

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Simulation aux grandes échelles d'écoulements éoliens

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE

Niveau requis : Master ou école d'ingénieur

Date de début : 15 février 2024

Durée de la mission : 6 mois

Contexte/ Objet et déroulement du stage

Le CERFACS investit depuis quelques années la physique des écoulements éoliens, pour le développement de modèles réduits précis. Ces modèles réduits permettent quant à eux la prédiction annuelle de production d'énergie d'un parc éolien.

Différentes configurations d'éoliennes ont été investiguées, avec des approches dites «wall-modelled », qui consistent à inclure la géométrie des pales dans la simulation.

Ces approches permettent une description précise de la turbulence, mais s'avèrent trop coûteuses en termes de coût de calcul.

Aussi, un stage est proposé, avec pour objectif l'implémentation d'une méthodologie dite de ligne actuatrice, permettant la représentation des pales par des termes sources dans les équations de conservation. Cette approche permet ainsi de s'abstenir de la prise en compte de la géométrie réelle, en particulier des couches limites, qui induisent des maillages et coûts de calcul importants.

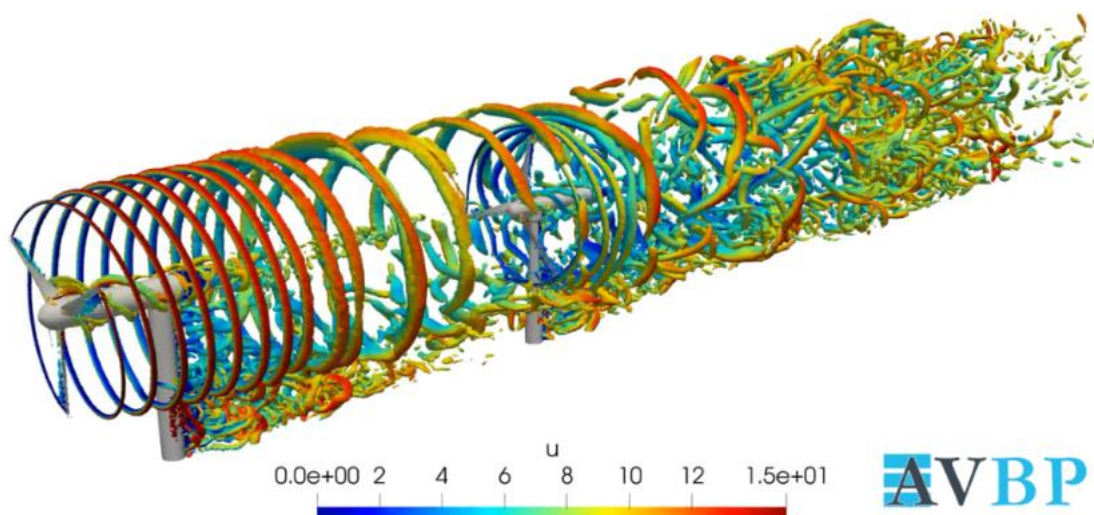
Enfin, si le temps le permet, la prise en compte de la déformation des pales, par la prise en compte des premiers modes propres de déformation des pales, sera investiguée.

Contacts

Nicolas Odier (odier@cerfacs.fr)

Laurent gicquel (lgicquel@cerfacs.fr)

Florent Duchaine (florent.duchaine@cerfacs.fr)



Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Modélisation de la cinétique de la combustion-assistée par plasma d'ammoniac: application à l'allumage

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, CALCUL HAUTE PERFORMANCE, COMBUSTION, ELECTROMAGNETISME, MECANIQUE DES FLUIDES

Contexte

Aujourd'hui, il est essentiel pour notre société d'avoir accès à une source d'énergie fiable ayant un faible impact sur l'environnement et le climat. Dans ce contexte, des projets sont actuellement en cours pour utiliser des carburants décarbonés tels que l'ammoniac (NH_3) comme vecteur d'énergie. Ces carburants peuvent être produits en utilisant des sources d'énergie intermittentes (éolienne, solaire, etc.), servant de forme de stockage et pouvant être utilisés de manière contrôlée. Cependant, l'utilisation de l'ammoniac dans les chambres de combustion actuelles n'est pas immédiatement possible et nécessite une phase d'adaptation pour respecter les normes de sécurité et d'émissions de polluants, tels que les NO_x . Pour y parvenir, il est naturel de se tourner vers des régimes de combustion pauvres, malheureusement sujets à des instabilités et plus difficiles à allumer. Une solution émergente à ces problèmes est d'utiliser des décharges nanosecondes pulsées (Nanosecond Repetitively Pulsed Discharges – NRPD). Ce type de décharge est connu pour être capable d'atténuer les instabilités rencontrées dans les chambres de combustion et est également efficace pour l'allumage, avec une faible puissance électrique par rapport à celle de la flamme ($\leq 1\%$).

Les émissions de NO_x résultant de la combustion de l'ammoniac représentent une préoccupation environnementale significative, étant donné leurs effets néfastes sur la qualité de l'air et le climat global. Malgré le fait qu'il soit considéré comme une alternative de carburant à zéro carbone, l'ammoniac génère toujours des émissions de NO_x lors de son oxydation, contribuant à la formation de smog et présentant des risques pour la santé humaine. En réponse à ce défi, l'utilisation de Plasma Hors-Équilibre (Non-Equilibrium Plasma – NEP) émerge comme une solution prometteuse. Des travaux récents impliquant des décharges NEP ont montré un potentiel substantiel pour réduire les niveaux de NO_x lors de la combustion de l'ammoniac [1]. Cette approche innovante modifie la cinétique de combustion, perturbe la formation des oxydes d'azote et offre un contrôle précis sur le processus de combustion, résultant en une combustion plus propre et plus efficace. Ainsi, la technologie de décharge hors-équilibre offre une voie prometteuse pour atténuer les émissions de NO_x lors de la combustion de l'ammoniac.

Mission

L'objectif principal de ce stage est d'acquérir une compréhension globale de la physique des décharges de plasma hors équilibre et de leur interaction avec les processus de combustion. Les fondements de la combustion assistée par plasma reposent sur la chimie, qui dicte les effets cinétiques et thermiques. Pour étudier cela, le candidat utilisera le logiciel Cantera et son extension plasma [2] pour réaliser des simulations de l'allumage d'un mélange NH_3 -air en utilisant un mécanisme cinétique détaillé. Alors que des recherches récentes ont examiné en détail l'allumage de mélanges air-méthane dans des conditions similaires, l'accent principal sera mis sur l'adaptation de ces méthodologies aux mélanges contenant de l'ammoniac. La littérature existante propose des mécanismes cinétiques complets pour la combustion assistée par plasma de l'ammoniac (PAAC) [3], qui serviront de base à cette recherche. Une attention particulière sera portée à une analyse approfondie des chemins cinétiques clés dans la combustion assistée par plasma de l'ammoniac, en utilisant les outils d'analyse disponibles dans la l'outil ARCANÉ [4]. Enfin, un modèle simplifié [5] sera utilisé pour étudier l'allumage assisté par plasma de l'ammoniac en utilisant le solveur de Navier-Stokes compressible réactif AVBP (<https://www.cerfacs.fr/avbp7x/>) basé sur des travaux antérieurs réalisés sur le méthane [6] (voir Fig. 1). À cette fin, une configuration de canal simplifiée sera utilisée, représentative de celle utilisée dans [7].

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

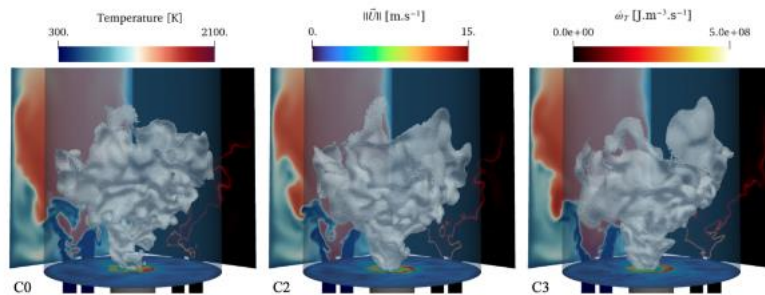


Fig.1: Simulation of the PACCI burner with an unstable flame (C0-left) and two flames stabilised by NRP discharges (C2-middle, C3-right).

Programme de travail

1. Assimilation de la physique des décharges de plasma, y compris la chimie hors équilibre.
2. Analyse cinétique de l'allumage assisté par plasma de l'ammoniac en utilisant Cantera et Arcane pour adapter un modèle à ordre réduit.
3. Simulation de l'allumage assisté par plasma de l'ammoniac en utilisant AVBP.

Programme technique

1. Développer et améliorer des scripts de pré-traitement ou de post-traitement en Python.
2. Effectuer des développements dans le langage Fortran au sein du code AVBP.

Une thèse (ANR JETHPAC) est financée pour septembre 2024, offrant une opportunité aux candidats très motivés de poursuivre leur travail dans le domaine de la combustion assistée par plasma.

Contacts :

N. Barléon (barleon@cerfacs.fr)

B. Cuenot (cuenot@cerfacs.fr)

O. Vermorel (vermorel@cerfacs.fr)

- [1] J. Choe, W. Sun, T. Ombrello, C. Carter, Plasma assisted ammonia combustion: Simultaneous NO_x reduction and flame enhancement, *Combustion and Flame* 228 (2021) 430–432.
- [2] L. Cheng, N. Barleón, B. Cuenot, O. Vermorel, A. Bourdon, Plasma assisted combustion of methane air mixtures: Validation and reduction, *Combustion and Flame* 240 (2022) 111990.
- [3] M. Shahsavari, A. A. Konnov, A. Valera-Medina, M. Jangi, On nanosecond plasma-assisted ammonia combustion: Effects of pulse and mixture properties, *Combustion and Flame* 245 (2022) 112368.
- [4] Q. Cazères, P. Pepiot, E. Riber, B. Cuenot, A fully automatic procedure for the analytical reduction of chemical kinetics mechanisms for computational fluid dynamics applications, *Fuel* 303 (2021) 121247.
- [5] N. Barleón, L. Cheng, B. Cuenot, O. Vermorel, A phenomenological model for plasma-assisted combustion with NRP discharges in methane-air mixtures: PACMIND, *Combustion and Flame* 253 (2023) 112794.
- [6] N. Barleón, B. Cuenot, O. Vermorel, Large-eddy simulation of swirled flame stabilisation using NRP discharges at atmospheric pressure, *Applications in Energy and Combustion Science* 15 (2023) 100163.
- [7] J. K. Lefkowitz, S. D. Hammack, C. D. Carter, T. M. Ombrello, Elevated OH production from NPHFD and its effect on ignition, *Proceedings of the Combustion Institute* 38 (4) (2021) 6671–6678.

