

# INSA

INSTITUT NATIONAL  
DES SCIENCES  
APPLIQUÉES  
HAUTS-DE-FRANCE



Université  
Polytechnique

HAUTS-DE-FRANCE

## FOAM-U – Bruxelles – Avril 25



von KARMAN INSTITUTE  
FOR FLUID DYNAMICS



NOVARES  
*Beyond plastics*

Rédaction : Elodie PERCELY  
Dans le cadre du PFE chez  
Novares, encadrée par M.  
BALLIGAND et F. BEAUBERT

## Table des matières

Table des matières.....	1
Role of CFD in new generation nuclear reactor design – KOLOSZAR Lilla.....	2
Extreme responses of ships and offshore structures with OpenFOAM – LASBLEIS Marine – Bureau Veritas.....	4
Study of wing-sail interactions on a ship under realistic conditions – GOURIOU Clément – CWS.....	6
Poster flash presentations – Poster holders .....	7
ParaView for OpenFOAM – MAZEN François – Kitware.....	9
Advances in liquid film simulations using geometric volume-of-fluid – GAMET Lionel – IFP.....	13
Implementation and Validation Case of Radiation-Particles Interaction – CHOPARD Etienne – Institut P prime.....	19
Personal perspectives of OpenSource versus Commercial and In-house developments – MENDONCA Fred – ifMniLtd....	23
Development and validation of phase-change models in OpenFOAM v11 – CANTIANI Antonio – VKI.....	25
Numerical simulation of a swirling flow in an industrial cyclone separator using hybrid turbulence models – BENZAZA Ishak – INSA / LAMIH.....	26
Physics-based localized data assimilation methodology coupled with OpenFOAM – ER Sarp – Arts & Métiers .....	33
Cadence Solution for CFD Pre-Processing and Meshing – HOTTOIS Romain .....	34
Bioclogging in In-Situ Bioremediation : Insights from a Numerical Modeling Approach – EDDAOUI Noura – LGCgE, Université de Lille.....	37
A Multi-fidelity Data Assimilation algorithm enhanced by Convolutional Neural Network – MOUSSIE Tom – CONES .....	39
Partitioned fluid-structure interaction simulations using OpenFOAM – DEGROOTE Joris .....	40
Enhancement of LES for the analysis of an intake flow rig via Data Assimilation – MELDI Marcello.....	42
A new CFD-DEM for simulating particulate transport and pore clogging in porous media – SOULAINNE Cyprien.....	43
CFD design of passive ventilation in apartment buildings – JOSHI Shrey – CFD Solutions.....	44
3D simulation of landslide generated waves – LOUIS-NAPOLEON Aurélie – CEA .....	45
A Continuous Immersed Boundary Method for Centrifugal Pump Simulation in OpenFOAM – MARTINEZ VALERO Miguel.46	
On the gas-liquid coupling instability in jet wiping using high and low fidelity models – BARREIRO David – VKI.....	47
Ray-tracing rendering of OpenFOAM simulations – RECOQUILLON Yann – ACE.....	48

# Role of CFD in new generation nuclear reactor design – KOLOSZAR Lilla



## VKI Presentation



Le VKI est un institut belge d'environ 90 personnes, partiellement financé par l'OTAN. Il propose plusieurs programmes de formation et mène des activités de recherche appliquée en mécanique des fluides.

Formations proposées :

- Stages courts pour étudiants en licence ou master (quelques mois, projet de recherche ou mémoire).
- Research Master Program : formation avancée entre le master et le doctorat, orientée recherche appliquée.
- Doctorat : effectué en collaboration avec des universités partenaires (80 doctorants en résidence).
- Lecture Series : cours intensifs de 3 à 5 jours, disponibles en ligne ou en présentiel, sur des thématiques spécialisées.

Domaines de recherche :

- Aérospatial : écoulements hypersoniques, régimes non équilibrés.
- Turbomachines : simulations pour moteurs civils et militaires.
- Procédés industriels : écoulements de métaux liquides (thème de la présentation technique).
- Dynamique environnementale : flux atmosphériques, parcs éoliens, alertes hydrométéo.
- Interaction fluide-structure & métrologie : outils numériques et expérimentaux.

Un projet en cours concerne la création d'un centre d'essai pour les technologies hydrogène (infrastructure prête, site à confirmer).

Séminaires OpenFOAM : Organisation de 4 webinaires par an. Chaque session présente un cas reproductible avec jeux de fichiers complets, dans une approche open source.

## Objectif principal de la présentation

Montrer comment la CFD (Computational Fluid Dynamics) joue un rôle stratégique dans la conception et la validation des réacteurs nucléaires de nouvelle génération.

## Enjeux liés au nucléaire

- Répondre aux nouvelles contraintes de sécurité post-Fukushima.
- Améliorer les performances thermiques et limiter les pertes de charge dans des systèmes compacts.
- Concevoir des réacteurs plus sûrs, plus économiques et adaptés aux besoins de transition énergétique.

## Apports de la CFD

- Outil non-invasif permettant d'anticiper le comportement thermique et hydraulique du système.
- Réduction du recours aux essais physiques coûteux à travers une modélisation fiable et validée.
- Possibilité de tester virtuellement plusieurs configurations géométriques ou régimes d'écoulement.

## Méthodologie utilisée

- Simulations RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) et, dans certains cas, LES (Large Eddy Simulation).
- Utilisation d'OpenFOAM pour sa souplesse et sa capacité à intégrer des modèles personnalisés.
- Approche multiphysique combinant CFD, thermique et comportement neutronique.

## Cas concrets

- Étude d'un échangeur de chaleur au sodium : visualisation des zones de stagnation, amélioration de la géométrie.
- Analyse des régimes transitoires dans un canal hexagonal de cœur de réacteur.
- Simulations de mélanges non-isothermes ou de changements de phase dans des configurations innovantes.

## Défis rencontrés

- Complexité de modélisation de certains phénomènes physiques (ex. : cavitation, ébullition, turbulence anisotrope).
- Besoin de modèles physiques avancés et d'un maillage très fin, induisant une lourde charge de calcul.
- Validation nécessaire avec des données expérimentales fiables.

## Perspectives

- Renforcement des capacités de calcul (HPC) pour simulations haute-fidélité.
- Intégration de l'intelligence artificielle pour l'optimisation de la conception.
- Contribution directe aux programmes européens de recherche sur les réacteurs du futur (ex. : Gen IV, SMR).

## Conclusion

La CFD, lorsqu'elle est correctement mise en œuvre et validée, constitue un outil indispensable pour accompagner la conception, l'optimisation et la mise en sûreté des réacteurs nucléaires de prochaine génération.

# Extreme responses of ships and offshore structures with OpenFOAM – LASBLEIS Marine – Bureau Veritas



## Contexte de l'étude

- Bureau Veritas est un acteur mondial de la certification et du contrôle technique, fortement impliqué dans la sûreté maritime et offshore.
- Dans un contexte de conditions de mer extrêmes, la compréhension des réponses hydrodynamiques sévères est essentielle pour garantir la sécurité et la conformité réglementaire des navires et structures.

## Enjeux réglementaires

- Les études s'inscrivent dans le cadre des exigences de l'IMO (Organisation Maritime Internationale), notamment en matière de stabilité intacte et avariée, de résistance aux vagues extrêmes et de protection contre les entrées d'eau (green water).
- Ces règles imposent des niveaux de sécurité spécifiques à respecter dans des conditions environnementales données (ex. Code IS, réglementations SOLAS, lignes directrices sur le slamming, etc.).

## Problématique technique

Les outils classiques de conception (analyses linéaires, modèles réduits) ne suffisent plus pour capter des phénomènes complexes :

- Impact de vagues sur la structure (slamming),
- Évènements de green water sur les ponts,
- Mouvement de liquides internes (sloshing),
- Réponses en régime fortement non linéaire.
- Besoin de simulations numériques précises pour satisfaire les nouvelles attentes réglementaires et industrielles.

## Apport d'OpenFOAM

- Simulation multiphasique de haute fidélité (fluide + air + structure), grâce au solveur interDyMFoam.
- Prise en compte des mouvements à 6 degrés de liberté (6DOF) pour les structures flottantes.
- Intégration de la bibliothèque waves2Foam pour la génération de vagues réalistes (régulières ou irrégulières).
- Possibilité de simuler l'impact des vagues, la montée d'eau sur le pont, et les pressions dynamiques associées.

## Méthodologie mise en œuvre

- Génération de houles ciblées (longues, courtes, extrêmes) pour reproduire les cas critiques.
- Maillage raffiné sur les zones d'impact, avec maillage dynamique pour suivre la surface libre.
- Analyse des charges, pressions et effets dynamiques via post-traitement.

## Cas d'étude illustratifs

- Green water : simulation de vagues passant par-dessus la proue, étude des charges verticales appliquées au pont.
- Slamming : impact d'une vague sur une structure rigide, avec pics de pression localisés.
- Sloshing : comportement d'un liquide dans une citerne, sollicitant les parois internes.
- Comparaison des résultats avec les prescriptions IMO et les critères de classification Bureau Veritas.

## Défis techniques

- Nécessité de maillages fins et stables pour capturer correctement les interfaces air/eau.
- Gestion des fortes non-linéarités des mouvements de structure et des vagues extrêmes.
- Consommation de ressources de calcul élevée (recours au HPC indispensable).

## Apport pour Bureau Veritas

- Approche numérique qui complète les essais expérimentaux et offre une meilleure précision dans les régimes extrêmes.
- Outil d'aide à la vérification de conformité aux normes IMO, et de soutien aux clients pour l'optimisation de conception.
- Capacité à anticiper les problèmes critiques dès les phases de conception ou de refit.

## Perspectives et développement

- Intégration de modèles hybrides CFD/statistiques pour couvrir un plus grand éventail de scénarios.
- Meilleure prise en compte des conditions environnementales combinées (vagues, vent, courant).
- Renforcement du lien entre simulation numérique et processus de certification maritime.

# Study of wing-sail interactions on a ship under realistic conditions – GOURIOU Clément – CWS



## Contexte et objectifs du projet

Clément Gouriou, chercheur chez CWS Company, a présenté ses travaux sur les interactions hydrodynamiques et aérodynamiques entre les voilures rigides (wingsails) et les navires, dans un objectif de réduction des émissions de CO<sub>2</sub> du transport maritime, conformément aux objectifs de l'IMO (International Maritime Organization) :

- -40 % de réduction des GES d'ici 2030 ;
- Neutralité carbone visée à l'horizon 2060.

Le système développé consiste en une solution de propulsion hybride éolienne appliquée à des navires neufs ou en retrofit, via l'ajout de plusieurs wingsails. Ces voiles rigides sont conçues pour optimiser la portance et la performance propulsive.

## Validation multi-échelle de la performance

La méthodologie repose sur un triptyque de validation :

- Soufflerie ;
- Modèles analytiques et semi-empiriques ;
- Simulation numérique CFD (OpenFOAM).

Un des défis majeurs reste la reproduction des conditions de turbulence réalistes, très variables en mer. L'équipe a mené des essais avec grille de turbulence (6 % d'intensité) et des simulations utilisant DFSEM (Divergence-Free Synthetic Eddy Method), afin de générer des conditions représentatives à l'échelle 1/21.

Les premiers essais numériques (2023) montraient un détachement prématuré du flux. Grâce à l'implémentation de DFSEM et à des échanges avec le LNFL (Marcello et Tom Moussie), les nouvelles simulations ont montré un meilleur accord avec les données expérimentales, notamment au point de portance maximale, validant ainsi l'approche hybride CFD / turbulence synthétique.

## Modélisation d'un navire complet avec six wingsails

Le projet a évolué vers la simulation d'un navire entier équipé de six wingsails, tous à configuration de portance maximale, afin d'évaluer les interactions multi-systèmes et leur impact sur la propulsion.

- Maillage : 63 millions de cellules, générées avec BlockMesh et SnappyHexMesh.
- Solveur utilisé : OpenFOAM v8 avec DFSEM et approche IDDES K-Omega SST, majoritairement en régime LES (> 99 %), pour mieux capturer la séparation du flux.
- Contraintes : nécessité de maintenir un Courant number  $\leq 1$ , entraînant des temps de calcul très longs (piso utilisé au lieu de pimple pour réduire les instabilités).

Les résultats montrent :

- Une bonne performance propulsive pour les premières voiles (effort homogène, flux attaché).
- Des zones de séparation massives sur les voiles arrière, dues aux perturbations créées par les conteneurs et aux effets d'interaction.
- Un écart d'orientation de flux significatif entre la première et la cinquième voile, expliquant les pertes d'efficacité locale.

Malgré ces contraintes, la simulation a permis de retrouver environ 90 % de la poussée expérimentale cumulée sur six voiles simulées séparément.

## Perspectives techniques et méthodologiques

Plusieurs pistes sont actuellement explorées :

- Ajout de couche limite atmosphérique pour simuler des vents cisailés ;
- Introduction de la vitesse propre du navire pour représenter un cas opérationnel complet ;
- Amélioration des modèles de turbulence, les limites du K-Omega SST actuel rendant les simulations très sensibles et coûteuses (timestep  $\approx 10^{-4}$  s) ;
- Optimisation du coût de calcul via l'allègement du modèle et l'utilisation de clusters plus puissants.

# Poster flash presentations – Poster holders



Bubble – Light – Lagrangian-Eulerian – Monte Carlo Ray Tracing



## Effect of bubbles on near wall light field in a photobioreactor

Victor Pozzobon<sup>1</sup>

<sup>1</sup> LGPM, CentraleSupélec, Université Paris-Saclay, Centre Européen de Biotechnologie et de Bioéconomie (CEBB), Pomacle, France



### CONTEXT

Photosynthetic microalgae are a promising source of **quality food**<sup>1</sup> and **feed**<sup>2</sup> (50% proteins, vitamins, quality lipids, ...) as well as **biomolecules** with applications in cosmetics and pharmaceutical sectors<sup>3-5</sup> (e.g., carotenoids – orange pigments with health benefits). Their cultivation comes with **environmental benefits**: carbon dioxide and NOx cycling<sup>6</sup>, water pollutions remediation (nitrate<sup>7</sup> and phosphate<sup>8</sup>), possible valorization as biofuel of extraction processes leftovers<sup>9</sup>. Finally, they can be cultivated on non-arable lands **avoiding competition with current food-producing cultures**. Photosynthesis is what makes all this possible.

At the **culture level**, several studies have shown that the prime determinant of the bioprocess performance (from an energetic standpoint) is the **average light intensity** within the culture vessel. Yet, at the **cell level**, properly describing **local illumination** is paramount as short burst of intense illumination can have a dramatic impact, either positive or negative.

Still, while light fields within photobioreactors have been evaluated by several methods (Beer-Lambert<sup>10-12</sup>, two-flux models<sup>13,14</sup>, ...), **none have taken into account the effect of bubbles** on the local light field. This work is a first step in this direction.

### ASSUMPTIONS & MODELS

Bubbles are described as **Lagrangian tracers** (two-way coupling with the liquid):

→ Out of the box OpenFOAM Lagrangian-Eulerian solver

Bubbles are assumed to be **spherical**:

→ validity range  $\frac{\Delta \rho g d_p^2}{\gamma} \ll 1$

**Geometrics optics** (with absorption and scattering) applies:

validity range  $\frac{2\pi n d_p}{\lambda} \gg 1, \quad 2\chi|m-1| \gg 1$

→ **Monte Carlo Ray Tracing** algorithm can be used to solve Radiation Transport Equation.

### IMPLEMENTATION

**Implementation of wall lift** in the Lagrangian module (based on Molin *et al.* formulation<sup>15</sup>):

$$\overrightarrow{F}_{Wall\ Lift} = \frac{3}{4} \frac{\rho_f}{\rho_p d_p} V_{LW}^2 C_{LW} \overrightarrow{e}_z$$

$$C_{LW} = C_{LW0} (1 + 0.6 Re_{LW}^{0.5} - 0.55 Re_{LW}^{0.08})^2 \left( \frac{2z}{3d_p} \right)^{-2} \tanh(0.01 Re_{LW})$$

$$\text{for } z^* < 10 \quad C_{LW0} = \left( \frac{9}{8} + 5.78 \times 10^{-6} z^{*4.58} \right) \beta^2 \exp(-0.292z^*)$$

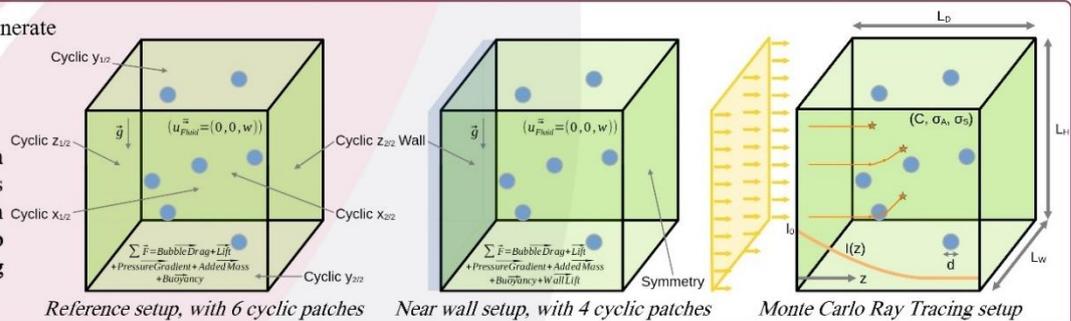
$$\text{for } z^* > 10 \quad C_{LW0} = 8.94 \beta^2 z^{*-2.09} \quad \text{with } z^* = \frac{zV_{LW}}{v_f}$$

### NUMERICAL SETUPS & WORKFLOW

Two setups are tested to generate realistic bubble swarms:

- Infinite medium
- Near wall

Bubble shapes are then extracted (spherical glyphs and surface extraction with Paraview) and passed on to the Monte Carlo Ray Tracing algorithm.

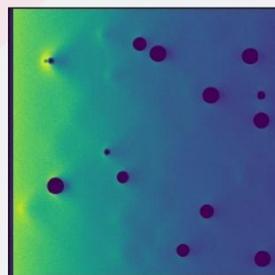


### RESULTS

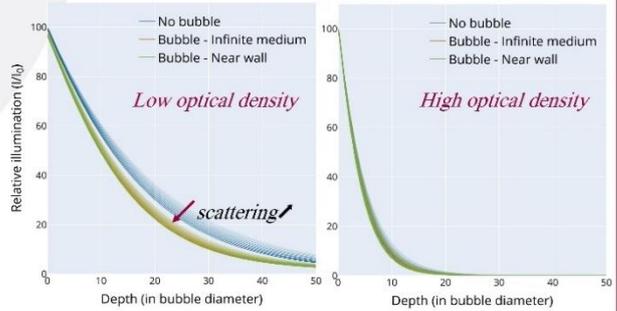
Bubbles induce local modification of the light field, **increasing the illumination** in their surrounding.

At **low optical density** (beginning of a culture), bubbles reflect up to 5 % of the incident light. Bubbles presence is a **stronger modulator than scattering**. Bubble distribution has a **marginal influence**.

At **high optical density** (end of a culture), bubbles presence does not alter significantly the light field and can be **safely ignored**.



Light near the wall



1. Kopylov, A. K. *et al.* Microalgae: a potential alternative to fish oil supplements for human nutrition. *Mar. Biotechnol.* 18, 34 (2015).  
 2. Medina, M. S. *et al.* Microalgae as feed ingredients for livestock production and their efficacy. *Animals* 10, 205, 111–121 (2017).  
 3. Caron, W., Piret, I. & Pozzobon, V. A review of light-colored algal bioactive products for nutraceuticals. *Bioact. Comp.* 10, 1074–1079 (2020).  
 4. Lomon, M., Shiga, M., Kawanishi, S., Liu, S. & Kawai, H. Expanding the potential of microalgae for new biotechnological applications and beyond. *Algal Culture: Methods* 10, 144–204 (2015).  
 5. Caccamo, S., Caccamo, S. & D'Amico, V. Drying perspectives on algae production from air-cultures: A focus on post-drying and antimicrobial control. *Bioact. Comp.* 10, 1074–1079 (2020).  
 6. Pozzobon, V., Liu, S., Kawanishi, S., Medina, M. S., Piret, I. & Caron, W. Nitrate and nitrite as natural sources of nitrogen for Chlorella vulgaris: Growth, nitrogen uptake and pigment synthesis. *Microb. Biotechnol.* 12, 99–107 (2018).  
 7. Zhou, X. & Shihua, A. Calcium uptake of photosynthetic microalgae to water stabilization ponds: nutrient immobilization and trace detection. *Environ. Sci. Biotechnol.* 11, 243–250 (2014).  
 8. Pozzobon, V., K. *et al.* Evaluation of natural foam collection as a simple and efficient harvesting method for microalgae. *Algal Culture: Methods* 10, 144–204 (2015).  
 9. Borjesson, F. P. & Thomas, J. P. A model for bubble radiation pressure in algae in a stirred tank. *Eng. Technol.* 20, 147–148 (1978).  
 10. S. Kawanishi, M., Pozzobon, V., Bredas, J., Piret, I. & Caron, W. Bubble-based on-axis laser light microscopy and light-scattering based light field measurements. *J. Chem. Phys.* 145, 142701 (2016).  
 11. Caron, W., Piret, I., Kawanishi, M., Liu, S. & Kawai, H. Expanding the potential of microalgae for new biotechnological applications and beyond. *Algal Culture: Methods* 10, 144–204 (2015).  
 12. Caron, W., Piret, I., Caron, W., G. & Desobry, G. A structured model for simulation of culture of the microalga *Spirulina platensis* in photobioreactors: I. Coupling between light transfer and growth kinetics. *Biotechnol. Bioeng.* 101, 117–129 (2008).  
 13. Caron, W., Piret, I., Caron, W., G. & Desobry, G. A structured model for simulation of culture of the microalga *Spirulina platensis* in photobioreactors: I. Coupling between light transfer and growth kinetics. *Biotechnol. Bioeng.* 101, 117–129 (2008).  
 14. Kawanishi, M. *et al.* Single cell based screening of optimal algal cultivation conditions for microalgae. *Algal Culture: Methods* 10, 144–204 (2015).  
 15. Molin, D., Mariani, C. & Sillaber, A. Turbulence modulation and cavitation dynamics in vertical channel flow. *J. Statist. Theory* 12, 99–107 (2012).

