



Soutenance de thèse – Pratik Rai

Modélisation et simulation numérique d'écoulements multi-composants compressibles

Modelling and numerical simulation of compressible multicomponent flows

**Vendredi 23 juillet 2021 – 14 h 00**

**lien JITS** : [https://rdv.onera.fr/Soutenance\\_de\\_these\\_Pratik\\_Rai](https://rdv.onera.fr/Soutenance_de_these_Pratik_Rai)

*(Configuration recommandée : navigateur Chrome)*

**Devant le jury composé de :**

**Examineurs :**

Rémi Abgrall, Professeur, Universität Zürich  
Siddhartha Mishra, Professeur, ETH Zürich  
Edwige Godlewski, Professeur, Sorbonne Université

**Rapporteurs :**

Bruno Despres, Professeur, Sorbonne Université  
Raphaël Loubère, Directeur de recherche, Université de Bordeaux

**Directeur de thèse :**

Vincent Giovangigli, Directeur de recherche, École Polytechnique

**Co-Directeur de thèse :**

Frédéric Coquel, Directeur de recherche, École Polytechnique

**Encadrant :**

Florent Renac, Maître de recherche, ONERA

**Invité :**

Christophe Chalons, Professeur, Université de Versailles

## Résumé

Cette thèse a deux objectifs principaux : la modélisation des écoulements compressibles multiphasiques et multi-composants, et la conception de nouveaux schémas numériques pour leur simulation d'ordre élevé.

En ce qui concerne la modélisation des écoulements multiphasiques, nous nous concentrons sur le modèle de non-équilibre de type Baer-Nunziato et proposons un nouveau modèle pour les écoulements impliquant un mélange réactif de gaz et de liquide. Notre modèle est hyperbolique et prend en compte le transfert de masse, la traînée interfaciale, le déséquilibre mécanique ainsi que le transfert thermique entre les phases. Le modèle est invariant par transformations galiléennes et dissipe l'entropie.

En ce qui concerne la conception de nouveaux schémas pour les écoulements compressibles, nous nous concentrons sur les modèles hyperboliques d'écoulement multiphasiques et multi-composants sous forme non-conservative. Nous choisissons comme cadre de discrétisation la méthode des éléments spectraux de Galerkin discontinus (DGSEM), basée sur la collocation des points de quadrature et d'interpolation. La méthode DGSEM utilise des opérateurs de sommation par parties (SBP) dans la quadrature numérique pour approcher les intégrales sur les éléments de discrétisation. Dans notre cas, nous modifions l'intégrale sur les éléments de la cellule en remplaçant les flux physiques par des flux aux fluctuations conservant l'entropie tout en appliquant des flux dissipant l'entropie aux interfaces du maillage. Cela nous permet d'établir un schéma semi-discret qui est précis à l'ordre élevé et qui satisfait à une inégalité d'entropie semi-discrète. Pour l'intégration temporelle d'ordre élevé, nous nous appuyons sur des schémas explicites de Runge-Kutta préservant la stabilité et conservant les propriétés des schémas d'intégration temporelle au premier ordre.

Nous appliquons ce schéma à la discrétisation du modèle homogène de Baer-Nunziato, où nous dérivons des flux conservant et dissipant l'entropie physique pour le modèle. Nous montrons également que la conception des flux numériques préserve formellement l'énergie cinétique au niveau discret. En analysant le schéma discret, nous imposons des conditions sur les paramètres numériques qui restreignent le pas de temps et garantissent la positivité des solutions moyennées par cellule. La positivité de la solution moyenne de la cellule est renforcée aux valeurs nodales en appliquant des limiteurs.

Le schéma DGSEM est également appliqué pour la discrétisation du modèle multi-composants de Shyue (1998) pour des lois d'état de type gaz raidis. Nous proposons ici un nouveau schéma stable d'entropie d'ordre élevé qui permet une résolution précise des discontinuités matérielles. À cette fin, nous dérivons des flux dissipant l'entropie et des flux préservant les contacts qui sont appliqués dans l'intégrale de volume, sur la base d'un senseur de chocs. Pour les flux numériques à l'interface, nous concevons un solveur de type HLLC pour le modèle multi-composants. Nous montrons que le schéma DG satisfait à inégalité d'entropie semi-discrète pour les solutions de choc, préserve les profils uniformes à travers les contacts et les interfaces matérielles et maintient la positivité de la solution. Plusieurs tests numériques sont effectués en une et deux dimensions d'espace qui mettent en évidence les propriétés de nos schémas numériques.

Mot clés : Écoulement multiphasique et multi-composants, Écoulement compressibles, EDP hyperbolique non-conservatif, Galerkin discontinu, schéma satisfaisant d'entropie

Résumé en version Anglaise :

This thesis involves two main objectives: the modelling of compressible multiphase and multicomponent flows, and the design of novel numerical schemes for their accurate simulation.

In regards to the modelling of multiphase flows, we focus on a Baer-Nunziato-like non-equilibrium model and propose a novel model for reactive gas-liquid flows. Our model is hyperbolic and accounts for the mass transfer, the interfacial drag, the mechanical disequilibrium as well as thermal transfer between the phases. The model is Galilean invariant and entropy dissipative and exhibits these properties at complete non-equilibrium.

With respect to the design of novel schemes for compressible flows, we focus on hyperbolic multiphase and multicomponent flow models in nonconservative form. Our discretization framework is based on the discontinuous Galerkin spectral elements method (DGSEM), which involves collocation of quadrature and interpolation points. The DGSEM uses summation-by-parts (SBP) operators with simultaneous approximation terms (SAT) in the numerical quadrature for approximating the integrals over discretization elements. For our purpose, we modify the integral over cell elements by replacing the physical fluxes with entropy conservative fluxes in fluctuation form while applying entropy stable fluxes at the interface. This modification along with the SBP-SAT operators allows us to establish a semi-discrete scheme which is high-order accurate. For high-order integration in time, we rely on explicit strong-stability preserving Runge-Kutta schemes that retain the properties of first order time integration schemes.

We apply this scheme for the discretization of the homogeneous Baer-Nunziato model, where we derive entropy conservative and entropy stable fluxes for the model. The design of the numerical fluxes are also shown to, formally, preserve the kinetic energy at the discrete level. By analysing the fully discrete scheme, we impose conditions on the numerical parameters that restricts the time step and guarantees the positivity of the cell averaged solutions. The positivity of cell-averaged solution is further enforced at the nodal values by applying a posteriori limiters.

We then apply the semi-discrete DGSEM scheme for the discretization of the gamma-based multicomponent model of Shyue (1998), with the aim to propose a novel high-order entropy stable scheme which allows for a sharp resolution of the material discontinuities. To this purpose, we derive entropy conservative fluxes and contact-preserving fluxes that are applied in the volume integral, based on a troubled-cell indicator function. For the numerical fluxes at the interface we design a HLLC-like solver for the multicomponent model. We show that the DG scheme satisfies a semi-discrete entropy inequality for shock solutions, preserves uniform profiles across contacts and material interfaces and maintains positivity of the solution.

Keywords : Multiphase and multicomponent flows, compressible flows, Non-conservative hyperbolic PDE, Discontinuous Galerkin method, entropy stable numerical schemes