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Raffinement de maillage adaptatif pour la simulation de décharges plasma

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, CALCUL HAUTE PERFORMANCE, COMBUSTION, ELECTROMAGNETISME, MECANIQUE DES FLUIDES, SIMULATION NUMERIQUE

Niveau requis : Master

Date de début : 1 février 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite de candidatures : 1 janvier 2024

Rémunération : 650 € / mois

Contexte

De nombreuses initiatives sont actuellement en cours pour utiliser des carburants décarbonés, tels que l'hydrogène (H_2) et l'ammoniac (NH_3), en tant que vecteurs d'énergie en réponse à la crise climatique. Ces carburants peuvent être produits à l'aide de sources d'énergie intermittentes (éolienne, solaire, etc.), servant ainsi de forme de stockage et pouvant être utilisés de manière contrôlée. Cependant, l'utilisation de ces nouveaux carburants dans les chambres de combustion actuelles n'est pas immédiatement possible et nécessite une phase d'adaptation pour respecter les normes de sécurité et d'émissions de polluants, telles que les NO_x . Pour y parvenir, il est naturel de se tourner vers des régimes de combustion pauvres, malheureusement sujets à des instabilités et plus difficiles à allumer. Une solution émergente à ces problèmes est d'utiliser des décharges nanosecondes répétitives. Ce type de décharge est connu pour être capable d'atténuer les instabilités rencontrées dans les chambres de combustion et est également efficace pour l'allumage, avec une faible puissance électrique par rapport à celle de la flamme ($<1\%$).

Mission:

L'objectif de ce stage est d'effectuer des simulations détaillées de décharges plasma de type « streamer ». Pour ce faire, le candidat utilisera le code AVBP (<http://www.cerfacs.fr/avbp7x>) et son extension plasma [1] pour effectuer des calculs détaillés de décharges NRP en présence d'un écoulement. Ce type de simulation est particulièrement exigeant en ce qui concerne les petites structures qui doivent être capturées pour décrire la décharge. De plus, la simulation des décharges NRP implique une large gamme d'échelles de temps, allant de la nanoseconde à la milliseconde. Ainsi, des techniques numériques doivent être développées pour réduire considérablement le coût de la simulation. L'une de ces techniques est le Raffinement de Maillage Adaptatif (AMR), qui consiste à affiner uniquement des zones très spécifiques, le reste du domaine étant maillé plus grossièrement. Cette méthode a été largement appliquée dans d'autres domaines tels que l'aérodynamique et les écoulements réactifs [2] (voir Fig. 1). Cependant, elle doit être adaptée à la physique des plasmas, en particulier le choix de la métrique. Les premiers résultats ont été obtenus avec AVBP pour simuler une seule décharge 2D avec AMR (voir Fig. 2). Ce cas 2D simple contribuera à consolider l'utilisation de l'AMR dans un cadre plasma et à l'étendre à un cas 3D incluant un mélange en écoulement. L'objectif final de ce stage sera de se familiariser avec la physique des décharges de plasma hors équilibre.

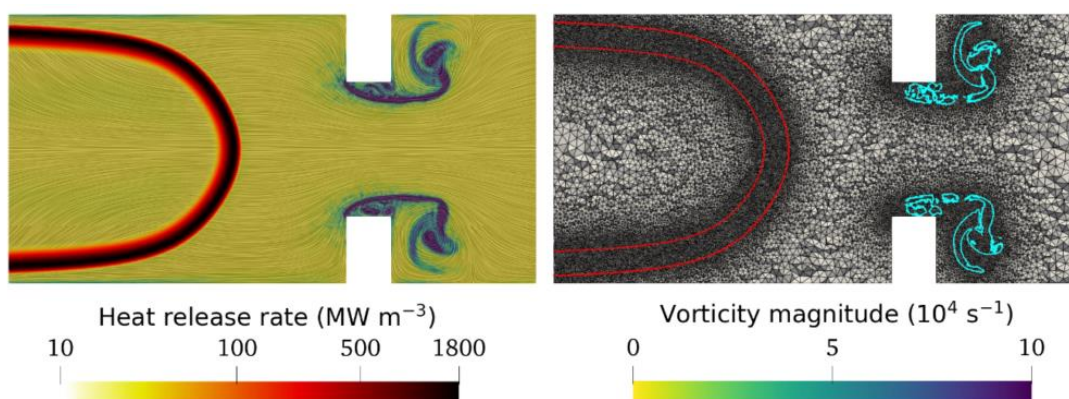


Fig 1:

Raffinement de Maillage Adaptatif dans un cas simple 2D d'un interaction flamme/obstacle.

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

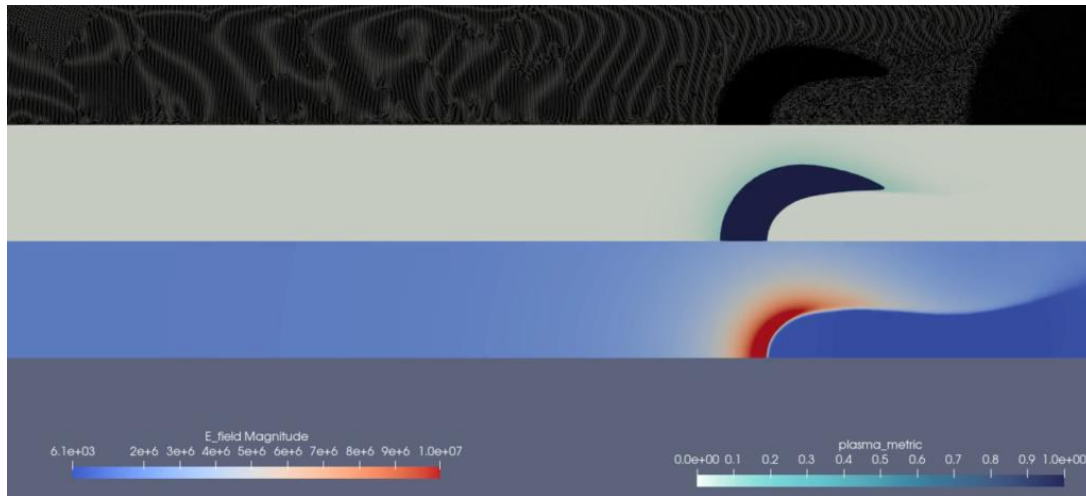


Fig 2:

Propagation d'un streamer positif en utilisant l'AMR: maillage (haut), métrique AMR (milieu) et champ électrique (bas).

Programme de travail :

1. Assimilation de la physique des décharges de plasma.
2. Simulation d'une décharge en utilisant l'AMR et diverses métriques pour déclencher le raffinement du maillage (2D).
3. Simulation d'une décharge dans un écoulement transversal (3D).

Programme technique :

1. Effectuer des développements dans le langage Fortran au sein du code AVBP avec le soutien des chercheurs du CERFACS.
2. Développer et améliorer des scripts de pré-traitement et de post-traitement en Python.

Une thèse (ANR JETHPAC) est financée pour septembre 2024, offrant une opportunité aux candidats très motivés de continuer à travailler dans le domaine de la combustion assistée par plasma.

Contacts:

N. Barléon (barleon@cerfacs.fr)

O. Vermorel (vermorel@cerfacs.fr)

B. Cuenot (cuenot@cerfacs.fr)

[1] L. Cheng, N. Barleon, O. Vermorel, B. Cuenot, A. Bourdon, AVIP: a low temperature plasma code (2022). arXiv:2201.01291.

[2] B. Vanbersel, F. A. M. Ramirez, P. Mohanamuraly, G. Staffebach, T. Jaravel, Q. Douasbin, O. Dounia, O. Vermorel, A systematic adaptive mesh refinement method for large eddy simulation of turbulent flame propagation (Oct. 2023). doi:10.21203/rs.3.rs-3388018/v1.

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Optimisation de maillage pour la prédiction par les de la limite d'extinction pauvre dans les chambres de combustion des turbines à gaz

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, CALCUL HAUTE PERFORMANCE, COMBUSTION, MÉTHODES NUMÉRIQUES, SIMULATIONS INFORMATIQUES DE DYNAMIQUE DES FLUIDES

Niveau requis : Master ou école d'Ingénieur

Date de début : 1 février 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 15 décembre 2023

Rémunération : 650€/ mois

Mission & plan de travail

L'objectif principal de ce stage est de **contribuer à l'avancement des techniques de simulation** en vue d'améliorer la **compréhension et la prédiction de la LBO** dans les chambres de combustion. Le/la stagiaire aura pour mission de **concevoir une stratégie de raffinement automatique** innovante, en tenant compte des modèles de sous-maille LES afin de converger vers des prédictions plus précises des quantités d'intérêt.

Plan de travail :

- Revue de l'état de l'art et choix de l'approche de raffinement de maillage.
- Implémentation et validation de la méthode sélectionnée sur des écoulements non réactifs simples dans le solveur AVBP, développé au CERFACS.
- Extension aux écoulements réactifs.
- Simulation d'une chambre de combustion en conditions proches de l'extinction pauvre. Comparaison coût/ précision de la méthode avec des maillages de référence.

Contexte

Les exigences de plus en plus strictes en matière d'émissions polluantes ont conduit à faire fonctionner les chambres de combustion des turbines à gaz modernes à fonctionner en régime pauvre (excès d'air) afin de réduire la température des gaz brûlés, réduisant ainsi les émissions de NOx. Cela augmente le risque d'extinction de la flamme à la **limite d'extinction pauvre** (Lean Blowout, ou LBO), phénomène qui présente un danger pour la sécurité dans les moteurs aéronautiques et nécessite des procédures coûteuses pour les turbines terrestres de production d'énergie.

