Engineering*, Montecatini, Italie, juin 2010.
- [44] K. EL GANAOUI. *Homogénéisation de modèles de transferts thermiques et radiatifs : application au cœur des réacteurs à caloporteur gaz*. Thèse de doctorat, École Polytechnique, 2006.
- [45] M. ELMO et O. CIONI. Low Mach number model for compressible flows and application to HTR. *Nucl. Eng. Des.*, 222 : 117–124, 2002.
- [46] S. ERGUN. Fluid flow through packed columns. *Chem. Eng. Prog.*, 48 : 89–94, 1952.
- [47] P. FORCHHEIMER. Wasserbewegung durch Boden. *Z. Ver. Dtsch. Ing.*, 45 : 1782–1788, 1901.
- [48] R. GAJAPATHY, K. VELUSAMY, P. SELVARAJ, P. CHELLAPANDI et S.C. CHETAL. CFD investigation of helical wire-wrapped 7-pin fuel bundle and the challenges in modeling full scale 217 pin bundle. *Nucl. Eng. Des.*, 237 : 2332–2342, 2007.

- [49] B. GOYEAU, T. BENIHADDADENE, D. GOBIN et M. QUINTARD. Averaged momentum equation for flow through a nonhomogeneous porous structure. *Transp. Porous Media*, 28 : 19–50, 1997.
- [50] W.G. GRAY. A derivation of the equations for multi-phase transport. *Chem. Eng. Sci.*, 30 : 229–233, 1975.
- [51] W. HACKBUSCH. Local defect correction and domain decomposition techniques. In K. BÖHMER et H.J. STETTER, éditeurs. *Defect Correction Methods. Theory and Applications, Computing, Suppl. 5*, pages 89–113. Springer, 1984.
- [52] J. HADAMARD. Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique. *Princeton University Bulletin*, 13 : 49–52, 1902.
- [53] A. HAJI-SHEIKH, D.A. NIELD et K. HOOMAN. Heat transfer in the thermal entrance region for flow through rectangular porous passages. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 49 : 3004–3015, 2006.
- [54] A. HAJI-SHEIKH et K. VAFAI. Analysis of flow and heat transfer in porous media imbedded inside various-shaped ducts. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 47 : 1889–1905, 2004.
- [55] K.D. HAMMAN et R.A. BERRY. A CFD simulation process for fast reactor fuel assemblies. *J. Fluid Mech.*, 240 : 2304–2312, 2010.
- [56] R.E. HARING et R.A. GREENKORN. A statistical model of a porous medium with nonuniform pores. *AIChE J.*, 16 : 477–483, 1970.
- [57] M. HELLOU, J. MARTINEZ et M. El YAZIDI. Stokes flow through microstructural model of fibrous media. *Mech. Res. Commun.*, 31 : 97–103, 2004.
- [58] M.F. HORSTEMEYER. Multiscale Modeling : A Review. In J. LESZCZYNSKI et M.K. SHUKLA, éditeurs. *Practical Aspects of Computational Chemistry : Methods, Concepts and Applications*, pages 87–135. Springer, 2009.
- [59] K.-T. HSIAO et S. ADVANI. Modified effective thermal conductivity due to heat dispersion in fibrous porous media. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 42 : 1237–1254, 1999.
- [60] M. KAVIANY. *Principles of Heat Transfer in Porous Media, Second Edition*. Springer-Verlag, New-York, 1995.
- [61] H. KAWAMURA, H. ABE et Y. MATSUO. DNS of turbulent heat transfer in channel flow with respect to Reynolds and Prandtl number effects. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 20 : 196–207, 1999.
- [62] J.B. KELLER. Effective behaviour of heterogeneous media. In U. LANDMAN, éditeur. *Statistical Mechanics and Statistical Methods in Theory and Application*, pages 631–644. Plenum, New-York, 1977.
- [63] K. KHADRA, P. ANGOT, J.-P. CALTAGIRONE et P. MOREL. Concept de zoom adaptatif en architecture multigrille locale ; étude comparative des méthodes L.D.C., F.A.C. et F.I.C.. *Math. Model. Numer. Anal.*, 30 : 39–82, 1996.
- [64] H. KOCH et D. TATARU. Well-posedness for the Navier-Stokes equations. *Adv. Math.*, 157 : 22–35, 2001.
- [65] J.A. KOLODZIEJ. Influence of the porosity of a porous medium on the effective viscosity in Brinkman’s filtration equation. *Acta Mech.*, 75 : 241–254, 1988.

