AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10
http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php
http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm

UNIVERSITÉ DE LORRAINE

École doctorale SIMPPÉ

Conceptions optimales de réacteurs à lit fixe par fabrication additive

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 15 janvier 2021

pour l'obtention du

Doctorat de l'Université de Lorraine

Spécialité : Génie des Procédés, des Produits et des Molécules

par

Alexis Courtais

Composition du jury

Président :	Yannick Privat, Professeur, Université de Strasbourg, Strasbourg
Rapporteurs :	Brahim Benyahia, Professeur, Université de Loughborough, Loughborough Benoît Chachuat, Professeur, Imperial College London, Londres
Examinateurs :	Marcela Szopos, Professeur, Université de Paris, Paris François Lesage, Maître de conférences, Université de Lorraine, Nancy Abderrazak M. Latifi, Professeur, Université de Lorraine, Nancy
Invités :	Denis Funfschilling, Chargé de recherches CNRS, Laboratoire ICube, Strasbourg Cyril Pelaingre, Docteur-ingénieur, Responsable R&D, CIRTES, Saint-Dié-des-Vosges

Laboratoire Réactions et Génie des Procédés — UMR 7274

Mis en page avec la classe thesul.

Remerciements

Ce travail de thèse a été financé par l'Institut Carnot ICÉEL et je remercie Jean-Michel Crompin d'avoir cru en ce projet.

Ce travail a été réalisé au Laboratoire Réactions et Génie des Procédés à Nancy d'octobre 2017 à janvier 2021 et je tiens à remercier monsieur Laurent Falk de m'avoir accueilli dans ce laboratoire.

Mes plus chaleureux remerciements vont à messieurs François Lesage et Abderrazak Latifi pour leur soutien, leurs nombreux conseils, leur pédagogie et leur disponibilité. Ils ont su me faire grandir autant scientifiquement qu'humainement. Les exigences qu'ils attendaient de moi m'ont permis de me surpasser et de toujours vouloir améliorer mon travail. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma profonde reconnaissance.

Je voudrais aussi remercier monsieur Yannick Privat pour sa disponibilité et son aide fournie au cours ces trois années. J'aimerai également le remercier pour avoir accepté de participer au jury de cette thèse mais aussi de l'avoir présidé.

Je remercie également messieurs Benoît Chachuat et Brahim Benyahia d'avoir pris le temps d'évaluer ce travail. J'adresse également toute ma gratitude à madame Marcela Szopos et messieurs Cyril Pelaingre et Denis Funschilling pour avoir fait partie de mon jury de thèse. Leurs présences dans le jury m'honore. Je tiens à les remercier pour leur relecture attentive ainsi que pour leurs remarques constructives qui ont aménées une discussion très intéressante pendant la défense, permettant de nombreuses perspectives pour la poursuite de ce travail.

Au cours de ces trois années et 3 mois de thèse, j'ai eu l'occasion d'enseigner dans deux écoles d'ingénieur, l'ENSIC et l'EEIGM, et je tiens à remercier François, Rainier, Alexandra, Marie, Laetitia, Romain, Baptiste, Zoubir, entres autres, pour leur accueil dans les équipes pédagogiques.

J'en arrive maintenant aux personnes avec qui j'ai passé une partie de cette thèse, Ryad pour son accueil dans l'équipe, Cristian avec qui j'ai partagé mon bureau pendant ces trois années, Andrès et Iliàs pour ces pauses billards, Fátima pour ses pains aux chocolats, Thomas pour ces discussions lors de repas interminables, Sanae et Cindy pour ne citer qu'eux. Grâce à vous j'ai pu me détendre, rigoler et penser à autre chose, je vous remercie chaleureusement. Merci aussi à mes camarades mayennais et de promotion ENSIC de m'avoir accompagné et fait rire à distance pendant ces trois années.

J'aimerai également remercier mes parents, mes beaux-parents, mes frères et ma sœur pour leur amour et leur confiance dont ils m'ont fait preuve.

Et enfin mais pas des moindres, un grand merci à toi Cyrielle, merci pour ton soutien inconditionnel, merci pour tes encouragements et merci d'avoir été ma première lectrice. Tu as apporté beaucoup plus que tu ne le penses au bon déroulement de ce travail.

Table des matières

Page

Table des figures **xi**

Liste des tableaux **xvii**

Nomenclature **xix**

Introduction générale **1**

Chapitre 1 Dispositifs expérimentaux et méthodes d'analyse **5**

1.1 Introduction 6

1.2 Conception des réacteurs par fabrication additive 6

1.2.1 Principes généraux de la fabrication additive 6

1.2.2 Principe fondamental du procédé de stratoconception 9

1.3 Mesure du taux d'avancement de réaction en sortie du réacteur 11

1.3.1 Choix de la réaction 11

1.3.2 Détermination du coefficient de Beer-Lambert 12

1.3.3 Détermination de la constante cinétique 14

1.3.4 Détermination de la concentration en ions triiodures en sortie du réacteur 15

1.4 Mesure de champs de vitesse par PIV 15
1.4.1 Concepts théoriques 15
1.4.1.1 Principe expérimental de la mesure 15
1.4.1.2 Ensemencement 17
1.4.1.3 Éclairage 18
1.4.1.4 Acquisition des images 18
1.4.1.5 Analyse des images 19
1.4.1.6 Avantages et limites de la technique de mesure 19
1.4.2 Dispositif expérimental 20
1.5 Mesure de la distribution des temps de séjour dans les réacteurs 21
1.5.1 Principe de la méthode de distribution des temps de séjour 21
1.5.2 Dispositif expérimental 23
1.6 Conclusions 23

Chapitre 2 Présentation de la méthode d'optimisation et application à l'hydrodynamique **25**

2.1 Introduction 26
2.2 Concepts fondamentaux de l'optimisation de forme 26
2.2.1 Classement selon l'algorithme d'optimisation 27
2.2.1.1 Les méthodes déterministes 28
2.2.1.2 Les méthodes stochastiques 29
2.2.1.3 Les méthodes hybrides 30
2.2.2 Classification selon le degré de liberté de la méthode 31
2.2.3 Équations aux dérivées partielles 32
2.2.4 Mécanique des fluides numériques 36
2.3 Cas étudiés et problèmes d'optimisation associés 37

2.3.1 Descriptions des cas considérés 37
2.3.2 Définitions des problèmes d'optimisation de forme 39
2.3.2.1 Équations du modèle 39
2.3.2.2 Variables de décision 39
2.3.2.3 Fonction objectif à minimiser 39
2.3.2.4 Ensemble des contraintes 39
2.4 Formulation mathématique des problèmes 40
2.4.1 Principes fondamentaux de la méthode de Hadamard 40
2.4.2 Méthode de l'état adjoint 41
2.5 Algorithme associé à la résolution 44
2.6 Résultats numériques et discussions 46
2.6.1 Énergie dissipée dans une conduite coudée à 90° 47
2.6.2 Dissipation d'énergie dans une conduite coudée à 180° 50
2.6.3 Dissipation d'énergie autour d'un obstacle 50
2.6.4 Énergie dissipée dans un arbre à deux branches (arbre dyadique) 54
2.7 Conclusions 56

Chapitre 3 Application de l'optimisation de forme à la conception optimale de réacteurs à lit fixe **59**

3.1 Introduction 60
3.2 Modélisation et analyse des problèmes d'optimisation considérés 60
3.2.1 Présentation du réacteur à lit fixe et sa modélisation 60
3.2.1.1 Premier cas : réaction homogène 61
3.2.1.2 Second cas : réaction de surface 62
3.2.2 Définition du problème d'optimisation géométrique 62
3.2.2.1 Fonction objectif à minimiser 62

3.2.2.2 Variable de décision 62
3.2.2.3 Modélisation 63
3.2.2.4 Ensemble des solutions admissibles 63
3.3 Formulation mathématique des problèmes 64
3.3.1 Cas de la réaction homogène 66
3.3.2 Cas de la réaction de surface 66
3.4 Implémentation et résolution sous OpenFOAM 67
3.4.1 Déplacement du maillage 67
3.4.1.1 Contrainte sur la largeur locale des canaux 68
3.4.1.2 Contrainte sur l'épaisseur locale des obstacles 68
3.4.2 Maillage et remaillage de la forme 73
3.4.3 Vérification de la qualité du maillage 74
3.4.4 Résolution des systèmes d'équations aux dérivés partielles 75
3.4.5 Autres explications 75
3.5 Résultats numériques et discussions 77
3.5.1 Résultats numériques de l'optimisation du réacteur siège de la réaction homogène 77
3.5.2 Résultats numériques de l'optimisation du réacteur siège de la réaction de surface 79
3.6 Conclusions 83

Chapitre 4 Optimisation multicritère de réacteurs à lit fixe **85**

4.1 Introduction 86
4.2 Revue bibliographique 86
4.2.1 Optimisation multicritère 86
4.2.1.1 Approches basées sur le concept de dominance au sens de Pareto 87

4.2.1.2 Approches scalaires . . . 89
4.2.1.3 Autres approches . . . 92
4.2.2 Algorithme d'aide à la décision multicritère . . . 94
4.2.2.1 Les méthodes d'agrégation complète . . . 95
4.2.2.2 Les méthodes de surclassement . . . 96
4.2.3 Choix de la méthode d'optimisation multicritère . . . 99
4.3 Formulation du problème d'optimisation . . . 99
4.4 Détermination des fronts de Pareto . . . 101
4.4.1 Optimisation multicritère du cas RH . . . 101
4.4.2 Optimisation multicritère du cas RS . . . 104
4.5 Aide à la décision multicritère : méthode MAUT . . . 105
4.5.1 Choix de la meilleure forme à mettre en œuvre pour le cas RH . . . 108
4.5.2 Choix de la meilleure forme à mettre en œuvre pour le cas RS . . . 108
4.6 Conclusions . . . 110

Chapitre 5 Comparaison des mesures expérimentales aux résultats des simulations numériques **113**

5.1 Introduction . . . 114
5.2 Simulations CFD des réacteurs . . . 114
5.3 Comparaison des DTS théoriques et expérimentales sur les 4 réacteurs . . . 117
5.3.1 Test de Fisher-Snedecor . . . 118
5.3.2 Test de Student . . . 119
5.3.3 Test de Welch . . . 120
5.3.4 Exploitation des tests . . . 120
5.4 Comparaison des champs de vitesse issus des simulations avec les mesures expérimentales . . . 121

5.4.1 Problèmes rencontrés lors des mesures PIV sur la configuration initiale du réacteur . . . 121

5.4.2 Comparaisons qualitative et quantitative des champs de vitesse expérimentaux et simulés . . . 123

5.4.2.1 Comparaison qualitative . . . 123

5.4.2.2 Comparaison quantitative . . . 126

5.5 Comparaison des mesures expérimentales et simulées du taux de conversion . . . 128

5.6 Conclusions . . . 129

Conclusions générales et perspectives **131**

Bibliographie **136**

Annexes **147**

Annexe A Formulaire mathématique **147**

A.1 Notations . . . 147

A.2 Formulaire d'intégration par partie . . . 148

Annexe B Démonstrations mathématiques des expressions des gradients de forme et états adjoints **151**