### CONTACT

Victor.Pozzobon@centralesupelec.fr



# Development of a 3D multiphase model for Hydrogen Evolution in an Electrolysis Stack

Aswath Ashok<sup>1</sup> Delphine Laboureur<sup>1</sup> Sylvania Lopes<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Von Karman Institute for Fluid Dynamics



## Introduction

Hydrogen is utilized as an energy source such as in fuel cell technologies and as an energy carrier in the chemical and petrochemical industries. Hydrogen is also being utilized in energy storage systems. Over 70% of current Hydrogen produced is from Steam Methane Reforming (SMR) and Coal Gasification. Hydrogen from Electrolyser technology accounts for 5% of current production. This is expected to increase in the next 10 years with improvements in the technology. There are currently 4 Electrolyser technology, namely, Alkaline Water Electrolysis (ALK), Proton Exchange Membrane Electrolysis (PEME), Anion Exchange Membrane Electrolysis (AEME) and Solid Oxide Electrolysis (SOE). ALK and PEME are the mature methods currently in use but are not highly efficient (50% - 70%). One of the reasons is the limited exploration of the nucleation, growth and transport of the Oxygen and Hydrogen bubbles at the electrode surface, PTL and flow channel. At the scale of considerations (microns), CFD methods are essential in robustly predicting the flow dynamics. Current state of the art lacks a model that can accurately account for bubble behaviour within the PTL and its transport into the channel.

Figure 1. Macroscopic to microscopic overview schematic of a PEME stack, cell and bubble evolution [1,2,3]

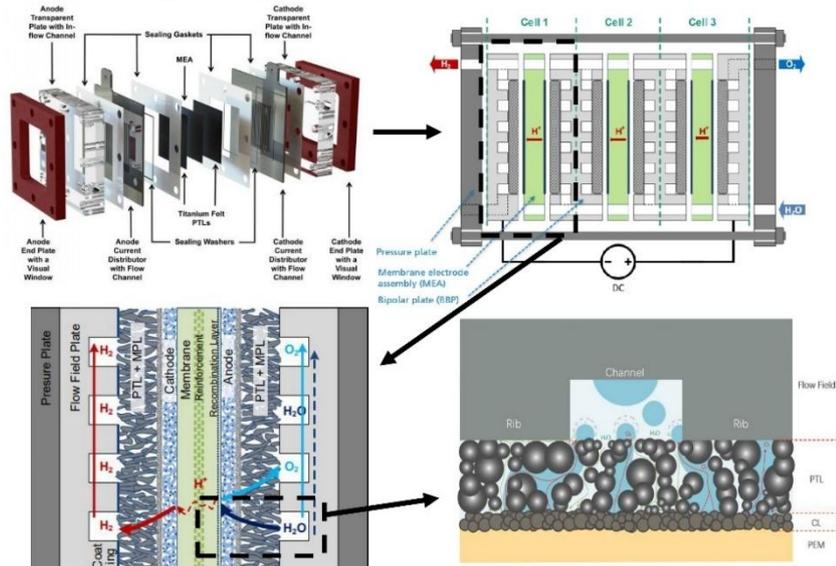
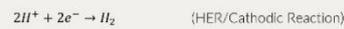


Table 1. Technology Readiness Level of Electrolyser Technologies

TRL	Small Prototype				Large Prototype		Demonstration		Market Uptake	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
							ALM	SOLC	PLM/ALK	

## HER and OER reactions within the system

The Hydrogen Evolution Reaction (HER) and Oxygen Evolution Reaction (OER) are given by



The HER and OER determine what ions and their ratio of transport within the system. This is critical information when designing a full stack to determine the voltage, current, material etc.

### Energy Requirements

Ideally, we would like minimum energy spent to achieve the high current densities, but this is difficult to achieve due to the nature of the system. The splitting of a water molecule requires 1.229V without thermal considerations. With thermal considerations, 1.481V would be necessary. This energy requirement does not consider activation losses, ohmic losses and diffusion losses (from mass transport). These effects are critical to consider when operating at < 1.6 A/cm<sup>2</sup> current densities [4]

## Operating Conditions (Ex. PEM)

- 20°C - 80°C
- Atm - 50 bar (differential)
- 1.0 - 2.5 A/cm<sup>2</sup>
- 1.8 - 2.2 V
- Lifetime stack, 15 to 20 thousand hours

## Advantages

- High current densities
- Higher purity Hydrogen, > 99.9999%
- Compact stack design
- Fast response time
- Suitable for high pressure and differential pressure operation

## Physical Phenomena

- 2 phase gas-liquid flow
- Chemical kinetics
- Bubble nucleation and growth
- Mass and transport phenomena
- Coalescence and diffusion

## Forces on a Bubble

- Lift and Drag
- Surface Tension
- Buoyancy
- Contact pressure
- Bubble growth force

## Limitations from Studies

- Numerical methods lacking robustness at the scale of consideration (microns)
- Transport of bubbles away from the electrode surface not very clear
- If a bubble distribution is considered, then the interfacial forces is lacking
- Uniform bubble distribution models

## Project Objective

- Macroscopic 3D multiphase model of an Electrolysis Stack
- Modelling bubble evolution and transport from PTL\* into Channel
- Bubble modelling based on Eulerian model. Distribution of bubble (size, velocity etc.) from Quadrature Based Method of Moments (QBMM)
- Couple Eulerian and QBMM model for an Electrolyser cell
- Validate against experimental data
- Develop ROM\* based on high fidelity and experimental data

\*Porous Transport Layer  
\*Reduced Order Model

## Current modelling approach, Improvements and Bubble Transport

The continuity and momentum equations for the Two-Fluid Eulerian model are given below for given phase k.

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{U}_k) = \dot{m}_{kj} - \dot{m}_{jk}$$

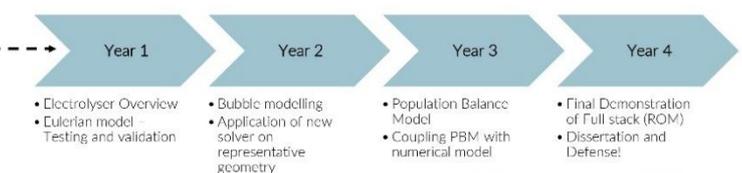
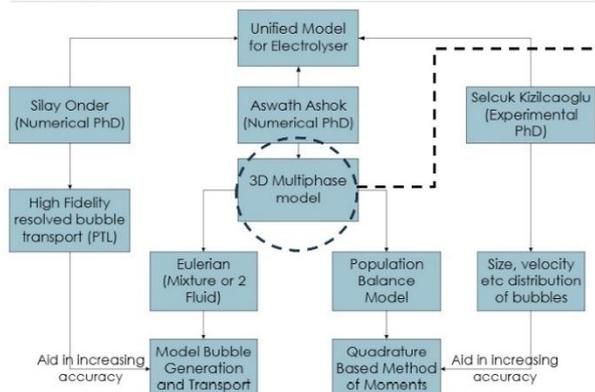
$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k \mathbf{U}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k) = -\alpha_k \nabla p_k + \nabla \cdot [\alpha_k (\bar{\tau}_k + \bar{\tau}_k^{Re})] + \alpha_k \rho_k g + \mathbf{M}_{ki}$$

The  $\mathbf{M}_{ki}$  term determines the behaviour and transport of the bubbles from the electrode into the channel flow. This momentum exchange considers forces such as virtual mass, lift, drag, wall lubrication and turbulent dispersion.

To more robustly model the size and distribution of the bubbles along with the transfer of energy, a Population Balance Model (PBM) based on the Quadrature Based Method of Moments (QBMM) will be coupled with the equation.

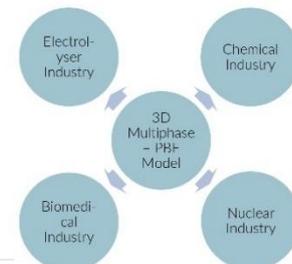
The amount of bubble nucleation depends on the current density, the drag force and the CL. Higher current density correspond to more bubble generation. Ideally, fast nucleation, growth and transport is desired (in both Anode and Cathode side). Improvements in bubble transport will aid in increasing efficiency of current Electrolyser technologies.

## Methodology



## Valorization

Why investigate this now and what is the benefit for it? This study directly contributes to the development of efficiency of Electrolysers through an increased understanding of flow dynamics. The flow dynamics investigated concern Bubble - Liquid interaction, which are found in other industries such as chemical, nuclear etc. Some Belgian companies within this space would be John Cockerill, Bekaert, SCK CEN. Some applications for Electrolysers would be for AEM, Sonolysis, for chemical would be in Bubble-Column flows, for Biomedical would be in hemodynamics and for nuclear in coolant flows (BWR).



## References

1. Hott, M. et al. "Cost forecast for Low Temperature Electrolysis." Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems ISE, 23 Apr. 2024.
2. Yuan, S. et al. "Bubble evolution and transport in PEM water electrolysis: Mechanism, impact, and Management." Progress in Energy and Combustion Science, vol. 96, May 2023, p. 101075. https://doi.org/10.1016/j.pecs.2023.101075
3. Xu, S. et al. "Electrochemical performance study of Proton Exchange Membrane Electrolyzer considering the effect of bubble coverage." International Journal of Hydrogen Energy, vol. 48, no. 70, Aug. 2023, pp. 27079-27094.
4. Falcato, D.S., and A.M.F.R. "Intro: A review on PEM electrolyzer modelling: Guidelines for beginners." Journal of Cleaner Production, vol. 261, July 2020, p. 121164. https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.121164

# ParaView for OpenFOAM – MAZEN François – Kitware



Contacts :

- Speaker : [francois.mazen@kitware.com](mailto:francois.mazen@kitware.com)
- Kitware Europe : [kitware@kitware.eu](mailto:kitware@kitware.eu) / (+33) 04 37 45 04 15

## Présentation générale de Kitware

Kitware est une société spécialisée dans le développement de logiciels open source scientifiques : ParaView, VTK, CMake, 3D Slicer, etc. Elle collabore avec l'industrie et la recherche sur des projets en vision par ordinateur, modélisation numérique, calcul médical, etc.

Son modèle repose sur le développement sur mesure ; le support technique ; la formation et les partenariats académiques.

Expertises principales

- Open source / Multiplateforme (desktop, cloud, HPC)
- Domaines : Computer vision, scientific computing, data analytics, medical computing.
- Services : formation, support, développement, co-financement de projets.

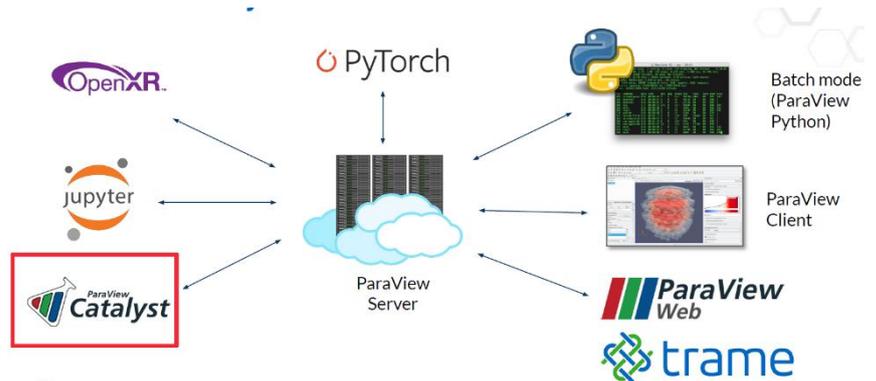


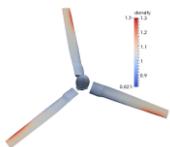
Figure 1 – Ecosystem ParaView

## Visualisation in situ avec Catalyst

Objectif : Réduire la quantité de données à stocker lors de simulations lourdes, via une analyse en mémoire (sans écriture disque).

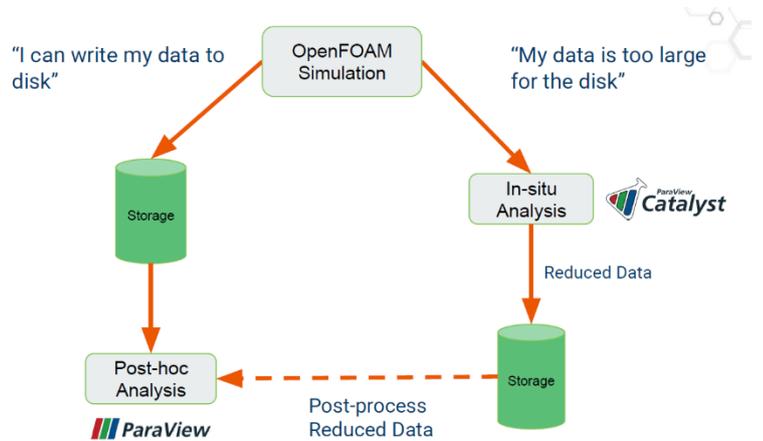
Deux usages principaux :

- Calculs à la volée (moyennes, iso-surfaces...)
- Génération d'images ou de vidéos pendant la simulation (monitoring ou débogage)



Exemple : Simulation d'hélicoptère (HPCMP CREATE-AV Helios (Army AFDD/AMRDEC) simulation)

- Données complètes par pas de temps : 448 Mo
- Surface seule des pales : 2,8 Mo
- Image : 71 Ko



Outils compatibles : Catalyst (ParaView), Ascent, Libsim, ADIOS, Sensei, Conduit

Post-hoc analysis

Adding In-situ processing

Dump Times

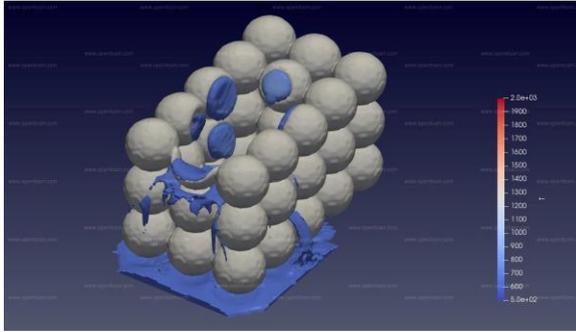


## OpenFOAM + Catalyst

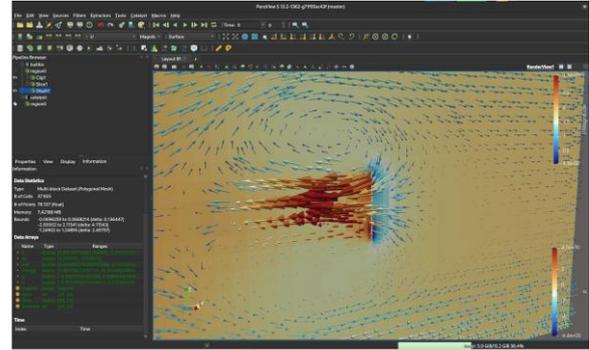
- Catalyst 1 : déjà intégré dans certaines versions modifiées d'OpenFOAM (ex. : Collinson/openfoam.com) – désormais obsolète.
- Catalyst 2 : nouvelle version en développement actif, avec adaptateur plus robuste et plus simple (GitLab public disponible).

Catalyst 1 (deprecated)

Catalyst 2 (WIP)



[Community/Catalyst\\_OpenFOAM/modules/visualization](https://github.com/Community/Catalyst_OpenFOAM/modules/visualization)  
2018 paper



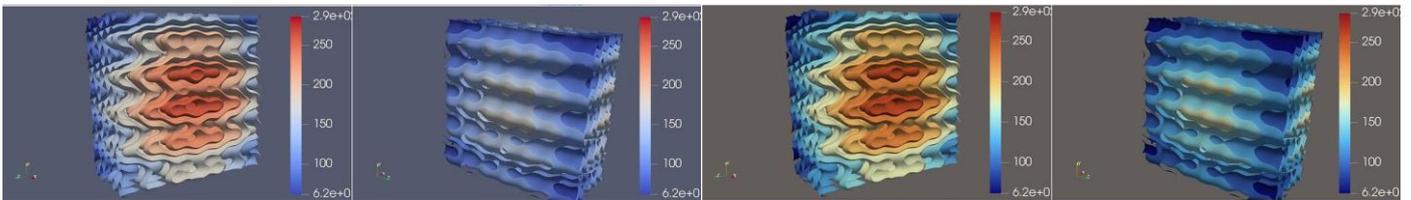
<https://gitlab.kitware.com/keu-public/openfoam-catalyst2>  
<https://gitlab.kitware.com/keu-public/openfoam-catalyst2>

## Démonstration de Catalyst 2

- Simulation OpenFOAM avec fonctionObject appelant un script Python ParaView.
- Visualisation en direct : slices, glyphs, iso-surfaces, etc.
- Manipulation interactive possible pendant l'exécution.

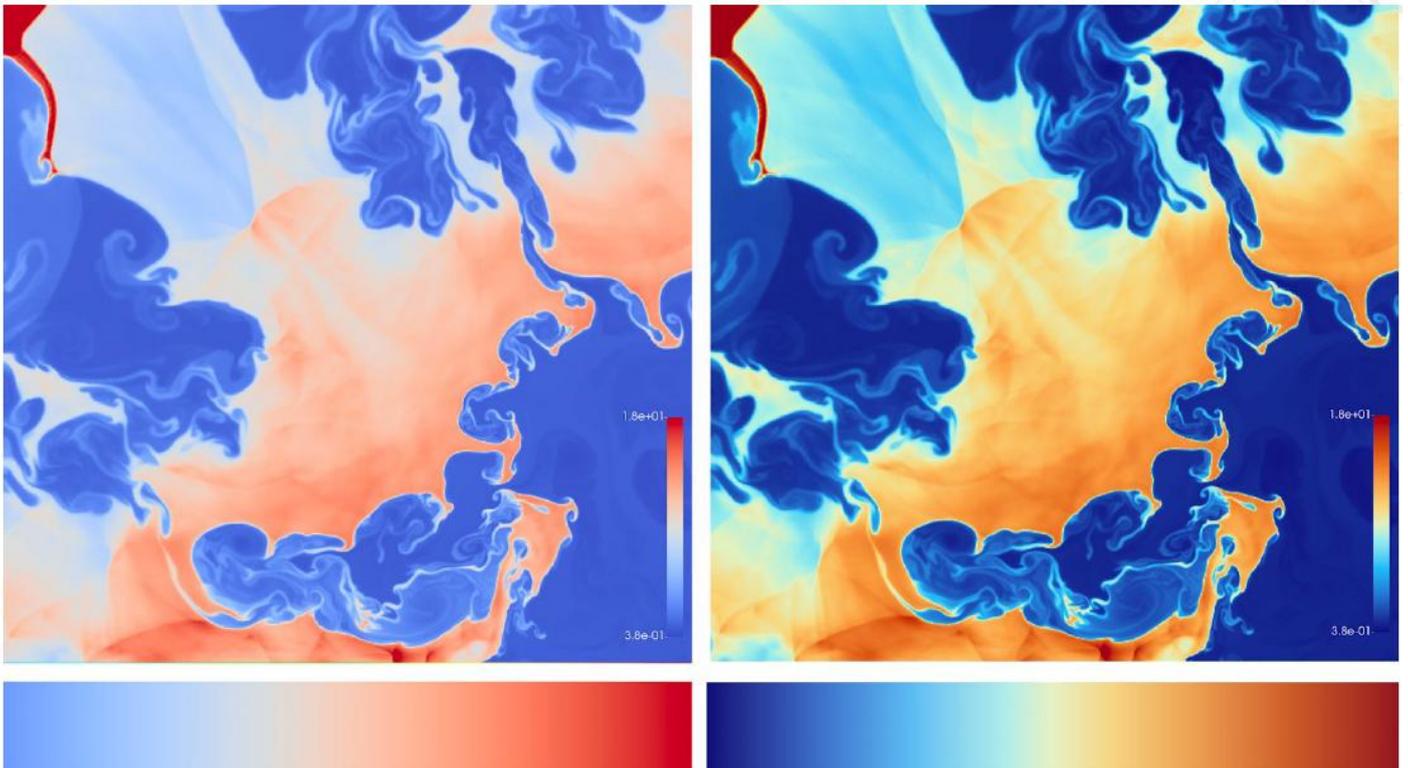
## Nouveautés à venir – ParaView 6.0 (printemps 2025)

- Nouvelle interface utilisateur et colormap par défaut améliorée



<https://www.kitware.com/new-default-colormap-and-background-in-next-paraview-release/>

<https://www.kitware.com/new-default-colormap-and-background-in-next-paraview-release/>



Paper: <https://www.computer.org/csdl/magazine/cg/2024/04/10640196/1ZySI5cfcNm>

Paper: <https://www.computer.org/csdl/magazine/cg/2024/04/10640196/1ZySI5cfcNm>

- Chargement différé des fichiers OpenFOAM (proc0 uniquement)

Default value changed to false

Multithreaded reading of OpenFOAM case files (large case files that are stored on a network drive)

Reading only the proc0 directory to determine the structure of the case file

- Filtres avancés (découpe par cônes, anneaux, etc.)