Les mécanismes menant à la LBO dans les flammes swirlées restent mal compris, en raison des **interactions complexes** entre la chimie, l'écoulement, la dynamique et l'évaporation du carburant liquide.

La conception de nouveaux moteurs est devenue plus rapide et moins coûteuse grâce à la simulation. Aujourd'hui, la simulation aux grandes échelles (**Large Eddy Simulation**, LES) est la seule méthode capable de prédire de manière fiable la dynamique des chambres de combustion. Cependant, la prédiction de la LBO dans les chambres de combustion des turbines à gaz reste un défi majeur en raison de la complexité des phénomènes impliqués.

Les recherches récentes ont mis en évidence **l'impact significatif des pratiques de modélisation**, notamment le choix des modèles et des maillages, sur la prédiction de la limite d'extinction pauvre. Parmi ces facteurs, **le maillage joue un rôle crucial**. Il devient donc impératif de développer des stratégies de raffinement automatique en maillage pour la LES.

Une position de doctorat (thèse CIFRE SAFRAN) est prévue pour octobre 2024, offrant ainsi la possibilité de poursuivre ce travail pour les candidats hautement motivés. Ce sujet portera sur la prédiction de la LBO en LES.

Contacts :

Q. Douasbin (quentin.douasbin@cerfacs.fr),

E. Riber (eleonore.riber@cerfacs.fr),

B. Cuenot (benedicte.cuenot@cerfacs.fr)

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Simulation de brûleurs hydrogène / air o2 pour la production de verre (Saint Gobain / Cerfacs)

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, CALCUL HAUTE PERFORMANCE, COMBUSTION

Niveau requis : Master ou ingénieur dernière année

Date de début : 1 février 2024

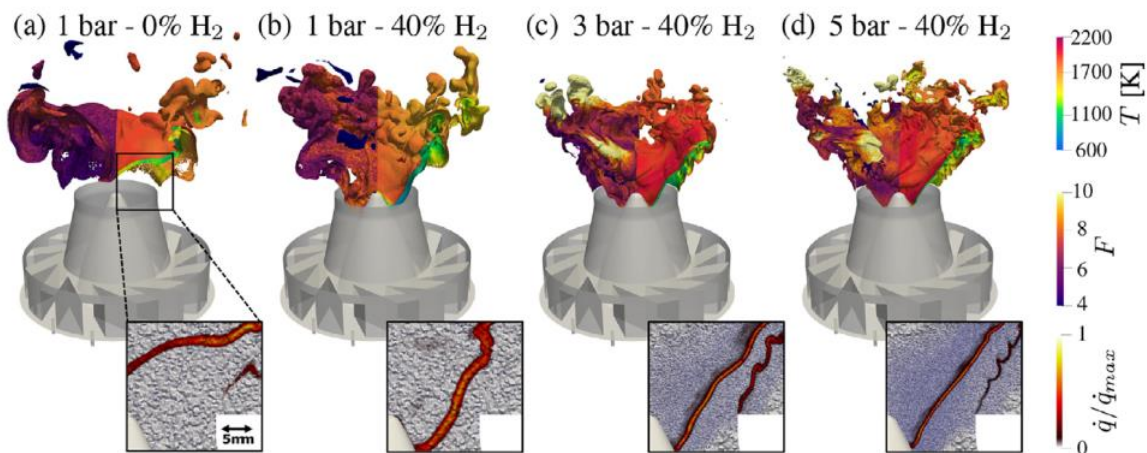
Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 21 décembre 2023

Rémunération : 650€/ mois

Décarboner l'industrie lourde est un enjeu essentiel pour lutter contre les effets du CO₂. L'objectif de ce stage est de calculer plusieurs configurations d'une flamme initialement propane / oxygène, transformée en flamme hydrogène / oxygène pour décarboner un processus industriel de Saint Gobain.

Les simulations seront faites avec le code AVBP du CERFACS, qui est la référence mondiale du domaine, dans l'équipe CFD du CERFACS (environ 80 personnes dont 45 thésards), en liaison avec l'équipe Saint Gobain Recherche. Ce stage devrait se poursuivre par une thèse en automne 2024, en liaison avec Saint Gobain.



Exemples de calculs de flamme CH₄/H₂ avec le code AVBP

Les trois configurations à calculer sont des cas déjà testés par Saint Gobain et certains résultats expérimentaux seront disponibles pour vérifier les simulations faites pendant le stage.

Pendant le stage, le stagiaire devra mailler les géométries d'un injecteur représentatif de la flamme avec ses variantes puis mettre en place un calcul AVBP réactif complet. On s'intéressera en particulier à la position de la flamme d'hydrogène dans le tube d'injection, à sa stabilité et à l'interaction avec les parois. Pour chaque cas, on caractérisera les champs d'espèces, de température et de vitesse en fonction de la distance à l'injecteur. Un calcul de transfert de chaleur sera effectué dans la partie solide de l'injecteur lui-même avec le code AVTP du CERFACS, pour évaluer la température des parois. En effet, les flammes hydrogène/oxygène ont des vitesses de flammes élevées et peuvent remonter dans les injecteurs ou les échauffer suffisamment pour les endommager. Ce mécanisme est contrôlé par la température des parois qu'il faut donc calculer en même temps que la combustion dans le gaz.

Contacts

poinot@cerfacs.fr

dombard@cerfacs.fr

cparroyo@cerfacs.fr

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Simulations haute-fidélité de l'interaction flamme/particules pour la sécurité hydrogène.

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, CALCUL HAUTE PERFORMANCE, MÉCANIQUE DES FLUIDES, MÉTHODES NUMÉRIQUES, SIMULATION NUMÉRIQUE

Niveau requis : Master ou école d'ingénieur

Date de début : 1 mars 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 1 février 2024

Rémunération : 650€/ mois

Contexte

L'Hydrogène est une des solutions mises en avant pour la réalisation de la transition énergétique. Ce vecteur énergétique, s'il est produit par à partir de sources renouvelables ou nucléaires par exemple, peut permettre de décarboner plusieurs secteurs de l'industrie, comme le transport, pour lesquels la réduction des émissions de gaz à effet de serre est particulièrement difficile à réaliser. L'Hydrogène peut aussi jouer un rôle important dans l'intégration de plusieurs sources d'énergie renouvelable, en offrant une solution efficace face aux problèmes d'intermittence via le stockage de cette énergie sur de longues périodes.

Le déploiement massif de l'Hydrogène dans notre société fait face à un problème majeur : les fuites accidentelles d'hydrogène et les risques d'incendie et d'explosion qui y sont associés. Ces scénarios peuvent avoir des conséquences tragiques dont l'impact sociétal peut freiner voire mettre un terme au déploiement de l'hydrogène. Pour faire face à ce risque, il est indispensable de mettre en place des mesures de mitigation efficaces contre ces risques. Ce point est d'importance capitale pour tout la filière hydrogène.

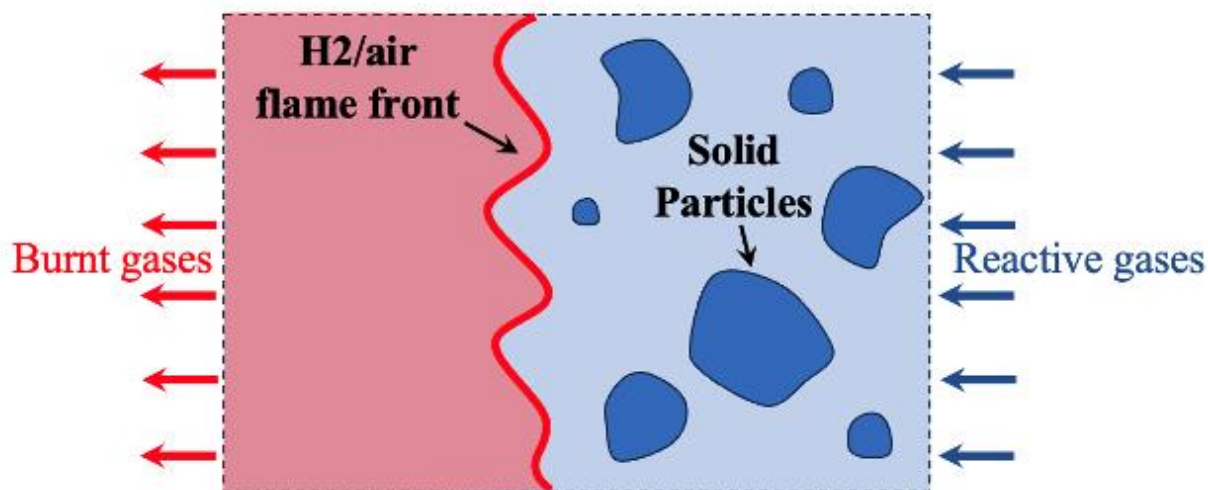


Fig. 1: Schémas de principe de l'interaction entre une flamme et un nuage de particules.

Ce stage propose d'étudier numériquement l'impact d'un nuage de particules solides ou liquides sur la « réactivité » d'une flamme d'hydrogène. La configuration à étudier est illustrée ci-dessus. Un intérêt particulier sera porté aux mécanismes contrôlant l'interaction de ces particules avec la structure interne de la flamme. L'objectif à court terme dans le cadre de ce stage sera d'étudier ces interactions en se focalisant sur les aspects aérodynamiques. Cependant à plus long terme, l'étude pourra également intégrer les aspects physico-chimiques induits par cette interaction.

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Ce stage sera co-encadré par le CERFACS et l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT). Une demande de financement pour une thèse a été déposée pour une éventuelle poursuite de ces travaux en doctorat. Le stagiaire pourra continuer en thèse s'il démontre une bonne motivation.

Impact

Durant son stage, l'étudiant développera une compréhension détaillée des processus fondamentaux contrôlant l'interaction d'une flamme d'hydrogène avec des particules liquides. Ce sujet est d'une importance majeure pour un déploiement rapide de technologies de production de l'énergie s'appuyant sur l'hydrogène.

L'étudiant développera des compétences de simulations numériques utilisant le code DIVA, développé à l'IMFT depuis de nombreuses années. Ce code de calcul est un code de référence pour la simulation d'écoulements multiphasiques en présence de changement de phase.