B.1 Démonstration de l'expression du gradient de forme (2.37) . . . 151

B.2 Démonstration des équations de diffusion du maillage . . . 154

B.3 Détails des calculs permettant la formulation du gradient de forme (3.21) . . . 155

B.4 Détails des calculs permettant la formulation du gradient de forme (3.24) . . . 159

Annexe C Principales étapes de l'algorithme SIMPLE **161**

Annexe D Présentation des formes obtenues après le processus d'optimisation de forme **165**

D.1 Comparaisons entre les formes déterminées par optimisation géométrique et la forme manufacturée 165

Annexe E Étalonnage de la pompe péristaltique **169**

Annexe F Supports supplémentaires pour la validation expérimentale des simulations CFD **173**

F.1 Comparaison des DTS expérimentales aux DTS simulées 173

F.2 Comparaison des mesures PIV aux simulations 176

Table des figures

1.1 Ventes annuelles d'imprimantes 3D dans le monde, (a) représente les ventes à destination de l'industrie, (b) les ventes pour les particuliers (Wohlers et al., 2019). 7

1.2 Principe de base du procédé de stratoconception®. 8

1.3 Comparaison entre le réacteur initial fabriqué par stratoconception® et la forme initiale du réacteur utilisée pour l'optimisation. 9

1.4 Illustration de la contrainte de dépassement. 10

1.5 Spectre d'absorbance du diiode. 13

1.6 Détermination de la constante de Beer-Lambert à 450nm pour une concentration de KI de 0.725 mol/L. 14

1.7 Évolution de la concentration en ions peroxodisulfates au cours du temps à 21°C (a), graphique de parité entre les concentrations expérimentales et théoriques (b). 16

1.8 Photo du banc expérimental pour les mesures d'avancement de réaction. 16

1.9 Observation lagrangienne des particules, les points noirs désignent les particules au temps t, les points verts les particules à $t + \delta t$ et $\boldsymbol{D}$ le déplacement entre t et $t + \delta t$. 17

1.10 Illustration expérimentale de la technique PIV. 17

1.11 Illustration de l'analyse des images PIV. 19

1.12 Photo du banc expérimental pour les mesures par PIV. 20

1.13 Concentration en traceur en entrée d'unité suivant l'injection, (a) impulsion, (b) échelon 22

1.14 Photo du banc expérimental pour les mesures de DTS. 23

2.1 Algorithme de gradient à pas constant 29

2.2 Illustration d'une méthode de gradient 30

2.3 Maximisation 2D de l'aire d'un objet sous contrainte de son périmètre en utilisant un algorithme d'optimisation (a) paramétrique, (b) géométrique, (c) topologique 32

2.4 Maillage 2D d'un ovale (a) maillage grossier, (b) maillage intermédiaire, (c) maillage fin 33

2.5 Discrétisation 2D de la forme en volumes de contrôle, la partie grisée représente le volume de contrôle associé au nœud $\boldsymbol{P}$, les points $\boldsymbol{N}$, $\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{W}$ et $\boldsymbol{E}$ désigne les voisins de $\boldsymbol{P}$. 34

2.6 Formes initiales des 4 cas considérés, (a) écoulement dans un coude à 180°, (b) écoulement dans un arbre à deux branches, (c) écoulement autour d'un obstacle, (d) dans un coude à 90°. 38

2.7 Exemple d'une itération de la méthode d'optimisation de forme 41

2.8 Algorithme implémenté dans OpenFOAM 44

2.9 Condition de sortie de l'état adjoint $\boldsymbol{U_a}$. 46

2.10 Champ de vitesse dans le coude à 90° ($Re = 25$), (a) géométrie initiale, (b) géométrie optimale. 49

2.11 Courbes de convergence de l'optimisation du coude à 90° ($Re = 25$), (a) représente l'évolution du ratio $\frac{\mathcal{L}}{\mathcal{L}_0}$, ($b$) le ratio $\frac{J}{J_0}$, (c) la contrainte sur le volume, et (d) le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte de volume. 49

2.12 Champ de vitesse dans le coude à 90° (a) ($Re = 250$), (a) géométrie initiale, (b) géométrie optimale et (c) géométrie optimale pour $Re = 25$. 50

2.13 Champ de vitesse dans le coude à 180°, (a) géométrie initiale, (b) géométrie optimale sous contrainte de volume et (c) géométrie optimale sans contrainte de volume. 51

2.14 Courbes de convergence de l'optimisation du coude à 180° sous la contrainte de volume, (a) représente l'évolution du ratio $\frac{\mathcal{L}}{\mathcal{L}_0}$, ($b$) le ratio $\frac{J}{J_0}$, (c) la contrainte sur le volume, et (d) le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte de volume. 52

2.15 Champ de vitesse autour d'un obstacle (a) géométrie initiale, (b) géométrie optimale sous contrainte de volume et (c) géométrie optimale sans contrainte de volume. 53

2.16 Exemple de l'obstacle qui se referme. 53

2.17 Courbes de convergence de l'optimisation de l'obstacle sous la contrainte de volume, (a) représente l'évolution du ratio $\frac{\mathcal{L}}{\mathcal{L}_0}$, ($b$) le ratio $\frac{J}{J_0}$, (c) la contrainte sur le volume et (d) le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte de volume. 54

2.18 Champ de vitesse dans un arbre à deux branches (a) géométrie initiale, (b) géométrie optimale. 55

2.19 Courbes de convergence de l'optimisation de l'arbre à deux branches, (a) représente l'évolution du ratio $\frac{\mathcal{L}}{\mathcal{L}_0}$, ($b$) le ratio $\frac{J}{J_0}$, (c) la contrainte sur le volume et (d) le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte de volume. 56

3.1 Configuration initiale du réacteur à lit fixe utilisé pour le processus d'optimisation. 60

3.2 Algorithme implémenté dans OpenFOAM 67

3.3 Exemple de l'extrusion du déplacement $\boldsymbol{V}$ en proche paroi, la zone grisée représente l'obstacle. 68

3.4 Illustration du traitement de la contrainte sur les canaux. 69

3.5 Illustration graphique de la construction du squelette d'un objet rectangulaire, les cercles bleus représentent les boules maximales, les points noirs leurs centres et le trait rouge désigne le squelette. 69

3.6 Illustration graphique du traitement de la contrainte d'épaisseur et de la construction de la ligne médiane. 70

3.7 Ligne médiane d'un obstacle suivant la forme de celui-ci, (a) forme standard, (b) forme complexe. 71

3.8 Diagramme de Voronoï d'un ensemble de 10 points. 72

3.9 Simplification du diagramme de Voronoï en squelette, les points verts désignent les points appartenant à l'obstacle et la courbe rouge le diagramme de Voronoï (a) et le squelette simplifié (b) et (c). 72

3.10 Comparaison de la ligne médiane et du squelette d'un obstacle suivant sa forme, (a) forme standard, (b) forme complexe. 73

3.11 Illustration de la possible configuration de certains obstacles (a), illustration du processus de formation de fines extrémités (b). 74

3.12 Illustration des critères de qualité du maillage 75

3.13 Condition de sortie de l'état adjoint C_a. 76

3.14 Cas de la réaction homogène, configuration initiale du réacteur à lit fixe (a), forme optimale sans considérer les contraintes de fabrication (b), forme optimale en considérant les contraintes de fabrication (c), réacteur optimal fabriqué par impression 3D. 78

3.15 Performances du processus d'optimisation, (a) représente le rapport $\frac{J}{J_0}$, (b) le taux de conversion, (c) la contrainte sur le volume, (d) la contrainte sur l'énergie. 80

3.16 Distribution des temps de séjour dans les réacteurs initial et optimal. 80

3.17 Formes optimales du réacteur en commençant le processus d'optimisation d'une configuration du garnissage légèrement perturbée : (a) les obstacles initiaux sont agrandis (demi-axes augmentés de 0,5 mm), (b) les obstacles initiaux sont rétrécis (demi-axes diminués de 0,5 mm), (c) le garnissage est décalé de 3 mm vers l'entrée et (d) le garnissage est décalé de 3 mm vers la sortie. 81

3.18 Cas de la réaction surfacique, configuration initiale du réacteur à lit fixe (a), forme optimale sous contrainte d'iso-énergie (b), forme optimale sous une contrainte 1,4 fois plus élevée que la perte d'énergie initiale (c), sans contrainte sur l'énergie (d). 82

3.19 Distribution des temps de séjour des réacteurs optimisés. 82

4.1 Illustration graphique 2D de la notion de dominance au sens de Pareto. 88

4.2 Illustration graphique de l'approche par pondération des fonctions objectif, la ligne rouge représente le front de Pareto. 90

4.3 Illustration graphique de l'approche ε-contrainte, la ligne rouge représente le front de Pareto, la partie hachurée désigne l'union de l'ensemble $\mathscr{C}$ et de la contrainte $f_2 \leqslant \varepsilon_2$. 91

4.4 Illustration graphique de l'approche dite de but à atteindre, la ligne rouge représente le front de Pareto et $\boldsymbol{P}^{\text{opt}}$ le point optimal. 92

4.5 Exemple illustratif de l'approche AHP pour un problème à trois critères et 3 alternatives ou actions. 97

4.6 Front de Pareto du cas RH. 102

4.7 Profils de vitesse et de concentration en fonction de tau, cas RH. 103

4.8 Front de Pareto du cas RS. 105

4.9 Profils de vitesse et de concentration en fonction de tau, cas RS. 106

4.10 Allure de la fonction d'utilité en fonction de la valeur de la tolérance relative α. . 108

4.11 Classement des solutions pour le cas RH, le triangle vert représente la solution retenue, la couleur des autres points désigne la valeur de la fonction d'utilité globale. 109

4.12 Comparaison entre la forme retenue à l'aide de la méthode MAUT et le réacteur correspondant fabriqué par stratoconception®. 109

4.13 Classement des solutions pour le cas RS, le triangle vert représente la solution retenue, la couleur des autres points désigne la valeur de la fonction d'utilité globale. 110

5.1 Représentation 3D et numérique des réacteurs, (a) forme initiale, (b) forme optimale pour la perte d'énergie, (c) forme optimale pour la conversion, (d) forme optimale choisie. 116