- [66] F. KUWAHARA et A. NAKAYAMA. Numerical determination of thermal dispersion coefficients using a periodic porous structure. *J. Heat Transf.*, 121 : 160–163, 1999.
- [67] P. LASCAUX et R. THÉODOR. *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur. Méthodes directes*. Masson, Paris, 1993.
- [68] P. LASCAUX et R. THÉODOR. *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur. Méthodes itératives*. Masson, Paris, 1994.
- [69] E. LENORMAND, P. SAGAUT et L. Ta PHUOC. Large eddy simulation of subsonic and supersonic channel flow at moderate Reynolds number. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 32 : 369–406, 2000.
- [70] P.-L. LIONS. On the Schwarz Alternating Method. I. *In First International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, 1987.
- [71] H. LIU, P.R. PATIL et U. NARUSAWA. On Darcy-Brinkman equation : viscous flow between two parallel plates packed with regular square arrays of cylinders. *Entropy*, 9 : 118–131, 2007.
- [72] J. LIU, S. CHEN, X. NIE et M.O. ROBBINS. A continuum-atomistic simulation of heat transfer in micro- and nano-flows. *J. Comp. Phys.*, 227 : 279–291, 2007.
- [73] Q. LIU et O.V. VASILYEV. A Brinkman penalization method for compressible flows in complex geometries. *J. Comp. Phys.*, 227 : 946–966, 2007.
- [74] I.F. MACDONALD, M.S. EL-SAYED et F.A.L. DULLIEN. Flow through porous media. the Ergun equation revisited. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 18 : 199–208, 1979.
- [75] C. MARLE. Écoulements monophasiques en milieu poreux. *Rev. Inst. Fr. Pétrole*, 22 : 1471–1509, 1967.
- [76] N. MARTYS, D.P. BENTZ et J. GARBOCZI. Computer simulation study of the effective viscosity in Brinkman's equation. *Phys. Fluids*, 6 : 1434–1439, 1994.
- [77] P. MAZET. Cours d'intégration, 2004–2005. Université Pierre et Marie Curie.
- [78] C.C. MEI et J.-L. AURIAULT. The effect of weak inertia on flow through a porous medium. *J. Fluid Mech.*, 222 : 647–663, 1991.
- [79] R. MINERO, M.J.H. ANTHONISSEN et R.M.M. MATTHEIJ. A local defect correction technique for time-dependent problems. *Numer. Meth. Partial Differ. Equ.*, 22 : 128–144, 2006.
- [80] W.J. MINKOWYCZ et A. HAJI-SHEIKH. Heat transfer in parallel plates and circular porous passages with axial conduction. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 49 : 2381–2390, 2006.
- [81] J. MLS. On the existence of the derivatives of the volume average. *Transp. Porous Media*, 2 : 615–621, 1987.
- [82] A. NAKAYAMA, H. KOYAMA et F. KUWAHARA. An analysis on forced convection in a channel filled with a Brinkman-Darcy porous medium : exact and approximate solutions. *Wärme- Stoffübertragung*, 23 : 291–295, 1988.
- [83] S.P. NEUMAN. Theoretical derivation of Darcy's law. *Acta Mech.*, 25 : 153–170, 1977.

- [84] D.A. NIELD, A.V. KUZNETSOV et M. XIONG. Thermally developing forced convection in a porous medium : parallel plate channel with walls at uniform temperature, with axial conduction and viscous dissipation effects. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 46 : 643–651, 2003.
- [85] D.A. NIELD, A.V. KUZNETSOV et M. XIONG. Effects of viscous dissipation and flow work on forced convection in a channel filled by a saturated porous medium. *Transp. Porous Media*, 56 : 351–367, 2004.
- [86] A. PACCOU, G. CHIAVASSA, J. LIANDRAT et K. SCHNEIDER. A penalization method applied to the wave equation. *C. R. Mec.*, 333 : 79–85, 2005.
- [87] C. PÉNIGUEL, I. RUPP, S. ROLFO et M. GUILLAUD. Thermal-hydraulics and conjugate heat transfer calculation in a wire-wrapped SFR assembly. *In International Congress on Advances in Nuclear Power Plants*, San Diego, USA, juin 2010.
- [88] W.D. POINTER, P. FISCHER, J. SMITH, A. OBABKO et A. SIEGEL. Simulations of turbulent diffusion in wire-wrapped sodium fast reactor fuel assemblies. *In International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles : Challenges and Opportunities*, Kyoto, décembre 2009.
- [89] M. PRAT. On the boundary conditions at the macroscopic level. *Transp. Porous Media*, 4 : 259–280, 1989.
- [90] M. PRAT. Some refinements concerning the boundary conditions at the macroscopic level. *Transp. Porous Media*, 7 : 147–161, 1992.
- [91] J. PRIEUR DU PLESSIS et S. WOUDBERG. Pore-scale derivation of the Ergun equation to enhance its adaptability and generalization. *Chem. Eng. Sci.*, 63 : 2576–2586, 2008.
- [92] M. QUINTARD. Diffusion in isotropic and anisotropic porous systems : three-dimensional calculations. *Transp. Porous Media*, 11 : 187–199, 1993.
- [93] M. QUINTARD, M. KAVIANY et S. WHITAKER. Two-medium treatment of heat transfer in porous media : numerical results for effective properties. *Adv. Water Resour.*, 20 : 77–94, 1997.
- [94] M. QUINTARD et S. WHITAKER. Transport in ordered and disordered porous media I : the cellular average and the use of weighting functions. *Transp. Porous Media*, 14 : 163–177, 1994.
- [95] M. QUINTARD et S. WHITAKER. Transport in ordered and disordered porous media II : generalized volume averaging. *Transp. Porous Media*, 14 : 179–206, 1994.
- [96] P. QUÉMÉRÉ. Communication privée. 2011.
- [97] I. RAMIÈRE, P. ANGOT et M. BELLIARD. A general fictitious domain method with immersed jumps and multilevel nested structured meshes. *J. Comput. Phys.*, 225 : 1347–1387, 2007.
- [98] T.S. RO et N.E. TODREAS. Energy transfer mechanisms in LMR rod bundles under mixed convection conditions. *Nucl. Eng. Des.*, 108 : 343–357, 1988.
- [99] M.C. ROCO, J. KHADILKAR et J. ZHANG. Probabilistic approach for transport of contaminants through porous media. *AIChE J.*, 9 : 1431–1451, 1989.