Contacts

Omar Dounia (dounia@cerfacs.fr)

Sébastien Tanguy (tanguy@imft.fr)

Annafederica Urbano (annafederica.urbano@isae-superaero.fr)

Nicolas Odier (odier@cerfacs.fr)

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Modélisation des conditions limites acoustiques dans les simulations haute-fidélité des moteurs H2/Air

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, ACOUSTIQUE, COMBUSTION, MECANIQUE DES FLUIDES, SIMULATION NUMERIQUE, SIMULATIONS INFORMATIQUES DE DYNAMIQUE DES FLUIDES

Niveau requis : Master ou école d'ingénieur

Date de début : 1 février 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 15 décembre 2023

Rémunération : 650 euros/mois

Contexte

L'hydrogène (H₂) sert de vecteur énergétique permettant la transition vers une société durable. Il peut être généré par électrolyse alimentée par de l'électricité durable et ainsi être utilisé pour stocker de l'énergie sous forme chimique. Une façon de récupérer cette énergie est de brûler l'H₂ dans un moteur thermique conventionnel. Ce processus de combustion n'émet aucun CO₂.

Lors de la conception de dispositifs de combustion, l'un des principaux défis est de prédire et de réduire les **instabilités thermoacoustiques**, également connues sous le nom d'instabilités de combustion. En bref, la boucle de rétroaction thermoacoustique se déroule comme suit. Les flammes instables dégagent de la chaleur à un taux variable dans le temps. Cette fluctuation génère des ondes acoustiques qui se propagent à l'intérieur du moteur. Comme toutes les géométries confinées, le moteur possède des modes acoustiques résonnants, ce qui conduit à l'amplification de longueurs d'onde spécifiques. Les ondes acoustiques sont réfléchies sur des limites acoustiques physiques (parois, entrées, sorties ou autres éléments du moteur) et perturbent ensuite l'écoulement, entraînant des fluctuations dans le taux de dégagement de chaleur. Lorsque ces fluctuations deviennent cohérentes avec les modes acoustiques résonnants, la rétroaction thermoacoustique constructive amplifie ces ondes acoustiques spécifiques, **entraînant des fluctuations de pression acoustique et de vitesse à haute amplitude**.

Lorsque des instabilités thermoacoustiques apparaissent, dans les meilleurs cas, elles conduisent à un fonctionnement extrêmement bruyant du moteur, pouvant endommager l'ouïe de l'opérateur. Dans d'autres cas, elles entraînent une défaillance du moteur (extinction de la flamme, retour de flamme, ...) voire même des défaillances catastrophiques, **détruisant ainsi l'ensemble du moteur en quelques millisecondes**.

Étant donné que l'H₂ est un carburant exceptionnellement puissant par rapport aux carburants hydrocarbonés traditionnels (la combustion de 1 kg d'H₂ libère 120 MJ tandis qu'un kg de gaz naturel n'en libère que 50 MJ), il est particulièrement sujet aux instabilités thermoacoustiques.

Les simulations haute-fidélité, notamment la Simulation aux Grandes Échelles (LES) et la Simulation Numérique Directe (DNS), sont des outils puissants couramment utilisés dans l'industrie et la recherche pour aider à la conception et à la compréhension de chambres de combustion stables H₂/Air.

Par conséquent, il est nécessaire que les modèles LES prédisent correctement les instabilités thermoacoustiques. En raison des propriétés spécifiques de ce carburant, la modélisation de la combustion de l'H₂ en elle-même est un défi. De plus, pour une prédiction précise des instabilités thermoacoustiques, il est impératif d'anticiper les **modes acoustiques réels du moteur** qui dépendent de la nature des **limites acoustiques physiques**.

Par conséquent, une attention particulière doit être accordée à la modélisation des conditions limites acoustiques en LES/DNS. Dans ce contexte, la méthode "Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition" (NSCBC), très utilisée, sera étudiée et modifiée afin **d'améliorer la prédiction des instabilités thermoacoustiques dans de véritables moteurs H₂/Air**.

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Projet de recherche :

Ce stage fait parti du projet SELECT-H (Safe and reliable Combustion Technologies powered by Hydrogen), subventionné par l'European Research Council.

Une position de doctorat est prévue pour octobre 2024, offrant ainsi la possibilité de poursuivre ce travail pour les candidats hautement motivés.

Programme de travail :

Le stage comprendra les étapes suivantes :

- Réaliser une revue de la littérature sur le traitement acoustique dans les simulations haute-fidélité.
- Co-implémenter les méthodes dans le solveur haute-fidélité CERFACS pour les équations de Navier-Stokes réactives (AVBP).
- Valider la méthode initialement sur des cas canoniques avant de simuler un véritable moteur H₂/ Air.

Contacts :

Q. Douasbin (quentin.douasbin@cerfacs.fr)

L. Gicquel (laurent.gicquel@cerfacs.fr)

T. Poinso (thierry.poinso@cerfacs.fr)

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Modélisation de la cinétique controlant la dynamique de flammes d'hydrogène (stage + these)

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, CALCUL HAUTE PERFORMANCE, MÉCANIQUE DES FLUIDES, MÉTHODES NUMÉRIQUES, SIMULATION NUMÉRIQUE

Niveau requis : Master ou école d'ingénieur

Date de début : 1 mars 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 1 février 2024

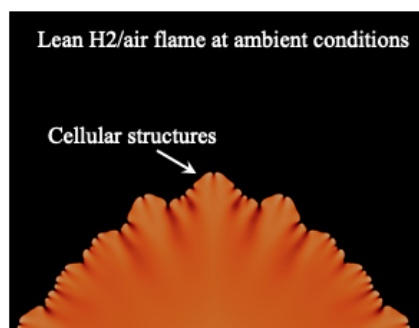
Rémunération : 650 euros/mois

Contexte

L'Hydrogène est une des solutions à la transition énergétique. S'il est produit par voie renouvelable ou nucléaire par exemple, il peut permettre de décarboner plusieurs secteurs de l'industrie, comme le transport, où la réduction des émissions s'est avérée particulièrement difficile par d'autres méthodes. L'Hydrogène peut aussi jouer un rôle important dans l'intégration de plusieurs sources d'énergie renouvelable, en offrant une solution efficace contre leur intermittence via le stockage de cette énergie sur de longues périodes.

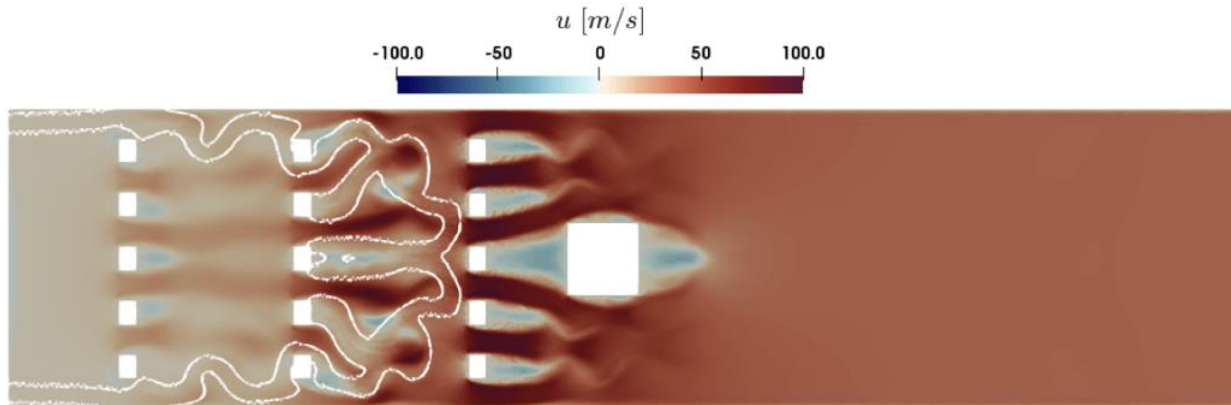
Le déploiement massif de l'Hydrogène dans notre société n'est pas possible sans une compréhension fondamentale des différents phénomènes physiques intervenant à différentes étapes de son utilisation : production, stockage, transport et consommation. En particulier, on peut nommer les phénomènes liés à la sécurité (flammes jet, explosion) et ceux liés à sa consommation (instabilités). Une prédiction précise de ces phénomènes, qui peuvent agir à grande échelle, n'est pas possible sans une description fiable et efficace du schéma réactionnel régissant la chimie des mélanges $H_2/O_2/N_2$.

Ce stage propose de développer une méthode automatique pour la génération de mécanismes simplifiés capables de reproduire les paramètres fondamentaux de la chimie $H_2/O_2/N_2$. Ces mécanismes devront prendre en compte une large gamme de pression, température et composition, augmentant ainsi leur pertinence pour la communauté scientifique de la combustion d'hydrogène. Ces schémas seront validés dans un **cas académique d'accélération de flamme d'intérêt pour la sécurité H_2** :



Flamme hydrogène instable simulée avec AVBP.

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.



Flamme hydrogène se propageant dans un canal avec obstacle, simulée avec AVBP.

Projet de recherche :

Ce stage s'inscrit dans le cadre du projet de recherche **TRACKDEMO** (TRAnsition of shoCK to DEtonation in Media with Obstacles) financé par l'ANR (collaboration CERFACS-institut Pprime) pour lequel deux thèses seront à pourvoir en septembre 2024, une au CERFACS (thèse numérique) et une autre à Pprime (thèse numérique/expérimentale). **Le stagiaire pourrait donc être amené à poursuivre ces travaux en thèse s'il démontre une bonne motivation.**

Programme :

Le stage suivra les étapes suivantes :

- Revue de la littérature sur les chimies réduites déjà disponibles pour la chimie H₂/O₂/N₂
- Développement d'une méthode systématique pour étendre les limites de validité des schémas cinétiques de la littérature. Le solveur CANTERA sera utilisé pour reproduire les propriétés fondamentales de la cinétique H₂/O₂/N₂. Des procédures d'optimisation seront développées sous Python.
- Un cas test de validation de la chimie développée sera réalisé avec le code AVBP dans le cas d'accélération de flamme

Impact :

Durant son stage, l'étudiant développera une compréhension détaillée des **processus fondamentaux contrôlant la cinétique H₂/O₂/N₂, et leur impact sur les phénomènes d'accélération de flamme**, d'importance majeure dans une société marquée par le déploiement rapide de solutions, à base d'hydrogène, à la crise énergétique.