5.2 Représentation schématique de l'entrée prenant en compte le raccord. 116

5.3 Distributions des temps de séjour des réacteurs, (a) *R1*, (b) *R2*, (c) *R3* et (d) *R4*. 118

5.4 Illustration des problèmes rencontrés sur la configuration initiale du réacteur. . . 122

5.5 Réacteur initial, mise en évidence de la fenêtre de visualisation. 123

5.6 Comparaison des champs de vitesse pour un débit de 3,14 L/h, (1) représente le champ de vitesse pour une simulation 2D, (2) le champ de vitesse dans le plan parallèle à (Oxy) et centré suivant l'axe Oz dans le réacteur pour une simulation 3D et (3a), (3b) et (3c) les mesures expérimentales par PIV. Les axes Ψ représentent les droites selon lesquelles la comparaison quantitative des profils de vitesse sera effectuée. 124

5.7 Comparaison des champs de vitesse pour un débit de 4,94 L/h, (1) représente le champ de vitesse pour une simulation 2D, (2) le champ de vitesse dans le plan parallèle à (Oxy) et centré suivant l'axe Oz dans le réacteur pour une simulation 3D et (3a), (3b) et (3c) les mesures expérimentales par PIV. Les axes Ψ représentent les droites selon lesquelles la comparaison quantitative des profils de vitesse sera effectuée. 125

5.8 Comparaison des profils de vitesse issus des simulations 2D et 3D avec les mesures expérimentales pour un débit $Q = 3{,}14$ L/h suivant les axes, (a) Ψ_1, (b) Ψ_2, (c) Ψ_3 et (d) Ψ_4 (débit de 3,14 L/h). 127

A.1 Ω, sous domaine de $\mathbb{R}^d$ 148

C.1 Algorithme SIMPLE 163

C.2 Maillage décalé de la forme, le carré grisé représente le volume de contrôle pour résoudre le champ de pression, le carré bleu hachuré la composante u de la vitesse et le carré hachuré vert la composante v de la vitesse. 164

D.1 Comparaison entre le réacteur optimal *R2* fabriqué par stratoconception® et la forme permettant de minimiser la perte d'énergie déterminée par optimisation géométrique. 166

D.2 Comparaison entre le réacteur optimal *R3* fabriqué par stratoconception® et la forme permettant de maximiser la conversion déterminée par optimisation géométrique. 166

D.3 Comparaison entre le réacteur optimal *R4* fabriqué par stratoconception® et la forme retenue à l'aide de la méthode MAUT. 167

E.1 Droites d'étalonnage de la pompe péristaltique. 169

E.2 Droites d'étalonnage de la pompe péristaltique et intervalles de confiance sur la prédiction. 171

F.1 DTS du réacteur *R1* pour des débits Q égalent à, (a) 1,35 L/h, (b) 1,51 L/h, (c) 1,83 L/h, (d) 1,86 L/h, (e) 2,27 L/h et (f) 2,60 L/h. 174

F.2 DTS du réacteur *R2* pour des débits Q égalent à, (a) 1,75 L/h et (b) 2,70 L/h. . 175

F.3 DTS du réacteur *R3* pour des débits Q égalent à, (a) 2,07 L/h et (b) 2,77 L/h. . 175

F.4 DTS du réacteur *R4* pour des débits Q égalent à, (a) 2,37 L/h et (b) 2,97 L/h. . 175

F.5 Comparaison des champs de vitesse pour un débit de 5,19 L/h, (1) représente le champ de vitesse pour une simulation 2D, (2) le champ de vitesse dans le plan parallèle à (Oxy) et centré suivant l'axe Oz dans le réacteur pour une simulation 3D et (3a), (3b) et (3c) les mesures expérimentales par PIV. Les axes Ψ représentent les droites selon lesquelles la comparaison quantitative des profils de vitesse sera effectuée. 176

F.6 Comparaison des profils de vitesse issus des simulations 2D et 3D avec les mesures expérimentales pour le débit Q = 4,94 L/h suivant les axes, (a) Ψ_1, (b) Ψ_2, (c) Ψ_3 et (d) Ψ_4 (débit de 4,94 L/h). 177

F.7 Comparaison des profils de vitesse issus des simulations 2D et 3D avec les mesures expérimentales pour le débit Q = 5,19 L/h suivant les axes, (a) Ψ_1, (b) Ψ_2,(c) Ψ_3 et (d) Ψ_4 (débit de 5,19 L/h). 178

Liste des tableaux

1.1 Liste des particules potentielles d'ensemencement. 18

2.1 Valeurs des coefficients associées aux cellules adjacentes. 36

2.2 Paramètres de simulation et d'optimisation. 47

2.3 Performances de l'algorithme d'optimisation (simulation effectuée sur un ordinateur avec un processeur Xeon 3.7GHz). 47

3.1 Paramètres de simulation. 77

4.1 Tolérance relative et poids accordés aux fonctions d'utilité individuelle. 107

5.1 Paramètres de simulations CFD. 115

5.2 Valeurs du temps de séjour moyen et de l'écart type des DTS en fonction de la configuration du réacteur. 119

5.3 Valeurs des coefficients de Student, de Welch et de Fisher-Snedecor, (A) = Hypothèse d'égalité acceptée, (R) = Hypothèse d'égalité refusée. 121

5.4 Valeurs des RMSE suivant chaque axe pour le débit de 3,14 L/h. 127

5.5 Valeurs des RMSE suivant chaque axe pour le débit de 4,94 L/h. 127

5.6 Valeurs des RMSE suivant chaque axe pour le débit de 5,19 L/h. 128

5.7 Comparaison des conversions du réacteur initial simulé en 2D et 3D avec la conversion expérimentale. 128

C.1 Valeurs des coefficients associées aux cellules adjacentes. 163

Nomenclature

Dans ce manuscrit, les variables en caractères gras font référence à des vecteurs. Lorsqu'elles ne le sont pas, ce sont des variables scalaires.

Symboles latins

A	absorbance du milieu	-
C	champ de concentration du réactif	mol.m^{-3}
$\mathscr{C}$	ensemble des contraintes du problème d'optimisation	-
C'	sensibilité de C par rapport à la variation de Ω	mol.m^{-4}
C_a	concentration de l'état adjoint à C	mol.m^{-3}
C_{Ab}	concentration de l'espèce qui absorbe la lumière	mol.m^{-3}
$C_{\mathcal{E}}$	contrainte sur la dissipation d'énergie	$\text{m}^5\text{.s.}^3$
C_{in}	concentration imposée à l'entrée	mol.m^{-3}
$C_{\mathcal{V}}$	contrainte sur le volume	m^3
$\boldsymbol{d}$	déplacement moyen des particules dans une imagette (PIV)	m
$\mathcal{D}$	coefficient de diffusion du réactif dans le solvant	$\text{m}^2\text{.s}^{-1}$
d_{fluide}	densité du fluide	-
$d_{\text{min}}^{\text{channel}}$	largeur locale minimale des canaux	m
$d_{\text{min}}^{\text{obstacle}}$	épaississeur locale minimale des obstacles	m
d_{part}	densité des particules ensemencées	-
E°	potentiel standard d'oxydoréduction	V
F	variable de Fisher	-
G	gradient de forme	-
J	critère de performance ou fonction objectif	-
k_{exp}	constante cinétique de la réaction d'oxydation des ions iodures par les ions peroxodisulfates	$\text{L.mol}^{-1}\text{.s}^{-1}$
K	constante d'équilibre de la réaction	-
k_{app}	constante cinétique apparente de réaction après dégénérescence de l'ordre	s^{-1}
K_{BC}	constante introduite par la condition de sortie de l'état adjoint C_a	$\text{mol.m}^{-2}\text{.s}^{-1}$
K_{crit}	constante permettant d'avoir le même ordre de grandeur entre les critères lors de l'optimisation multi-objectif	$\text{m}^6\text{.s}^{-3}\text{.mol}^{-1}$
k_{sim}	constante cinétique de réaction dans les simulations CFD	s^{-1}
l	longueur du chemin optique	m

L	largeur de l'entrée de fluide dans le réacteur 2D	m
$\mathcal{L}$	lagrangien du problème d'optimisation	-
$\boldsymbol{n}$	normale sortante à la frontière	-
p	champ de pression	Pa
p'	sensibilité de p par rapport à la variation de Ω	Pa.m^{-1}
p_a	pression de l'état adjoint à ($\boldsymbol{U}$, p)	Pa
Q	débit d'entrée	$\text{m}^3\text{.s}^{-1}$
r	rayon du disque d'entrée de fluide dans le réacteur 2D	m
r_{exp}	vitesse de réaction expérimentale	$\text{mol.L}^{-1}\text{.s}^{-1}$
r_{sim}	vitesse de réaction dans les simulations CFD	$\text{mol.L}^{-1}\text{.s}^{-1}$
s	estimation de l'écart type de la DTS	s
s.à.	soumis à	-
t	temps dans les chapitres 1 et 5	s
	pas de la méthode d'optimisation de forme dans les chapitres 2, 3 et 4	-
$\bar{t}$	temps de séjour moyen estimé	s
u	variable de Student	-
u'	variable de Welch	-
$\boldsymbol{U}$	champ de vecteur vitesse du fluide	m.s^{-1}
$\boldsymbol{U'}$	sensibilité de $\boldsymbol{U}$ par rapport à la variation de Ω	s^{-1}
$\boldsymbol{U_a}$	vitesse de l'état adjoint à ($\boldsymbol{U}$, p)	m.s^{-1}
$\boldsymbol{U}_{\text{in}}$	profil de vitesse imposé à l'entrée	m.s^{-1}
$\boldsymbol{V}$	champ de vecteur représentant le déplacement du maillage	m
$\mathcal{V}(\Omega)$	volume de Ω	m^2
w	poids accordé à la fonction d'utilité associée au critère de perte d'énergie (méthode MAUT)	-

Symboles grecs

α	pas d'une méthode de gradient	-
α_{s}	niveau de signification	-
$\beta_{\mathcal{V}}$	paramètre de mise à jour de la contrainte sur le volume	-
$\beta_{\mathcal{E}}$	paramètre de mise à jour de la contrainte sur l'énergie	-
γ	paramètre permettant d'ajuster la diffusion du maillage lors du déplacement de celui-ci	m^2
Γ	frontière libre du domaine Ω	-
Γ_{in}	entrée de fluide dans le domaine Ω	-
Γ_{out}	sortie de fluide dans le domaine Ω	-
Γ_{lat}	paroi latérale du domaine Ω	-
δ	distance entre la frontière Γ_{out} et le centre de la cellule adjacente	m
δt	intervalle de temps entre deux images lors d'une mesure PIV	s
$\delta\Omega$	réunion des frontières de Ω	s
ε	coefficient d'absorption molaire	$\text{L.mol}^{-1}\text{.m}^{-1}$
ε_0	perte d'énergie de la forme initiale	$\text{m}^5\text{.s}^3$
η	coefficient de diffusion associé à ϕ	-
$\lambda_{\mathcal{E}}$	multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte sur l'énergie	-
$\lambda_{\mathcal{V}}$	multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte sur le volume	-
μ_0	moment d'ordre 0 de la distribution des temps de séjour	-