Annulus widget  
Create cylinder with thickness

<https://docs.google.com/file/d/1k1idLfljBZB82eSzbmYt2lJ3vVFalYg/preview>

<https://docs.google.com/file/d/1k1idLfljBZB82eSzbmYt2lJ3vVFalYg/preview>

- Export par ID de maillage (plus besoin de script)

<https://docs.google.com/file/d/1MqnWlxXgxXauZB7gWTrknO5TcLySHqDN/preview>

<https://docs.google.com/file/d/1MqnWlxXgxXauZB7gWTrknO5TcLySHqDN/preview>

- Colormap bivariable (affichage simultané de deux variables)

- Décimation adaptative (filtrage intelligent des maillages)

- Optimisation du lecteur CSV

Properties (vehicle\_data.csv / CSV Reader)

- Detect Numeric Columns
- Use String Delimiter
- Have Headers

Field Delimiter:  Characters

Add Tab Field Delimiter

Merge Consecutive Delimiters

Preview

```
"Cylinders", "Displacement", "HP", "Weight", "Year", "Acceleration", "MPG"
8, 307, 130, 3504, 70, 12, 18
8, 350, 165, 3693, 70, 11.5, 15
8, 318, 150, 3436, 70, 11, 18
8, 304, 150, 3433, 70, 12, 16
8, 302, 140, 3449, 70, 10.5, 17
8, 429, 198, 4341, 70, 10, 15
8, 454, 220, 4354, 70, 9, 14
8, 440, 215, 4312, 70, 8.5, 14
8, 455, 225, 4425, 70, 10, 14
```

Skipped Lines: 0

Comment Characters: #

- Amélioration du mode client/serveur (OpenGL, offscreen, headless)

- Enregistrements automatisés

• Compatibilité avec dispositifs VR/VR (CAVE, casques) Single server packaging (OpenGL/EGL/OSMesa)

**Settings**

General IO Camera Render View Represented Attributes

Search ... (use Esc to clear text)

**General Options**

- Auto Save:** Enable state file auto save. When on, a state file will be saved after each modification of the pipeline or rendering.

**GUI Font**

- Override Font:** Override the GUI font size. Uncheck to use system default.

**Interface language**

**Interface Language:** Set ParaView language.

American English

**Properties Panel Options**

- Auto Apply:** Automatically apply changes in the 'Properties' panel.
- Preserve Property Values:** New source proxies (filter, sources, readers and extractors) are initialized with their previous property values.
- Load All Variables:** Load all variables when loading a data set.
- Load No Chart Variables:** Do not load any variables when loading a 2D chart.

**Data Processing Options**

- Auto Convert Properties:** Automatically convert data arrays as needed by filters including converting cell arrays to point arrays, or vice versa, and extracting single components from multi-component arrays.

**Color/Opacity Map Range Options**

**Scalar Bar Mode:** Set how ParaView manages showing of color legend bars (or scalar bars) in render views.

Reset Restore Defaults Apply Cancel OK

## ParaView User Day Europe – 23 septembre 2025 à Lyon

Événement communautaire organisé par Kitware :

- Conférences et démonstrations
- Rencontres avec les développeurs
- Présentations utilisateurs
- Sessions pratiques et dîner ParaView

Infos : [www.kitware.eu/paraview-user-day-europe-2025](http://www.kitware.eu/paraview-user-day-europe-2025)



# Advances in liquid film simulations using geometric volume-of-fluid – GAMET Lionel – IFP

Tiago CAMPOS<sup>1,2</sup>, Lionel GAMET<sup>1</sup>, Georg BRÖSIGKE<sup>2</sup>, Olivier LAGET<sup>1</sup>, Véronique PENIN<sup>1</sup>, Pascal ALIX<sup>1</sup>, Jens-Uwe REPKE<sup>2</sup>

<sup>1</sup> IFP Energies Nouvelles, France

<sup>2</sup> Technische Universität Berlin, Germany

## Contexte & Objectifs

Étude des films liquides dans des écoulements gaz/liquide complexes (procédés de captation de CO<sub>2</sub>, génie chimique, microfluidique...) via des méthodes de capture d'interface précises. Objectif : améliorer la représentation des dynamiques d'interface dans les écoulements capillaires.

### À propos de nous... IFP Energies Nouvelles

Institut public de recherche et de formation à vocation internationale, intervenant dans les domaines suivants :

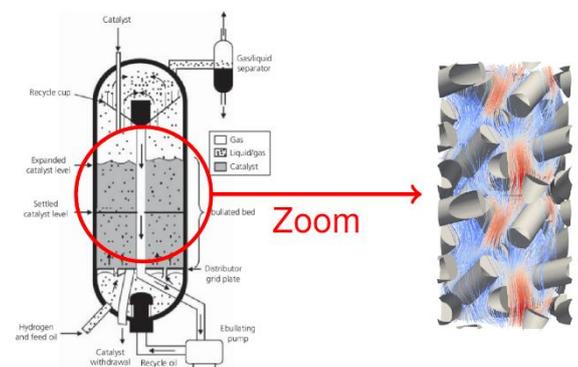
- **Pétrole et gaz responsables** : Développement de technologies répondant à la demande en énergie et en produits chimiques, tout en réduisant l'impact environnemental.
- **Énergies renouvelables** : Élaboration de solutions pour produire de l'énergie, des carburants et des intermédiaires chimiques à partir de sources renouvelables.
- **Mobilité durable** : Conception de solutions efficaces et respectueuses de l'environnement pour le secteur des transports.
- **Climat, environnement et économie circulaire** : Réduction de l'impact des activités humaines et industrielles sur le climat et les écosystèmes.

**Recherche fondamentale** : 1531 employés, dont 1078 dédiés à la recherche ; 40 à 50 nouvelles thèses de doctorat chaque année ; Autofinancement supérieur à 50 %.

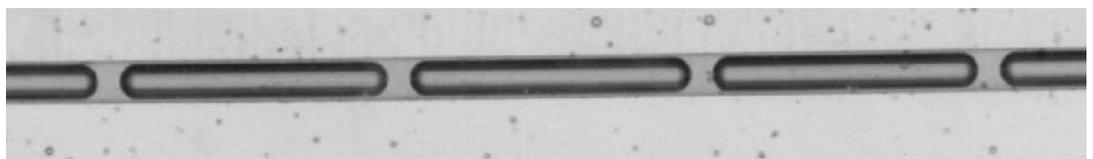
**Groupe industriel** d'environ 4500 collaborateurs dans 25 pays ; Chiffre d'affaires de 1100 M€ en 2023 ; Stratégie d'innovation adaptée aux start-ups et PME.

### Écoulements gaz/liquide en génie chimique

- **Phénomènes multiphysiques** :
  - Écoulements à deux ou trois phases : liquide / gaz / solide
  - Transport d'espèces chimiques
  - Réactions chimiques
  - Transferts de chaleur et de masse (y compris changement de phase)
- **Paramètres caractéristiques** :
  - Faibles nombres de Reynolds (régime laminaire)
  - Faibles nombres de capillarité  $Ca = \frac{\mu L U}{\sigma}$
  - Écoulements en bulles
  - Microfluidique et géométries complexes



Lits catalytiques bouillonnants ou fixes



Écoulements de type Taylor (catalyse homogène)

Films liquides sur garnissages structurés

⇒ Simulation directe (DNS) de petits réacteurs à l'aide de méthodes de capture d'interface précises

## Méthodes numériques (VoF)

La méthode historique VoF, MULES (Multidimensional Universal Limiter with Explicit Solution), repose sur une approche implicite de compression d'interface. Toutefois, cette méthode montre des limites de précision, en particulier pour les écoulements fortement influencés par les forces capillaires. Pour améliorer cela, la méthode géométrique isoAdvector PLIC-RDF5 a été utilisée. Basée sur la reconstruction d'interface via une fonction de distance (RDF), elle permet une meilleure précision et limite fortement les courants parasites.

Deux modèles dynamiques d'angle de contact ont été implémentés dans OpenFOAM : le modèle de Cox et celui de Kistler, tous deux fondés sur le nombre de capillarité local. Ils remplacent avantageusement le modèle hyperbolique de type tanh présent par défaut dans OpenFOAM, dont l'interprétation dynamique est souvent inadéquate.

Un autre développement important a concerné les conditions aux limites de glissement partiel (partialSlip) et de glissement de Navier (navierSlip). Cette dernière introduit une longueur de glissement physique qui permet un contrôle plus rigoureux de la dynamique des films au voisinage de la ligne triple.

- **MULES**

La méthode VoF (Volume of Fluid) repose sur l'ajout d'une équation d'évolution pour le champ de fraction volumique  $\alpha$ , où  $\alpha = 0$  dans les gaz et  $\alpha = 1$  dans les liquides. Il faut veiller à limiter l'étalement numérique de  $\alpha$  et à maintenir ses valeurs entre 0 et 1 ( $0 \leq \alpha \leq 1$ )

Méthode VoF historique dans OpenFOAM (Henry Weller, solveur interFoam) :

Multidimensional Universal Limiter with Explicit Solution (MULES) :

- La netteté de l'interface est obtenue en introduisant un terme de flux de compression artificielle dans l'équation de la fraction volumique  $\alpha$  :
 
$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha u) + \nabla \cdot (\alpha(1 - \alpha)u_r) = 0$$
- Ce terme supplémentaire (le flux de compression) agit pour resserrer numériquement la transition entre les phases liquide et gazeuse.
- L'utilisation du limiteur MULES (basé sur une méthode implicite) garantit que la fraction volumique reste bornée dans l'intervalle  $[0 ; 1]$ , condition indispensable à la stabilité des calculs VoF.
- Pour plus de détails : H. Rusche PhD, "Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions", 2002. See also S. Deshpande, L. Anumolu, and M. Trujillo, "Evaluating the performance of the two-phase flow solver interFoam", Comp. Sc. & Discovery, vol. 5, no. 1, 2012

- **isoAdvector iso-Alpha**

La méthode géométrique VoF isoAdvector a été introduite dans OpenFOAM+ en 2016 (solveur interIsoFoam). Elle est particulièrement efficace sur des maillages polyédriques complexes.

- La reconstruction d'interface repose sur des calculs d'isosurfaces efficaces.
- L'advection de l'interface découpe chaque pas de temps en sous-intervalles, sur lesquels les flux de fraction volumique peuvent être calculés analytiquement en supposant un déplacement régulier de l'interface.

Pour plus de détails, voir : J. Rønby, H. Bredmose, and H. Jasak, "A computational method for sharp interface advection", Royal Society Open Science, vol. 3, no. 11, 2016

- **isoAdvector PLIC-RDF5**

Une amélioration de isoAdvector (2019, solveur interFlow) introduit une nouvelle méthode de reconstruction d'interface basée sur une fonction de distance reconstruite (RDF), qui réduit les erreurs d'orientation d'interface. Une variante PLIC (Piecewise Linear Interface Construction) a aussi été implémentée.

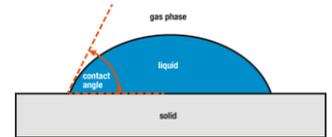
Le schéma PLIC-RDF5 (avec 5 itérations) offre :

- Une convergence d'ordre 2 avec des erreurs absolues réduites, pour tous types de maillage.
- Une implémentation simple et peu coûteuse.
- Une réduction des courants parasites pour les écoulements très capillaires.
- Le solveur interFlow est disponible ici : <https://github.com/DLR-RY/TwoPhaseFlow.git>

Pour plus de détails, voir : H. Scheufler and J. Rønby, "Accurate and efficient surface reconstruction from volume fraction data on general meshes", Journal of Computational Physics, 383, 2019

- **Gestion de la ligne triple : condition d'angle de contact**

Un paradoxe des méthodes VoF réside dans le fait qu'elles permettent de simuler le mouvement de bulles ou de gouttes le long des parois, alors même que la condition limite de vitesse y impose généralement  $u = 0$ .



La ligne triple correspond à l'intersection entre l'interface gaz-liquide et la paroi solide, et c'est à cet endroit que se définit l'angle de contact.

Lorsque la ligne triple est mobile, il devient indispensable de modéliser un angle de contact dynamique. Le modèle dynamique actuellement disponible dans OpenFOAM repose sur l'expression suivante :

$$\theta_{dyn} = \theta_0 + (\theta_A - \theta_R) \tanh\left(\frac{u_{wall}}{u_\theta}\right)$$

où :  $u_{wall}$  est la vitesse locale dans la cellule adjacente à la paroi,  $\theta_0$ ,  $\theta_A$ ,  $\theta_R$  sont les angles de contact d'équilibre, d'avancée et de recul et  $u_\theta$  est une vitesse de référence imposée par l'utilisateur.

Cependant, ce modèle présente des limitations. Pour une représentation plus réaliste, deux modèles plus rigoureux ont été implémentés dans OpenFOAM : le modèle de Cox et le modèle de Kistler, tous deux basés sur le nombre de capillarité local ( $Ca$ ).

### • Le modèle de Cox

Ce modèle s'exprime par (J. Fluid Mech., 357:249-278, 1998) :

$$\theta_{dyn\ Cox} = g^{-1}\left(g(\theta_{app}) + Ca \log \frac{L}{\lambda}\right) \text{ avec } \theta_{app} = \begin{cases} \theta_A & \text{si la ligne triple avance} \\ \theta_R & \text{si la ligne triple recule} \end{cases}$$

$$\text{Où } Ca = \frac{\mu_L U_{CL}}{\sigma_{CL}}, L = \frac{\Delta x}{2}, \lambda = 10^{-9} \text{ m et } g(\theta) = \int_0^\theta \frac{d\theta}{f(\theta)}$$

$$f(\theta) = \frac{2\sin\theta[\lambda^2(\theta^2 - \sin^2\theta) + 2\lambda(\theta(\pi - \theta) + \sin^2\theta) + ((\pi - \theta)^2 - \sin^2\theta)]}{\lambda(\theta^2 - \sin^2\theta)[(\pi - \theta) + \sin\theta \cos\theta] + [(\pi - \theta)^2 - \sin^2\theta](\theta - \sin\theta \cos\theta)}$$

$$f(\theta) \text{ est approximé par } \begin{cases} g(x) \approx \frac{x^3}{9} - 0,00183985x^{4,5} + 1,845823 \cdot 10^{-6} x^{12,258487} \\ g^{-1}(x) \approx (9x)^{1/3} + 0,0727387x - 0,0515388x^2 + 0,00341336x^3 \end{cases}$$

### • Le modèle de Kistler

Ce modèle s'exprime par (Wettability, 6, 311-430, 1993) :

$$\theta_{dyn\ Kist} = f_H(Ca + f_h^{-1}(\theta_{app}))$$

$\theta_{app}$  et  $Ca$  sont définis similairement au modèle de Cox.

$$f_H \text{ est la fonction de Hoffman : } f_H(x) = \arccos\left[1 - 2 \tanh\left(5,16 \left[\frac{x}{1+1,31x^{0,99}}\right]^{0,706}\right)\right]$$

### • Condition limite de glissement partiel (partialSlip) dans OpenFOAM

La condition partialSlip représente une approche intermédiaire entre le non-glissement (no-slip) et le glissement parfait (free-slip).

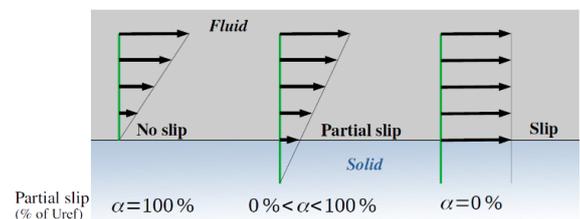
Les paramètres utilisateurs sont :

- $u_{ref}$  – vitesse de référence
- $\alpha$  – coefficient de pondération

La vitesse imposée sur la paroi est alors :

$$u_{imposed} = \alpha u_{ref} + (1 - \alpha)(I - nn) \cdot u_c$$

où  $u_c$  est la vitesse au centre de la cellule proche de la surface,  $n$  est la normale à la surface et  $(I - nn) \cdot u_c$  correspond à la composante tangentielle de la la vitesse à la surface.



### • Condition de glissement de Navier (navierSlip)

Cette condition a été développée comme une généralisation plus physique de partialSlip. Elle introduit une longueur de glissement réelle  $\lambda$ .

Les paramètres utilisateurs sont :

- $u_{ref}$  – vitesse de référence
- $\alpha$  – distance de glissement (en m)

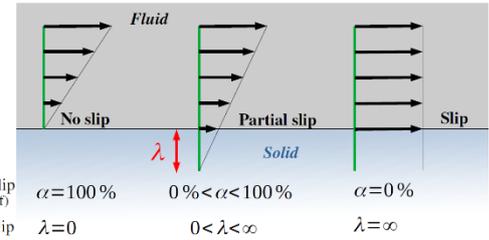
Le profil de vitesse est tel que la Vitesse  $u_{ref}$  est atteinte à l'intérieur du solide, à une distance  $\lambda$  de la paroi. Mathématiquement, la condition de glissement de Navier s'écrit :

$$(I - nn) \cdot (u - u_{ref}) = \lambda(I - nn) \cdot (\nabla u + \nabla u^T) \cdot n$$

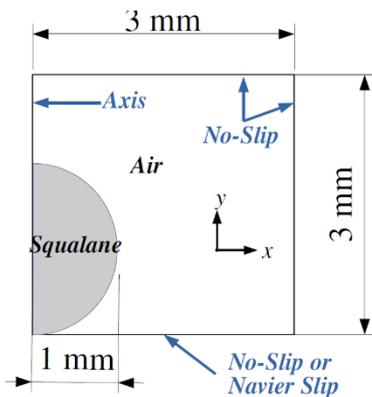
La relation entre les conditions navierSlip et partialSlip s'écrit alors :  $\alpha = \frac{1}{1 + \frac{\lambda}{\Delta/2}}$

avec  $\Delta$  représentant la taille de maille locale dans la direction perpendiculaire à la paroi.

Des tests effectués en écoulement monophasique sur des surfaces courbes (par exemple : configuration de Taylor-Couette en 2D) suggèrent toutefois que le terme transposé du gradient de vitesse  $\nabla u^T$  ne semble pas encore pris en compte dans l'implémentation actuelle.



### Impact d'une goutte (Lavi & Marmur, Legendre)



Simple cas test académique (2D axisym. or 3D) : Fluid 1 [liquide] : Squalane / Fluid 2 [gaz] : Air

Tension de surface  $\sigma = 32 \text{ mN} \cdot \text{m}^{-1}$

Vitesse initiale nulle, gravité selon  $-y$

Grille cartésienne uniforme  $96 \times 96$

Conditions aux limites sur la paroi inférieure : Pour le champ  $\alpha$  : angle de contact constant ou dynamique ; Pour la vitesse  $u$  : paroi adhérente (no slip) ou glissement de Navier

Becky Lavi and Abraham Marmur. "The exponential power law: partial wetting kinetics and dynamic contact angles". In: Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects 250.1-3 (2004), pp. 409–414.

Dominique Legendre and Marco Maglio. "Comparison between numerical models for the simulation of moving contact lines". In: Computers & Fluids 113 (2015), pp. 2–13.

$\Delta$  correspond à la taille de la maille au niveau de la paroi, dans la direction perpendiculaire à celle-ci.

La dynamique de la goutte est plus rapide avec une condition de glissement partiel.

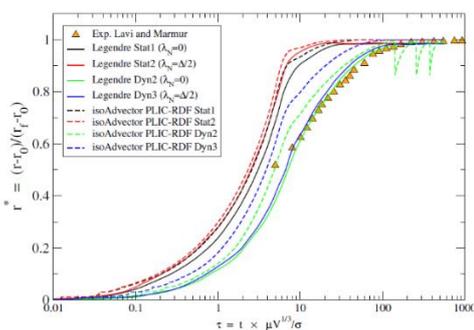
Le modèle dynamique de Cox permet de mieux reproduire la dynamique de la goutte.

On observe un comportement de type «goutte pulsante» (voir la courbe - - - isoAdvecteur PLIC-RDF Dyn2).

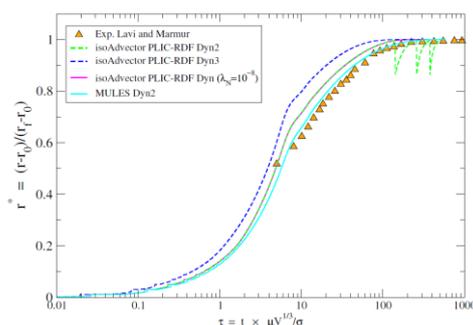
Nous présentons ici uniquement les résultats obtenus avec le modèle dynamique de Cox.

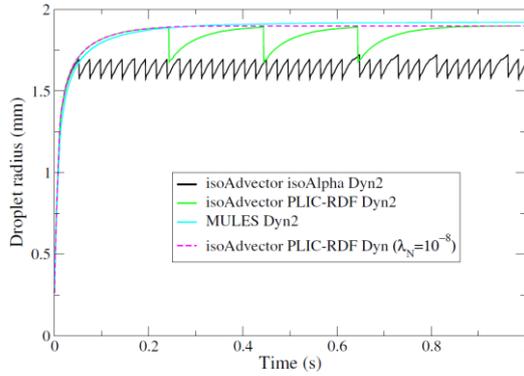
Une très faible longueur de glissement permet de supprimer les oscillations/pulsations de la goutte.

Le solveur interFoam donne de bons résultats pour ce cas.



Stat1	$\theta_S$	$\lambda = 0$
Stat2	$\theta_S$	$\lambda = \Delta/2$
Dyn2	$\theta_{Cox}$	$\lambda = 0$
Dyn3	$\theta_{Cox}$	$\lambda = \Delta/2$

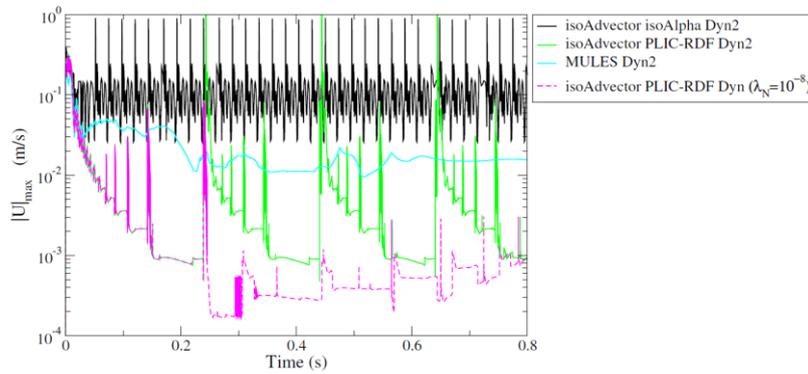




Nous présentons ici le rayon dimensionné de la goutte en fonction du temps.

