**Titre de la thèse** : Simulation numérique et modélisation de la turbulence compressible dans les écoulements de gaz denses

**Mots-clés :** Gaz dense, Turbulence compressible, Couche de mélange, Simulation Numérique Directe (SND), Simulation des Grandes Echelles (SGE) *a priori* et *a posteriori*, Apprentissage Automatique

**Résumé :**

Ce travail porte sur l'analyse et la modélisation de la turbulence dans les écoulements de **gaz denses** (GD). L'intérêt pour ces gaz provient de l'industrie des machines à cycle organique de Rankine (COR), utilisant le cycle de William Rankine largement répandu dans le monde industriel. Le fluide de travail organique utilisé de préférence à l'eau est détendu après évaporation afin de produire de l'énergie mécanique puis de l'électricité.

Au cours des 40 dernières années, les GD ont été largement utilisés par l'industrie des COR en raison de la flexibilité qu’ils apportent. Leur principal avantage est leur capacité à échanger des quantités importantes d'énergie à des températures modérées voire faibles pour la source chaude. Les GD sont des vapeurs monophasiques caractérisées par de longues chaînes d'atomes et par une masse molaire moyenne voire élevée. Leur comportement proche du point critique est très différent des gaz classiques. Nous étudierons ici une sous-famille des GD, également très répandue dans l'industrie, nommée gaz Bethe-Zel’dovich-Thompson (BZT). Ces gaz présentent une zone thermodynamique dite d'inversion où la dérivée fondamentale Γ de la dynamique des gaz est négative, autorisant les ondes de choc de détente.

L'utilisation de ces gaz pose des problèmes de modélisation lors de la conception des turbines dans les COR du fait de la nature très compressible des écoulements turbulents produits et de leur différence avec les gaz parfaits (GP). Jusqu'à présent, bien que les propriétés thermodynamiques des GD soient très différentes de celles des GP, les modèles de fermeture de la turbulence développés pour les GP ont été utilisés pour les simulations RANS et les simulations des grandes échelles (SGE) d'écoulements de GD faute de modèles dédiés disponibles. Le comportement singulier de ces gaz, en particulier les gaz BZT, remet en question ce choix qui suppose implicitement que les structures turbulentes ne sont pas modifiées par les effets GD.

Cette thèse s'intéresse au problème de la modélisation SGE pour ces gaz et comprend 3 étapes principales :1) l'analyse détaillée de simulations numériques directes (SND) de couches de mélange ; 2) l'évaluation *a priori* des termes de sous-maille en utilisant des SND filtrées (une SND de turbulence homogène isotrope est également utilisée) ; 3) la construction et la validation *a posteriori* d'une nouvelle modélisation de sous-maille en utilisant l'apprentissage automatique supervisé.

Dans le chapitre 3, les SND de couche de mélange pour l'air considéré comme un gaz parfait sont validées par comparaison avec les résultats de la littérature pour trois valeurs du nombre de Mach convectif (Mc=0.1-1.1-2.2). Le chapitre 4 est consacré à l'étude des SND de GD. La comparaison avec les résultats GP montre des différences majeures pour le taux de croissance de l'épaisseur de quantité de mouvement à Mc=2.2 (deux fois plus grand pour GD). Cependant, ces différences ne sont pas dues aux régions thermodynamiques BZT et GD mais plutôt aux effets gaz réels transcritiques. Plusieurs facteurs sont responsables de la réduction des effets de compressibilité dans les couches de mélange GD : le découplage entre l'énergie cinétique et l'énergie interne ; les pertes par frottement sont réduites, modifiant la distribution de la masse volumique, ce qui favorise le taux de croissance de la couche de mélange.

L'évaluation *a priori* met en évidence deux nouveaux termes de sous-maille qui doivent être modélisés pour les GD en plus des termes de sous-maille habituellement modélisés en GP : le terme associé au gradient de pression et celui associé au travail des forces de pression.