μ_1	moment d'ordre 1 de la distribution des temps de séjour	s
μ_2	moment d'ordre 2 de la distribution des temps de séjour	s^2
ν	viscosité cinématique du fluide	$m^2.s^{-1}$
σ	écart type de la distribution	s
τ	poids accordé au critère sur l'énergie	-
ϕ	grandeur transportée dans les équations de convection-diffusion	-
Ω	domaine de travail	-

Indice

i	itération de l'algorithme d'optimisation de forme
a	réfère à un état adjoint
in	réfère à l'entrée de Ω
$\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{W}$, $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{N}$	position des centres des volumes de contrôle
w, e, s, n	position des centres des faces du volume de contrôle $\boldsymbol{P}$

Abréviations

AD	optimisation de l'arbre dyadique
C180NV	optimisation du coude à 180° sans contrainte sur le volume
C90R25	optimisation du coude à 90° pour un nombre de Reynolds de 25
C90R250	optimisation du coude à 90° pour un nombre de Reynolds de 250
C180NV	optimisation du coude à 180° sans contrainte sur le volume
C180V	optimisation du coude à 180° sous contrainte d'iso-volume
CFD	mécanique des fluides numériques (computational fluid mechanics)
DTS	distribution des temps de séjour
EDP	équations aux dérivées partielles
FI	fenêtre d'interrogation
IC	inter-corrélation
ObNV	optimisation de l'obstacle sans contrainte sur le volume
ObV	optimisation de l'obstacle sous contrainte d'iso-volume
PIV	vélocimétrie par image de particules (particle image velocimetry)
PMMA	polyméthacrylate de méthyle
RH	étude du réacteur siège d'une réaction homogène
RMSE	erreurs des moindres carrés (root mean square errors)
RS	étude du réacteur siège d'une réaction de surface
R1	configuration initiale du réacteur
R2	configuration optimale du réacteur pour la perte d'énergie
R3	configuration optimale du réacteur pour la conversion sous contrainte de perte d'énergie constante
R4	configuration optimale du réacteur choisie à l'aide de la méthode MAUT
S-HGS	billes de verre creuses recouvertes d'argent

Abréviations associées à l'optimisation multicritère

ELECTRE	élimination et choix traduisant la réalité

MAUT	théorie de l'utilité multi-attribut (multiple attribute utility theory)
MDCA	aide à la décision multicritère (multiple-criteria decision analysis)
MOGA	méthode multiple objectives genetic algorithm
PROMETHEE	preference ranking organisation method for enrichment evaluations
UTA	théorie de l'utilité additive (utility theory additive)
VEGA	méthode vector evaluated genetic algorithm

Introduction générale

Contexte général

L'amélioration continue de la compétitivité de l'industrie chimique nécessite non seulement de constamment innover, mais aussi d'évoluer inévitablement vers des procédés qui sont plus intensifiés, efficaces, compacts et durables. La forme des unités (réacteurs, agitateurs, garnissages, échangeurs, conduites etc.) qui constituent un procédé est l'un des paramètres clés pour améliorer la compétitivité et représente un défi scientifique et technologique fondamental.

L'objectif de l'optimisation de forme est de modifier la frontière extérieure d'un objet pour minimiser ou maximiser une fonction de coût, comme les performances d'un procédé, sous des contraintes spécifiées. Historiquement, les méthodes d'optimisation de forme ont été utilisées dans les technologies de pointe, principalement dans les domaines avancés tels que l'aérodynamique. Cependant, elles ont récemment été étendues à d'autres domaines de l'ingénierie où la forme a une grande influence sur les performances. Par exemple, en hydrodynamique, la forme d'une conduite qui minimise l'énergie dissipée par le fluide due au frottement visqueux a été analysée (Courtais et al., 2019a; Henrot et Privat, 2010; Tonomura et al., 2010). En revanche, en génie des procédés, où la forme des opérations unitaires est un paramètre de conception important, les approches d'optimisation de forme n'ont pas été suffisamment étudiées. C'est un sujet très important qui mérite donc d'être abordé et qui conduira probablement à un changement de paradigme dans l'optimisation de la conception et du fonctionnement des procédés.

Dans le domaine plus spécifique des réacteurs à lit fixe, l'optimisation de forme n'a pas fait l'objet de travaux de recherche significatifs aussi bien au niveau académique qu'industriel. D'autant plus que ces réacteurs sont largement répandus dans l'industrie, notamment dans l'hydrogénation catalytique, l'hydrotraitement de coupes pétrolières, le traitement des eaux, etc. (Charpentier et Rode, 2011). Il convient également de souligner que malgré leur large utilisation, le dimensionnement et le fonctionnement de ces réacteurs posent encore beaucoup de problèmes dus notamment aux phénomènes complexes mis en jeu et au manque de données fiables et précises sur l'hydrodynamique et les transferts/transports, surtout à l'échelle locale.

L'optimisation de forme dans ces réacteurs consisterait typiquement à déterminer la forme du garnissage qui permettrait d'optimiser un indice de performance donné, soumis à des contraintes définies par la fabrication de cette forme et par le fonctionnement du réacteur.

Par ailleurs, la forme optimale d'un objet est souvent complexe et difficile à fabriquer. Cependant, les récents développements de la fabrication additive, ou impression 3D, sont très prometteurs et ouvrent le champ sur l'utilisation de l'optimisation de forme comme outil d'innovation technologique dans le domaine des réacteurs à lit fixe. En effet, la fabrication additive (par opposition à la fabrication soustractive) minimise les contraintes de fabrication et permet la conception de formes complexes.

Les travaux menés dans le cadre de cette thèse sont dédiés aux réacteurs à lit fixe et à écoulement monophasique de liquide. Plus spécifiquement, l'optimisation de forme sera utilisée pour déterminer la forme, et sera ensuite fabriquée à l'aide de la fabrication additive. En outre, des mesures expérimentales seront mises en œuvre pour tester et valider la forme optimale du réacteur.

Objectifs de la thèse

Dans ce travail, nous considérerons un réacteur à lit fixe parallélépipédique en deux dimensions avec un écoulement monophasique liquide. Le garnissage est constitué d'obstacles cylindriques régulièrement espacés dans le réacteur.

L'objectif de ce travail de thèse est de développer une méthode d'optimisation géométrique basée sur le calcul du gradient de la fonction objectif par introduction d'un ou plusieurs états adjoints. Cette méthode est ensuite testée et utilisée afin de déterminer la configuration optimale d'objet permettant :

- de minimiser la **dissipation d'énergie** dans le fluide due aux frottements visqueux dans le réacteur. L'énergie dissipée étant directement liée aux pertes de charge dans le fluide, cette optimisation reviendra à minimiser la puissance nécessaire au déplacement du fluide et donc, diminuer les coûts énergétiques des pompes.
- de minimiser la **concentration moyenne** de réactif en sortie d'un réacteur à lit fixe. C'est-à-dire maximiser l'avancement de la réaction du procédé.
- de minimiser simultanément ces deux fonctions objectif à l'aide de l'optimisation multicritère.

Le logiciel OpenFOAM est utilisé pour de résoudre les équations aux dérivées partielles qui décrivent le modèle du réacteur. Étant donné l'approximation numérique, il faut s'assurer que ce modèle résolu soit représentatif de la réalité quelle que soit la géométrie, celle-ci évoluant au cours de l'algorithme d'optimisation. Pour cela, des maquettes des réacteurs à lit fixe à l'échelle 1 sont fabriquées par fabrication additive dans le but de les expérimenter. Le procédé de fabrication additive est la stratoconception, un procédé d'impression 3D bien maîtrisé par le Centre Européen de Développement Rapide de Produit (CIRTES) localisé à Saint-Dié-des-Vosges. La campagne expérimentale s'articule autour de trois techniques de mesure :

1. La PIV haute fréquence (Particle Image Velocimetry) qui permet de mesurer le champ de vitesse sur un plan.
2. La spectrophotométrie qui permet de déterminer l'avancement d'une réaction de production de diiode en sortie de réacteur.
3. La distribution des temps de séjour (DTS) déterminée à l'aide d'un colorant par spectrophotométrie qui permet de caractériser écoulement dans le réacteur.

Plan du manuscrit

Le premier chapitre de ce manuscrit est dédié à la présentation du procédés d'impression 3D utilisé pour fabriquer les maquettes des réacteurs à lit fixe à l'échelle 1. Les techniques de mesures expérimentales, réalisées pour caractériser l'écoulement de fluide et le transfert de masse, sont ensuite détaillées et les dispositifs expérimentaux mis en œuvre sont présentés.

Le deuxième chapitre décrit l'approche d'optimisation de forme utilisée dans ces travaux. Cette approche algorithmique est développée et implémentée sous OpenFOAM, puis testée sur un ensemble de schémas 2D typiques d'écoulement de fluide dans le but de valider les performances de la méthode par comparaison des résultats numériques avec ceux de la littérature.

Dans le troisième chapitre, l'approche d'optimisation de forme développée est appliquée aux écoulements réactionnels afin d'optimiser un réacteur à lit fixe siège (i) d'une réaction homogène de premier ordre, (ii) d'une réaction hétérogène limitée par le transferts externe. L'objectif est alors de déterminer la forme du garnissage qui permet de maximiser la conversion du réacteur sous contrainte de pertes d'énergie maximale et d'iso-volume. Deux autres contraintes sont également considérées afin de prendre en compte le caractère manufacturable des configurations optimales du réacteur.

La conversion du réacteur et la perte d'énergie dans le fluide ayant des allures antagonistes, le quatrième chapitre s'intéresse à l'optimisation simultanée du réacteur à l'aide de l'optimisation multi-objectif. Un ensemble de solution optimales est alors déterminé et un algorithme d'aide à la décision est utilisé afin de déterminer le meilleur compromis parmi l'ensemble des formes optimales.

Le dernier chapitre de ce manuscrit est dédié à la validation expérimentale des simulations CFD effectuées par OpenFOAM.

Pour finir, ce manuscrit se termine par une conclusion générale sur le travail réalisé ainsi que quelques propositions de perspectives pour de futures études.