- [100] P. ROLLET-MIET. *Simulation des Grandes Échelles sur maillages non structurés pour géométries complexes*. Thèse de doctorat, École Centrale de Lyon, 1997.
- [101] D. RYAN, R.G. CARBONELL et S. WHITAKER. Effective diffusivities for catalyst pellets under reactive conditions. *Chem. Eng. Sci.*, 35 : 10–16, 1980.
- [102] A.E. SÁEZ et J.C. PERFETTI. Prediction of effective diffusivities in porous media using spatially periodic models. *Transp. Porous Media*, 6 : 143–157, 1991.
- [103] P. SAGAUT. *Large-Eddy Simulation for Incompressible Flows – An introduction, Third Edition*. Springer, 2005.
- [104] E. SANCHEZ-PALENCIA. *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*, volume 127 de *Lecture Notes in Physics*. Springer-Verlag, 1980.
- [105] A. SARTHOU, S. VINCENT, J.-P. CALTAGIRONE et P. ANGOT. Eulerian-Lagrangian grid coupling and penalty methods for the simulation of multiphase flows interacting with complex objects. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 56 : 1093–1099, 2007.
- [106] L. SCHWARTZ. *Théorie des distributions*. Hermann, Paris, 1951.
- [107] E. SKJETNE et J.-L. AURIAULT. New insights on steady, non-linear flow in porous media. *Eur. J. Mech. – B/Fluids*, 18 : 131–145, 1999.
- [108] A. TAMAYOL et M. BAHRAMI. Analytical determination of viscous permeability of fibrous porous media. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 52 : 2407–2414, 2009.
- [109] L. TARTAR. Remarks on homogenization. In J.L. ERICKSEN, D. KINDERLEHRER, R.V. KOHN et J.-L. LIONS, éditeurs. *Homogenization and Effective Moduli of Materials and Media*, pages 228–246. Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [110] D. TENCHINE. Some thermal hydraulic challenges in sodium cooled fast reactors. *Nucl. Eng. Des.*, 240 : 1195–1217, 2010.
- [111] J. THIM. Continuous Nowhere Differentiable Functions. Mémoire de D.E.A., Luleå University of Technology, 2003.
- [112] N.E. TODREAS et M.S. KAZIMI. *Nuclear Systems II : Elements of Thermal Hydraulic Design*. Hemisphere Publishing Corporation, 1990.
- [113] S. TRINH, P. ARCE et B.R. LOCKE. Effective diffusivity tensors of point-like molecules in isotropic porous media by Monte-Carlo simulation. *Transp. Porous Media*, 38 : 241–259, 2000.
- [114] P.V. TSOI. Problem of heat transfer with allowance for axial heat conduction for the flow of a liquid in tubes and channels. *J. Eng. Phys. Thermophys.*, 74 : 183–191, 2001.
- [115] K. VAFAI et C.L. TIEN. Boundary and inertia effects on flow and heat transfer in porous media. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 24 : 195–203, 1981.
- [116] V. VEVERKA. Theorem for the local volume average of a gradient revised. *Chem. Eng. Sci.*, 36 : 833–838, 1981.
- [117] T. VON KÁRMÁN. Mechanische Ähnlichkeit und Turbulenz. *Nachr. Ges. Wiss. Gött., Math.-Phys. Kl.*, 5 : 58–76, 1930.

- [118] S. WHITAKER. Advances in theory of fluid motion in porous media. *Ind. Eng. Chem.*, 61 : 12–28, 1969.
- [119] S. WHITAKER. A theoretical derivation of Darcy’s law. *Transp. Porous Media*, 1 : 3–25, 1986.
- [120] S. WHITAKER. The Forchheimer equation : a theoretical development. *Transp. Porous Media*, 25 : 27–61, 1996.
- [121] S. WHITAKER. *The Method of Volume Averaging. Theory and Applications of Transport in Porous Media*. Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [122] W.-C. YUEH. Eigenvalues of several tridiagonal matrices. *Appl. Math. E-Notes*, 5 : 66–74, 2005.
- [123] Z. ZENG et R. GRIGG. A criterion for non-Darcy flow in porous media. *Transp. Porous Media*, 63 : 57–69, 2006.
- [124] A.A. ZICK et G.M. HOMSY. Stokes flow through periodic arrays of spheres. *J. Fluid Mech.*, 115 : 13–26, 1982.