L'étudiant sera formé à l'utilisation de deux outils : (1) solveur de chimie CANTERA, (2) code CFD AVBP, reconnu mondialement comme un code de référence pour la simulation d'écoulements compressibles réactifs et multiphasiques.

Contact: Envoyer CV à:

Omar Dounia: dounia@cerfacs.fr

Olivier vermorel: vermorel@cerfacs.fr

Thomas Jaravel: jaravel@cerfacs.fr

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Simulation des flammes d'hydrogene sur une fuite accidentelle (Airbus/Cerfacs)

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, CALCUL HAUTE PERFORMANCE, COMBUSTION, MÉCANIQUE DES FLUIDES

Niveau requis : Master ou Ingénieur

Date de début : 5 février 2024

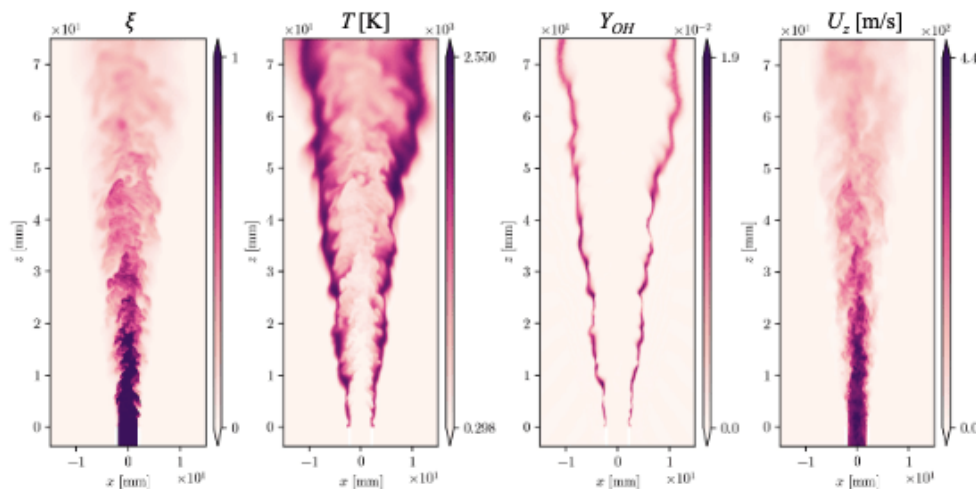
Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 24 janvier 2024

Rémunération : 650 euros/mois

La sécurité des avions du futur fonctionnant à l'hydrogène passe par un contrôle drastique de la sécurité et en particulier de potentielles flammes liées à une fuite d'hydrogène à partir d'un réservoir, d'un tuyau ou de tout élément contenant de l'hydrogène sous pression.

Le CERFACS développe un grand projet de simulation en collaboration avec Airbus pour étudier tous les scénarios possibles quand de l'hydrogène s'échappe d'un orifice dans l'air libre ou dans une cavité. Un outil essentiel pour aborder ces problèmes est la simulation, faite avec le code AVBP. Il s'agit de simulations de flammes jets qui sont souvent supersoniques car les pressions amont sont élevées. On utilise la simulation aux grandes échelles et on compare les résultats avec des expérimentations installées dans des laboratoires CNRS partenaires.



Exemple de simulation de flamme jet de H₂: H₂ est injecté dans de l'air et crée une flamme turbulente (thèse F. Garnier, CERFACS). La figure montre la fraction massique de H₂, la température, le radical OH et la vitesse axiale. Calcul AVBP.

Le stagiaire sera intégré dans ce dispositif. Il apprendra AVBP, la combustion, la LES, la thématique sécurité H₂ et ses déclinaisons en aéronautique. Il simulera des flammes jets de H₂, principalement supersoniques. Une forte motivation pour l'aéronautique est nécessaire. Une expérience dans le domaine des grands codes de CFD, le calcul parallèle, la combustion et la mécanique des fluides est souhaitable ainsi qu'un intérêt pour la théorie et la physique.

Après le stage, une thèse en collaboration avec Airbus sur ce thème sera disponible en octobre 2024 si le candidat démontre ses capacités et sa motivation.

Contacts: T. Jaravel (jaravel@cerfacs.fr), Q. Douasbin (qdouasbin@cerfacs.fr), T. Poinot (poinot@cerfacs.fr)

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Simulation des scénarios de sécurité hydrogène dans les turbines à gaz decarbonées (Projet Européen avec Baker Hughes)

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, CALCUL HAUTE PERFORMANCE, COMBUSTION, MÉCANIQUE DES FLUIDES, MÉTHODES NUMÉRIQUES, SÉCURITÉ

Niveau requis : Master ou Ecole d'ingénieurs

Date de début : 8 janvier 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 21 décembre 2023

Rémunération : 650 euros/mois

Le CERFACS participe à un projet Européen appelé HYPOWERGT, qui a pour ambition de faire tourner une turbine à gaz Baker Hughes à l'hydrogène pur. Dans ce projet avec de nombreux partenaires Européens, le CERFACS a un rôle particulier: simuler des scénarios où de l'hydrogène pourrait se trouver à un endroit non prévu pendant des séquences d'allumage ou d'extinction et mener à des explosions plus ou moins fortes. Le CERFACS utilise le code AVBP pour ces calculs. AVBP est le leader mondial des codes de simulation 3D pour la combustion instationnaire.

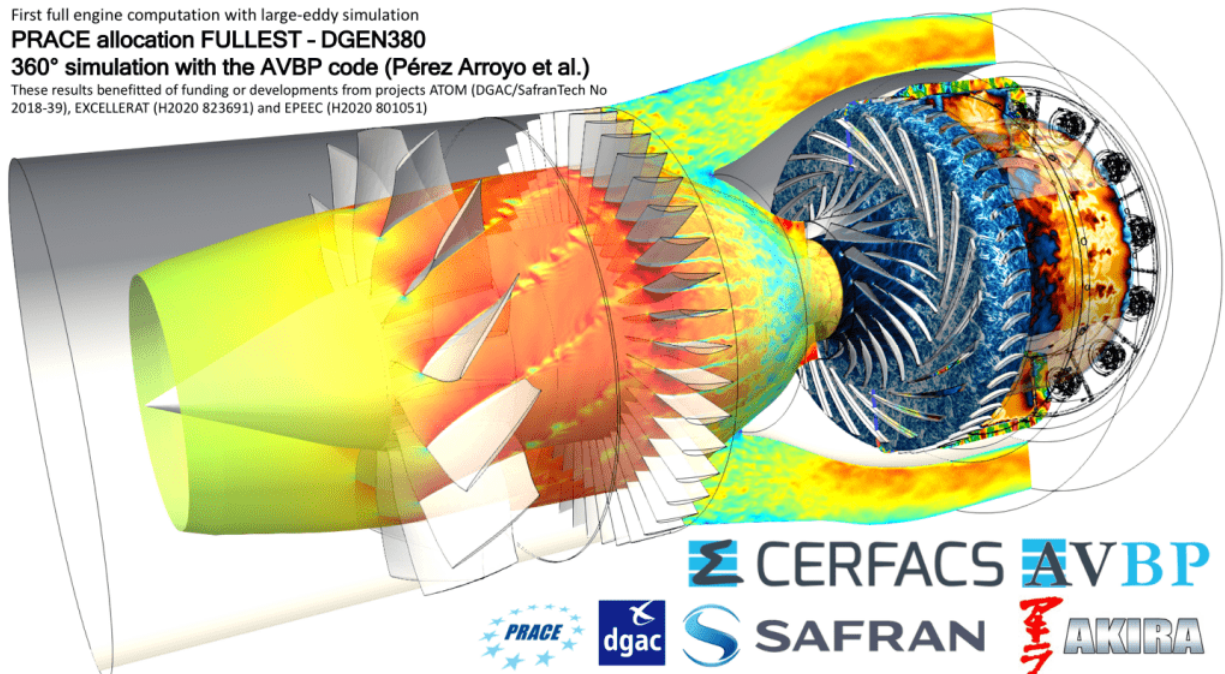
L'image ci dessous montre un calcul AVBP complet par le CERFACS (C. Perez Arroyo). Dans HYPOWERGT, on considérera un morceau de ce moteur où une fuite d'hydrogène pourra se produire et on simulera l'explosion qui pourrait suivre.

First full engine computation with large-eddy simulation

PRACE allocation FULLEST - DGEN380

360° simulation with the AVBP code (Pérez Arroyo et al.)

These results benefitted of funding or developments from projects ATOM (DGAC/SafranTech No 2018-39), EXCELLERAT (H2020 823691) and EPEEC (H2020 801051)



Pendant ce stage, l'étudiant apprendra la physique des explosions et comment les prévoir avec AVBP. Il participera au suivi du projet HYPOWERGT. Un solide background en mécanique des fluides et si possible en combustion est souhaitable ainsi qu'un intérêt pour les grands calculs en mécanique des fluides.

La suite naturelle de ce stage si il se déroule bien est une thèse au CERFACS dans le cadre de HYPOWERGT de octobre 2024 à Septembre 2027.