Chapitre 1

Dispositifs expérimentaux et méthodes d'analyse

Sommaire

1.1 Introduction 6
1.2 Conception des réacteurs par fabrication additive 6
1.2.1 Principes généraux de la fabrication additive 6
1.2.2 Principe fondamental du procédé de stratoconception 9
1.3 Mesure du taux d'avancement de réaction en sortie du réacteur . . 11
1.3.1 Choix de la réaction 11
1.3.2 Détermination du coefficient de Beer-Lambert 12
1.3.3 Détermination de la constante cinétique 14
1.3.4 Détermination de la concentration en ions triiodures en sortie du réacteur 15
1.4 Mesure de champs de vitesse par PIV 15
1.4.1 Concepts théoriques 15
1.4.1.1 Principe expérimental de la mesure 15
1.4.1.2 Ensemencement 17
1.4.1.3 Éclairage 18
1.4.1.4 Acquisition des images 18
1.4.1.5 Analyse des images 19
1.4.1.6 Avantages et limites de la technique de mesure 19
1.4.2 Dispositif expérimental 20
1.5 Mesure de la distribution des temps de séjour dans les réacteurs . 21
1.5.1 Principe de la méthode de distribution des temps de séjour 21
1.5.2 Dispositif expérimental 23
1.6 Conclusions 23

1.1 Introduction

La validation des simulations numériques, en les comparant à des données expérimentales, est une étape essentielle dans le domaine de la modélisation d'un procédé. Cependant, dans le domaine de l'optimisation de forme où une modélisation CFD (mécaniques des fluides numériques) est nécessaire, il n'est pas possible de réaliser une telle validation pour chaque configuration. En effet, au cours du processus d'optimisation de forme, le réacteur peut présenter un grand nombre de configurations très variées les unes des autres. Par exemple, on peut dénombrer autant de configurations différentes qu'il y a d'itérations dans le processus d'optimisation. Il a donc été choisi de réaliser une campagne de mesures expérimentales uniquement sur les réacteurs initial et optimaux dans le but de valider les simulations CFD. Cette campagne expérimentale s'articule autour de trois techniques de mesure : la vélocimétrie par image de particules (PIV) pour mesurer le champ de vitesse dans les réacteurs fabriqués par impression 3D, les distributions des temps de séjour dans les maquettes, et l'avancement d'une réaction homogène de premier ordre à la sortie du lit fixe. Lors des optimisations des réacteurs, l'écoulement de fluide est supposé laminaire, de faibles débits seront donc imposés en entrée lors des mesures expérimentales afin d'assurer des écoulements laminaires.

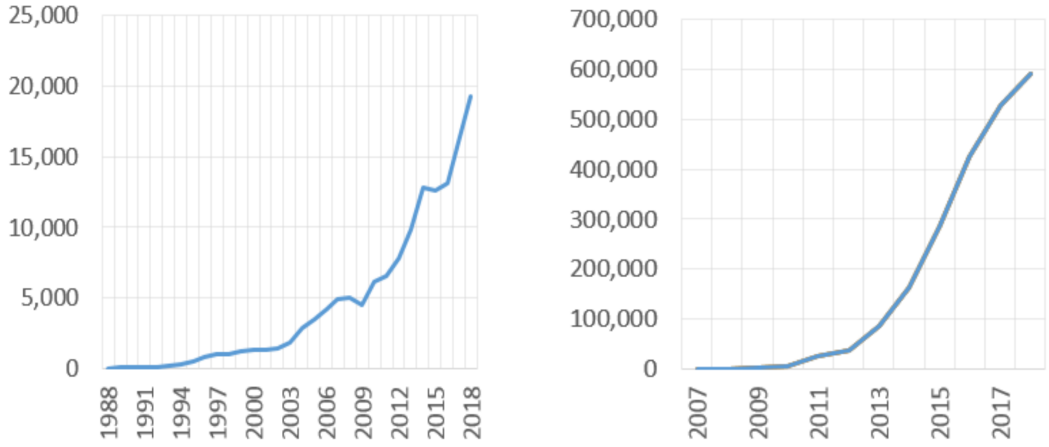
Le présent chapitre présente le procédé de fabrication utilisé lors de la conception des réacteurs ainsi que les techniques de mesure et leurs dispositifs expérimentaux associés mis en œuvre.

1.2 Conception des réacteurs par fabrication additive

1.2.1 Principes généraux de la fabrication additive

La fabrication additive (autrement appelée impression 3D), par opposition à la fabrication soustractive, est un procédé de fabrication d'objet 3D par ajout de matière couche par couche. La norme NF EN ISO/ASTM 52900 fixe sa définition comme "*l'ensemble des technologies permettant de fabriquer des pièces par couches successives de matière à partir d'un modèle numérique*". La forme de la pièce désirée est tout d'abord modélisée numériquement à l'aide d'un logiciel de conception assistée par ordinateur (CAO) qui réalise le fractionnement des couches requises à la conception de l'objet. Ce fractionnement en fines couches est ensuite soumis à l'outil de fabrication additive qui met en forme la matière couche par couche jusqu'à obtention de l'objet souhaité.

La fabrication additive est une technologie récente qui a vu le jour au milieu des années 1980. Le 16 juillet 1984, Jean Claude André, Alain Le Méhauté et Olivier de Witte, trois chercheurs français, déposent le premier brevet sur un procédé de fabrication additive (André et al., 1984), suivis trois semaines plus tard par Chuck Hull (Hull, 1984). Ces deux brevets portent tous deux sur le même procédé, la stéréolithographie. Ils sont rapidement suivis par d'autres portant sur des procédés tels que le frittage sélectif par laser (Beaman et Deckard, 1990) ou le dépôt de fil en fusion (Stratasys, 1991). Ces techniques d'impression 3D sont expliquées plus en détails dans la suite de la section. Depuis la vente de la première imprimante 3D en 1988, le procédé de fabrication additive connaît une importante croissance technologique et commerciale comme l'atteste la figure 1.1. Initialement réservées au secteur industriel, les ventes d'imprimantes 3D



(a) Ventes à destination de l'industrie (b) Ventes à destination des particuliers

FIGURE 1.1 – Ventes annuelles d'imprimantes 3D dans le monde, (a) représente les ventes à destination de l'industrie, (b) les ventes pour les particuliers (Wohlers et al., 2019).

connaissent un essor pour les particuliers depuis 2010. Industriellement, les applications des procédés de fabrication additive sont très nombreuses, par exemple, en médecine, dans l'aéronautique, l'automobile, le bâtiment et même dans la restauration.

Les technologies de fabrication additive n'ont pas vocation de remplacer les actuels procédés de fabrication que sont le moulage, le soudage ou le tournage/fraisage mais d'apporter de nouvelles solutions techniques à leurs limites. En effet, les procédés de fabrication additive ont certains avantages par rapport aux procédés traditionnels. On peut citer entre autres :

- la possibilité de fabriquer des pièces de formes complexes que les procédés traditionnels ne peuvent fabriquer,
- la fabrication sur mesure des pièces, comme cela peut être le cas en médecine par exemple,
- l'absence d'étape de pré-fabrication (fabrication de moules par exemple), ce qui peut réduire certains délais.

Cependant, les techniques d'impression 3D n'étant pas encore mûres, elles possèdent certaines limites et inconvénients :

- la surface de la pièce imprimée présente souvent de fortes rugosités, celle-ci nécessite un traitement de surface par polissage ou reprise d'usinage,
- le manque de précision de l'imprimante 3D impose également de traiter de l'état de surface de la pièce,
- les nuances de matériaux possibles sont encore limitées uniquement aux quelques polymères, céramiques, métaux et bois,
- la faible capacité de la pièce à tenir sous hautes pressions.

Depuis le brevet déposé en 1984 (André et al., 1984), de nombreuses recherches ont été effectuées sur la fabrication additive menant au développement de nouveaux procédés plus ou moins différents les uns des autres. Ainsi, pour clarifier les différentes appellations utilisées, la norme NF ISO 17296-2 catégorise les différents procédés existants en 7 grandes familles. Cette catégorisation classe les procédés de fabrication additive au sein d'une famille suivant le

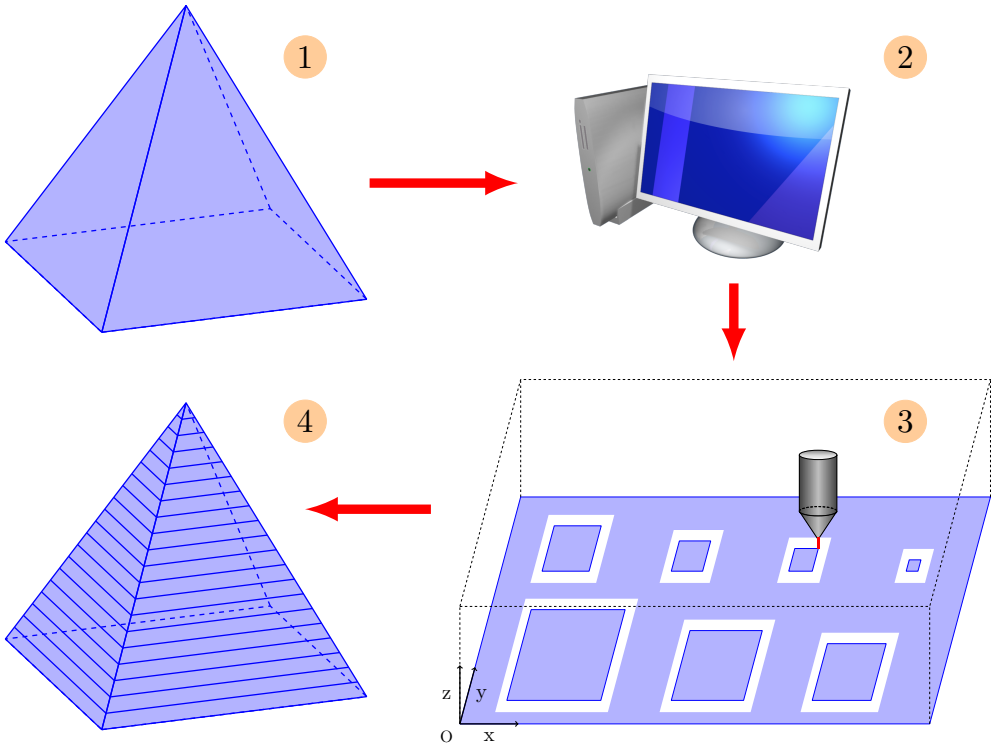
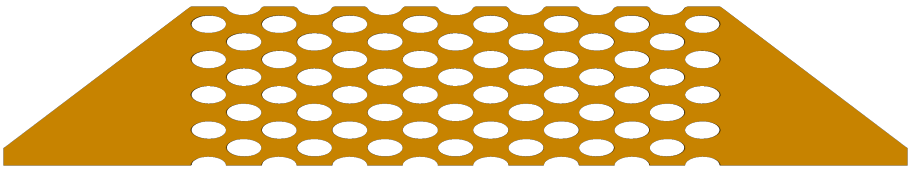


FIGURE 1.2 – Principe de base du procédé de stratoconception®.