La dynamique initiale est similaire pour toutes les simulations avec isoAdvecteur, légèrement plus rapide que interFoam.

Une fréquence de pulsation plus élevée est observée avec interIsoFoam, sans convergence vers un état stationnaire.



Nous présentons ici la valeur maximale de la norme de la vitesse sur l'ensemble du domaine.

## La cascade ruisselante (Lavalle et al., 2020)

- Simulation d'un film liquide tombant sur une plaque verticale plane

Cas en 3D dans un bloc rectangulaire de taille  $L \times W \times H$ ,  $10H = L = W = 0,1m$ . L'injection de liquide se fait par une ouverture de taille  $l_z \times h_0$  avec  $l_z/W = 45 ; 85$  or  $98 \%$

La plaque est verticale ( $90^\circ$ ) et la gravité est orientée selon  $+x$

Liquide A : Eau/Glycérine (80%),  $\sigma = 64 \text{ mN/m}$

Gaz : Air

$Re = 2,92 ; Ca = 0,04$  (basé sur les propriétés du liquide).

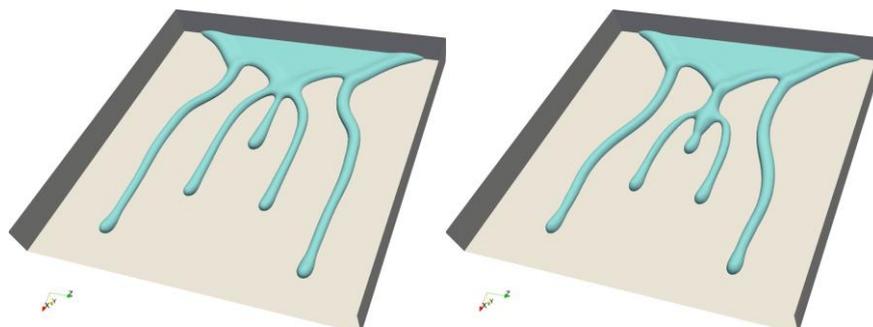
Conditions aux limites pour le mur inférieur :

- $\alpha$  : Angle de contact constant / dynamique
- $u$  : non-glissement / glissement de Navier

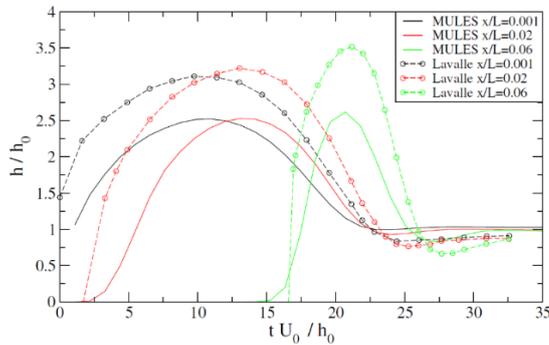
Gianluca Lavalle, J Sebilliau, and Dominique Legendre. "Rivulet cascade from falling liquid films with side contact lines". In: Physical Review Fluids 5.12 (2020), p. 124001.

### Animation

Gauche : interFoam ; Droite : interIsoFoam avec PLIC-RDF, pour  $l_z/W = 85 \%$  avec angle de contact constant.



Preliminary results



Hauteur de film liquide mesurée sur la ligne centrale, à différents emplacements en aval.

Configuration :  $l_z/W = 85\%$  ; angle de contact constant  $\theta_S = 82,5^\circ$  ; interFoam.

La comparaison quantitative avec les données expérimentales de la littérature est encore en cours.

## Film liquide sur paroi ondulée

Objectif : Vers la simulation de garnissages structurés, notamment dans les colonnes de captation de  $\text{CO}_2$ .

Liquid : Eau,  $\sigma = 70 \text{ mN/m}$

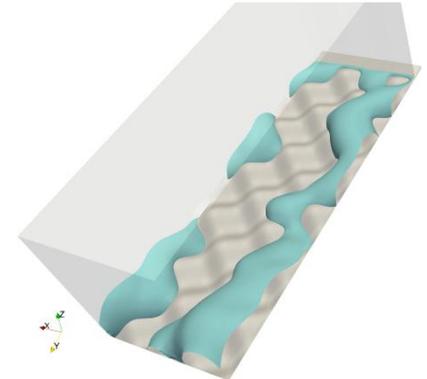
Gaz : Air

Paroi ondulée verticalement ( $90^\circ$ ), avec double sinus en  $x$  et  $y$  ( $T = 2,6875 \text{ mm}$ ,  $2H = 0,66 \text{ mm}$ ) ; Gravité dirigée selon  $+y$

Vitesse d'entrée du liquide :  $0,2 \text{ m/s}$

Conditions aux limites :

- Parois : pas de glissement, angle de contact constant  $\theta_S = 75^\circ$
- Sortie : vitesse  $U = \text{pressureInletOutletVelocity}$  ; pression  $p = \text{fixedFluxPressure}$



## Conclusion et perspectives

- Le solveur interFlow, basé sur isoAdvector avec la reconstruction PLIC-RDF5, est très bien adapté aux écoulements fortement capillaires.
- Les modèles dynamiques d'angle de contact (Cox et Kistler) permettent de mieux reproduire la dynamique réelle, à condition de les appliquer correctement à la ligne triple.
- La condition de glissement de Navier a un effet modéré mais significatif sur la dynamique des gouttes ; elle doit être soigneusement paramétrée.

### • Travaux futurs annoncés :

- Intégration du terme manquant  $\nabla u^t$  dans la condition de glissement de Navier.
- Extension aux géométries encore plus complexes : surfaces ondulées ou perforées.
- Retour aux problématiques de transfert de masse interfacial, dans le cadre des procédés catalytiques.

### • Résumé complémentaire sur les modèles d'angle de contact pour les méthodes VoF :

- isoAdvector PLIC-RDF5 permet de réduire significativement les courants parasites, notamment dans les écoulements capillaires.
- Validation supplémentaire nécessaire pour les modèles dynamiques de Cox et Kistler.
- Le modèle dynamique basé sur tanh (présent dans OpenFOAM) est à éviter.
- Les modèles dynamiques d'angle de contact donnent les meilleures prédictions.

### • Concernant les conditions de glissement de Navier

Peuvent modifier significativement la dynamique des gouttelettes.

### • Travaux en cours :

- Correction du terme  $\nabla u^t$  dans navierSlip.
- Exploration de géométries plus complexes.
- Reprise des études sur les transferts de masse interfacial (référence : thèse A. Tourbier, 2023).

# Implementation and Validation Case of Radiation-Particles Interaction – CHOPARD Etienne – Institut P prime



## Contexte et objectifs

Les interactions entre rayonnement thermique et milieux semi-transparents sont essentielles dans de nombreuses applications industrielles (Combustion ; Incendie ; Capture de CO<sub>2</sub>)

Elles reposent sur trois phénomènes fondamentaux : Émission, Absorption et Diffusion (scattering)

Ces phénomènes sont modélisés par l'équation du transfert radiatif (RTE) :

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\lambda}{\partial t} + \frac{\partial I_\lambda}{\partial s} + (\kappa_{a\lambda} + \kappa_{d\lambda}) I_\lambda = \kappa_{a\lambda} I_\lambda^0(T) + \kappa_{d\lambda} D_\lambda$$

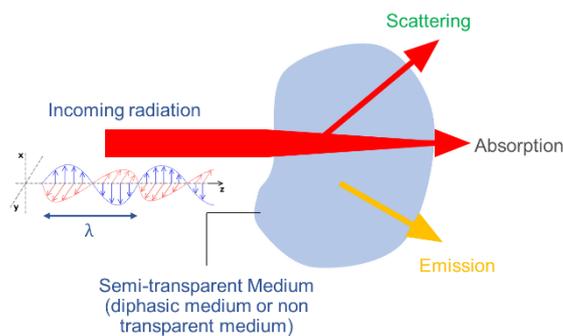
Avec :

$$D_\lambda(s, \Omega) = \int_{4\pi} I_\lambda(s, \Omega') \Phi_\lambda(\Omega', \Omega) d\Omega'$$

FVDM (Finite Volume Discrete Ordinate Method)

Study in direction  $\Omega$  :

$$\nabla [I_\lambda^{\Omega} \Omega] + (\kappa_{a\lambda} + \kappa_{d\lambda}) I_\lambda^{\Omega} = \frac{\Omega}{\pi} \left( \kappa_{a\lambda} I_\lambda^0 + \frac{E}{4} \right) + \sum_{\Omega'} \kappa_{d\lambda} I_\lambda^{\Omega'} \Phi(\Omega', \Omega) \Omega'$$



### FVDM

#### Principe de la méthode

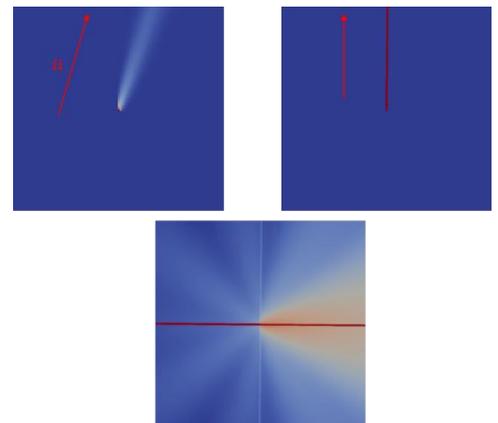
Implémentée dans le solveur fireFOAM de FM Global (version OpenFOAM v1912)

Cette méthode repose sur la combinaison de :

- La méthode des volumes finis (FVM)
- La méthode des ordonnées discrètes (DOM)

Elle consiste à résoudre l'équation du transfert radiatif (RTE) sur :

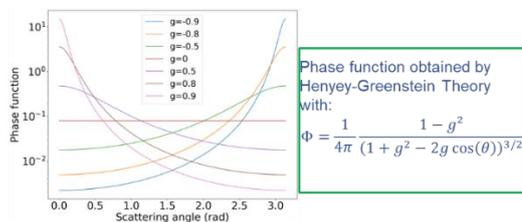
- Un nombre fini de directions angulaires  $n_\theta \times n_\varphi$
- Un nombre fini de longueurs d'onde  $n_\lambda$



Dans OpenFOAM, chaque intensité associée à une direction et une longueur d'onde est stockée dans un champ scalaire volScalarField.

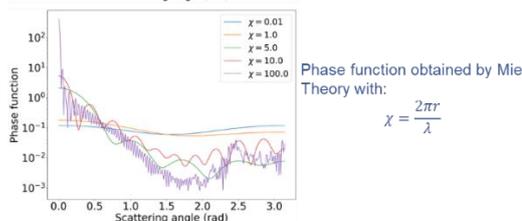
Cela implique la résolution de  $n_\theta \times n_\varphi \times n_\lambda$  équations indépendantes

#### Calcul des coefficients



Phase function obtained by Henyey-Greenstein Theory with:  

$$\Phi = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g \cos(\theta))^{3/2}}$$



Phase function obtained by Mie Theory with:  

$$\chi = \frac{2\pi r}{\lambda}$$

Ces grandeurs dépendent du rayon des particules ( $r$ ) ; de la longueur d'onde ( $\lambda$ ) et des indices optiques complexes du matériau ( $m + ik$ )

#### Phase continue

Données tabulées disponibles pour de nombreux matériaux.

#### Phase dispersée (particules) : Théorie de Henyey-Greenstein

Simplification de la fonction de phase par l'utilisation d'un paramètre unique permettant de moduler la diffusion vers l'amont ou l'aval.

#### Phase dispersée (particules) : Théorie de Mie

Solution analytique des équations de Maxwell permettant de calculer :

- Les coefficients d'efficacité (liés directement à  $\kappa_a$  et  $\kappa_d$ )
- La fonction de phase ( $\Phi$ : proportion du rayonnement diffusé d'une direction  $\Omega$  vers une direction  $\Omega'$ )

## Intégration dans le solveur

### Calculs basés sur la théorie de Mie

La théorie de Mie fournit une solution analytique des équations de Maxwell permettant de représenter avec précision l'interaction entre rayonnement et particules.

Du fait de la forte dépendance des résultats aux rayons des particules et à la longueur d'onde, les coefficients associés (absorption, diffusion, fonction de phase) sont :

	$\lambda_1$	...	$\lambda_n$
$r_1$	$Q_{abs\ 11}$ $Q_{d\ 11}$ $\phi_{11}$		$Q_{abs\ 1n}$ $Q_{d\ 1n}$ $\phi_{1n}$
...			
$r_n$	$Q_{abs\ n1}$ $Q_{d\ n1}$ $\phi_{n1}$		$Q_{abs\ nn}$ $Q_{d\ nn}$ $\phi_{nn}$

- Précalculés via un script Python,
- Tabulés pour des raisons d'efficacité et de coût de calcul,
- Chargés dans le solveur via un programme en C++ qui les convertit en vecteurs utilisables dynamiquement.

La formule utilisée pour le calcul local des coefficients est :

$$\kappa_{i,dispr_{mean}\lambda_{mean}} = \frac{N_{part}}{V_{cell}} \pi r_{mean}^2 Q_{i,disp\lambda_{mean}}(r_{mean}, \lambda_{mean})$$

où :  $N_{part}$  est le nombre de particules dans la maille,  $V_{cell}$  est le volume de la maille et  $Q$  est le coefficient d'efficacité issu de la théorie de Mie.

### Modèle de distribution "readValue" pour l'injection lagrangienne

Une extension du modèle d'injection Lagrangien ManualInjection a été réalisée.

Elle permet désormais d'injecter des particules avec des diamètres personnalisés, lus depuis un fichier externe (distribution readValue).

Cela améliore la reproductibilité expérimentale et la représentation de cas réalistes.

Fonctionnalités ajoutées :

- Position de l'injection déjà gérée par ManualInjection → nouvelle gestion centrée sur les diamètres ;
- La fonction sample() (génération aléatoire selon une loi) est conservée pour les autres modèles de distribution ;
- Introduction d'une fonction read() pour toutes les distributions, renvoyant :
  - {sample()} dans les autres modèles que readValue ;
  - diameters pour le modèle readValue.
- Modification de sample() pour le modèle readValue : sample(): return read()[0]

```
sizeDistribution
{
    type readValue;
    #include "reactingCloud1Diameters"
}
```

In a blank "reactingCloud1Diameters" file :

```
readValueDistribution
{
    diameters
    ( d1 d2 ..... dn )
}
```

Modification Manual injection :

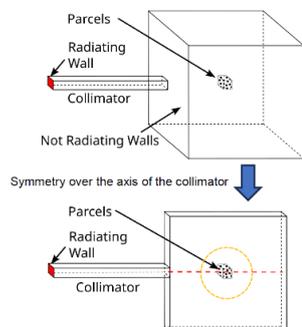
```
forall(diameters_i)
{
    diameters_[i] = sizeDistribution_->sample();
}
```



```
forall(diameters_i)
{
    if (i > sizeDistribution_->read().size()-1)
        {diameters_[i] = sizeDistribution_->read()[0];}
    else
        {diameters_[i] = sizeDistribution_->read()[i];}
}
```

## Cas de validation

### Objectif et principe



Afin de vérifier la validité de l'implémentation du modèle de transfert radiatif couplé aux particules selon la théorie de Mie, un cas test a été construit sur un domaine bidimensionnel simplifié mais représentatif. Celui-ci comprend :

- Un mur noir émetteur à 2 000 K (paroi parfaitement rayonnante,  $\epsilon = 1$ ) ;
- Des parois totalement absorbantes ( $\alpha = 1$ ) pour éliminer toute réflexion parasite ;
- Un collimateur orienté selon une direction bien définie, permettant de restreindre l'entrée du rayonnement à une seule direction du schéma angulaire FVDOM, ce qui simplifie considérablement le système à résoudre ;
- Un média non émetteur (ni gaz ni particules) pour ne considérer que l'atténuation et la diffusion du faisceau entrant.

Les particules sont placées dans une unique maille au centre du domaine (110 × 110 mailles), et regroupées dans un unique paquet lagrangien. Ce choix vise à limiter les effets d'interactions croisées entre rayons diffusés. Le domaine est symétrique par rapport à l'axe du collimateur, et un grand nombre de directions (360 en 2D) est utilisé pour garantir une résolution angulaire fine.

L'équation est ainsi simplifiée.

$$\nabla \cdot [J_{\lambda}^{\Omega}] + (\kappa_{a\lambda} + \kappa_{d\lambda}) J_{\lambda}^{\Omega} = \frac{\Omega}{\pi} \left( \kappa_{a\lambda} I_{\lambda}^{\Omega} + \frac{E}{4} \right) + \sum_{\Omega'} \kappa_{d\lambda} I_{\lambda}^{\Omega'} \Phi(\Omega', \Omega) \Omega'$$

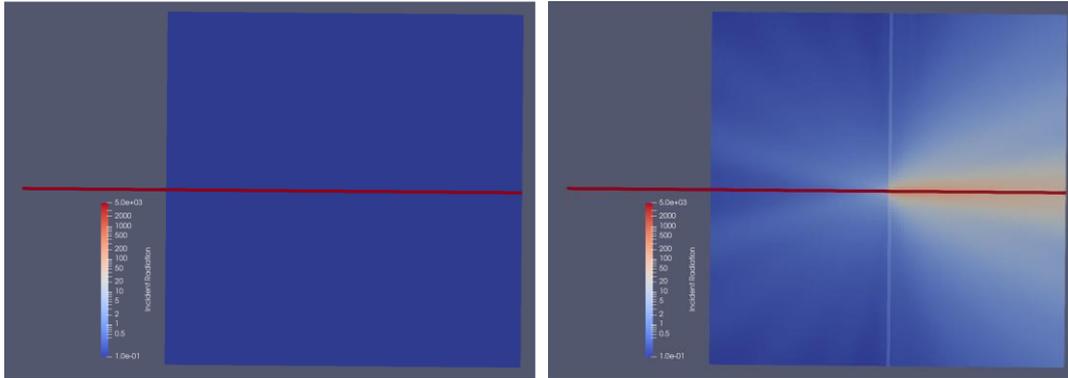
Non emitting media/particle for the validation  
Interaction from all directions + goal of the development

Avec 1 direction du rayonnement entrant :

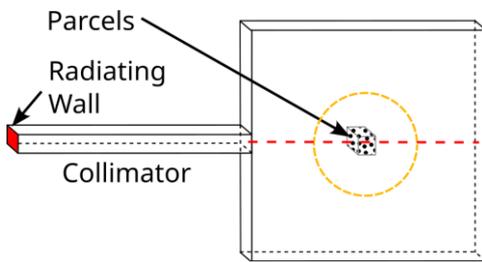
$$\nabla[I_{\lambda}^{\Omega}] + (\kappa_{a\lambda} + \kappa_{d\lambda})I_{\lambda}^{\Omega} = \kappa_{d\lambda}I_{\lambda}^{\Omega}\Phi(\Omega, \Omega)\Omega \quad \text{dans la direction du rayonnement entrant}$$

$$\nabla[I_{\lambda}^{\Omega'}] = \kappa_{d\lambda}I_{\lambda}^{\Omega}\Phi(\Omega, \Omega')\Omega' \quad \text{dans toute direction autre que par le rayonnement entrant}$$

$\Omega$  direction du rayonnement entrant et  $\Omega'$  direction d'étude



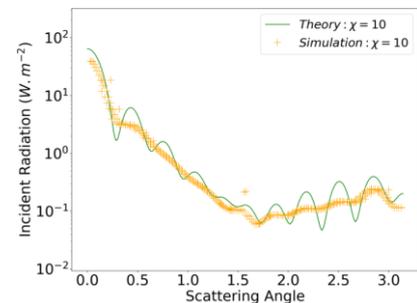
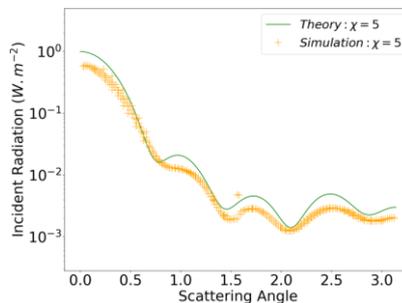
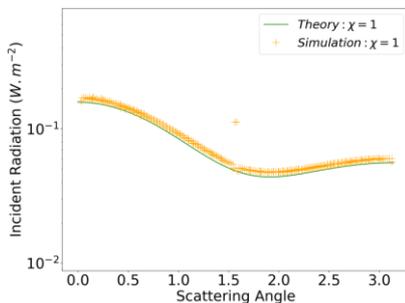
### Paramètres de test



Trois configurations ont été testées, chacune correspondant à une valeur distincte du paramètre adimensionnel  $\chi = \frac{2\pi r}{\lambda}$ , caractérisant le régime d'interaction onde/particule :

Valeur de $\chi$	Rayon $r$ ( $\mu\text{m}$ )	Longueur d'onde $\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Nombre de particules
1	3	1,885	$10^5$
5	3	3,770	$10^5$
10	3	18,85	$10^5$

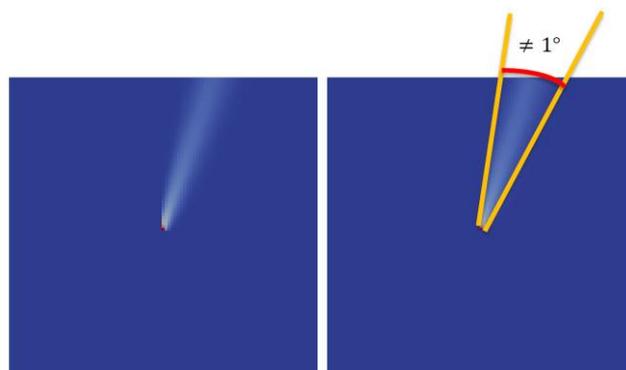
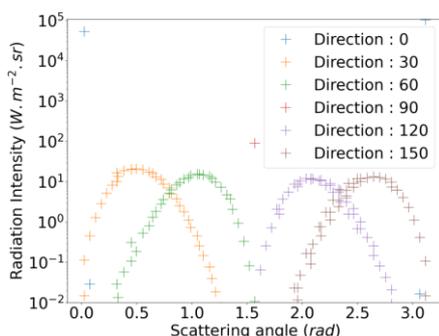
Ces cas permettent d'évaluer la cohérence de la modélisation sur une large gamme de régimes optiques.