Liste des figures

1	Un noyau d'uranium 235 impacté par un neutron est fragmenté en deux nouveaux noyaux (fission nucléaire) en libérant des neutrons, ces derniers allant impacter à leur tour d'autres noyaux (réaction en chaîne). Chaque fission libère une quantité d'énergie considérable (source : www.cea.fr).	14
2	Photographies de la partie supérieure d'un assemblage (banc d'essai du CEA, 2011), dont la conception est de type Phénix. Dans les assemblages réels, le combustible nucléaire est placé dans des tubes, espacés par des fils hélicoïdaux. L'assemblage est ici inséré dans un boîtier transparent en Plexiglas. La photo du bas donne une idée de la finesse des aiguilles.	15
3	Plan schématique de la thèse : une description d'un milieu poreux à l'échelle macroscopique peut être formellement obtenue par changement d'échelle (chapitre 1), ou plus spécifiquement par une modélisation « sous-canal » si l'on considère un assemblage de RNR-Na (chapitre 2). Connaissant les champs moyens dans la structure, une méthodologie de reconstruction des champs microscopiques est décrite (chapitre 3), et appliquée numériquement à des assemblages de RNR-Na (chapitre 4). Enfin, une généralisation de la procédure sous la forme d'un couplage d'échelle dynamique est proposée (chapitre 5).	21
1.1	Régimes d'écoulement et lois associées. La loi de Darcy, traduisant la proportionnalité entre vitesse et gradient de pression, n'est plus valide si les effets d'inertie sont importants. La transition vers le régime turbulent a lieu approximativement pour $Re > 100$ (Bear [16], Kaviany [60], Skjetne et Auriault [107]).	25
1.2	Illustration de la séparation d'échelles dans un milieu poreux périodique constitué de grains carrés. On considère que l'échelle microscopique est la taille de la cellule unitaire engendrant le milieu. La séparation d'échelles est d'autant mieux vérifiée que le milieu est formé d'un grand nombre de cellules.	26
1.3	Échelles de longueur et volume élémentaire représentatif associés à un milieu poreux hétérogène (en haut) et périodique (en bas).	27
1.4	Effet qualitatif de la taille du VER sur les propriétés macroscopiques. Si cette taille est inférieure à r_0 ou ℓ_0 , les hétérogénéités microscopiques sont visibles et le volume choisi n'est pas représentatif du milieu.	27
1.5	Prise de moyenne volumique : un champ défini dans la phase fluide est intégré sur le domaine fluide Ω_f contenu dans le volume de prise de moyenne de centre \vec{x}_0 . Une valeur moyenne du champ est ainsi définie à chaque position \vec{x}_0	28
1.6	Tracés des filtres m_p aux trois premiers ordres en dimension un (en haut), et du filtre quadratique m_2 en dimension deux (en bas). Le support de m_p a un côté de longueur $(p + 1)\ell_0$, traduisant un étalement des fonctions m_p lorsque p augmente.	33

1.7	Variations de $\langle 1 \rangle = m_1 * \chi$ en fonction de la taille ℓ_0 du filtre boîte m_0 , pour une fonction indicatrice de phase χ (en gris) de période spatiale $\Delta = 1$. Si la taille du filtre correspond à un nombre entier de périodes, la fonction $\langle 1 \rangle$ prend une valeur constante égale à la porosité $\phi = 0,5$. Pour $0 \leq \ell_0 < 1$, l'effet des discontinuités de χ demeure visible après filtrage. Enfin, $\langle 1 \rangle$ tend vers χ lorsque $\ell_0 \rightarrow 0$, car les filtres m_p tendent vers le pic de Dirac qui est neutre pour l'opération de convolution.	34
1.8	Champ microscopique $\chi\psi$ (en gris) et produit de convolution de ce champ avec un filtre m_p , $p = 1, 2, 3$. Le produit de convolution est d'autant plus « lisse » que l'ordre du filtre est élevé.	36
1.9	Tracés des transformées de Fourier des dérivées $n^{\text{ièmes}}$ $\langle \psi \rangle_p^{(n)}$ pour $n, p = 0, 1, 2$. Dérivée fait apparaître de plus en plus de hautes fréquences spatiales. Augmenter l'ordre du filtre permet d'éliminer de mieux en mieux ces hautes fréquences.	38
1.10	Interfaces fluide/solide Σ_{fs} contenues dans le VER. Les formules d'inversion (1.55a) – (1.55c) font apparaître une moyenne surfacique où l'intégration est réalisée pour la variable \vec{x} décrivant Σ_{fs}	39
1.11	Illustration de la propriété (1.66), avec ici $i = 3$ et $j = 2$	41
1.12	Milieu poreux et cellule unitaire considérés pour le calcul numérique de la conductivité thermique effective et de la perméabilité.	46
1.13	Domaine de calcul et conditions aux limites considérés pour la détermination de la conductivité effective. On impose un flux thermique moyen q dans la direction y	48
1.14	Évolution de la conductivité effective adimensionnée Λ_{eff}^* en fonction de la porosité $\phi = 1 - d^2/\ell_0^2$. Le comportement de la courbe des simulations est extrapolé pour $\phi < 0,1$ et pour $\phi > 0,9$	49
1.15	Domaine de calcul et conditions aux limites considérés pour la détermination de la perméabilité. On impose une force motrice volumique uniforme $G \vec{e}_y$ dans la direction de périodicité.	50
1.16	Perméabilité en fonction de la porosité.	51
1.17	Convergence en maillage de la perméabilité, pour $\phi = 0,5$	52
1.18	Paroi externe d'un milieu poreux.	53
1.19	Canal plan poreux rempli d'une matrice de grains carrés.	54
1.20	Profils de vitesse dans le demi-canal à différents nombres de Darcy, pour $\mu^* = 4/3$ et $U_{\text{paroi}}^* = 0$	55
1.21	Interprétation graphique de la longueur δ^* . Elle est telle que l'aire hachurée est égale à l'aire sous la courbe U^* , la variation $\delta Q_{\text{macro}}^*$ étant égale à l'aire de la surface verte.	56
1.22	Coefficient α^* en fonction de δ^* . La condition de Robin devient une condition d'adhérence au point $\delta_{\text{a}}^* = 0$ et une condition de symétrie au point de singularité $\delta_{\text{s}}^* = 2\sqrt{\mu^* \text{Da}}$	58
1.23	Cellule adjacente à la paroi pour le calcul de δ^* . La distance entre la paroi et le centre de la dernière rangée de grains est $\ell_p = \ell_0/2$ sur la figure.	58
1.24	Variations de δ en fonction de la distance à la paroi ℓ_p , pour $\mu^* = 4/3$ et $\phi = 0,75$	59
1.25	Un élément de bord V_b	59
2.1	Éléments de caractérisation géométrique d'un assemblage à aiguilles et fils espaceurs : (a) une aiguille et son fil espaceur, (b) une coupe d'assemblage à 37 aiguilles, (c) un groupement de trois aiguilles en coupe (vue du dessus). 64	
2.2	Coupes radiales des sous-canaux : (a) sous-canaux internes, (b) sous-canaux périphériques (bord et coin).	65