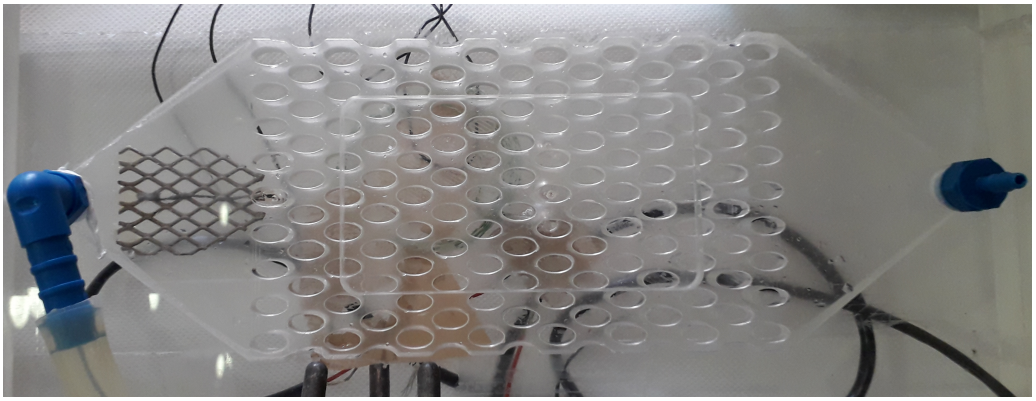
matériau mis en œuvre (poudre, liquide, bobine de fil etc..), le principe physique ou chimique de transformation des matériaux et le type d'énergie utilisé. Les 7 familles sont les suivantes :

- la photopolymérisation, qui polymérise localement, couche par couche, une résine liquide photosensible,
- la fusion sur lit de poudre, qui met en œuvre la pièce par frittage ou fusion laser d'une poudre,
- la projection de liant, consistant à déposer un liant adhésif, couche par couche, sur un lit de matériaux poudreux,
- la projection de matière, pour laquelle le matériau est amené sous forme liquide puis se solidifie sous l'effet de la température ou d'une source lumineuse,
- l'extrusion de matériaux, qui consiste à fondre, couche par couche, le filament d'un polymère thermoplastique,
- le dépôt sur énergie concentrée, dont le principe repose sur la fusion et le dépôt simultanés du matériau sur la pièce,
- le laminage de feuille ou de plaque, qui consiste à découper des plaques une à une, les empiler puis les assembler.

Ces différents procédés de fabrication additive sont détaillés par Sakly (2013) et par Barlier et Bernard (2020).



(a) Schéma de la configuration initiale du réacteur utilisée pour l'optimisation.



(b) Configuration initiale du réacteur fabriquée par stratoconception®.

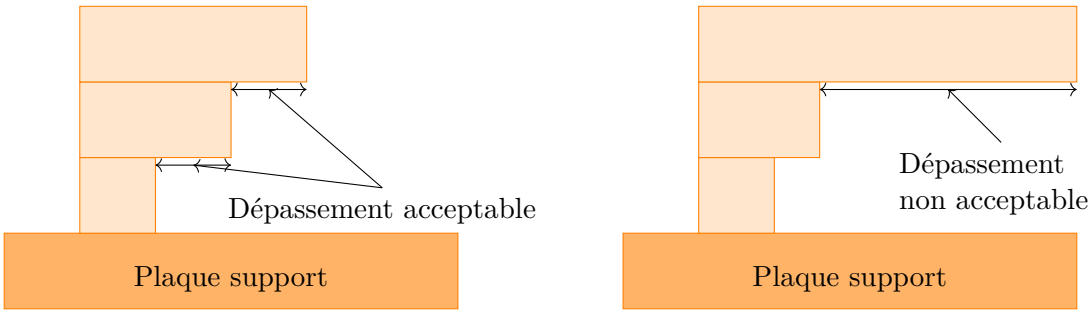
FIGURE 1.3 – Comparaison entre le réacteur initial fabriqué par stratoconception® et la forme initiale du réacteur utilisée pour l'optimisation.

1.2.2 Principe fondamental du procédé de stratoconception

Dans ce travail de thèse, les contacteurs à lit fixe initial et optimaux déterminés par optimisation de forme sont fabriqués par le procédé de stratoconception®. Ce procédé, breveté par Claude Barlier en 1991 (Barlier, 1991), est un procédé de fabrication additive par laminage de feuille. La figure 1.2 illustre les grandes étapes du procédé de stratoconception®, prenant l'exemple de la fabrication d'une pyramide. L'objet à concevoir ① est tout d'abord modélisé numériquement ② à l'aide d'un outil de CAO (conception assistée par ordinateur). Un fichier STL (stéréolithographie) est ensuite généré permettant de représenter numériquement l'objet en fonction de sa surface externe. Au cours de cette étape, l'objet est divisé en fines couches dont l'épaisseur est choisie adéquatement par l'utilisateur. Chacune de ces couches est ensuite fabriquée à partir d'une plaque par micro-fraisage ③. Le choix du matériau constituant la plaque et donc, l'objet final est également celui de l'utilisateur. Un avantage majeur du procédé de stratoconception® est la grande variété de choix concernant le matériau de la plaque (polymère, métaux, bois etc..). Une fois ces différentes couches fabriquées, elles sont enfin empilées, assemblées puis fixées à l'aide d'inserts et de colle. Bien souvent, la surface du produit final n'est pas lisse, une étape de finition par polissage est requise. La figure 1.3 présente une comparaison entre le schéma de la forme initiale du réacteur utilisée pour l'optimisation et la maquette à l'échelle 1 fabriquée par le procédé de stratoconception®. Le procédé utilisé pour la fabrication des maquettes des réacteurs est décrit plus précisément par Pelaingre (2005) et le principe technique de la fabrication repose sur le brevet déposé par Pelaingre et al. (2002). Les comparaisons des formes optimales obtenues numériquement (voir les chapitres 3 et 4) et de leurs maquettes fabri-

quées sont disponibles dans l'annexe D.1. Le matériau utilisé pour la fabrication de ces réacteurs est le polyméthacrylate de méthyle (PMMA), un polymère thermoplastique transparent. Cela sera utile pour effectuer des mesures optiques telles que les mesures par PIV.

Ce procédé de fabrication additive est intéressant dans le cadre de ces travaux car il permet de limiter au maximum les contraintes liées à l'étape de fabrication des contacteurs à lit fixe. Cependant, il en existe quelques unes. Les deux contraintes de fabrication considérées dans ce travail de thèse et intégrées à l'algorithme d'optimisation sont liées à l'étape d'usinage des plaques par micro-fraisage. En effet, les pores (i.e. la partie fluide) doivent avoir une largeur locale minimale afin de permettre le passage de l'outil lors de la découpe. Les obstacles (i.e. la partie solide du réacteur) sont également contraints à avoir une épaisseur minimale afin qu'ils gardent une bonne tenue mécanique aussi bien pendant le procédé de fabrication que lors de l'utilisation des maquettes. Les limites inférieures de ces contraintes sont respectivement de 2,1 mm et de 2 mm. L'étape d'assemblage et de fixation impose la prise en compte d'une autre contrainte de fabrication, la contrainte de dépassement. En effet, la fixation d'une couche peut s'avérer compliquée lorsque la couche inférieure sur laquelle elle repose ne permet pas un soutien suffisant. La figure 1.4 illustre la cause de cette contrainte. Cette contrainte n'est pas prise en compte dans le cadre de ces travaux car l'optimisation géométrique du réacteur est une optimisation 2D. Le lecteur est invité à se référer à Allaire et al. (2017a,b) pour plus d'information (définition mathématique et traitement numérique) sur cette contrainte de dépassement.



(a) Contrainte satisfaite (b) Contrainte non satisfaite

FIGURE 1.4 – Illustration de la contrainte de dépassement.

Ces trois contraintes de fabrication ne sont pas inhérentes au procédé de stratoconception®, mais à l'ensemble des procédés de fabrication additive. Celui-ci possède tout de même l'inconvénient d'augmenter la limite inférieure associée à la contrainte sur les canaux par rapport aux autres procédés d'impression 3D. La largeur minimale est augmentée pour laisser passer l'outil de micro-fraisage, tandis que pour les autres procédés, cette largeur minimale n'est pas due à un passage d'outil, mais à la précision de l'imprimante 3D. En revanche, le procédé de stratoconception® utilisé dans ces travaux possède certains avantages par rapport aux autres procédés d'impression 3D. Tout d'abord, il permet une meilleure tenue sous pression de la pièce finale par rapport aux autres procédés. En effet, les couches sont usinées à partir de plaques, puis coller entre elles à l'aide d'inserts et d'un adhésif choisi judicieusement. Cela permet, par rapport aux autres procédés, de limiter les défauts de la pièce, et par conséquent, d'assurer une meilleure cohésion de celle-ci. De plus, ce procédé permet également d'éliminer la contrainte de dépassement. En effet, lors de l'usinage des plaques, la couche n'a pas besoin de reposer directement sur l'objet fabriqué contrairement aux autres procédés qui mettent en forme chaque couche pendant

que celle-ci repose sur l'objet en construction (Sakly, 2013). Un autre avantage que permet le procédé de stratoconception® par rapport aux autres procédés de fabrication additive consiste en sa faculté de fabriquer des pièces multi-matériaux de grandes dimensions (Pelaingre, 2005). La précision de ce procédé est très fine et l'état de surface des pièces est très bonne ce qui limite l'étape de post-traitement des surfaces par polissage ou reprise d'usinage. Pour finir, ce procédé est intéressant car contrairement aux procédés basés sur la fusion sur lit de poudre ou sur la projection de liant, il n'y a pas de problèmes pour évacuer les poudres ou liquides non solidifiés à l'intérieur de la pièce.

1.3 Mesure du taux d'avancement de réaction en sortie du réacteur

Dans le chapitre 3, les optimisations de réacteurs à lit fixe sièges de deux réactions différentes ont été mises en œuvre. La première réaction considérée est une réaction de surface limitée par le transfert de matière externe. La seconde est une réaction homogène de premier ordre supposée irréversible. Dans la suite du manuscrit, l'étude du réacteur siège de la réaction homogène sera appelée ''cas RH'', et celle du réacteur où la réaction de surface se produit sera appelée ''cas RS''. Il est possible de vérifier expérimentalement l'avancement de la réaction de surface en sortie du réacteur. En effet, le dépôt d'une fine couche de catalyseur est techniquement réalisable à la surface des obstacles. Cependant, par manque de temps, ce point n'a pu être traité.

1.3.1 Choix de la réaction

Cette section s'intéresse à la validation expérimentale de l'avancement d'une réaction à la sortie du lit fixe. La réaction mise en œuvre au cours du processus d'optimisation du contacteur est une réaction homogène, irréversible, d'ordre 1 par rapport à l'un des réactifs et relativement lente (constante cinétique de l'ordre de $k_{\text{sim}} = 10^{-2}$ s^{-1}). Il s'agit d'une réaction de type

$$\mathrm{A} \rightarrow \mathrm{P}$$

dont la vitesse de réaction s'exprime par

$$r_{\text{sim}} = k_{\text{sim}}[\mathrm{A}] \tag{1.1}$$

où [A] représente la concentration de l'espèce A en solution.