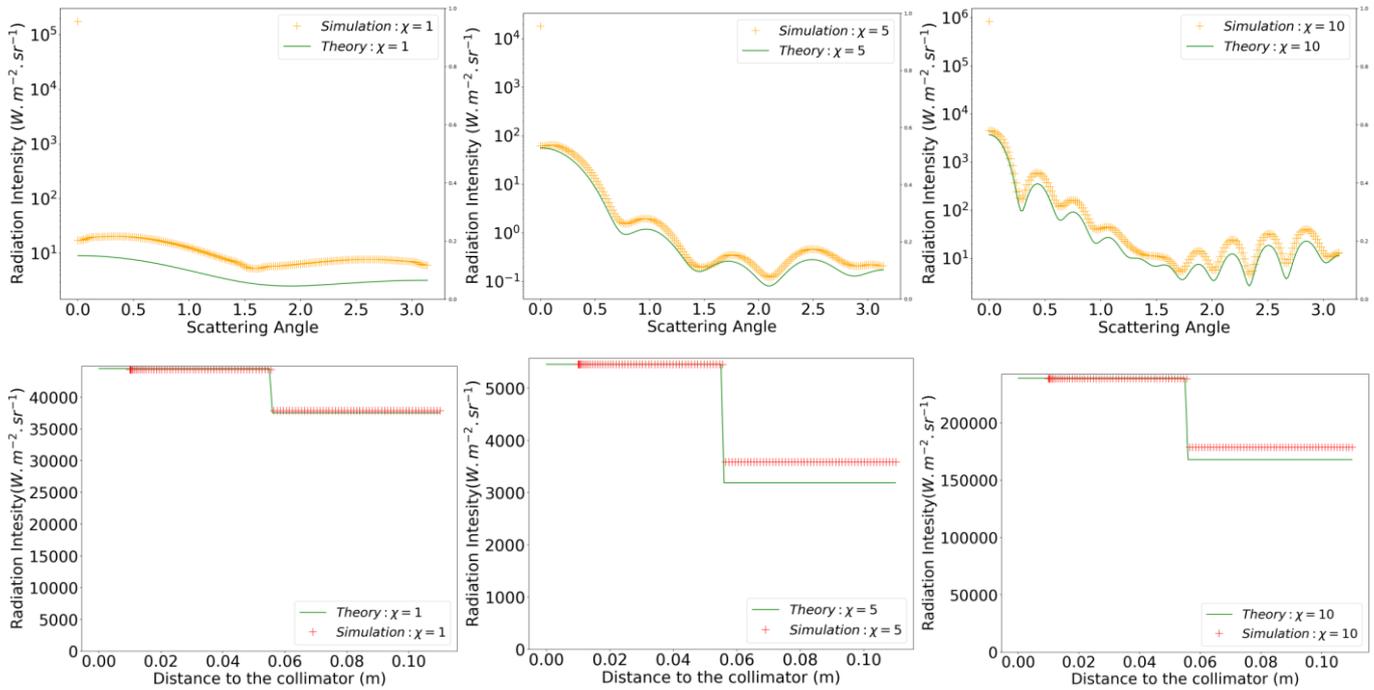


### Résultats observés et diffusion numérique

Les simulations montrent :

- Une diffusion latérale bien reproduite : l'intensité rayonnée dans les directions perpendiculaires à celle du faisceau est en accord avec les prédictions issues de la théorie de Mie.
- Une atténuation du faisceau principal sous-estimée dans l'axe du collimateur : bien que globalement correcte, une légère sous-estimation de l'intensité résiduelle est constatée. Cette divergence fait l'objet d'investigations complémentaires.
- Une diffusion numérique angulaire : due à la discrétisation angulaire propre à la méthode FVDM. En particulier, une perte de symétrie est constatée lorsque les directions discrètes ne coïncident pas exactement avec l'axe du collimateur ( $\neq 1^\circ$ ), phénomène typique de la méthode.





## Perspectives et développements futurs

Deux axes principaux structurent la suite des travaux :

- **Étude de la ségrégation turbulente**

Un cas test 3D est en cours de préparation à partir de données DNS générées avec le code ASPHODELE. L'objectif est de simuler un « mur de brume » (spray dense) et d'étudier comment la turbulence affecte la répartition spatiale des particules, ainsi que son influence sur la transmission du rayonnement à travers le milieu.

Cette étape permettra de valider l'approche dans des configurations réalistes et représentatives de situations industrielles complexes.

- **Parallélisation du solveur**

La méthode FVDOM, bien qu'efficace, engendre un coût de calcul très élevé en raison du grand nombre de directions et de longueurs d'onde traitées. Une parallélisation du solveur est envisagée via OpenMP, en exploitant l'indépendance des longueurs d'onde pour répartir les calculs.

Toutefois, les dépendances entre directions imposent des contraintes supplémentaires, notamment des boucles imbriquées et des échanges de données non triviales, rendant la parallélisation moins directe.

## Application industrielle visée

Ce travail de recherche s'inscrit dans une problématique concrète de protection incendie. L'objectif est d'évaluer et de concevoir des rideaux de particules d'eau, disposés entre une source de chaleur intense (feu) et une zone à protéger (personnel, équipements sensibles).

Ces rideaux doivent atténuer le rayonnement thermique transmis, grâce à l'absorption et à la diffusion effectuées par les gouttelettes en suspension. Le modèle développé dans OpenFOAM permet de prédire l'efficacité de ces dispositifs, en fonction des caractéristiques des particules (taille, concentration, matériaux) et du spectre du rayonnement.

Il constitue donc un outil de simulation prédictive, orienté vers la conception et l'optimisation de stratégies de protection thermique passive dans des environnements à haut risque.

# Personal perspectives of OpenSource versus Commercial and In-house developments – MENDONÇA Fred – ifMniLtd

Contact : [fred@ifMni.com](mailto:fred@ifMni.com)

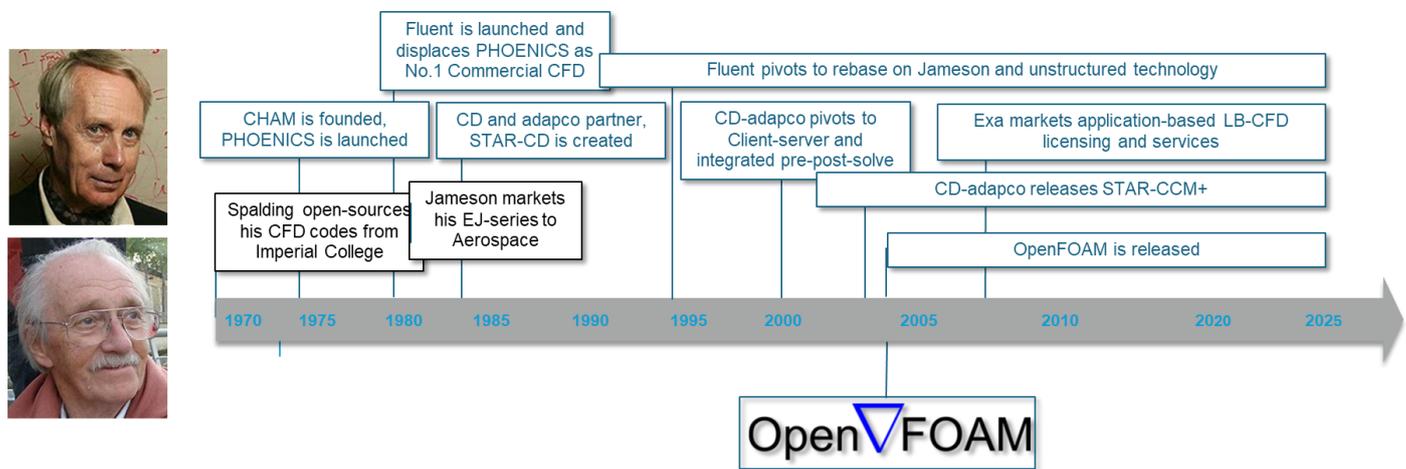


## Introduction : une histoire (volontairement) biaisée de la CFD

Fred Mendonça, fort de plus de 35 ans d'expérience dans le domaine de la mécanique des fluides numérique (CFD), retrace son parcours à travers l'évolution des modèles de développement logiciel en CFD. Il rappelle que de nombreux codes aujourd'hui commerciaux (comme Fluent ou Phoenix) ont vu le jour dans des milieux académiques et étaient initialement distribués librement.

« La CFD commerciale a commencé comme de l'open source » : les premiers codes étaient conçus avec des interfaces permettant aux utilisateurs d'ajouter ou de remplacer des éléments du cœur du code.

Cette genèse académique rappelle que l'opposition entre open source et solutions propriétaires est souvent plus floue qu'on ne le pense.



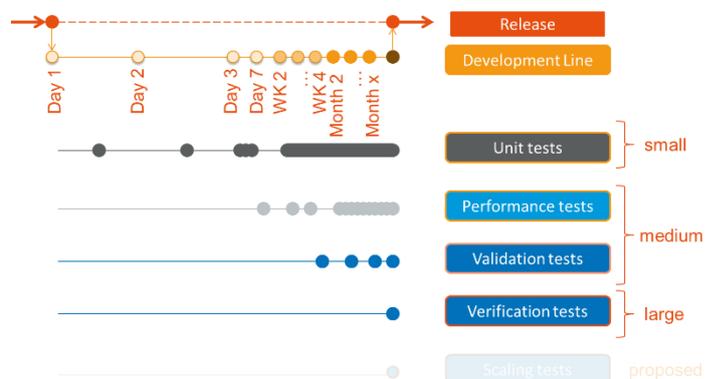
## L'assurance qualité : pilier de toute stratégie de développement

Nécessité d'une démarche de qualité rigoureuse, commune à tous les modèles de développement :

1. Écrire ce que l'on fait : documenter les instructions comme référence.
2. Faire ce que l'on a écrit : démontrer la conformité avec les instructions, via des preuves auditées.
3. Mesurer les résultats : précision, rapidité, usage mémoire.
4. Améliorer : optimiser les performances et mettre à jour la documentation.

Boucles de tests (test loops) :

- Petite boucle : tests unitaires automatisés (exécutés chaque nuit).
- Boucle moyenne : cas tutoriels et validations simples (~2 jours d'exécution).
- Grande boucle : cas clients en transitoire et stationnaire (jusqu'à 1 semaine).



Cette approche assure la régression minimale des versions, la validation des nouvelles fonctionnalités, et renforce la position de « fournisseur ou partenaire de confiance » auprès des utilisateurs.

## Comparaison des modèles économiques

- Commercial - customer makes a license fee investment which is split into

Comparaison structurée entre trois modèles de développement logiciel en CFD :

Critère	Modèle Commercial	Modèle In-house	Modèle Open Source
Motivation principale	Génération de revenus	Optimisation du produit interne	Co-développement, partage de coûts
Propriété intellectuelle (IP)	Fermée, propriétaire	Fermée, mais interne	Ouverte, accessible et modifiable
Support utilisateur	Standardisé, parfois automatisé	Interne, réactif, expert	Personnalisé, selon niveau de sponsoring
Développement	Par retour sur investissement	Focalisé sur le besoin interne	Piloté par les sponsors utilisateurs
Coût pour l'utilisateur	Licence annuelle élevée	Non commercialisable	Coût neutre (contribution = fonctionnalité)
Retour vers la communauté	Limité (IP protégée)	Absent	Possible et encouragé

L'approche open source est économiquement compétitive : les études montrent un coût de 10 à 30 % par rapport à une licence commerciale équivalente.

Mais cela suppose une implication active de l'utilisateur (financement, tests, retours) : il faut être acteur du système, non un « parasite ».

## Fondements personnels : les valeurs derrière l'open source

Le speaker partage ses principes éthiques, tirés de son engagement dans le monde open source :

- Intégrité : faire ce que l'on dit, ou rectifier rapidement.
- Authenticité : considérer l'ensemble, avec ses imperfections.
- Conscience collective : faire partie de quelque chose de plus grand que soi.
- Transmission : nourrir l'écosystème pour les générations futures.

Ces valeurs renforcent l'idée que l'open source est aussi un modèle de société, basé sur la transparence, la responsabilité et la coopération.

## Une fin ouverte : la CFD comme outil prédictif

Le speaker conclut avec une démonstration de simulation urbaine sur Hampton (Virginie, USA), intégrant données météo, topographiques et physiques.

Cas d'usage envisagé : La logistique par drones, nécessitant des simulations aérodynamiques plus rapides que le temps réel, pour anticiper les trajectoires face au vent, aux obstacles urbains et aux conditions climatiques.

Cela implique des avancées sur :

- La vectorisation (GPU),
- La parallélisation (OpenMP, CUDA, OpenACC),
- L'IA (réduction de modèle, machine learning),
- Et potentiellement le calcul quantique à plus long terme.

« La CFD de demain ne sera plus un outil de post-analyse, mais un composant actif des systèmes intelligents. »

## Development and validation of phase-change models in OpenFOAM v11 – CANTIANI Antonio – VKI



Antonio Cantiani, chercheur au VKI, a présenté ses développements récents autour de la modélisation des changements de phase (évaporation/condensation) dans des conditions cryogéniques, avec une application directe aux réservoirs d'hydrogène liquide et d'azote liquide. Ce travail vise à mieux prédire la dépressurisation et la pressurisation transitoire de systèmes fermés, notamment dans les domaines de la propulsion spatiale ou des systèmes embarqués à hydrogène.

Ce projet s'inscrit dans des initiatives liées à la transition énergétique, et en particulier à la montée en puissance de l'hydrogène dans les secteurs maritime et aéronautique.

### Objectifs du projet

- Modéliser les phénomènes d'évaporation/condensation dans des réservoirs fermés contenant de l'azote ou de l'hydrogène liquide.
- Reproduire les effets de dépressurisation et pressurisation dans des conditions cryogéniques complexes (propulsion, transport hydrogène).
- Intégration dans OpenFOAM v11 via une architecture modulaire facilitant l'ajout de modèles physiques.

### Développements réalisés

- Création d'une bibliothèque dédiée intégrée au module compressibleMultiFluid.
- Implémentation de plusieurs modèles de source :
  - Modèle E : simple, basé sur la différence de température.
  - Modèle  $\nabla\alpha$  : intègre le gradient de fraction volumique.
  - Modèle simplifié : version plus directe pour interfaces peu résolues.
- Modélisation des transferts thermiques fluide/solide et pressurisation dynamique.

### Validation expérimentale

- Test sur cryostat rempli d'azote liquide ( $\sim 70$  K) avec trois phases :
  1. Remplissage.
  2. Pressurisation active (injection de gaz).
  3. Oscillation contrôlée du réservoir (sloshing).
- Instrumentation par capteurs de température et pression.
- Simulation CFD focalisée sur la cellule centrale (maillage  $\sim 1$  mm).
- Bon accord simulation/mesure sur les pressions et températures pendant les phases transitoires.

### Choix techniques

- Utilisation de LES pour modéliser les écoulements diphasiques transitoires (RANS inadapté).
- Importation du maillage via Cubit (généralisé sous ICEM).
- Calibration nécessaire des coefficients de source, surtout en fonction de la température du solide.

### Perspectives de développement

- Ajout d'un modèle multi-régions (gaz/liquide séparés sans VOF).
- Modélisation de l'ébullition et de la nucléation de bulles.
- Simulation d'injection liquide via traqueurs lagrangiens.
- Génération de corrélations 0D/1D à partir des simulations pour intégration dans les outils systèmes.

### Limitations et remarques

- Hypothèse de quasi-équilibre valable dans le cas du sloshing lent (temps caractéristiques  $\sim 120$  s).
- Incertitudes sur la température des parois solides dans l'expérience.
- Sensibilité du modèle à la formulation  $\nabla\alpha$ , surtout en cas de maillage grossier ou géométrie complexe.



# Numerical simulation of a swirling flow in an industrial cyclone separator using hybrid turbulence models – BENZAZA Ishak – INSA / LAMIH

Mustafa Ishak BENZAZA <sup>a</sup> ; David UYSTEPRUYST <sup>a,b</sup> ; François BEAUBERT <sup>a,b</sup> ; Damien MERESSE <sup>a,b</sup> ; Céline MORIN <sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Univ. Polytechnique Hauts-de-France, CNRS UMR 8201 – LAMIH, 59313 Valenciennes, France

<sup>b</sup> INSA Hauts-de-France, 59313 Valenciennes, France

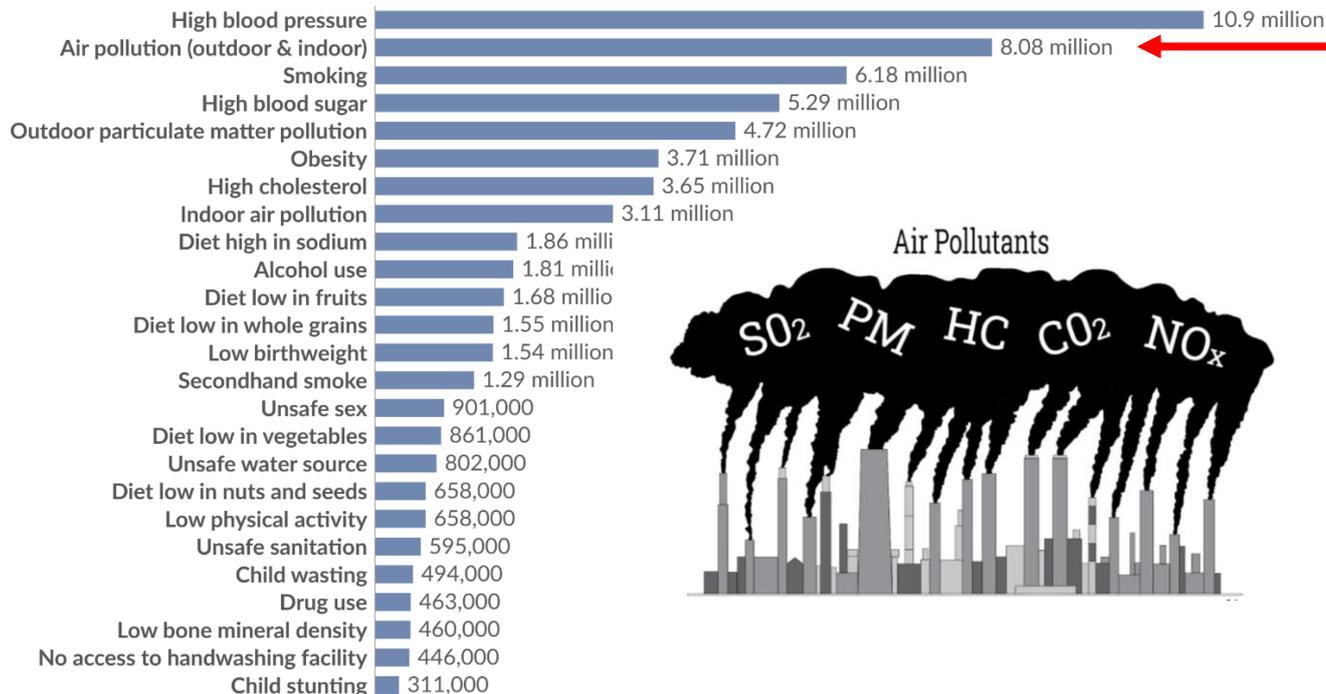
## Contexte

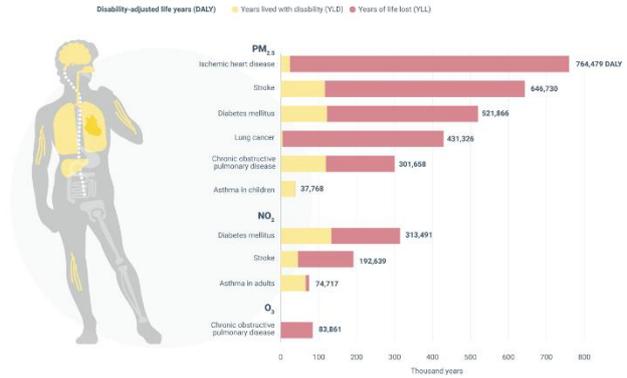
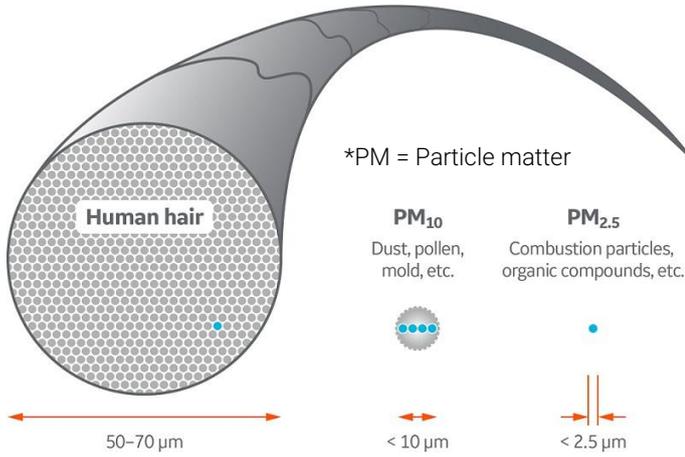
- Pollution de l'air : les particules fines (PM2.5) sont responsables de plus de 8 millions de décès prématurés/an (IHME, 2024).
- Trois grands types de dispositifs industriels de captation :
  - Filtres à manches : haute efficacité mais coût élevé et maintenance contraignante.
  - Épurateurs venturi : efficaces pour les gaz mais peu adaptés aux grands débits.
  - Cyclones : robustes, économiques, sans pièce mobile, mais moins performants pour les très fines particules.
- Objectif global : optimiser les performances des séparateurs cycloniques industriels grâce à la simulation numérique d'écoulements tourbillonnaires.