2.3	Surface de passage et périmètre « mouillé » d'un sous-canal interne.	68
2.4	Répartition des vitesses axiales par sous-canal dans un assemblage à 61 aiguilles et cinq pas de fil, pour un nombre de Reynolds de 45 400. (a) Assemblage entier, (b) coupe radiale.	69
2.5	Températures moyennes associées au sous-canal i d'altitude k	70
2.6	Numérotation locale des sous-canaux adjacents au sous-canal i	72
2.7	Visualisations de la température : (a) dans l'assemblage entier, (b) dans une coupe radiale à mi-hauteur. L'assemblage comporte ici 61 aiguilles déposant un profil cosinusoidal de puissance axiale, et cinq pas de fil. Le nombre de Reynolds de l'écoulement est $Re = 45\,400$	73
2.8	Cellule périodique de numéro N et sous-canaux associés.	74
2.9	Modèle de milieu poreux tridimensionnel où les grains sont cubiques et la cellule unitaire est un cube de côté $\ell_x = \ell_y = \ell_z$. La cellule (i, j, k) est repérée par les coordonnées de son centre C_{ijk} , $x_i = x_0 + i\ell_x$, $y_j = y_0 + j\ell_y$, $z_k = z_0 + k\ell_z$ dans un repère orthogonal quelconque (O, x_0, y_0, z_0)	75
2.10	Solution simulée du problème (2.44) (à gauche), et moyenne volumique in- trinsèque de cette solution calculée avec le filtre m_2 (à droite).	78
2.11	(a) Dérivées des moyennes volumiques de ψ calculées sur le filtre m_2 , et (b) moyennes cellulaires, pour différents maillages de post-traitement de $m \times m$ mailles carrées.	79
2.12	Gradients moyens évalués par résolution du modèle macroscopique (2.45) et par filtrage de la solution du problème macroscopique (2.44).	80
2.13	Paramétrisation des cellules et sous-canaux pour la construction des gra- dients moyens.	81
2.14	Schéma de correspondance entre l'approche par prise de moyenne volumique et l'approche « sous-canal ».	83
3.1	Une cellule unitaire et un vecteur \vec{R}_n , avec $n = (1, 1, 1)$	87
3.2	Représentation qualitative d'un champ ψ : (a) ψ est périodique, (b) ψ est « pseudo-périodique », (c) ψ est non périodique au voisinage de la pertur- bation.	89
3.3	Cellule de calcul pour la simulation du problème hydraulique de référence (3.45a) et du problème hydraulique pénalisé (3.45b).	98
3.4	Profils le long de AB (FIG. 3.3) de la norme des vitesses \vec{u}_0 et \vec{u}_ω pour différents paramètres de pénalisation ω (problèmes (3.45a) et (3.45b)). . . .	98
3.5	Évolution, en fonction du paramètre de pénalisation ω , du terme de pénali- sation \vec{G}_ω et de la vitesse \vec{u}_ω . Pour $\omega^{-1} > 10^{4-1}$ s, une instabilité numérique apparaît (problèmes (3.45a) et (3.45b)).	99
3.6	Schéma de synthèse de la méthode de retour à l'échelle locale : un milieu po- reux est décrit à l'échelle macroscopique <i>via</i> la modélisation « sous-canal » ou la prise de moyenne volumique, qui fournissent les valeurs moyennes de vitesse, de température et de gradient de température dans chaque cellule unitaire. Ces valeurs permettent la simulation numérique des problèmes hy- draulique et thermique dans une cellule quelconque, conduisant aux champs de vitesse et de température dans cette cellule. Ces champs sont comparés à ceux issus d'une simulation numérique du milieu entier, lorsque celle-ci est possible, donnant ainsi des éléments de validation de la méthodologie. . .	101
3.7	Géométrie et conditions aux limites.	102
3.8	Champs de vitesse et de température de référence (avec superposition de lignes isothermes en (d)), aux échelles microscopique et macroscopique, ré- sultats de la simulation 1 ($Pe = 0,1$).	104
3.9	Profils horizontaux de température moyenne en $y = 3d$	105