La réaction d'oxydation des ions iodures I^- par les ions peroxodisulfates $\mathrm{S_2O_8^{2-}}$ en solution aqueuse (1.2) répond aux caractéristiques souhaitées.

$$2\mathrm{I}^- + \mathrm{S_2O_8^{2-}} \rightarrow \mathrm{I_2} + 2\mathrm{SO_4^{2-}} \tag{1.2}$$

Cette réaction est une réaction homogène et sa vitesse de réaction s'exprime selon la relation suivantes :

$$r_{\text{exp}} = k_{\text{exp}}[\mathrm{I}^-]^n[\mathrm{S_2O_8^{2-}}]^m \tag{1.3}$$

où k_{exp} désigne la constante cinétique, n et m les ordres partiels de la réaction. Moews et Petrucci (1964) ont étudié cette réaction et ont démontré qu'elle est d'ordre 1 par rapport aux ions iodures et peroxodisulfates. Ainsi, lorsque les ions iodures sont en excès par rapport aux ions peroxodisulfates, la concentration en I^- peut être considérée constante et la vitesse de réaction se réécrit :

$$r_{\text{exp}} = k_{\text{app}}[S_2O_8^{2-}] \tag{1.4}$$

avec $k_{\text{app}} = k_{\text{exp}}[I^-]^n$.

La réaction d'oxydoréduction (1.2) est issue des demi-réactions suivantes :

$$2I^- \leftrightharpoons I_2 + 2e^-, \qquad E^\circ([I_2]/[I^-]) = 0,54V \tag{1.5}$$

$$S_2O_8^{2-} + 2e^- \leftrightharpoons 2SO_4^{2-}, \qquad E^\circ([S_2O_8^{2-}]/[SO_4^{2-}]) = 2,01V \tag{1.6}$$

E° désigne le potentiel standard des couples d'oxydoréduction, sa valeur est donnée par Atkins et al. (2018). L'égalité des équations de Nernst permet d'exprimer la constante d'équilibre selon la relation suivante :

$$K = 10^{n_e \frac{\Delta E}{0,06}} \tag{1.7}$$

où ΔE est la différence des potentiels standards des deux couples d'oxydoréduction mis en jeu et n_e le nombre d'électrons échangés. L'ordre de grandeur de la constante d'équilibre étant de $K = 10^{49}$, la réaction peut être considérée comme irréversible.

De plus, la réaction (1.2) présente l'avantage de former du diiode, présent sous forme d'ions triiodures I_3^- en solution aqueuse (1.8). Ce produit de couleur brune en solution aqueuse est facilement caractérisable, soit par spectrophotométrie, soit par dosage en retour par les ions thiosulfates $S_2O_3^{2-}$. Cela permettra de déterminer l'avancement de la réaction (1.2) à la sortie du réacteur. On a donc choisi d'utiliser une mesure par spectrophotométrie pour caractériser les ions triiodures en solution.

$$I^- + I_2 \rightarrow I_3^- \tag{1.8}$$

La réaction (1.2) n'étant pas terminée en sortie du lit fixe, le dosage en retour par les ions thiosulfates $S_2O_3^{2-}$ n'est techniquement pas réalisable. En effet, les ions $S_2O_3^{2-}$ réagiraient avec les ions $S_2O_8^{2-}$ encore présent en solution avant de réagir avec le diiode, ce qui fausserait les résultats.

1.3.2 Détermination du coefficient de Beer-Lambert

L'objectif de cette section est de déterminer la constante cinétique apparente k_{app} (voir Eq. (1.4)) par spectroscopie. La loi de Beer-Lambert (1.9) définit une proportionnalité entre la concentration et l'absorbance d'un composé chimique.

$$A = \varepsilon l C_{\text{Ab}} \tag{1.9}$$

où ε désigne le coefficient d'absorption molaire de l'espèce chimique, l la longueur du chemin optique traversée par le faisceau lumineux, C_{Ab} la concentration de l'espèce chimique en solution, et A l'absorbance du milieu définie par $A = \log\left(\frac{I}{I_0}\right)$ où I_0 représente l'intensité du

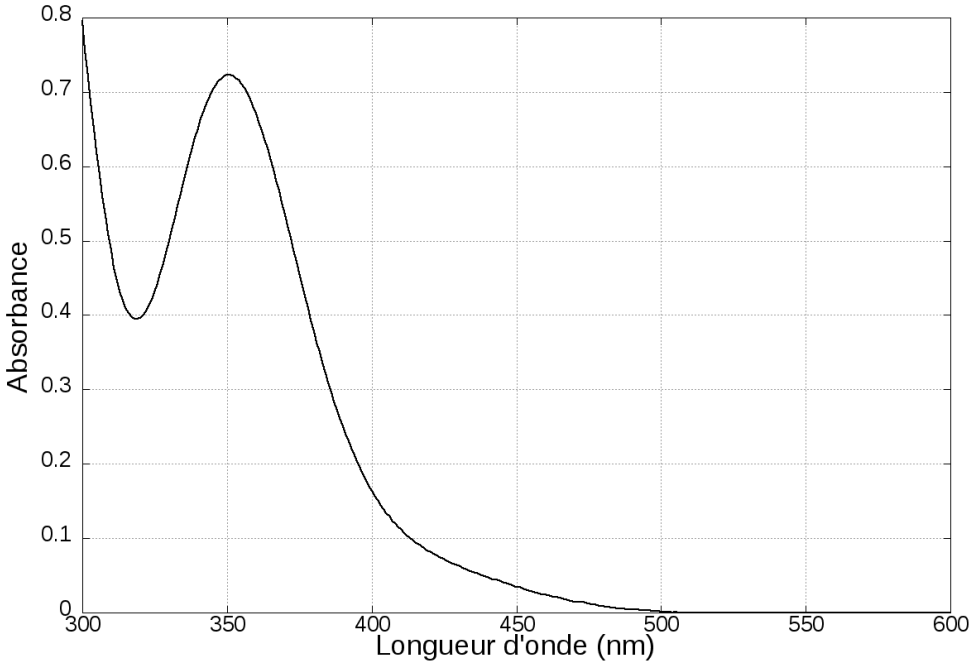


FIGURE 1.5 – Spectre d'absorbance du diiode.

faisceau lumineux avant de traverser la solution et I l'intensité du faisceau lumineux après avoir traversé la solution. Le produit εl est une constante dépendant de la longueur d'onde qu'il faut identifier. Ainsi, lorsqu'une seule entité chimique absorbe dans le milieu, la détermination de la concentration de cette entité à partir de l'absorbance de la solution devient aisée.

La figure 1.5 présente le spectre d'absorbance des ions triiodures. Un plateau entre 348 nm et 358 nm est présent où l'absorbance est peu sensible aux erreurs sur la longueur d'onde. Il serait donc intéressant de travailler à cette longueur d'onde pour limiter les incertitudes de mesure. Cependant, à cette longueur d'onde, l'ion triiodure n'est pas la seule entité chimique présente en solution à absorber. En effet, la constante k_{app} est déterminée pour une concentration en ions iodures (introduit en excès) de 0,725 mol/L or, à cette concentration, une solution de KI absorbe légèrement à 353 nm. Ainsi, pour la détermination de la constante cinétique k_{app}, il a été décidé de se placer à 450 nm. À cette longueur d'onde, la solution de KI n'absorbe plus et la pente reste modérée, limitant ainsi les incertitudes expérimentales.

La figure 1.6 illustre la détermination de la constante de Beer-Lambert à 450 nm. Lorsque la concentration de la solution en iodure de potassium est de 0,725 ± 0,009 mol/L, la valeur du coefficient de Beer-Lambert εl des ions I_3^- en solution est de 1576,4 ± 23,5 L/mol. Cette valeur a été estimée par régression linéaire (R^2=0,999) et sera utilisée pour la détermination de la constante cinétique k_{app}.

Remarque : D'après la loi de Beer-Lambert (1.9), l'absorbance d'une solution dépend uniquement de la concentration de l'espèce qui absorbe la lumière. Cependant, dans le cas présent, ce n'est pas le cas car il y a un effet de matrice. C'est-a-dire que l'intensité du signal mesuré (ici l'absorbance) dépend non seulement de l'espèce analysée mais aussi du solvant et des autres entités chimiques présentes en solution (Gore, 2000; Pinta et Riandey, 1969). Par exemple, dans ces travaux, la constante de Beer-Lambert a été estimée une seconde fois pour une concentration

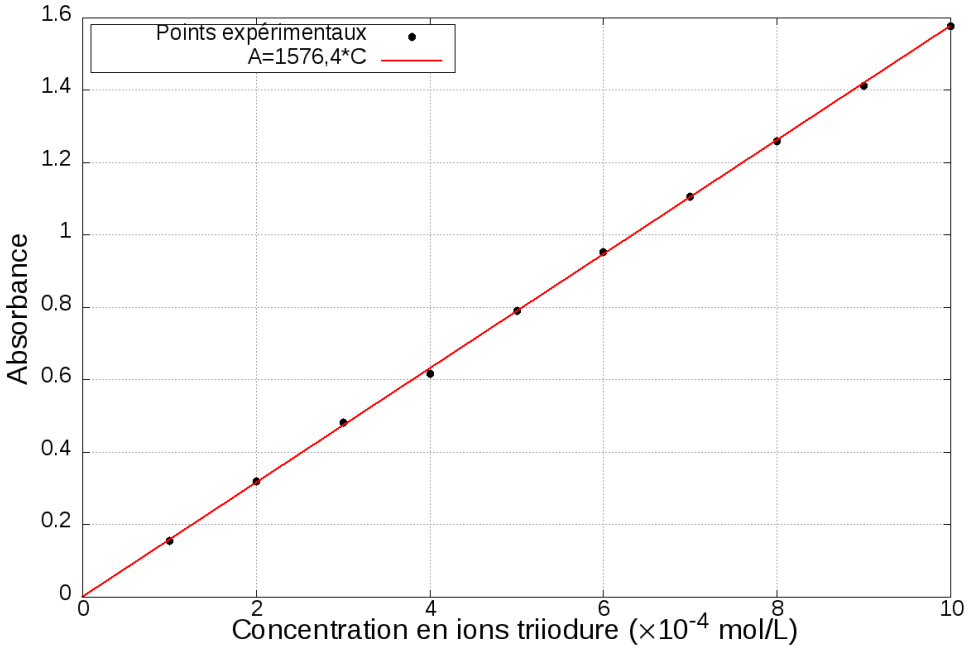


FIGURE 1.6 – Détermination de la constante de Beer-Lambert à 450nm pour une concentration de KI de 0.725 mol/L.

en iodure de potassium de $(1{,}45 \pm 0{,}02).10^{-2}$ mol/L (i.e. une dilution 50 fois de la solution de KI initiale). Sa valeur de 1283,2 ± 17,9 L/mol (R^2=0,999) est inférieure à la précédente. Ainsi, à concentration en ions I_3^- égale, deux solutions dont la concentration en iodure de potassium sont de $1{,}45.10^{-2}$ et de 0,725 mol/L n'auront pas la même absorbance à 450 nm.