## Deaths by risk factor, World, 2021

Our World in Data

The estimated annual number of deaths attributed to each risk factor<sup>1</sup>. Estimates come with wide uncertainties, especially for countries with poor vital registration<sup>2</sup>.

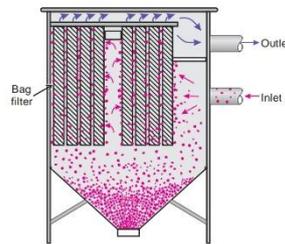




## Dispositifs industriels de captation

### Filtere à manches / dépoussiéreur

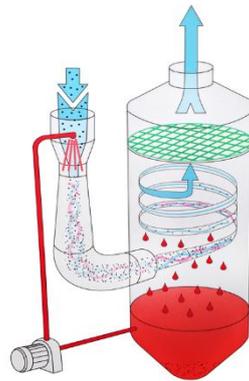
- + Taux extrêmement élevé de particules grossières et fines
- + Disponible dans un grand nombre de configurations



- Exigences relativement élevées en matière d'entretien.
- Limité à une température de fonctionnement < 300 °C

### Venturi scrubber / épurateur Venturi

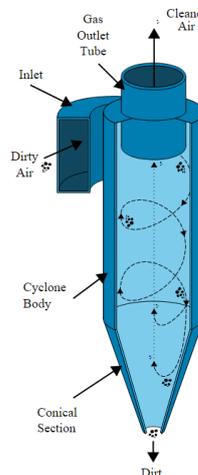
- + Rendement d'élimination élevé
- + Les composants gazeux sont absorbés



- Pertes de charges élevées
- Erosion

### Séparateur cyclonique

- + Faible coût
- + Simple, pas de pièces mobiles
- + Capacités larges de température et de pression



- Collecte inefficace des petites particules
- Augmentation de l'efficacité de la collecte uniquement avec une chute de pression élevée

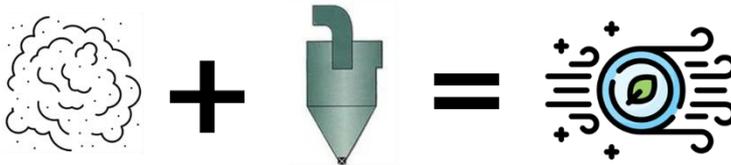
## Séparateur cyclonique

Le fonctionnement du cyclone repose sur les effets de la force centrifuge générée par l'écoulement tourbillonnaire.

Les particules solides présentes dans l'air (poussières, polluants) sont expulsées vers les parois du cyclone sous l'effet de cette force, puis récupérées par gravité.

Ce principe permet de séparer efficacement les particules sans recours à des filtres ou dispositifs mécaniques complexes.

Le cyclone constitue donc une solution robuste, économique et adaptée aux environnements industriels pour le traitement de grands volumes d'air chargé en particules.



## Objectifs de recherche

### • Étape 1 – Écoulement fluide seul :

- Évaluer la capacité des modèles de turbulence hybrides à simuler des écoulements tourbillonnaires très turbulents.
- Implémenter et tester sous OpenFOAM différents modèles hybrides (VLES, PANS, DES).
- Étudier la sensibilité au maillage.
- Comparer aux mesures expérimentales issues du banc LAMIH.

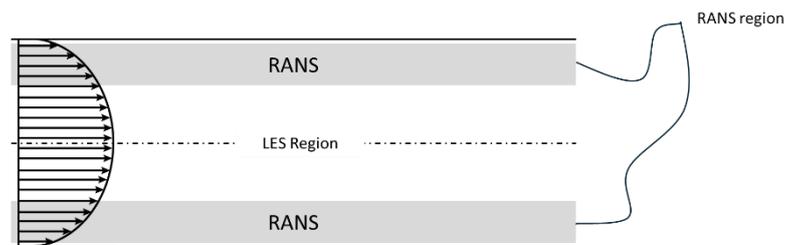
### • Étape 2 – Écoulement diphasique (prévu) :

Étendre l'analyse à la simulation fluide + particules solides.

## Modélisation numérique

Modèles de turbulence hybrides testés :

- VLES (Very Large Eddy Simulation)
- PANS (Partially Averaged Navier-Stokes)
- DES (Detached Eddy Simulation)



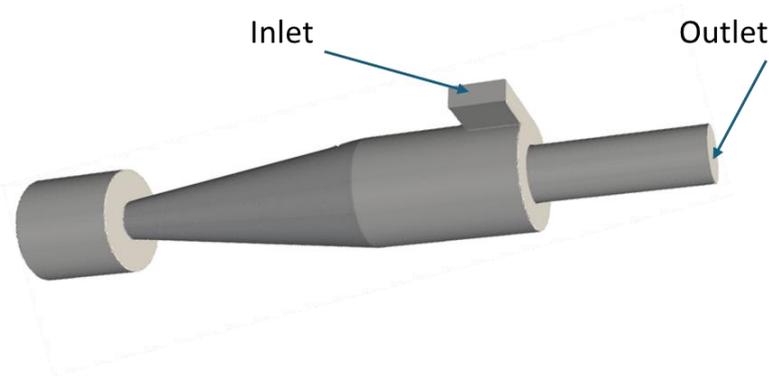
Detached Eddy Simulation (DES)

$$\bar{d} = \min(d, C_{DES}\Delta)$$

Very Large Eddy Simulation (VLES)	Partially Averaged Navier Stokes (PANS)
$F_r = \frac{\int_{L_k}^{L_c} E(L)dL}{\int_{L_k}^{L_i} E(L)dL}$	$f_k = \frac{k}{k_{tot}}$
$L_c$ , $L_i$ , and $L_k$ : échelles caractéristiques de longueur turbulente (coupure, intégrale et de Kolmogorov)	$k$ and $k_{tot}$ : énergie cinétique turbulente modélisée et totale

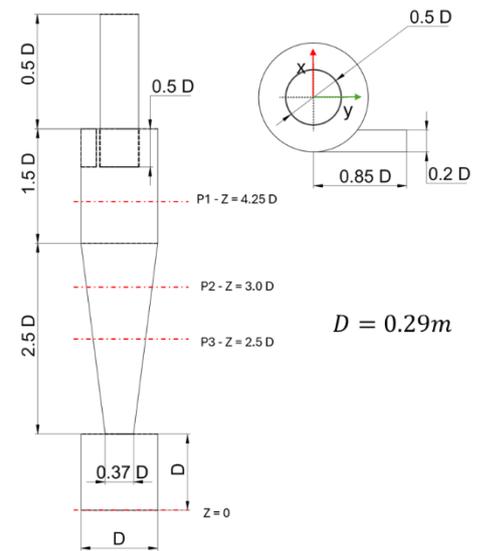
## Configuration des simulations

Géométrie fournie par STIVEN Industries, partenaire industriel du projet.



$$Re = 2.8 \times 10^5$$

Boundary condition	Value
Inlet	$U_{in}=14 \text{ m/s}$
Outlet	$p : \text{totalPressure}, p_t=0$ $U : \text{pressureInletOutletVelocity}$
Wall	$\nabla p=0$ $U=0$

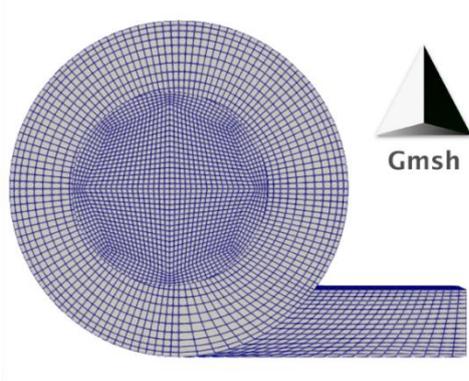


$$D = 0.29 \text{ m}$$

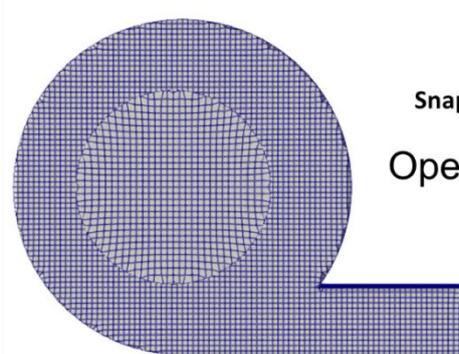
### Mesh dependency

Implémentation OpenFOAM, maillages générés via GMSH (non structuré) et SnappyHexMesh (structuré).

Structured Mesh – 0.88 M cells



Unstructured Mesh – 0.89 M cells



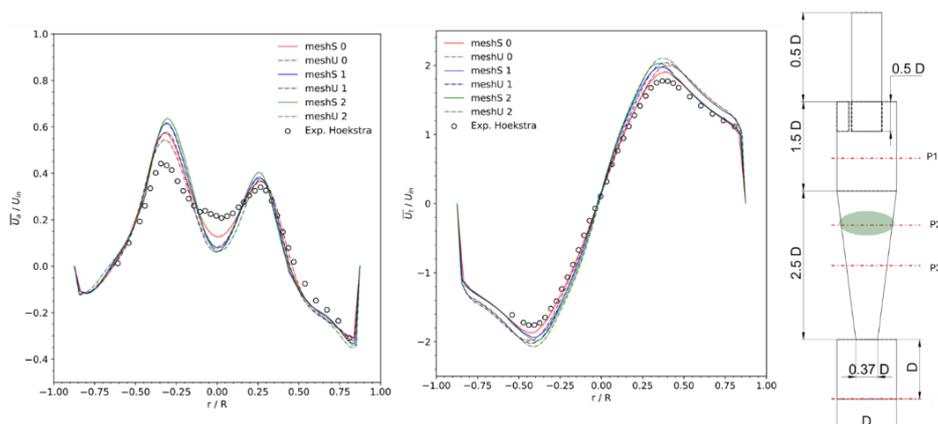
SnappyHexMesh  
OpenFOAM

Model	Structured			Unstructured		
	0	1	2	0	1	2
Cells number	0.53 M	0.88 M	1.60 M	0.53 M	0.89 M	1.65 M
Mean $y^+$	142	113	95	108	99	82

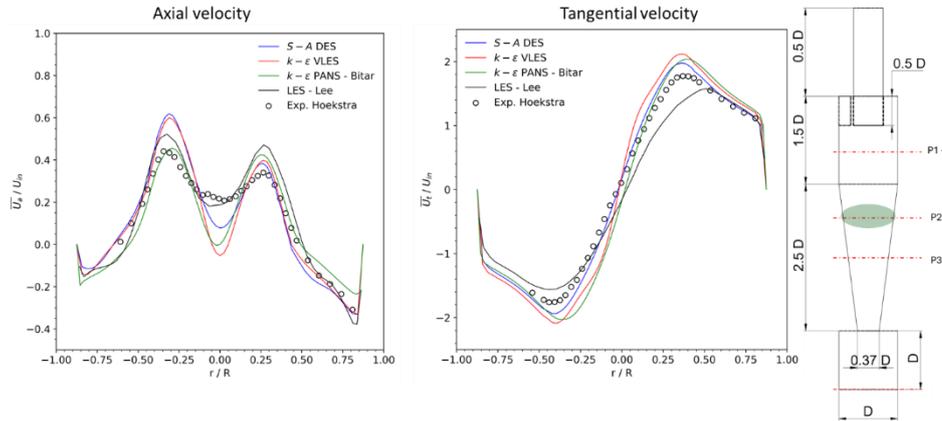
## Résultats numériques

### Sensibilité au maillage

Peu d'impact significatif sur les profils moyens de vitesse. Le maillage structuré de 0.88 M cellules a été retenu pour les calculs.



### Comparaison des modèles



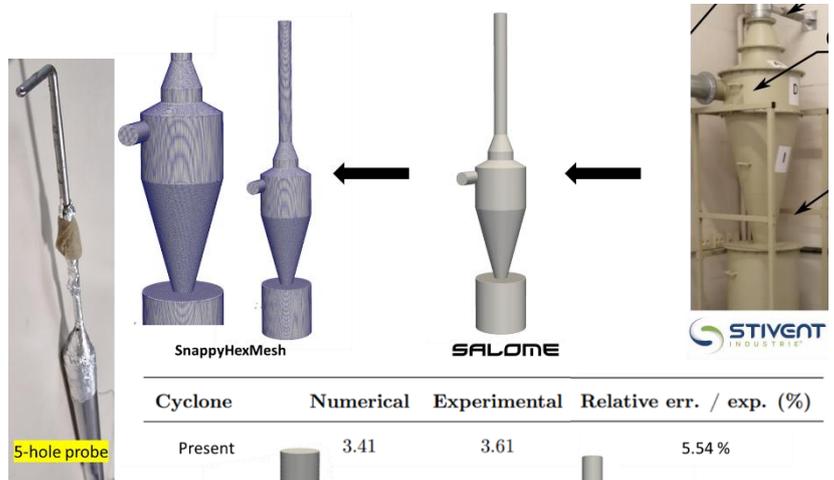
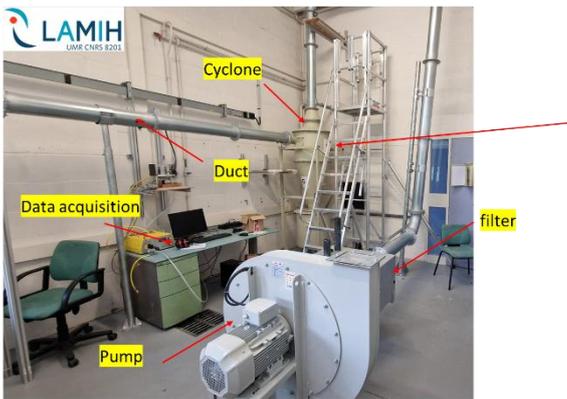
Model	Eu (-)	Relative err. / exp. (%)
S-A DES	4.82	2.27
$k - \epsilon$ VLES	5.36	8.72
$k - \epsilon$ PANS [29]	4.99	1.22
LES - Lee [27]	4.45	9.73
Experimental [12]	4.93	-

DES donne les résultats les plus cohérents avec les données expérimentales.

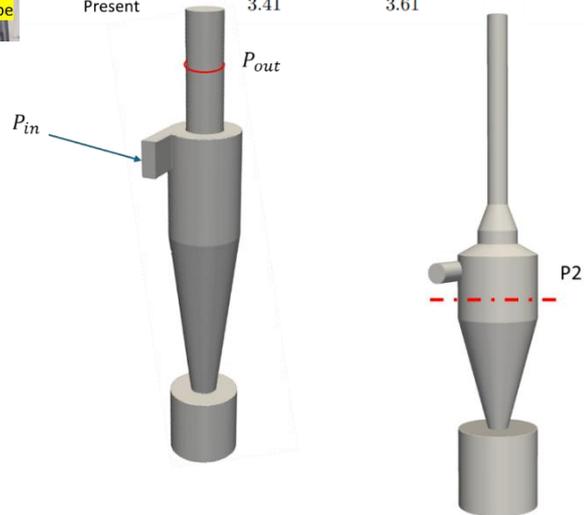
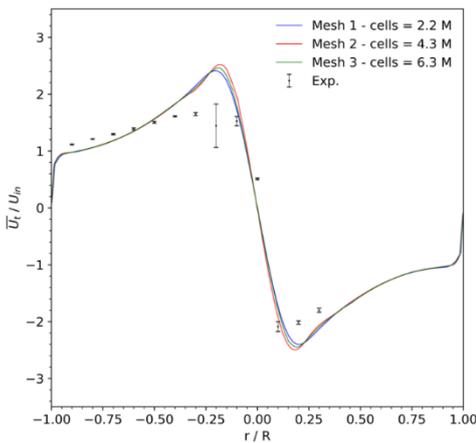
VLES et PANS présentent des comportements non physiques dans certaines zones (instabilités, transitions floues entre LES et RANS).

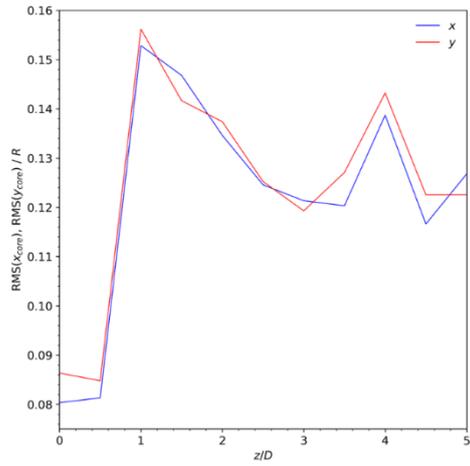
La prédiction de la perte de charge (via le nombre d'Euler  $Eu = \frac{\Delta p}{0.5 \rho u_{in}^2}$ ) est fidèle à l'expérience.

• Le cyclone industriel aujourd'hui



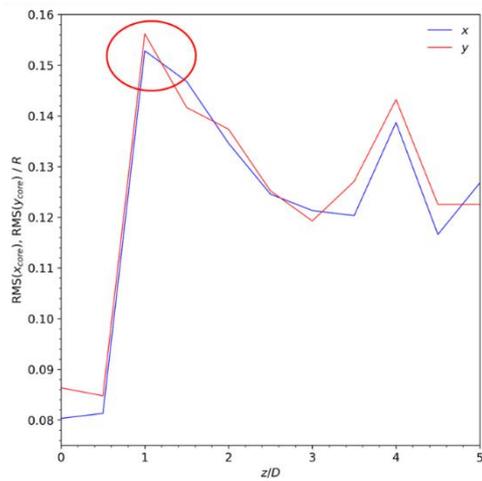
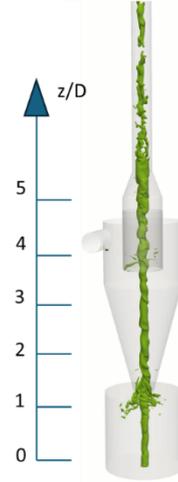
Cyclone	Numerical	Experimental	Relative err. / exp. (%)
Present	3.41	3.61	5.54 %



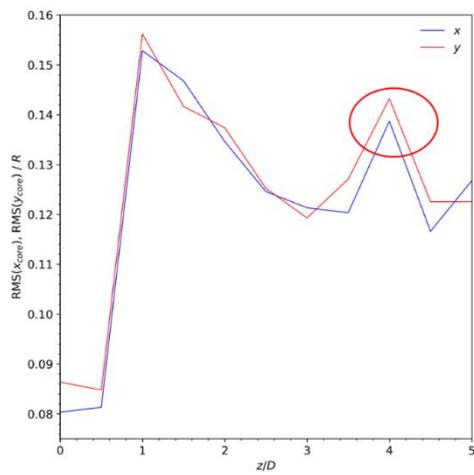
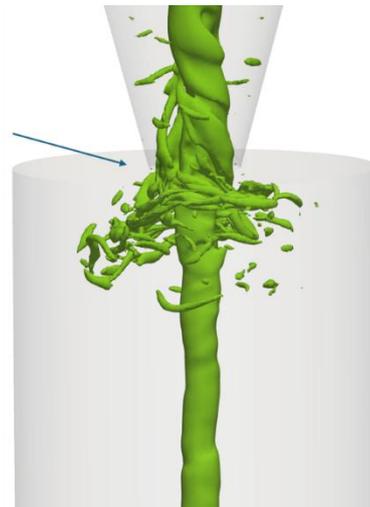


$$f(U_t = 0) \rightarrow P(x_0, y_0)$$

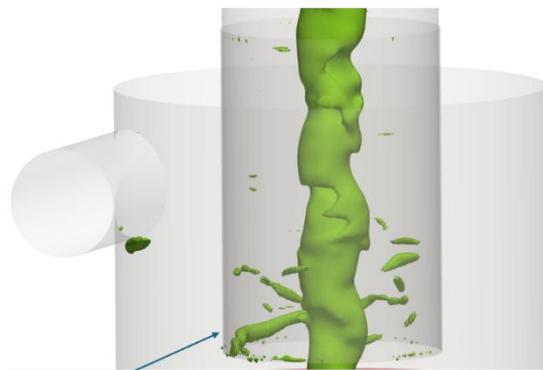
Q criterion



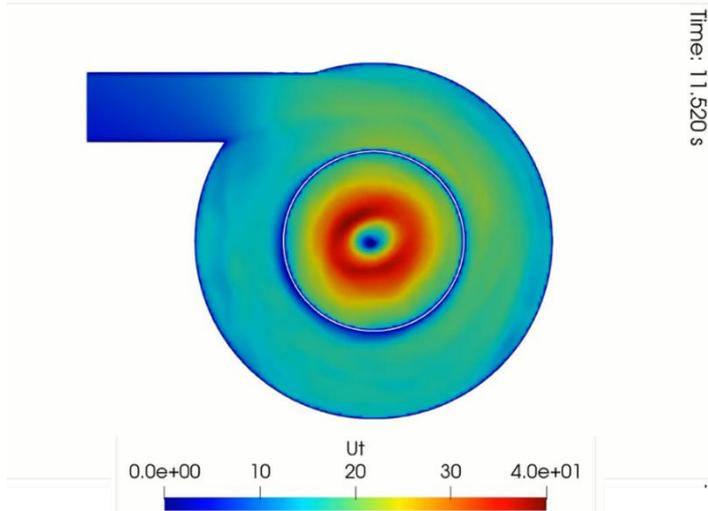
z/D = 1



z/D = 4



• Analyse du cœur tourbillonnaire



Étude via le critère Q et les profils de vitesse tangentielle.

Bonne localisation du vortex central sans interaction parasite avec les parois.

**Conclusion**

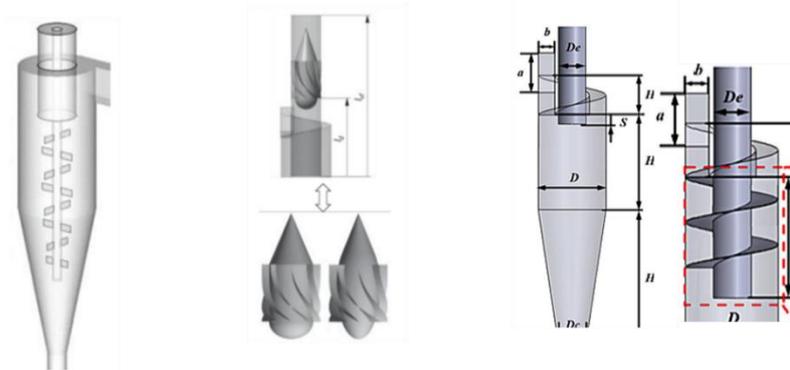
- DES s'avère le plus fiable pour simuler les écoulements tourbillonnaires dans les cyclones industriels.
- Bon accord entre simulation et données expérimentales, tant en termes de vitesse que de chute de pression.
- Le banc d'essai permet une validation expérimentale rigoureuse et comparative sur différentes géométries.