3.10	Cellules d'application de la méthodologie. On post-traitera les profils ABCD de vitesse et de température.	106
3.11	Solutions numériques à $Pe = 0,1$ dans la cellule 56 : vitesse et vecteurs vitesse (à gauche) et déviation de température avec lignes isodéviations (à droite).	106
3.12	Profils de vitesse et de température obtenus dans les cellules 32, 36, 42, 46, 52 et 56, dans le cas à $Pe = 0,1$, pour un maillage à 572 éléments par cellule : champs de référence $\ \vec{u}_0\ $ et θ_0 (traits pleins) et champs solutions des problèmes de cellule $\ \vec{u}^*\ $ et θ^* (points).	107
3.13	Profils de vitesse et de température obtenus dans les cellules 32, 36, 42, 46, 52 et 56, dans le cas à $Pe = 1$, pour un maillage à 572 éléments par cellule : champs de référence $\ \vec{u}_0\ $ et θ_0 (trait plein) et champs solutions des problèmes de cellule $\ \vec{u}^*\ $ et θ^* (points).	108
3.14	Comparaison des deux maillages de cellule utilisés. (a) 572 mailles, (b) 7160 mailles.	108
3.15	Profils de vitesse obtenus dans les cellules 32, 36, 42, 46, 52 et 56, dans le cas à $Pe = 1$, pour un maillage à 7160 éléments par cellule.	109
3.16	Définition géométrique du domaine de calcul.	110
3.17	Visualisations (a) de la norme $\ \vec{u}_0\ $ du champ de vitesse de référence, (b) de la norme $\ \langle \vec{u}_0 \rangle_f\ $ de sa moyenne volumique intrinsèque avec superposition de vecteurs vitesse, (c) de la courbure $ \gamma_0 $ des lignes de courant du champ de vitesse moyen $\ \langle \vec{u}_0 \rangle_f\ $ avec superposition de lignes de courant.	112
3.18	Position des quinze cellules d'application de la méthodologie de reconstruction, et définition de la périodicité « croisée » : les frontières périodiques sont AB/IH, BC/HG, BM/EF, NH/DE, KJ/BM et LK/NH. Les cellules 1, 3, 5 et 7 sont de type « ABMNHIJKL », et les cellules 2, 4, 6 et 8 à 15 de type « BCDEFGHNM ».	113
3.19	Superposition de la courbure du champ de vitesse moyen et de l'erreur commise par résolution des problèmes de cellule, dans chaque cellule simulée.	113
3.20	Profils de vitesse de référence et de vitesse solution des problèmes de cellule. Les profils tracés sont représentés en pointillés sur les cellules 1 et 8 à gauche.	114
3.21	Maillage de la cellule vu en trois dimensions (à gauche), et coupe radiale (à droite).	115
3.22	Visualisations des champs solutions du problème de référence.	117
3.23	Profils de vitesse et de température le long d'une arête de la cellule dans le plan radial.	118
4.1	Coupe partielle de la structure (à gauche) et coupe radiale du maillage (à droite).	123
4.2	Champ de vitesse axiale dans l'assemblage de 61 aiguilles : vue 3D (à gauche) et coupe transversale dans la section d'entrée ou de sortie.	124
4.3	(a) Coupe radiale à mi-hauteur de la composante u de la vitesse à l'échelle microscopique. (b) Vecteurs de vitesse moyenne radiale dans le même plan.	124
4.4	Cellule d'application de la méthodologie de retour à l'échelle microscopique, en gris : vue 3D isolée (à gauche) et coupe radiale au sein de l'assemblage (à droite).	125
4.5	Coupe radiale du maillage de l'assemblage complet (à gauche) et de la cellule unitaire (à droite).	126
4.6	Coupes de vitesse axiale à différentes altitudes, avec superposition des vecteurs de vitesse radiale.	127