Le chapitre 6 propose donc une méthodologie afin de modéliser le terme de sous-maille de pression en utilisant des réseaux de neurones. Les résultats montrent le succès de la validation a priori. La validation a posteriori est ensuite réalisée pour des couches de mélange à Mc=1.1 et Mc=2.2 pour plusieurs tailles de filtrage.

**Title of the thesis:** Numerical simulation and modeling of compressible turbulence in dense gas flows

**Keywords:** Dense Gas, Compressible Turbulence, Mixing Layer, Direct Numerical Simulation (DNS), *a priori* and *a posteriori* Large Eddy Simulation (LES), Machine Learning

**Summary**

The present work is devoted to the analysis and modeling of turbulence in flows of **dense gases** (DG). The interest for these gases mainly comes from the Organic Rankine Cycles (ORC) turbine industry. ORCs rely on the so-called and widely used William Rankine's cycle. The organic working fluid (instead of water) is expanded after being evaporated so as to produce mechanical energy and then electricity.

Among organic fluids, DG have been widely used in the ORC industry over the past 40 years. Indeed, their use enables a great adaptability for ORCs. The main advantage of DG is their capacity to exchange large amount of energy at low to moderate temperatures for the heat source. DG are single-phase vapors characterized by long chains of atoms and medium to large molecular weights. In the vicinity of the critical point, DG exhibit an unusual behavior when compared with classical gases. In this study, specific DG called Bethe-Zel’dovich-Thompson (BZT) gases, also widely used in the industry, are considered. BZT gases display an "inversion zone", that is a thermodynamic region where the fundamental derivative of gas dynamics Γ becomes negative, allowing the existence of expansion shock-waves.

The use of DG in ORCs raises modeling issues when numerically designing ORC turbines since the turbulent flows at stake include both significant compressibility effects and differences with respect to perfect gases (PG). Up to now, although DG thermodynamic features strongly differ from those of PG, turbulence closure models developed for PG have been applied for RANS simulations and Large Eddy Simulation (LES) of DG flows, for lack of a better option. The peculiar thermodynamic behavior of DG, in particular BZT gases, questions the relevance of this choice, which implicitly assumes that turbulent structures are not affected by DG effects.

The present thesis tackles the DG LES modeling issue by considering 3 main steps: 1) the detailed analysis of DG mixing layers direct numerical simulation (DNS); 2) an *a priori* assessment of LES subgrid-scale (SGS) terms using filtered DNS (DNS of homogeneous isotropic turbulence is also used); 3) the construction and *a posteriori* validation of a new LES SGS model using supervised machine learning algorithms.

DNS of mixing layers are first computed for air considered as a PG in Chapter 3 for three values of the convective Mach numbers (Mc=0.1-1.1-2.2). Their comparison to reference results from the literature validates the present DNS strategy. Chapter 4 is dedicated to the computation of DG DNS of mixing layers and the comparison with PG DNS. Results show major differences for the momentum thickness growth rates at Mc=2.2, which is twice as large for DG when compared to PG. Yet, BZT effects have only a small influence on the mixing layer growth. Discrepancies between DG and PG flows are more likely related to transcritical real gas effects rather than linked to the BZT and the DG thermodynamic regions. Shocklets produce indeed only a limited effect on the mixing layer growth. Several factors tend to reduce compressibility effects in DG mixing layers: the decoupling of kinetic and internal energies reduces the effect of increasing Mc; reduced friction losses in DG flows modify the averaged density distribution, which favors the momentum thickness growth rate

The *a priori* evaluation of SGS terms is performed from filtered DNS for the 2 above-mentioned configurations. The SGS pressure term and SGS pressure work appearing respectively in the filtered momentum and total energy equation need to be modeled in addition to the SGS terms usually modeled in PG flows.

To answer the need for a specific SGS modeling, Chapter 6 proposes a modeling methodology using artificial neural networks (ANN). The method is then applied to the SGS pressure term showing a proper *a priori* prediction of the term. The *a posteriori* assessment is carried out for mixing layers at Mc=1.1 and Mc=2.2 with several filtering sizes.