**Perspectives**

Simulation diphasique fluide + particules solides.

Intégration de modèles de dispersion turbulente pour mieux prédire le transport particulaire.

Étude de contrôles passifs (déflecteurs, géométrie d'entrée) pour optimiser le compromis efficacité / perte de charge.



# Physics-based localized data assimilation methodology coupled with OpenFOAM – ER Sarp – Arts & Métiers

## Contexte et motivation

- Objectif : améliorer la précision des simulations numériques d'écoulements turbulents en corrigeant les modèles à l'aide de données expérimentales ou DNS.
- Problème : les modèles de CFD sont souvent approchés et sources d'erreurs ; il est nécessaire de les corriger efficacement sans surcoût numérique prohibitif.

## Méthodologie développée

- Basée sur l'Ensemble Kalman Filter (EnKF), adapté à des systèmes non linéaires pour intégrer des observations et corriger les simulations.
- Introduction d'une localisation spatiale : réduction des interactions entre zones éloignées pour maintenir la structure des matrices de covariance.

## Fonction de localisation innovante

- Nouvelle fonction dynamique, physiquement fondée :
  - Orientation alignée avec l'écoulement local.
  - Rayons adaptatifs selon l'anisotropie du champ de vitesse (fonction de l'autocorrélation).
- Avantage : assimilation mieux ciblée, plus efficace dans les zones instationnaires ou anisotropes.

## Implémentation et couplage avec OpenFOAM

- Intégration dans l'environnement DA2 via le gestionnaire de couplage CONS.
- Fonctionnement en runtime, sans redémarrage des cas simulés.
- Parallélisation : chaque membre EnKF est une simulation indépendante OpenFOAM.

## Cas d'étude et validation

- **Cas 1 : écoulement 2D autour d'un cylindre carré ( $Re = 150$ )**
  - ↪ Forte réduction de l'erreur en quelques itérations ; convergence vers DNS.
- **Cas 2 : écoulement 3D turbulent autour d'un cylindre circulaire ( $Re = 3900$ )**
  - ↪ Division par 3 du coût de calcul par rapport à une méthode d'hyperlocalisation classique.
  - ↪ Meilleure stabilité statistique (évite les effondrements du filtre).

## Perspectives

- Outil prometteur pour le développement de jumeaux numériques réactifs et fiables.
- Applications cibles : machines tournantes, dispositifs de combustion, structures aérothermiques.
- Prochaines étapes envisagées :
  - Intégration d'IA pour optimiser les fonctions de localisation.
  - Utilisation d'algorithmes stochastiques (PSO, CMA-ES) pour ajuster dynamiquement les paramètres.
  - Extension à d'autres solveurs CFD au-delà d'OpenFOAM.

# Cadence Solution for CFD Pre-Processing and Meshing – HOTTOIS Romain



## Présentation de Cadence



Cadence est d'abord une société de logiciels de conception électronique. Elle aide des entreprises comme Intel, AMD et NVIDIA à concevoir leurs puces.

Comme vous le verrez dans la diapositive suivante, Cadence a décidé il y a des années de s'étendre à l'analyse au niveau du système.

La société est assez grande comme vous pouvez le voir et nous opérons dans de nombreux pays du monde entier, développant maintenant une très large gamme de solutions logicielles pour les puces, PCB aux systèmes complets.

Principal fournisseur de **Intelligent System Design™** solutions logicielles, matérielles et IP pour la conception de systèmes intelligents qui concrétisent les concepts de conception

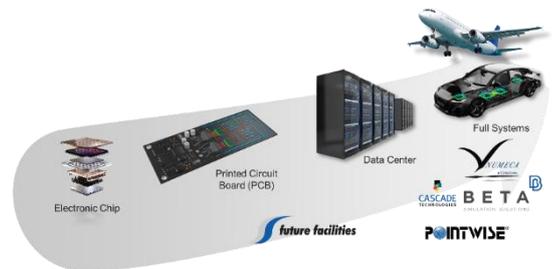
- **Logiciel de calcul** : Pour la conception des systèmes électroniques actuels
- **>13,000** : employés dans le monde entier
- **Culture de l'innovation** : plus de 20 nouveaux produits importants au cours des trois dernières années
- **40** : centres mondiaux de développement

Nasdaq: CDNS; S&P 500 and Nasdaq 100 indexes

## De l'automatisation de la conception électronique à l'automatisation de la conception des systèmes

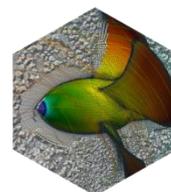
Cadence est une société de logiciels de conception et de simulation dont les capacités vont de l'analyse des systèmes électroniques aux simulations complètes des systèmes. Avec un nombre croissant d'entreprises concevant des produits électroniques sur mesure, Cadence vise à fournir une solution complète pour concevoir des produits de plus en plus complexes. En ce qui concerne le CFD, Cadence dispose d'une grande expérience et de nombreuses capacités puisque notre solution est basée sur des développements internes au-dessus de différentes acquisitions (Numeca, Pointwise, Cascade Technologies, Beta CAE).

Historiquement, le cœur de métier de Cadence se trouve dans l'EDA, donc fondamentalement, nous avons commencé par créer des logiciels qui aident à la conception des puces électroniques en premier. Et comme tout le monde ici le sait, dans le monde d'aujourd'hui, vous pouvez trouver des puces, et des appareils électroniques en général, partout. Dans les circuits imprimés, les centres de données et les systèmes complets tels que les voitures et les avions. C'est donc tout naturellement que Cadence a étendu ces dernières années à l'automatisation de la conception des systèmes. Cela a commencé il y a environ 4 ans avec l'acquisition de Numeca et Pointwise, qui possédaient un grand nombre de solutions CFD pour les applications turbomachines, marines et aérospatiales. Des installations futures en 2022 pour résoudre les problèmes de refroidissement dans les data centres, grâce à des jumeaux numériques basés sur la physique. Et plus récemment, avec l'acquisition des technologies Cascade et BETA CAE, Cadence a encore complété son portefeuille de simulations LES haute fidélité et d'outils avancés de pré-traitement et de maillage, en particulier pour l'industrie automobile.

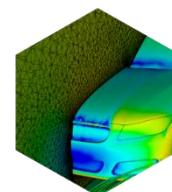


## Les capacités de prétraitement CFD les plus complètes

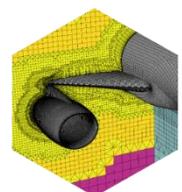
Aujourd'hui, grâce à ces acquisitions successives et au développement continu de nos équipes R&D et Produits, nous disposons de la solution la plus complète sur le marché pour le Pré-traitement et le maillage des CFD. Cette solution comprend 3 outils complémentaires : Fidelity Hexpress, ANSA et Fidelity Pointwise. Dans les diapositives suivantes, je vais brièvement montrer quelques cas d'applications pour montrer certaines des capacités que nous avons dans ces outils, pas possible d'aller dans les détails, je vous invite à venir nous parler par la suite. « Notre rôle est de vous aider à trouver l'outil qui correspond le mieux à vos besoins pour des applications spécifiques. »



**Fidelity™ Hexpress**  
Marine  
Turbomachinery  
General Purpose



**ANSA**  
Automotive  
General Purpose



**Fidelity™ Pointwise**  
Aerospace

## Nettoyage et emballage CAO automatiques

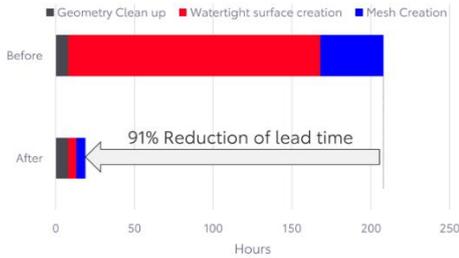
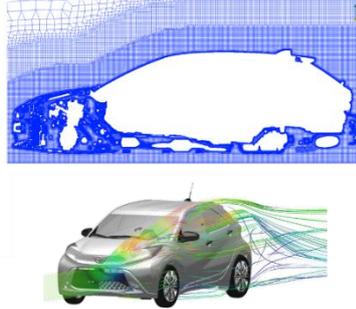


Image courtesy of Toyota Motor Europe NV/SA



Nous disposons de nombreux outils pour manipuler des géométries CAO et les rendre aptes au maillage en surface et/ou en volume.

Dans ce cas particulier, Toyota utilise nos capacités de nettoyage CAO et de fermeture géométrique avec Fidelity AutoSeal. Ils utilisent ensuite notre enveloppe de surface pour créer une surface étanche qu'ils peuvent utiliser pour le maillage de volume.

Les calculs ont ensuite été exécutés dans OpenFOAM. Comme vous pouvez le voir, ils ont réduit leur temps de création de maillage de 91% dans ce cas.

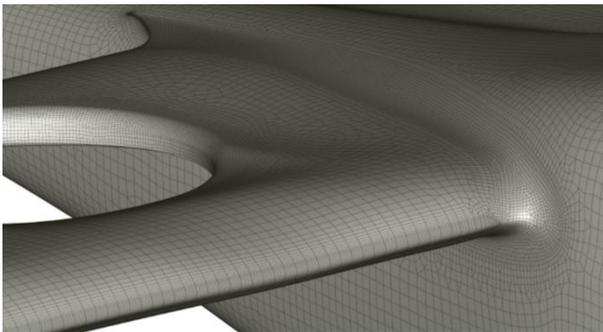


Image courtesy of Ascendance Flight Technologies

## Maillage de surface : anisotropie

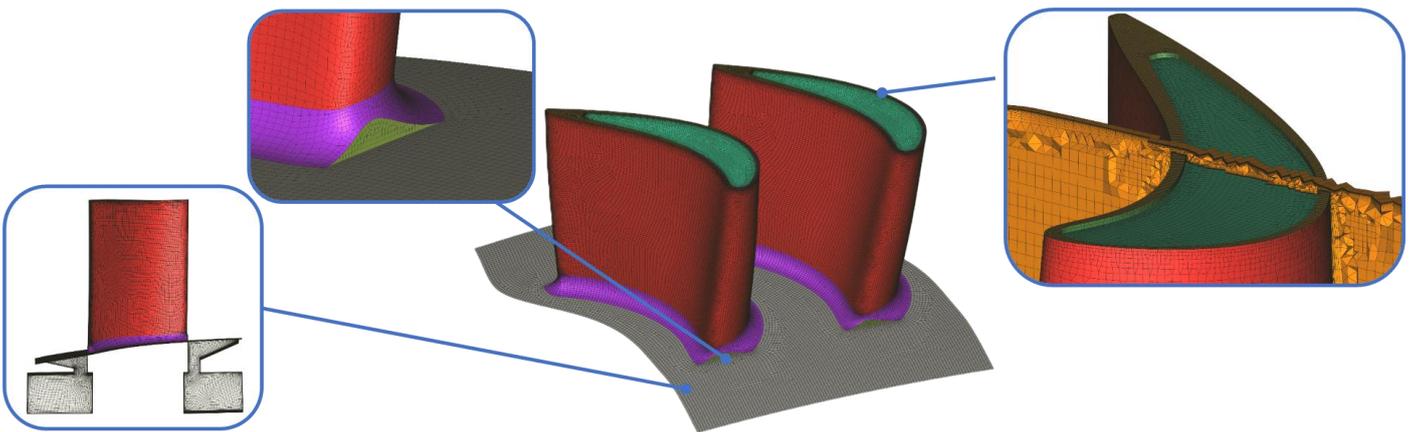
Nous avons des capacités pour le maillage de surface des géométries avec un contrôle fin sur le maillage créé comme la détection automatique de courbure, anisotropie, etc.

## Maillage structuré / non structuré / mixte

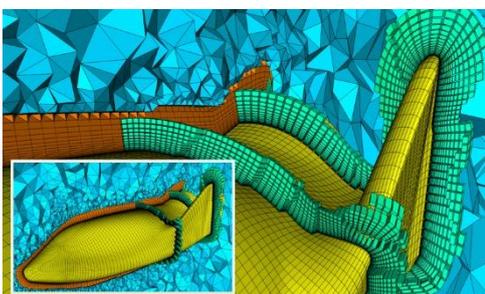
Traditionnellement, la grille structurée est utilisée pour la précision et l'efficacité.

Les turbomachineries deviennent plus compliquées Vous ne pouvez plus les mailler complètement structurées

Manière automatisée de mailler la plupart des parties du canal de flux structuré, puis d'utiliser non structuré pour les zones où plus de complexité est nécessaire. Le maillage obtenu correspond parfaitement.



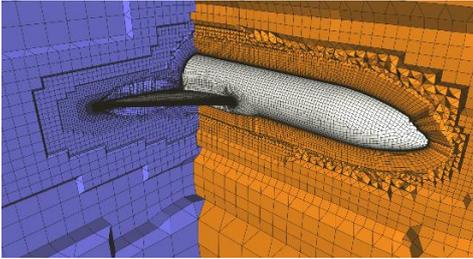
## Maillage avancé de la couche limite



Maillage automatique (pour correspondre à l'indice de qualité attendu) et couverture à 100% (algorithmes avancés)

- Aucune interaction manuelle ou interaction manuelle limitée
- Maillage de haute qualité conduisant à de meilleurs résultats puisque la physique peut être capturée plus précisément
- La plupart du temps, les nouveaux utilisateurs OpenFoam qui commencent à utiliser nos solutions le font pour obtenir une meilleure insertion et transition VL.

## Maillage de volume : approche surface-volume (S2V)



Pour les cas où la surface est « propre » et/ou lorsque l'insertion VL de qualité supérieure → S2V

Différents types d'éléments peuvent être utilisés Hexa dominant ou entièrement tétraédrique

Boîtes de raffinement, affinages de proximité, anisotropie

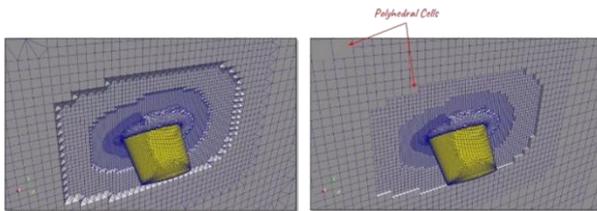
Transition de BL à maillage de volume

## Maillage de volume : approche du volume à la surface (V2S)

- Capable de manipuler des géométries « sales »
- Plus rapide et plus robuste. Génération de maillage parallèle en mémoire partagée ou distribuée
- Boîtes de raffinement, affinages de proximité
- Hexa complet avec nœuds suspendus, ou éléments mixtes sans nœuds suspendus

## Contrôle de la qualité et export OpenFoam

- Optimiseurs de qualité de maillage dédiés pour des solveurs particuliers, en particulier pour OpenFOAM
- Contrôles de qualité des maillages intégrés pour OpenFOAM



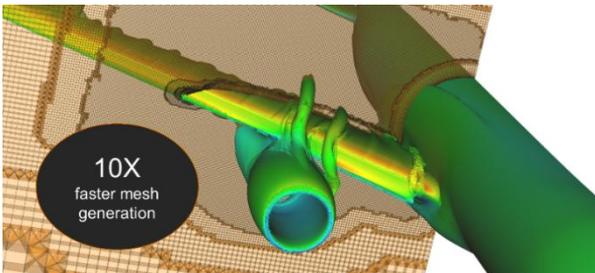
Cell count: 2,284,541 vs 1,437,091 (37% reduction)  
(~50% reduction in Voxel/Isotropic Region)

Maillage plus petit et qualité supérieure

→ Résolution plus rapide

→ Convergence plus rapide

## Automatisation des maillages



10X  
faster mesh  
generation

- Maillage de surface et de volume entièrement automatique
- Meilleures pratiques pour la génération de maillages
- Maillage non structuré de haute qualité avec >10X TAT
- Automatisation → Permet de faire des DOE, Optimisation, ... Pas d'interaction manuelle

Travaillant avec une grande entreprise de l'aérospatiale, ils ont mis en œuvre l'automatisation pour leur création de maillage et génèrent maintenant plus de maillages qu'ils n'auraient jamais pu imaginer en créant / exécutant, avec un délai d'exécution 10 fois plus rapide.

# Bioclogging in In-Situ Bioremediation : Insights from a Numerical Modeling Approach – EDDAOUI Noura – CNRS



## Contexte général

- Dans le cadre du Pacte vert européen, l'objectif est d'atteindre une pollution zéro d'ici 2050.
- En Europe, plus de 2,8 millions de sites sont potentiellement pollués, mais seulement 4,1 % ont été réhabilités.
- En France : plus de 7 000 sites pollués recensés.
- Polluants ciblés : hydrocarbures de type NAPL (Non-Aqueous Phase Liquid), peu solubles et fortement mobiles, pouvant contaminer les nappes phréatiques.

## Problématique

- La biorémédiation in situ est une solution prometteuse : utilisation de bactéries pour consommer les NAPL dissous dans l'eau.
- Cela crée un déséquilibre favorisant la dissolution continue.
- Problème : croissance bactérienne excessive → accumulation de biomasse dans les pores du sol → bioclogging.
- Effet du bioclogging : baisse de porosité, réduction du transport de nutriments, ralentissement de la dissolution.
- Question centrale : à partir de quel volume critique de biofilm l'efficacité de la biorémédiation chute-t-elle ?

## Approche de modélisation

- Outil : code bio-MPES-COM, dérivé du solveur MPES-COM (milieux poreux).
- Le modèle couple :
  - La dissolution des hydrocarbures,
  - La croissance bactérienne (impact sur la porosité),
  - La biodégradation des NAPL dissous,
  - La formation de zones de colmatage.
- Trois régimes de bioclogging modélisés :
  - Colmatage diffus (biomasse répartie),
  - Colmatage localisé (biofilm hétérogène),
  - Colmatage partiel (porosité conservée malgré la croissance bactérienne).

## Cas test numérique

- Colonne verticale de 1 m de long.
  - Conditions initiales : Porosité = 34 % / Saturation en NAPL = 16 %
  - Deux zones : Active avec bactéries & Stérile sans biomasse.

## Résultats de simulation

- Zone stérile : concentration de NAPL dissous atteint un plateau.
- Zone active : concentration diminue continuellement grâce à la consommation bactérienne.
- Une frontière de diffusion apparaît : gradient de concentration entre les zones.
- Effet de diffusion : permet une activité microbienne dans la zone sans biomasse.
- Observation clé :
  - Lorsque la biomasse occupe 11 % à 23 % du volume poral → stagnation de la dissolution.
  - Mécanisme auto-limitatif : croissance bactérienne trop rapide par rapport à l'apport de polluant dissous.
  - Dans les zones où la diffusion est dominante : dissolution continue malgré le colmatage.

## Effets des paramètres

Croissance bactérienne rapide :	Croissance lente :	Taux de dissolution élevé :
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Remédiation accélérée,</li> <li>• Risque accru de colmatage.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Moins de colmatage,</li> <li>• Polluants résiduels plus importants.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Peut compenser le bioclogging,</li> <li>• Maintient la disponibilité du NAPL dissous.</li> </ul>

→ Besoin d'un équilibre entre vitesse de dissolution et croissance bactérienne.

## Perspectives & applications

- Application à d'autres domaines :
  - Croissance tumorale,
  - Dissolution de substances dans le sang.
- Intégration future :
  - Résolution 3D avec écoulement réel → effet géométrique.
  - Utilisation potentielle de solveurs comme OpenFOAM (justifiée par les simulations futures en 3D).
  - Calibration expérimentale en cours avec des partenaires (sols réels difficiles à caractériser).
- Objectif long terme : prédictions à grande échelle sur cartes 3D de sites contaminés.

## Conclusion

- Le modèle met en évidence l'effet ambivalent du biofilm : Stimule puis inhibe la dissolution.
- La dynamique du colmatage impose un seuil critique à ne pas dépasser.
- Le modèle permet d'optimiser les paramètres de remédiation pour éviter l'auto-limitation.
- Potentiel pour des outils d'aide à la décision environnementale, en appui aux politiques de transition écologique.

# A Multi-fidelity Data Assimilation algorithm enhanced by Convolutional Neural Network – MOUSSIE Tom – Arts & métiers



## Problématique

- En simulation CFD avec OpenFOAM, un dilemme persiste entre :
  - Précision (nécessitant des grilles fines, très coûteuses),
  - Coût computationnel réduit (grilles grossières, peu précises).
- Objectif : combiner efficacement les données simulées sur grilles fines et grossières pour obtenir des solutions fiables tout en maîtrisant le coût.
- Solution envisagée : assimilation de données améliorée par apprentissage automatique, pour guider les simulations vers une solution réaliste à moindre coût.

## Objectifs de l'étude

- S'inscrit dans le cadre du projet COMES (Coupling OpenFOAM Simulations with Miraculix Environments).
- Objectif : automatiser l'assimilation de données CFD en ligne sans intervention manuelle.
- Méthode : couplage d'un filtre de Kalman d'ensemble (EnKF) avec un CNN de type UNet.
- Cas d'étude : simulation 2D compressible autour d'un profil NACA, Mach 4.5, angle d'attaque 25°.
- Cible : ajuster automatiquement l'angle d'attaque via les mesures de vitesse ( $U_x$ ,  $U_y$ ).