4.7	Profils le long de « Z » de la composante radiale u de vitesse (à gauche) et de la composante axiale w (à droite), obtenus dans la simulation complète et dans la simulation de cellule (assemblage de 61 aiguilles).	128
4.8	Champ de vitesse axiale dans la configuration modèle : vue 3D (à gauche) et coupe transversale dans la section d'entrée ou de sortie.	129
4.9	Profils le long de « Z » de la composante radiale u de vitesse (à gauche) et de la composante axiale w (à droite), obtenus dans la simulation complète et dans la simulation de cellule (assemblage modèle).	130
4.10	Profil de flux thermique surfacique dégagé par les aiguilles (équation (4.8)).	131
4.11	Positionnement de la cellule considérée (en noir) dans l'assemblage (en rouge).	132
4.12	Coupes de vitesse axiale et de température à mi-hauteur.	133
4.13	Profils axiaux de température issus du modèle « sous-canal » (température macroscopique) et de la simulation de cellule (température microscopique), au centre de l'assemblage.	133
4.14	Profils le long de « Z » de la composante axiale w de vitesse (à gauche) et de la déviation de température $\tilde{\theta}^*$ (à droite) obtenues dans la simulation de cellule.	134
5.1	Exemple d'un bloc de cellules Ω_z avec les cellules adjacentes Ω_i , dans un milieu poreux modèle. Le bloc est composé ici de 6×3 cellules. L'interface entre une cellule Ω_i et Ω_z est $\partial\Omega_{z_i}$	138
5.2	Problèmes en jeu dans la procédure de couplage. En rouge, l'interface chauffante délivrant le flux thermique q_{acc} , représentant l'accident choisi comme exemple.	140
5.3	Algorithme de couplage itératif. À l'itération n , les problèmes dans les domaines Ω_p , Ω_i et Ω_z sont résolus dans un ordre indifférent en utilisant les données $\tilde{\theta}_z$, $T_p(\vec{x}_i)$, $\vec{\nabla}T_p(\vec{x}_i)$, \vec{u}_i^* et θ_i^* calculées à l'itération précédente (algorithme de <i>Schwarz additif</i>).	143
5.4	Champs de température solutions du problème de référence avec perturbation locale (5.1a) – (5.1g) : échelle microscopique à gauche, et échelle macroscopique (moyenne volumique intrinsèque calculée avec le filtre m_2) à droite. À nombre de Péclet croissant, la convection prend le dessus sur la diffusion et la largeur de la zone perturbée diminue tandis que sa longueur augmente.	145
5.5	Profils P_1 et P_2 de post-traitement du champ de température. En rouge, la cellule (6, 10) contenant le flux thermique accidentel.	146
5.6	Profils de déviation $\tilde{\theta}_0 = \theta_0 - \langle \theta_0 \rangle_f$ le long des segments P_1 et P_2 de la FIG. 5.5, pour les différents nombres de Péclet de la FIG. 5.4. La cellule (6, 10) contenant le flux thermique accidentel est délimitée par les traits pointillés rouges.	147
5.7	Superposition du maillage du problème poreux (en rouge) et du maillage du problème de zoom (en gris), pour une taille du zoom de 3×3 cellules unitaires.	150
5.8	Évolution temporelle du champ de température macroscopique dans la simulation 1, de $t = 0$ s (état initial) à $t = 16\,000$ s (état stationnaire convergé).	150
5.9	Champs de température obtenus par la procédure de couplage : problème de zoom (à gauche) et problème poreux (à droite).	151
5.10	Comparaison des profils P_1 et P_2 de température microscopique (à gauche) et macroscopique (à droite) issus du couplage (simulations 1a et 1b, TAB. 5.2), avec les profils de référence.	152

5.11	Comparaison des profils P_1 et P_2 de température microscopique (à gauche) et macroscopique (à droite) issus du couplage (simulations 2a et 2b, TAB. 5.2), avec les profils de référence.	152
A.1	Schéma d'un canal plan poreux avec une vitesse moyenne uniforme et une température uniforme imposée aux parois.	160
A.2	Évolution de la température au point situé sur l'axe à la distance $X = 1$ de l'entrée du canal en fonction du nombre de Péclet.	162
A.3	Profils transverses de température à la distance $X = 1$ de l'entrée du canal à différentes valeurs du nombre de Péclet.	162
B.1	Exemple de numérotation des cellules : l'élément (i, j) a pour numéro $N = i + (j - 1)n$	165
C.1	Nombre d'itérations N_ε à partir duquel $\ V^{(n)}\ < \varepsilon$ (où $V^{(n)}$ est défini dans la relation (C.8)), en fonction $\delta t/\omega$. La convergence est optimale au point $\delta t/\omega = 1$, correspondant à $\rho(A) = 0$. Si $\rho(A) > 1$, le problème diverge.	173
C.2	Convergence de $\ V^{(n)}\ $ (défini dans la relation (C.8)) en fonction du nombre d'itérations n et pour différentes valeurs de $\delta t/\omega$, en partant d'une condition initiale $\ V_{\text{init}}\ = 1$. Pour $\delta t/\omega = 1$, la convergence a lieu en un nombre fini d'itérations.	173
C.3	Découpage du domaine $[0, L]$ en éléments réguliers.	175
C.4	Évolution temporelle de la norme $\ U^{(n)}\ _\infty$ pour différentes valeurs de $\Delta t/\omega$, avec $N = 10$ et $b = c = 0$	177
C.5	Évolution temporelle de la norme $\ U^{(n)}\ _\infty$ pour différentes valeurs de b , avec $N = 10$, $a = 0$, $c = 0$. Pour $b \leq 1/\left[1 - \cos\left(\frac{N\pi}{N+1}\right)\right] \approx 0,510\,336$, la convergence a lieu. Si $0,5 \leq b \leq 0,510\,336$, on observe de faibles oscillations qui n'existent plus pour $b \leq 0,5$	178
C.6	Évolution temporelle de la norme $\ U^{(n)}\ _\infty$ pour différentes valeurs de c , avec $N = 10$, $a = 0$ et $b = 0$. La convergence a lieu pour $c \leq 2$. Si $c \leq 1$, on n'observe pas d'oscillations. Si $1 \leq c \leq 2$, on constate l'apparition d'oscillations qui peuvent être très amplifiées au cours des premières itérations (en particulier si c est proche de deux) mais qui s'affaiblissent au bout d'un temps éventuellement assez long.	179
C.7	Valeurs de $\Delta t/\omega$ telles que $\rho[M(a, b, 0)] \leq 1$ en fonction du nombre de points de discrétisation, pour $b = 0,25$ et $b = 0,5$. On observe que $\Delta t/\omega$ tend vers 2 lorsque l'on augmente le nombre de points N	180
C.8	Rayon spectral $\rho[M(a, b, 0)]$ en fonction de $\Delta t/\omega$, pour $b = 0,5$ et pour différentes valeurs de N	181
C.9	Valeurs de $\Delta t/\omega$ telles que $\rho[M(a, 0, c)] \leq 1$ en fonction du nombre de points de discrétisation, pour $c = 0,5$ et $c = 1$. On observe que $\Delta t/\omega$ tend vers 2 lorsque l'on augmente le nombre de points N	181
C.10	Valeurs de $\Delta t/\omega$ telles que $\rho[M(a, b, c)] \leq 1$ en fonction du nombre de points de discrétisation, pour $b = c = 1/4$ et $b = c = 1/3$. On observe que $\Delta t/\omega$ tend vers 2 lorsque l'on augmente le nombre de points N	181