Contacts: poinsot@cerfacs.fr, lgicquel@cerfacs.fr

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Décarbonisation : simulation de scénarios de sécurité associés à des fuites d'hydrogène

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE,

Niveau requis : Master

Date de début : 1 février 2024

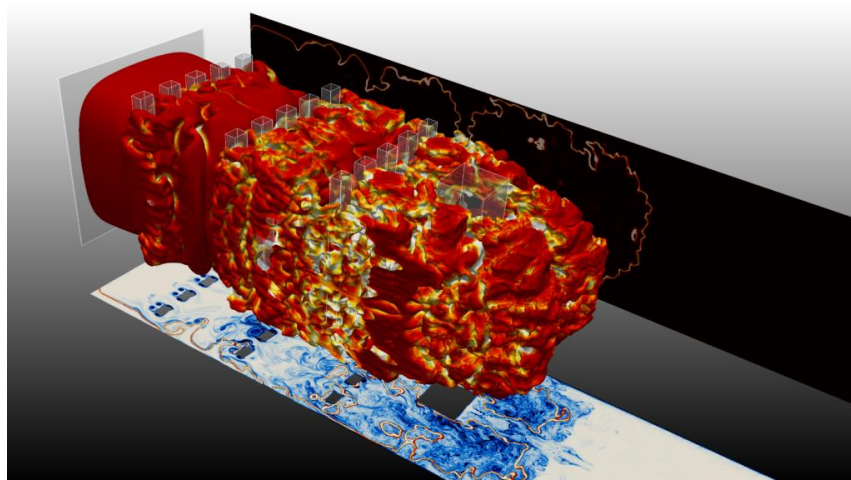
Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 4 janvier 2024

Rémunération : 650 euros/mois

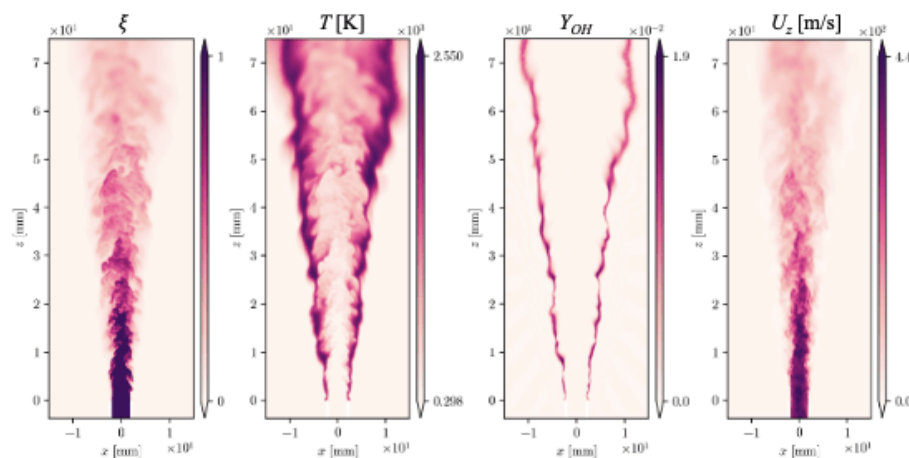
Le CERFACS collabore avec de nombreuses entreprises dans le domaine de la décarbonisation pour simuler des scénarios de sécurité associés à des fuites d'hydrogène. Ces fuites peuvent être volontaires (pour libérer la pression d'un réservoir d'hydrogène surchauffé) ou accidentelles (après la défaillance d'un conduit ou d'un élément d'un moteur ou d'un four). Lorsque l'hydrogène fuit, il se mélange à l'air et peut soit s'enflammer immédiatement (créant une flamme), soit s'enflammer plus tard (générant une explosion qui peut être encore plus grave).

La plupart des entreprises s'intéressent à la simulation de ces scénarios parce que les expériences sont trop compliquées, dangereuses et coûteuses (puisque le système expérimental lui-même ne peut généralement être utilisé qu'une seule fois avant de devoir être reconstruit). D'un point de vue scientifique, le sujet concerne les jets hypersoniques d'hydrogène se mélangeant à l'air, l'auto-inflammation, l'allumage par des plaques chauffantes, la propagation turbulente de la flamme, la transition vers la détonation. Dans ce domaine, le CERFACS recrute de nombreux docteurs (plus d'une dizaine sont aujourd'hui actifs au CERFACS sur les flammes d'hydrogène) et avant ces docteurs, offre la possibilité d'une première expérience de 6 mois par le biais de stages à l'issue d'un cursus de master. En 2024, deux ou trois stages de master seront proposés aux étudiants en fin de master. Pour être éligibles, les candidats doivent avoir une expérience en CFD et/ou en combustion ainsi qu'une solide formation en Mécanique des fluides.



Exemple de simulation d'explosion : LES d'une flamme se propageant dans un récipient avec des obstacles (PhD P. Quillatre)

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.



Exemple de flamme à jet d'hydrogène (thèse du Dr F. Garnier)

Les candidatures doivent être envoyées par courrier à

poinsot@cerfacs.fr

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Simulation d'explosions dans un contexte industriel : le défi des grandes dimensions (TotalEnergies / Cerfacs)

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, COMBUSTION, MÉCANIQUE DES FLUIDES, SÉCURITÉ, SIMULATIONS INFORMATIQUES DE DYNAMIQUE DES FLUIDES

Niveau requis : Master ou Ecole d'ingénieur

Date de début : 1 février 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 1 janvier 2024

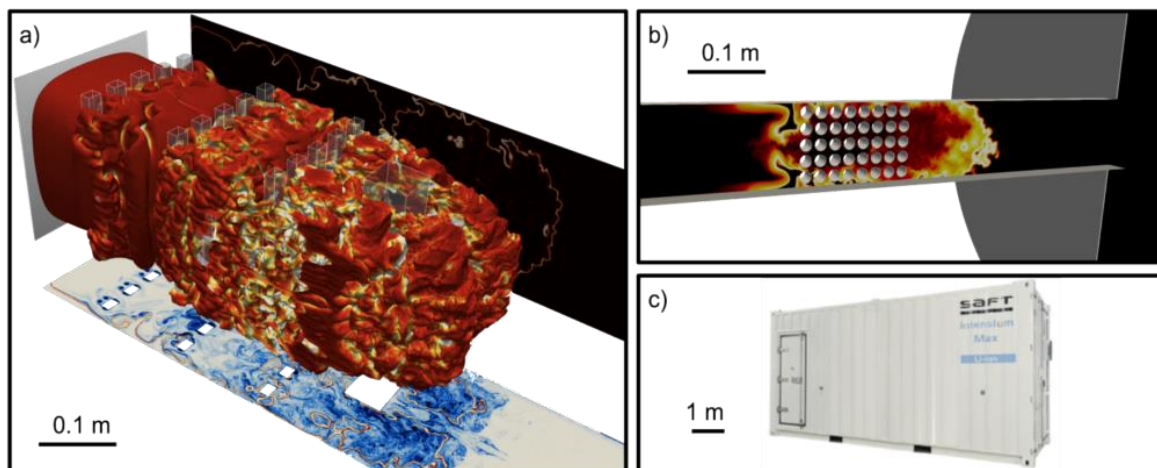
Rémunération : 650 euros/mois

Contexte

L'évaluation des risques d'explosion est un enjeu majeur pour l'industrie. L'utilisation d'outils de simulation haute-fidélité comme la simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs permet une capture fidèle de la physique du phénomène, aidant à la préparation de contre-mesures. La simulation d'explosions dans des systèmes de grandes dimensions, dépassant le mètre-cube, reste un défi rarement surmonté du fait de la disparité des échelles à représenter : des petites échelles liées à la flamme aux grandes échelles des dispositifs.

Mission

L'objectif du stage est d'évaluer les capacités du code de simulation aux grandes échelles AVBP [1], développé au CERFACS pour de nouvelles configurations d'explosion proches des questionnements industriels en termes d'échelles, d'obstacles, et de mélanges explosifs. Le stagiaire profitera donc d'une immersion dans l'équipe CFD du CERFACS (environ 80 personnes dont 45 thésards), en liaison avec l'équipe HSE de TotalEnergies. Dans un premier temps, les configurations à tester correspondent à des scénarios reproduits expérimentalement et pour lesquels des mesures de surpressions dues à l'explosion ainsi que des mesures de vitesse de propagation de flamme sont disponibles. Plusieurs scénarios sont à envisager, reproduisant les conséquences d'une fuite amenant à un mélange explosif de propane ou d'hydrogène, dans un ensemble d'obstacles modulables [2]. Ces configurations offriront une formation poussée à l'utilisation d'AVBP pour les phénomènes d'explosion. Dans un second temps, une réflexion plus générale sur l'applicabilité des outils aux explosions de grande échelle doit être menée, notamment en envisageant des configurations plus exotiques, clé pour le domaine de l'énergie et son futur : les systèmes de stockage de grande échelle Lithium-ion (BESS). Pour ces systèmes, pouvant être sujets à des emballements incontrôlés produisant des conditions explosives, développements et validations sont encore à proposer et une participation à ces étapes est prévue [3, 4].



Exemples de simulations d'explosions avec AVBP : a) le cas Masri medium-scale [5], b) application au Lithium-ion [4], c) exemple de configuration grande échelle Li-ion à viser [6].

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Programme de travail

- Monter en compétence sur la physique des explosions
- Formation à l'utilisation d'AVBP en général, et dans le contexte explosion en particulier
- Simulation de scénarios d'explosion de grande dimension et validation *versus* expérimental, comparaison à des codes de calcul d'explosion existants (FLACS, ...)
- Proposition et validation de stratégies pour des applications variées (BESS Li-ion)

Ce stage devrait se poursuivre par une thèse à partir d'automne 2024, en partenariat avec TotalEnergies.

Contacts

poinsot@cerfacs.fr

dounia@cerfacs.fr

duchaine@cerfacs.fr

Références

- [1] <https://www.cerfacs.fr/avbp7x/>
- [2] [Hiskens H. et al. , Assessing the influence of real releases on explosions: Selected results from large-scale experiments, J. Loss Prev. Proc. Ind. 72 \(2021\)](#)
- [3] [Peng R. et al. , Numerical investigation on explosion hazards of lithium-ion battery vented gases and deflagration venting design in containerized energy storage system, Fuel 351 \(2023\)](#)
- [4] [Cellier A. , Simulation aux Grandes Echelles de Feux de Batteries Lithium-ion pour le Diagnostic de l'Emballage Thermique, PhD Thesis \(2023\)](#)
- [5] [Quillatre P. , Simulation aux grandes échelles d'explosions en domaine semi-confiné, PhD Thesis \(2014\)](#)
- [6] <https://www.saft.com/>

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Stage lois d'état pour la simulation aux grandes échelles d'interfaces liquide-gaz

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE

Niveau requis : Master 2 / ingénieur

Date de début : Février / Mars 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 1 janvier 2024

Rémunération : 650 euros/mois

Le CERFACS développe depuis quelques années des méthodes numériques permettant la description des interfaces liquide-gaz, dans un contexte compressible.