## Méthodologie

- Trois grilles de calcul :
  - Grille grossière (rapide, imprécise),
  - Grille moyenne,
  - Grille fine (précise, coûteuse).
- Deux stratégies d'assimilation testées :
  - Filtre multi-grille : 1 simulation fine + plusieurs grossières.
  - Filtre multi-fidélité : combinaisons de membres fins/grossiers, pondérées pour réduire la variance.
- Intégration d'un réseau de neurones convolutionnel (CNN) :
  - Architecture utilisée : UNet.
  - Objectif : apprendre la différence entre simulations fine et grossière.
  - Données d'apprentissage : 32 000 paires d'images projetées sur un maillage structuré.
  - Zones d'échantillonnage : bord d'attaque, milieu de profil, sillage.
- Architecture UNet :
  - Couches de convolution pour extraire les caractéristiques locales,
  - Downsampling/Upsampling pour gérer la résolution,
  - Concatenation pour préserver la localisation spatiale,
  - Sortie : estimation de l'erreur locale (fine – grossière).

## Résultats

- Avec CNN :
  - Amélioration de la convergence vers l'angle d'attaque cible (25°),
  - Stabilité atteinte dès 70 itérations (vs. >100 sans CNN),
  - Réduction significative de la variance dans les filtres multi-fidélité.

Le CNN a permis une correction localisée des erreurs de la grille grossière → Reproduction partielle de la précision de la grille fine à moindre coût.

## Discussion et perspectives

- L'UNet s'est révélé efficace pour réduire les erreurs issues des simulations grossières.
- Le modèle agit comme une correction rapide, intégrée dans la boucle d'assimilation.
- Pistes d'évolution :
  - Entraînement en ligne du CNN pendant l'assimilation pour s'adapter dynamiquement au champ de simulation.
  - Application à des cas industriels complexes (ex. : compresseurs haute pression), avec maillages et géométries réalistes.



# Partitioned fluid-structure interaction simulations using OpenFOAM – DEGROOTE Joris – Ghent University

## Introduction et contexte

Objectif : illustrer les capacités d'OpenFOAM pour simuler des interactions fluide-structure (FSI) en mode partitionné.

Approche : couplage modulaire d'un solveur fluide et d'un solveur structurel, particulièrement adapté aux cas de :

- Grandes déformations,
- Mouvements rigides,
- Vibrations induites par turbulence.

Présentation pédagogique des trois grandes approches de maillage : ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) ; Immersed Boundary Method (IBM) et Overset Grids (Chimera).

Toutes sont disponibles dans OpenFOAM et compatibles avec des méthodes de couplage robustes (ex. : algorithmes quasi-Newton).

## Méthodologies de couplage et traitement des maillages

Il n'existe pas de méthode FSI universelle : le choix dépend du problème.

Overset Grid (maillage superposé) = compromis robuste :

- Grille de fond fixe + grille mobile autour de l'objet.
- Bon compromis précision / flexibilité / robustesse.

Points critiques :

- Qualité de l'interpolation entre maillages.
- Recouvrement précis pour éviter les pertes de fidélité.

Capacité à traiter des géométries complexes : faisceaux de tubes, vis sans fin, systèmes multi-composants.

## Cas d'étude 1 : Lubrification élastohydrodynamique (EHL)

Simulation d'un rouleau flexible en contact avec une plaque rigide via un film lubrifiant mince.

Adaptation du solveur cavitatingFoam pour gérer :

- Propriétés thermodynamiques du lubrifiant dépendantes de la pression,
- Zones de cavitation.

Validation contre la littérature : reproduction précise des effets de cavitation et déformation.

## Cas d'étude 2 : Plaque flexible attachée à un segment rigide oscillant

- Simulation dans l'eau avec méthode Overset.
- Problème : déformation importante au bord de fuite  $\Rightarrow$  maillage critique.
- Solution : méthode d'extrapolation pour maintenir la qualité du maillage.
- Validation : bonnes correspondances avec les données expérimentales (forces, vortex).
- Application future : objets biomimétiques (ailes d'oiseaux, drones colibris).

## Cas d'étude 3 : Bulles d'air synthétiques en écoulement

- Implémentation d'une condition aux limites pour injection contrôlée de bulles.
- Amélioration des modèles multiphasiques pour systèmes de type banc à bulles.
- Meilleure correspondance simulée/expérimentale pour les forces générées.

## Cas d'étude 4 : Vibrations induites par turbulence (nucléaire)

- Contexte : générateurs de vapeur – usure par vibration.
- Simulation LES de l'écoulement autour de tubes périodiques.
- Objectif : capturer les fluctuations de pression pour alimenter les modèles structurels.



- Résultat : données fiables pour estimer les effets vibratoires faibles mais critiques.

## Conclusion et perspectives

OpenFOAM propose un écosystème complet pour la FSI partitionnée :

- Méthodes de maillage : ALE, IBM, Overset.
- Couplage robuste : algorithmes quasi-Newton.
- Modèles de turbulence : RANS, URANS, LES.
- Solveurs open-source internes (solidFoam) ou externes (Kratos, CoCoNuT).

Modularité idéale pour :

- Formation d'étudiants de master (mémoires),
- Projets avancés en biomédical, nucléaire, aéroélasticité, ingénierie mécanique.

# Enhancement of LES for the analysis of an intake flow rig via Data Assimilation – MELDI Marcello – LMFL



## Contexte et problématique

- Étude d'un écoulement instationnaire dans un banc d'admission simplifié (type moteur à combustion interne).
- Difficultés classiques : Turbulence multi-échelle ; Géométries complexes ; Sensibilité extrême aux conditions initiales ; Incertitudes épistémiques...
- Objectif : Réduire l'écart entre simulation numérique (LES) et mesures expérimentales.
- Solution : Assimilation de données avec l'Ensemble Kalman Filter (EnKF) :
  - Fusion des données simulées (basse fidélité) et mesurées (haute-fidélité),
  - Amélioration dynamique de la précision, même en régime fortement instationnaire.

## Méthodologie

- Cas d'étude : écoulement oscillant sans combustion, entrant via un conduit annulaire et traversant une soupape.
  - Simulation de référence : LES haute-fidélité avec 150 millions de cellules,
  - Accord expérimental démontré.
- Simulation assimilée :
  - 35 simulations indépendantes sur une grille plus grossière (80 millions de cellules),
  - Aucune information initiale sur la condition d'entrée.
  - Données d'observation : mesures ponctuelles via 160 capteurs locaux (vitesses instantanées).
- Assimilation via EnKF :
  - Objectif 1 : reconstruire la condition d'entrée (amplitude, phase, fréquence),
  - Objectif 2 : synchroniser le système simulé avec le système réel.

## Résultats et Apports

- Sans assimilation → divergence complète entre les simulations.
- Avec assimilation → reconstruction correcte et synchronisation dynamique :
  - Bonne prédiction de la fréquence, amplitude et phase,
  - Structures turbulentes reproduites fidèlement (cohérence spatiale),
  - Fonctionne avec peu de capteurs bien placés.
- Mise en évidence de la sensibilité aux conditions initiales de l'ensemble :
  - Risque de convergence lente si mal initialisé.
  - Solutions : techniques de localisation et stratégie d'optimisation des capteurs.

## Coût computationnel et perspectives

- LES de référence :  $\approx 1$  million heures CPU,
- 35 simulations + EnKF :  $\approx 100\,000$  heures CPU,
- Assimilation optimisée (code CONS) → réduction du coût par facteur 200.
- Vision à long terme : vers les jumeaux numériques (digital twins) haute-fidélité pour :
  - Systèmes complexes et instationnaires,
  - Industrie 4.0,
  - Simulation hybride temps réel / mesure.

# A new CFD-DEM for simulating particulate transport and pore clogging in porous media – SOULAINE Cyprien – ISTO



## Objectif

- Développer un modèle CFD-DEM couplé (à 4 voies) pour simuler : Le transport particulaire et le colmatage des pores (pore clogging),
- Application directe : systèmes géothermiques (réduction d'injectivité), dépollution, filtration.

## Contexte scientifique

En géothermie profonde :

- L'eau froide réinjectée peut mobiliser des particules fines (ex. : argiles),
- Risque de colmatage irréversible des milieux poreux,
- Conséquences : baisse de perméabilité → perte d'efficacité.

## Méthodologie et Modèle

- Couplage CFD-DEM à quatre voies (four-way coupling) :
  1. Transport lagrangien des particules (trajectoires individuelles),
  2. Interaction fluide ↔ particules (traînée, portance...),
  3. Interaction particule ↔ particule (contact mécanique + forces électrostatiques),
  4. Interaction particule ↔ parois.
- Forces électrostatiques modélisées via le modèle DLVO :
  - Forces de Van der Waals,
  - Effet de double couche électrique.
  - Permet de modéliser : agrégation, répulsion.
- Approche multi-échelle :
  - Résolution partielle ou complète des particules selon leur taille relative au maillage,
  - Modèle hybride résolu/non résolu.

## Résultats numériques

Trois configurations simulées :

- Faible concentration, sans interactions électrostatiques : Transport libre, pas de colmatage durable.
  - Forte concentration, sans interactions électrostatiques : Formation de bouchons permanents, perméabilité réduite.
1. Avec forces électrostatiques (DLVO) :
    - Forte agrégation,
    - Colmatage sévère, chute de perméabilité de 80 %,
    - Irréversibilité du colmatage après "rinçage" (flushing).

## Apports et applications

Première implémentation d'un couplage CFD-DEM complet intégrant électrostatique + multi-échelle.

Représentation précise des zones de colmatage, utile pour :

- Optimiser les stratégies de réinjection,
- Anticiper la durée de vie des filtres/équipements,
- Mieux comprendre les processus dans les sols contaminés ou milieux poreux réactifs.

## Conclusion

L'impact des forces d'interaction particule-particule ne peut être négligé.

Ce modèle ouvre des perspectives nouvelles pour :

- Prédiction fiable du colmatage,
- Conception de systèmes plus robustes (géothermie, filtration, environnement).

# CFD design of passive ventilation in apartment buildings – Joshi Shrey – CFD Solutions



## Objectifs du projet

- Répondre à une demande des autorités irlandaises concernant la ventilation passive dans les parties communes d'immeubles résidentiels.
- Vérifier si la ventilation naturelle (due aux mouvements humains et d'équipements) permet d'atteindre un taux de renouvellement d'air de 0,1 ACH (Air Change per Hour).
- Contexte post-COVID : enjeux accrus sur la qualité de l'air intérieur, notamment dans les couloirs, cages d'escalier, halls... souvent sans ventilation mécanique.

## Méthodologie CFD innovante

Rejet des méthodes expérimentales classiques basées uniquement sur les flux bruts d'air.

Utilisation de traceurs en simulation transitoire CFD :

- Mesure précise de l'air effectivement renouvelé (hors « court-circuitage »),
- Meilleure représentativité de la qualité réelle de l'air.

Outils utilisés :

- Logiciel Helix (basé sur OpenFOAM),
- Modélisation précise des objets mobiles via « Generalized Internal Boundaries ».

## Scénarios simulés

- Ouverture/fermeture d'une porte avec passage d'un occupant.
- Déplacement d'une personne dans un ascenseur.
- Mouvement vertical de l'ascenseur générant des flux d'air via les interstices.

## Résultats et enseignements

Les méthodes classiques surestiment le renouvellement d'air réel.

La méthode par traceur montre :

- Une ventilation parfois suffisante pour atteindre 0,1 ACH,
- Mais ce seuil reste très bas et questionnable en termes sanitaires.

Résultats appuient la nécessité d'un rehaussement potentiel des exigences réglementaires.

Dispositifs comme les AOV (Automatic Opening Vents) peuvent significativement améliorer la ventilation... à condition d'être bien intégrés.

## Apports et implications

- Validation de la simulation CFD comme outil indispensable pour :
  - Évaluer finement la qualité de l'air dans des espaces complexes et transitoires,
  - Informer les choix de conception dans les bâtiments existants ou neufs.
- Mieux comprendre les effets dynamiques (personnes, ascenseurs) dans la ventilation passive.

## Conclusion

- La CFD fournit une lecture bien plus fine que les mesures traditionnelles.
- La ventilation passive seule peut être insuffisante.
- Nécessité d'une réflexion réglementaire sur les seuils minimaux de renouvellement d'air dans les espaces communs.

# 3D simulation of landslide generated waves – LOUIS-NAPOLÉON Aurélié – CEA



## Objectif

Développer une méthodologie de simulation tridimensionnelle pour modéliser les tsunamis générés par des glissements de terrain sous-marins.

Identifier les paramètres physiques et numériques critiques influençant la génération et la propagation des vagues.

Objectif final : améliorer les systèmes de prévision des risques côtiers à l'aide de modèles réalistes et validés.

## Approche méthodologique en 3 étapes

1. **Pré-calculs de maillage (modélisation simplifiée)**
  - Objectif : définir une maille optimale à l'interface air/eau/sol.
  - Résultat : taille de maille optimale de 10 à 20 mètres pour capter la dynamique de génération des vagues.
2. **Simulation 3D in situ de la zone de génération**
  - Application à un fjord réel, résolution fine (~5 millions de cellules).
  - Variations de viscosité testées pour modéliser le matériau en glissement.
  - Validation par données de terrain : hauteur de vague, run-up, forme du front.
3. **Simulation complète du fjord (propagation)**
  - Extension à la totalité du bassin.
  - Comparaison des résultats numériques avec les mesures terrain sur la propagation du tsunami.

## Choix physiques et numériques

- Modèle multiphasique : 3 fluides (air, eau, matériau glissant).
- Rhéologie newtonienne choisie (simple, efficace).
  - Comparaison faite avec rhéologie Bingham : écart peu significatif.
- Viscosité dynamique optimale du matériau glissant : 100 m<sup>2</sup>/s (déduite par similarité avec essais expérimentaux).
- Code utilisé : OpenFOAM.

## Résultats clés

- Le paramètre de viscosité est crucial :
  - ↳ Plus la viscosité est élevée, plus la vague générée est atténuée.
- Un maillage très fin est indispensable à l'interface pour bien modéliser la phase initiale de génération.
- Coût computationnel important :
  - ↳ Exemple : 10 jours de calcul pour simuler 700 secondes de phénomène réel.

## Perspectives et application

- Intégration future de la méthode dans des systèmes d'alerte aux tsunamis.
- Objectif : couplage avec des modèles de type eau peu profonde pour la propagation à grande échelle (shoreline-to-coast).
- Utilisation comme outil d'aide à la décision pour l'aménagement côtier et la prévention des risques naturels.

## Conclusion

- Le modèle développé permet de simuler avec précision la dynamique complexe des tsunamis générés par glissements de terrain.
- Il combine réalisme physique, validation expérimentale, et potentiel opérationnel.
- Étape importante vers des outils de prévision robustes et adaptés aux zones à risques.



# A Continuous Immersed Boundary Method for Centrifugal Pump Simulation in OpenFOAM – MARTINEZ VALERO Miguel – Arts et Métiers

## Contexte & objectifs

- Simuler les écoulements complexes dans une pompe centrifuge sans recourir à des maillages conformes coûteux.
- Exploiter une méthode immersed boundary (IB) continue pour intégrer facilement des géométries complexes dans OpenFOAM.
- Application à une pompe expérimentale du laboratoire CReMHyF, avec perspective de jumeau numérique.

## Méthodologie

- **Base de travail** : Solveur modifié à partir de simpleFoam (stationnaire), intégrant un terme de pénalisation dans les équations de Navier-Stokes.
- **Méthode Immersed Boundary (IB)** :
  - Forçage pénalisant dans la zone immergée (inspirée d'Angot, 1999).
  - Dépend d'un paramètre de contrôle  $\eta$  (équilibre précision/stabilité critique).
- **Traitement géométrique** :
  - Géométrie impeller issue d'un fichier CAD.
  - Immersion dans un cylindre défini comme cellZone à l'aide de topoSet.
  - Zone rotative traitée par la méthode MRF (Multiple Reference Frame), permettant une rotation figée pour simplifier les calculs.
- **Modèle de turbulence** :
  - k- $\omega$  SST modifié pour la méthode IB.
  - Adaptation de  $\omega$  via une fonction de blending dans les zones proches des parois immergées.

## Résultats préliminaires

- Bonne correspondance des profils de pression dans le diffuseur avec les mesures expérimentales.
- Sensibilité élevée de la simulation de l'impeller aux choix de paramètres IB (notamment  $\eta$ ).
- Nécessité d'une phase d'optimisation pour garantir robustesse et fidélité dans la zone rotor.

## Perspectives

- Couplage futur avec une méthode d'assimilation de données (OpenFOAM-vine) :
  - ↔ Calibration des paramètres IB à partir de mesures PIV ou pression.
- Vers un jumeau numérique :
  - Objectif : simulation temps réel à partir d'un modèle simplifié + IA.
  - Supervision et pilotage possible de systèmes physiques complexes en exploitation (maintenance prédictive, optimisation en ligne, etc.).

## Conclusion

- La méthode IB continue développée dans OpenFOAM ouvre la voie à des simulations plus flexibles et accessibles dans le domaine des turbomachines.
- Elle permet de s'affranchir de maillages contraignants tout en intégrant des géométries complexes.
- Des travaux sont encore nécessaires pour affiner la modélisation du rotor, mais les résultats préliminaires sont prometteurs pour des applications avancées comme les jumeaux numériques.

# On the gas-liquid coupling instability in jet wiping using high and low fidelity models – BARREIRO David – VKI



## Contexte et objectif

- Le jet wiping est un procédé clé en galvanisation pour ajuster l'épaisseur de la couche de zinc par impact d'un jet de gaz sur un film liquide.
- À haute vitesse de bande, des instabilités ondulatoires apparaissent dans le film, altérant la qualité du revêtement.
- Objectif : identifier le mécanisme physique de cette instabilité couplée gaz/liquide et proposer des outils de simulation performants.

## Méthodologie

Deux niveaux de modélisation :

1. **Haute-fidélité : VOF-LES 3D multiphasique**
  - Volume of Fluid (VOF) + Large Eddy Simulation (LES) pour la turbulence.
  - Interface gaz-liquide résolue finement, avec prise en compte des forces capillaires.
  - Simulation très coûteuse (~14 millions de cellules), nécessitant des moyens HPC.
2. **Faible fidélité : modèle intégral 1D du film liquide**
  - Équations intégrées sur l'épaisseur du film (type boundary layer).
  - Couplage unidirectionnel : les forces du jet sont imposées via corrélations.
  - Hypothèse de profils de vitesse auto-similaires.

## Résultats clés

- Validation : très bon accord entre simulations VOF et expériences (film de dipropylène glycol) – en statique et dynamique (spectres de fluctuations).
- Identification d'un mécanisme rétroactif : Vagues sur le film → déviation du jet → modification des forces de cisaillement → amplification des vagues.
- Analyse modale (POD) :
  - Structures dominantes 2D, même en 3D.
  - Pression de wiping oscille tandis que le jet reste globalement stationnaire.
- Robustesse du phénomène : Observé aussi avec l'eau malgré des propriétés différentes → phénomène générique.
- Limites du modèle 1D :
  - Les profils auto-similaires sont invalides dans les zones de recirculation (Rambach flow).
  - Nécessité de raffinement pour ces zones spécifiques.

## Vers une approche hybride

- Proposition : modèle partitionné itératif.
  - Solveur gaz : calcul des efforts sur l'interface.
  - Résolution itérative dans le modèle liquide.
- Résultats initiaux : mécanisme instable bien capté qualitativement.
- Objectif : outil numérique multi-fidélité industrialisable.

## Perspectives

Application en postdoctorat (VKI) à l'évaporation d'hydrogène liquide :

- Couplage explicite solveurs liquide/vapeur + modèle d'évaporation basé sur les flux thermiques.
- Sans coefficients empiriques → approche plus physique et prédictive.

## Conclusion

- Le couplage instable gaz/liquide est confirmé comme mécanisme principal des instabilités de jet wiping.
- La combinaison de modèles haute et basse fidélité permet de concilier précision et efficacité.
- La démarche ouvre la voie à des outils industriels robustes et à des applications dans d'autres systèmes multiphasiques complexes.

# Ray-tracing rendering of OpenFOAM simulations – RECOQUILLON Yann – ACE



## Objectifs

- Utiliser le ray tracing non seulement pour produire des images photoréalistes, mais surtout pour :
  - Mieux communiquer avec des non-spécialistes.
  - Créer des contenus marketing percutants.
- Rendre les résultats de simulation plus intuitifs et visuellement compréhensibles grâce à :
  - Réflexions, ombres, profondeur de champ, réfraction, matériaux réalistes...

## Cas concrets présentés

1. **Cas test : le bateau "3D Benchy"**
  - Petit modèle 3D utilisé dans un cas Overset (maillage SnappyHexMesh).
  - Visualisation dans ParaView avec ray tracing :
    - Eau animée, matériaux réalistes.
    - Outil pédagogique efficace pour expliquer les simulations aux visiteurs non techniques.
  - Comparaison avec un modèle physique réel → rendu visuel très fidèle.
2. **Projet réel : vélo de contre-la-montre (Look & Cofidis)**
  - Collaboration avec la marque Look et l'équipe Cofidis.
  - Objectif : optimiser l'aérodynamisme du vélo via simulation OpenFOAM.
  - Post-traitement photoréaliste :
    - Textures (carbone, bitume), logos, environnement réaliste.
    - Production de visuels à forte valeur ajoutée pour le marketing.
  - Challenge : placement précis des textures et logos sur la géométrie 3D.

## Outils et techniques

- ParaView = plateforme principale de rendu.
- Ray tracing sur CPU ou GPU (meilleure performance avec NVIDIA).
- Filtre Resample to Image : adapte les données CFD au moteur de rendu.
- Material Editor : création et application de matériaux réalistes.

## Enjeux techniques & perspectives

- Positionnement des lumières : manipulation délicate dans ParaView.
- Flickering (scintillement) : artefacts visuels dans les animations, origine encore incertaine (rendu ou lecture vidéo ?).
- Exploration de Blender : pour un contrôle plus fin de l'éclairage et des animations.

## Conclusion

- Une démonstration claire de la valeur ajoutée du ray tracing dans la simulation :
  - Vulgarisation scientifique améliorée.
  - Communication industrielle plus attractive.
- L'interface entre simulation et design marketing devient un levier clé dans les projets d'ingénierie.