Liste des tableaux

1	Avantages et inconvénients des approches microscopique et macroscopique. . .	17
2.1	Les différents types de moyennes introduits et leurs principales caractéristiques.	74
3.1	Propriétés physiques du sodium liquide utilisées dans les simulations.	102
3.2	Propriétés géométriques et nombres de Péclet et de Reynolds de l'écoulement dans chaque simulation.	103
3.3	Propriétés physiques et géométriques de la simulation.	110
3.4	Propriétés de la simulation.	115
4.1	Propriétés géométriques de l'assemblage et propriétés de l'écoulement (voir aussi la FIG. 2.1 page 64).	122
4.2	Caractéristiques de la simulation de couplage « sous-canal »/cellule.	131
5.1	Paramètres géométriques et nombre de Reynolds des simulations numériques en régime accidentel.	144
5.2	Caractéristiques des tests numériques de couplage.	149

Simulation multirésolution et multiéchelle de la thermohydraulique des assemblages de réacteur à neutrons rapides

Ce travail de thèse poursuit l'objectif d'une simulation numérique multiéchelle d'un assemblage de réacteur à neutrons rapides. Malgré la puissance croissante des ordinateurs, la CFD fine complète d'un tel système demeure extrêmement coûteuse dans un contexte de recherche et développement. Nous proposons alors, une fois déterminé le comportement thermohydraulique moyen de l'assemblage, de reconstruire localement l'information aux fines échelles, l'ensemble de la démarche requérant un temps de calcul bien moindre qu'une simulation de la totalité de la structure. La description à l'échelle moyenne est obtenue soit par le formalisme de prise de moyenne volumique en milieu poreux, soit *via* une approche alternative historiquement développée pour les assemblages de RNR-Na. Elle fournit des informations utilisées comme contraintes d'un sous-problème de raffinement d'échelle, par l'intermédiaire d'une technique de pénalisation des équations de conservation locales. Ce sous-problème exploite le caractère périodique de la structure en s'appuyant sur des conditions aux limites de périodicité des champs recherchés ou de leur déviation spatiale. Après validation des méthodologies sur des applications modèles, nous entreprenons leur mise en œuvre sur des configurations « industrielles » qui démontrent la viabilité de cette approche multiéchelle.

Mots-clés : Simulation numérique – Changement d'échelle – Couplage multiéchelle – Milieu poreux – Pénalisation – Périodicité – Réacteur à neutrons rapides – Thermohydraulique.

Multiresolution and multiscale simulation of the thermal hydraulics in fast neutron reactor assemblies

The present work is devoted to a multiscale numerical simulation of an assembly of fast neutron reactor. In spite of the rapid growth of the computer power, the fine complete CFD of a such system remains out of reach in a context of research and development. After the determination of the thermohydraulic behaviour of the assembly at the macroscopic scale, we propose to carry out a local reconstruction of the fine scale information. The complete approach will require a much lower CPU time than the CFD of the entire structure. The macroscale description is obtained using either the volume averaging formalism in porous media, or an alternative modeling historically developed for the study of fast neutron reactor assemblies. It provides some information used as constraint of a downscaling problem, through a penalization technique of the local conservation equations. This problem lean on the periodic nature of the structure by integrating periodic boundary conditions for the required microscale fields or their spatial deviation. After validating the methodologies on some model applications, we undertake to perform them on “industrial” configurations which demonstrate the viability of this multiscale approach.

Keywords : CFD – Downscaling – Fast neutron reactor – Multiscale coupling – Penalization – Periodicity – Porous medium – Thermal hydraulics – Upscaling.