Ces méthodes ont été appliquées avec succès pour la simulation aux grandes échelles d'injection de carburant au sein de moteurs aéronautiques, ou spatiaux.

Plusieurs lois d'état peuvent être considérées selon les conditions opératoires pour fermer le système thermodynamique. Des lois d'état décrivant les gaz non-idéaux, dites lois d'état *cubiques*, peuvent être utilisées dans des conditions de haute pression, et haute température.

Des lois d'état, dites « *stiffened-gas* » permettent elles la description des liquides à plus basse pression. L'objectif du stage sera de quantifier les erreurs induites par ces différentes lois d'état dans une large gamme de points de fonctionnement, depuis des conditions froides, basse pression, jusqu'à des conditions hautes pression, haute température. Des configurations d'interfaces planes, de gouttes isolées, et éventuellement de jets diphasiques seront investiguées.

Le candidat devra avoir une bonne connaissance de la thermodynamique, un goût prononcé pour la physique.

Niveau : Master2 / ingénieur

Contact :

odier@cerfacs.fr



Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Stage injection liquide moteur fusée

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE

Niveau requis : Master 2 / ingénieur

Date de début : Février / Mars 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 1 janvier 2024

Rémunération : 650 euros/mois

Le CERFACS, en collaboration avec le laboratoire EM2C, développe des méthodes numériques permettant la simulation aux grandes échelles d'injection liquide pour les moteurs spatiaux sous/trans/supercritiques, avec le code de calcul AVBP.

Une méthodologie permettant le passage d'une description eulérienne vers une description lagrangienne a également été développée pour la description du spray final dans le cas sous-critique.

L'objectif du stage sera d'investiguer l'impact de la chimie sur les résultats, ainsi que d'investiguer en détail l'impact de l'algorithme de passage de la description eulérienne vers la description lagrangienne.

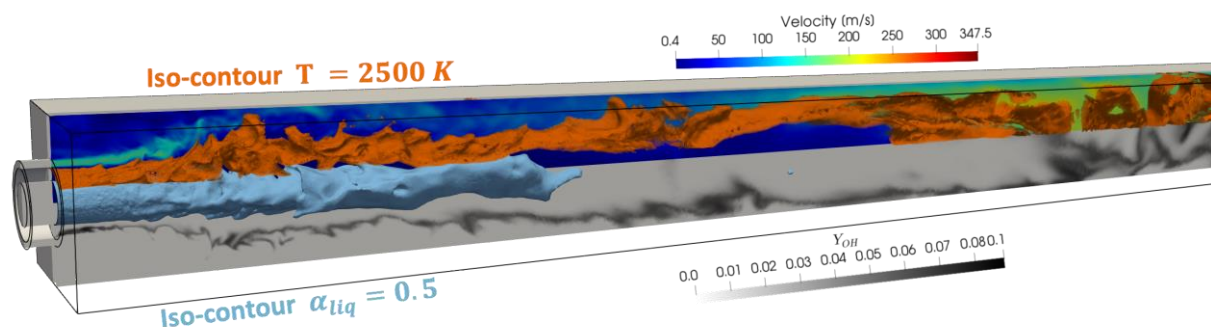
Pour ce faire, des configurations simplifiées de couches de mélange, de jets 2D seront considérées.

Le candidat devra avoir un goût prononcé pour la physique, une bonne connaissance de la thermodynamique, mécanique des fluides et combustion.

Niveau : Master2 / ingénieur

Contact :

odier@cerfacs.fr



Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Optimisation des paramètres de spray pour l'injection liquide dans les chambres de combustion

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, COMBUSTION, SIMULATION NUMERIQUE, MECANIQUE DES FLUIDES, PROGRAMMATION EN PYTHON, LIBRAIRIE SCIKIT-LEARN

Niveau requis : Fin d'études bac+5

Date de début : Février / Mars 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 1 janvier 2024

Rémunération : 650 euros/mois

Contexte

Aujourd'hui, la modélisation mathématique et la puissance des ordinateurs permettent de prédire avec précision la combustion turbulente dans des systèmes industriels. Cependant, il reste un élément clé encore difficile à modéliser, lié à l'injection de carburant liquide. En effet les systèmes d'injection sont conçus pour obtenir une atomisation du jet liquide en un spray de gouttes très fines, permettant une combustion plus efficace. Ce phénomène d'atomisation est très difficile à modéliser avec précision et une stratégie alternative qui consiste à injecter un spray déjà formé est aujourd'hui utilisée. Cette stratégie nécessite cependant de connaître les propriétés du spray, information qui n'est pas toujours disponible. Pour cette raison, une technique d'optimisation des paramètres du spray par rapport aux mesures disponibles, que ce soit au niveau du spray ou de la flamme, a été développée.

Mission

La mission consistera à mettre en place une chaîne d'optimisation des paramètres de spray en s'appuyant sur des bibliothèques Python existantes : scikit-learn, OpenTurns ou TensorFlow. La méthodologie d'optimisation reprendra celle mise au point dans des travaux précédents. Il s'agira donc, avec cette nouvelle chaîne d'optimisation, (i) de reproduire des résultats obtenus précédemment avec un autre outil numérique d'optimisation (Thèse de B. Rochette) et (ii) de produire les paramètres spray pour un nouveau cas d'étude (brûleur SSB). Les simulations des flammes turbulentes des cas étudiés seront réalisées avec le code de combustion AVBP.

Compétences demandées

Simulation numérique, Mécanique des Fluides, Programmation en Python, Bibliothèque Scikit-learn, Combustion, Français et Anglais

Aptitudes

Esprit d'analyse et de synthèse, Capacité d'innovation, Aptitude à travailler en autonomie, Qualités relationnelles, Rigueur

Envoyer CV + Lettre de motivation à :

cuenot@cerfacs.fr

riber@cerfacs.fr

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Stagiaire (H/F): vers des modèles de fondation pour la simulation fluide – un premier pas avec les écoulements proche-paroi

STAGE, ALGORITHMES PARALLÈLES

Niveau requis : Master 2 / ingénieur

Date de début : 1 Février 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 15 janvier 2024

Rémunération : 650 euros/mois

Le CERFACS est un organisme de recherche scientifique et de formation, spécialisé dans la physique informatique. Il favorise les synergies entre les mathématiciens appliqués, les physiciens experts et les informaticiens, qui collaborent pour approfondir la compréhension de questions complexes allant de la physique de la terre aux systèmes d'ingénierie qui dépendent des écoulements turbulents. Pour plus d'informations sur le CERFACS, voir <https://cerfacs.fr>.

Ce travail sera effectué au sein de l'équipe Algo-COOP <https://cerfacs.fr/coop/>, qui apporte un soutien crucial à la mission du CERFACS en améliorant les méthodes de calcul, en développant des algorithmes parallèles innovants et des techniques d'assimilation de données, et en tirant parti de l'IA pour la science.

Contexte

L'intelligence artificielle a connu des développements rapides et des réalisations impressionnantes dans les années 2010, dans divers domaines tels que le traitement du langage naturel (NLP), la reconnaissance et la synthèse vocales, la vision par ordinateur et la synthèse d'images, et bien d'autres encore. Les applications comparables dans l'ingénierie et la conception restent toutefois minimes. Cela peut s'expliquer par plusieurs facteurs, par exemple la disponibilité préalable de méthodes numériques précises et robustes, l'attente d'une robustesse et d'une fiabilité comparables, ou le manque d'ensembles de données diversifiées de haute qualité.

Dans le domaine du traitement du langage naturel (NLP), un changement de paradigme s'est amorcé au cours de cette décennie avec l'émergence de ce que l'on appelle les « modèles de base » [1]. Ceux-ci exploitent des ensembles de données à grande échelle avec des techniques d'apprentissage auto-supervisé et transmettent des caractéristiques génériques qui peuvent être transférées à diverses tâches après une étape potentielle de mise au point. Ces modèles ont donné naissance aux « transformateurs préentraînés généralisés » (GPT) et au ChatGPT, qui ont sans doute propulsé l'IA à un niveau de notoriété encore plus élevé qu'au cours de la décennie précédente. Une tendance similaire a été observée dans le domaine de la vision avec les transformateurs de vision (ViT), et sur les données multimodales avec des travaux récents (CLIP, DALL-E, FLAMINGO). Cette tendance a commencé à avoir un impact sur les domaines scientifiques, en particulier les sciences de la terre, pour les problèmes météorologiques et climatiques. Le récent article Climax [2] et les travaux connexes [3, 4] montrent des résultats prometteurs pour le pré-entraînement d'un modèle fondamental pour le temps et le climat qui peut être efficacement adapté à des tâches générales liées à l'atmosphère terrestre. La clé de l'approche est d'exploiter des simulations riches et hétérogènes pour entraîner le modèle de base, d'inclure des transformateurs de type vision pour différents sous-ensembles de variables atmosphériques, et de concevoir une tâche globale de prétexte dédiée à la prévision d'un ensemble arbitraire de variables d'entrée à un moment arbitraire dans l'avenir.

Déroulé du stage

L'objectif de ce stage sera d'appliquer l'approche générale d'apprentissage auto-supervisé et les architectures profondes de [2] à une base de données précédemment agrégée au CERFACS [5, 6] de multiples simulations de CFD. Les propriétés statistiques et de généralisation de ces algorithmes seront évaluées, *e.g.* les capacités d'inpainting des modèles de fondation appris dans les différentes tâches CFD. Plus précisément, l'objectif sera de produire et d'évaluer les écoulements près de la paroi et à l'entrée. Il doit s'agir d'écoulements instables, avec une grande ressemblance avec une turbulence réaliste, et sans perturbations significatives à l'interface avec l'écoulement résolu.

Le candidat cherchera ensuite à améliorer cette base en utilisant de nouveaux modèles profonds, en se concentrant sur la nature des données CFD et sur la manière dont elles diffèrent des données climatiques. En

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

particulier, l'utilisation de contextes spatiaux croissants sera explorée, par le biais de différents encodages de données (cadres sans maillage comme PINNs/Opérateurs neuronaux, réseaux de graphes, interpolation vers les voxels). Selon les dernières évolutions de la littérature et des logiciels libres disponibles, l'intégration du contexte temporel, *par exemple via* des méthodes autorégressives, sera également étudiée [7]. Dans tous les cas, une évaluation minutieuse de la qualité des générations et de leur utilisation potentielle dans le contexte de la substitution du flux près de la paroi et de la génération du flux entrant sera effectuée.

Ce travail sera effectué dans des environnements HPC. Tout d'abord, l'entraînement à partir d'un ensemble de données hétérogènes de simulations CFD pose d'importants problèmes de données qui devront être résolus par le candidat. Deuxièmement, les modèles entraînés résultants seront évalués directement dans l'un des solveurs HPC phares du CERFACS, [AVBP](#). En s'appuyant sur des travaux antérieurs, et notamment sur la bibliothèque de couplage de solveurs AI-Physics [PhyDLL](#), le candidat mettra en place des cas de validation pour la simulation hybride, où le solveur et le réseau entraîné travaillent ensemble pour produire la solution variable dans le temps. Cette stratégie doit s'adapter aussi bien qu'AVBP lui-même, sur des architectures massivement parallèles composées d'un mélange de CPU et de GPU.

Le stage devrait durer environ 6 mois, à partir de la fin de l'hiver / début du printemps 2024.

Profil recherché

Actuellement en dernière année de master, avec une spécialisation en physique numérique ou dans un domaine connexe, vous avez une certaine expérience du ML, ou un goût prononcé pour ces technologies et le désir d'apprendre à les connaître. Alternativement, vous avez une spécialisation en informatique et en ML, et vous êtes intéressé par les applications de modélisation physique. Ce poste exige une lecture active de la littérature scientifique dans le domaine et un apprentissage rapide. Dans l'environnement d'un laboratoire de recherche, l'initiative, l'autonomie, la créativité et la pensée synthétique sont très appréciées. Une expérience avec des solveurs CFD, des bibliothèques d'apprentissage profond ou un langage de traitement de données (Python, R, Matlab) est un plus.

Ce stage se chevauchera avec le début du projet ANR PHLUSIM. Un financement de doctorat est inclus qui correspond au suivi de ce sujet, en co-tutelle entre le CERFACS et La Sorbonne Université. Un candidat souhaitant poursuivre un doctorat sera un atout pour ce poste.

Contact

Veuillez envoyer votre curriculum vitae, ainsi qu'un bref résumé de vos motivations et des raisons pour lesquelles ce poste vous intéresse, aux adresses électroniques suivantes :

- Corentin Lapeyre (lapeyre@cerfacs.fr)
- Nicolas Odier (odier@cerfacs.fr)

Bibliographie

- [1] Bommasani, R., & Liang, P. (2021). Reflections on foundation models. *Stanford Institute for Human-Centered AI*.
- [2] Tung Nguyen, Johannes Brandstetter, Ashish Kapoor, Jayesh K. Gupta, and Aditya Grover. "ClimaX: A foundation model for weather and climate". In: (2023). eprint: arXiv:2301.10343.
- [3] Jaideep Pathak et al. FourCastNet: A Global Data-driven High-resolution Weather Model using Adaptive Fourier Neural Operators. 2022. eprint: arXiv:2202.11214.
- [4] Remi Lam et al. GraphCast: Learning skillful medium-range global weather forecasting. 2022. eprint: arXiv:2212.12794.
- [5] Dupuy, D., Odier, N., & Lapeyre, C. (2023). Data-driven wall modeling for turbulent separated flows. *Journal of Computational Physics*, 487, 112173. doi:10.1016/j.jcp.2023.112173
- [6] Dupuy, D., Odier, N., Lapeyre, C., & Papadogiannis, D. (2023). Modeling the wall shear stress in large-eddy simulation using graph neural networks. *Data-Centric Engineering*, 4, e7. doi:10.1017/dce.2023.2
- [7] Kohl, G., Chen, L. W., & Thuerey, N. (2023). Turbulent Flow Simulation using Autoregressive Conditional Diffusion Models. arXiv preprint arXiv:2309.01745.

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Mise en œuvre de la méthode des différences spectrales dans un code Julia en vue d'une étude comparative des méthodes d'ordre élevé

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, PROGRAMMATION (Julia), METHODES NUMERIQUES

Niveau requis : Fin d'études bac+5

Date de début : 1 Février 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 15 Décembre 2023

Rémunération : 650 euros/mois

Thématiques

- Programmation (Julia)
- Méthodes numériques

Contexte

L'évolution des exigences aéronautiques, en matière de performance, de consommation et d'impact environnemental (émissions, bruit), entraîne un besoin d'optimisation des systèmes industriels. La simulation numérique instationnaire est un atout majeur pour traiter cette problématique. Les codes actuels sont principalement pensés pour fonctionner sur une architecture CPU (Central Processing Unit). Toutefois, les enjeux énergétiques et les performances de calcul tendent à promouvoir les architectures centrées autour du GPU (Graphical Processing Unit). Ce changement de structure des supercalculateurs récents nécessite un portage des codes de calculs, afin de pouvoir fonctionner sur des systèmes hybrides. Dans ce contexte, le CERFACS veille à évaluer la maturité des différentes solutions technologiques disponibles.

Missions

L'objectif de ce stage est d'évaluer les capacités de la plateforme Trixi [1] (code Julia) en y intégrant la méthode des Différences Spectrales, actuellement utilisée dans les codes de calcul du CERFACS. Cette méthode d'ordre élevé partage des similitudes avec la DGSEM déjà disponible dans Trixi. Les performances des deux approches seront évaluées sur des cas de référence de la littérature (Convected Vortex, Kelvin Helmholtz instability, Taylor Green Vortex). Dans un premier temps, le candidat devra se familiariser avec la programmation en Julia et les méthodes numériques d'ordre élevé. Ensuite, la méthode des différences spectrales sera mise en œuvre dans la plateforme en s'appuyant sur les compétences développées au CERFACS et sur l'expérience acquise par le candidat. Pour finir, ces développements seront validés sur des cas tests académiques et les résultats seront comparés à la méthode DGSEM.

Profil recherché

Le candidat doit avoir des connaissances solides en programmation (Python / Matlab et/ou C++) afin de faciliter la prise en main du code. Une première expérience avec le langage Julia serait fortement appréciée bien que non essentielle. De plus, le candidat doit être familier avec les méthodes numériques de résolution des EDP (Equations aux Dérivées Partielles). Dans le cadre d'un travail de recherche, le candidat, préparant un Master 2 (ou équivalent), doit être capable de présenter ses travaux à l'ensemble de l'équipe (écrit / oral). Une autonomie de travail inhérente à la recherche (bibliographie, choix de développements, validation, etc.) est également attendue.

Aptitudes

- Capacité de travail en équipe
- Esprit d'initiative
- Rigueur
- Qualités d'analyse et de synthèse

Contacts

arthur.colombie@cerfacs.fr

boussuge@cerfacs.fr

References

[1] <https://github.com/trixi-framework/Trixi.jl>

Le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) travaille à la résolution, par la modélisation et la simulation numérique, des problèmes scientifiques nécessitant le recours aux moyens de calcul les plus puissants. Il associe de manière interdisciplinaire, pour la recherche comme pour la formation avancée, des physiciens, des mathématiciens appliqués, des numériciens et des ingénieurs.

Quantification de l'impact de différentes méthodes de génération de turbulence synthétique dans les simulations d'ordre élevé

STAGE, MÉCANIQUE DES FLUIDES NUMÉRIQUE, METHODES D'ORDRE ELEVE, DIFFERENCES SPECTRALES, TURBULENCE

Niveau requis : Fin d'études bac+5

Date de début : 1 Février 2024

Durée de la mission : 6 mois

Date limite des candidatures : 15 Décembre 2023

Rémunération : 650 euros/mois

Thématiques

- Méthodes d'ordre élevé
- Différences spectrales
- Turbulence

Contexte

Le développement de solutions technologiques liées à la réduction de l'impact environnemental (émissions, bruit) des systèmes aéronautiques s'appuie de plus en plus sur l'utilisation de simulations numériques instationnaires. Ces méthodes autrefois hors de portée ont bénéficié de la croissance rapide des moyens de calculs, ce qui leur a permis de s'imposer comme un outil essentiel à la conception de certains composants. Dans ce contexte, le CERFACS développe des méthodes d'ordre élevé (différences spectrales), permettant une plus grande précision que les méthodes classiques pour un coût de calcul donné. Toutefois, la réduction des perturbations associées aux techniques de génération de turbulence constitue un axe de travail majeur pour ces nouvelles méthodes.

Missions

L'objectif de ce stage consiste à évaluer diverses méthodes de génération de turbulence (méthode de Kraichnan, digital filter, ...) appliquées à la simulation d'ordre élevé (code JAGUAR). La première mission sera l'analyse des perturbations de pression générées par la turbulence synthétique initialement introduite dans le domaine. L'amplitude initiale, la propagation et l'atténuation des ondes seront évaluées. La deuxième mission aura pour but d'étudier l'impact des différentes méthodes de génération de turbulence sur le calcul des statistiques turbulentes, en particulier pour les moments d'ordre 2 et plus. En fonction de l'avancée des travaux, le candidat sera amené à développer de nouvelles méthodes de génération de turbulence dans le code JAGUAR (langage FORTRAN).

Profil recherché

Le candidat doit avoir des connaissances solides en mécanique des fluides compressibles et en turbulence. De même, les principes de bases associés à la simulation numérique doivent être maîtrisés (notions de méthodes et schémas numériques, conditions limites, maillage). Une expérience antérieure en simulation numérique instationnaire constituerait un atout pour ce stage. Enfin, les compétences de base en programmation sont nécessaires pour intervenir dans le code de calcul. Dans le cadre d'un travail de recherche, le candidat, préparant un Master 2 (ou équivalent), doit être capable de présenter ses travaux à l'ensemble de l'équipe (écrit / oral). Une autonomie de travail inhérente à la recherche (bibliographie, choix de développements, validation, etc.) est également attendue.

Aptitudes

- Capacité de travail en équipe
- Esprit d'initiative
- Qualités d'analyse et de synthèse

Contacts

arthur.colombie@cerfacs.fr

daviller@cerfacs.fr