1.3.3 Détermination de la constante cinétique

Comme mentionné précédemment, l'ordre partiel par rapport aux ions peroxodisulfates est de 1. Cela nous permet donc d'exprimer théoriquement l'évolution de la concentration en ions peroxodisulfates au cours du temps selon la relation suivante :

$$[S_2O_8^{2-}](t) = [S_2O_8^{2-}]_0 e^{-k_{app}t} \tag{1.10}$$

où $[S_2O_8^{2-}]_0$ est la concentration initiale de $S_2O_8^{2-}$ en solution, k_{app} la constante cinétique apparente à déterminer et t le temps.

Cette constante cinétique a été déterminée à 21°C par spectroscopie pour une solution initiale de 0,725 ± 0,009 mol/L en KI et $(2{,}876 \pm 0{,}043).10^{-4}$ mol/L en $Na_2S_2O_8$. Les ions iodures sont présents en excès, ce qui permet de considérer la concentration en ion iodure constante au cours de la réaction. La valeur de cette constante cinétique est $k_{app} = 7{,}56.10^{-3}$ s^{-1}. La figure 1.7(a) montre l'évolution de la concentration en ions peroxodisulfates au cours du temps. Plus spécifiquement, elle compare l'évolution expérimentale de la concentration en $S_2O_8^{2-}$ au cours du temps à l'allure théorique (Eq. (1.10)) de cette concentration. La figure 1.7(b) présente le diagramme de parité entre les valeurs expérimentales et théoriques. La courbe qui en résulte se superpose à la première bissectrice ($R^2 = 0{,}999$), confirmant l'ordre partiel de 1 par rapport aux ions $S_2O_8^{2-}$.

1.3.4 Détermination de la concentration en ions triiodures en sortie du réacteur

Le dispositif expérimental mis en œuvre pour les mesures d'avancement de réaction en sortie du lit fixe est présenté sur la figure 1.8. Les concentrations en ions persulfates et en ions iodures dans la solution en entrée du réacteur sont respectivement $(2{,}504 \pm 0{,}077).10^{-3}$ et $(7{,}25 \pm 0{,}22).10^{-1}$ mol/L. Le mélange est réalisé avant d'entrer dans le réacteur. Les deux débits partiels sont égaux et imposés par une pompe péristaltique fournissant un débit total compris entre 3,15±0,09 et 5,19±0,06 L/h (voir annexe E pour le détail des calculs sur les incertitudes). Le réacteur à lit fixe fait ici office de mélangeur statique permettant d'homogénéiser plus ou moins l'écoulement de fluide. En sortie du réacteur, la réaction n'est pas terminée et il faut la stopper [1]. Pour cela, une dilution par 50 du flux de sortie est effectuée permettant une diminution de la concentration en I^- et donc une réduction de la constante cinétique apparente de la réaction k_{app}. Celle dilution abaisse la constante cinétique apparente à $1{,}96.10^{-5}$ s^{-1}. Ainsi, la réaction est pratiquement stoppée et la concentration en ions $S_2O_8^{2-}$ ne varie que de 1% toutes les 9 minutes. Une fois la dilution effectuée, 5 échantillons de la solution sont prélevés afin de les analyser. La concentration en ions triiodures est finalement déterminée par spectrophotométrie à la longueur d'onde de 353 nm [2].

1.4 Mesure de champs de vitesse par PIV

1.4.1 Concepts théoriques

La vélocimétrie par images de particules, ou PIV, est une méthode très efficace pour caractériser un écoulement de fluide. Il s'agit d'une technique de mesure non intrusive permettant la mesure du champ de vitesse dans un écoulement. Cette technique consiste à suivre le déplacement de fines particules, nommées traceurs, en suspension dans un écoulement et suivant les lignes de courant de l'écoulement selon une description lagrangienne de celui-ci (voir figure 1.9).

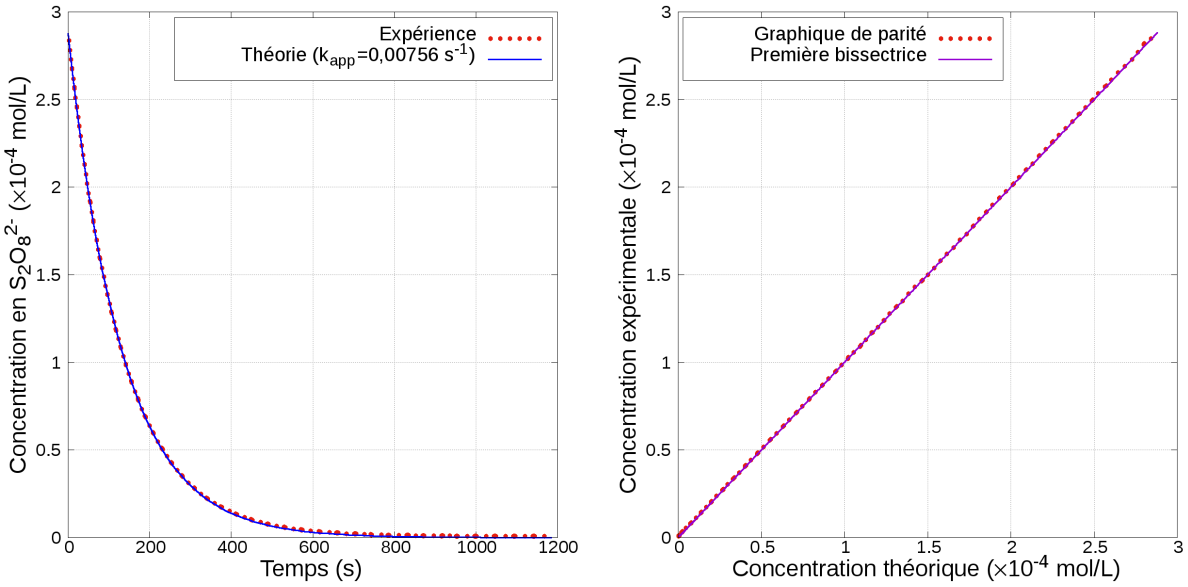
Le principe de la technique de mesure consiste à photographier, à l'aide d'une caméra haute vitesse, deux images proches dans le temps (δt petit) de ces traceurs permettant la détermination de leurs déplacements. La vitesse instantanée se déduira du déplacement et du délais δt entre deux photos. La PIV est une technique indirecte de mesure puisque le champ de vitesse mesuré est celui des particules que l'on assimile au champ de vitesse de l'écoulement.

1.4.1.1 Principe expérimental de la mesure

La figure 1.10 illustre le dispositif expérimental pour la technique de mesure par PIV. Une nappe laser est fabriquée à partir d'un faisceau laser et d'une lentille cylindrique. Celle-ci est projetée sur un écoulement ensemencé par de fines particules permettant d'éclairer les particules,

1. Il est également possible d'installer en ligne et en sortie du réacteur une cellule spectroscopique permettant la mesure en ligne de l'absorbance de la solution sortant du réacteur. Cependant, le matériel n'était pas disponible lors de la campagne expérimentale.

2. L'absorbance d'une solution de iodure de potassium à $1{,}45\,10^{-2}$ mol/L est négligeable à la longueur d'onde de 353 nm. La constante de Beer-Lambert a été déterminée à cette longueur d'onde et vaut 23792 ± 475 L/mol.



(a) Évolution de la concentration en $S_2O_8^{2-}$ (b) Graphique de parité ($R^2 = 0{,}999$)

FIGURE 1.7 – Évolution de la concentration en ions peroxodisulfates au cours du temps à 21°C (a), graphique de parité entre les concentrations expérimentales et théoriques (b).

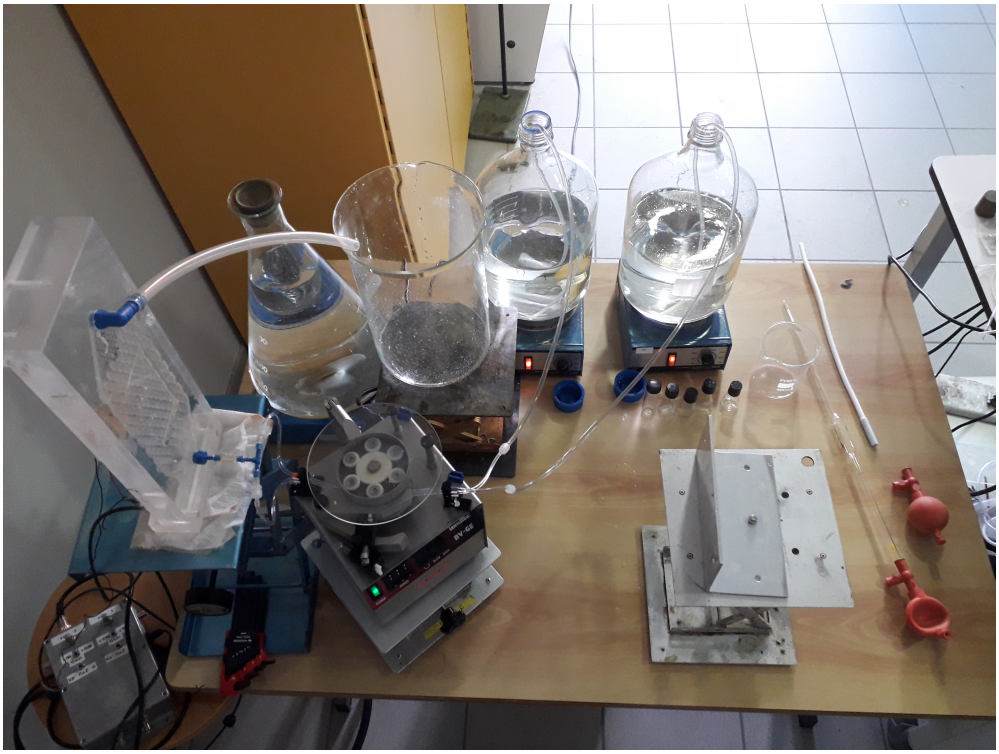


FIGURE 1.8 – Photo du banc expérimental pour les mesures d'avancement de réaction.

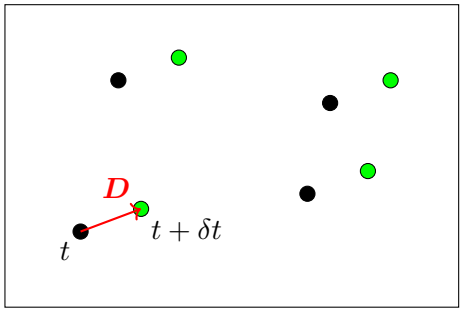


FIGURE 1.9 – Observation lagrangienne des particules, les points noirs désignent les particules au temps t, les points verts les particules à $t + \delta t$ et $\boldsymbol{D}$ le déplacement entre t et $t + \delta t$.

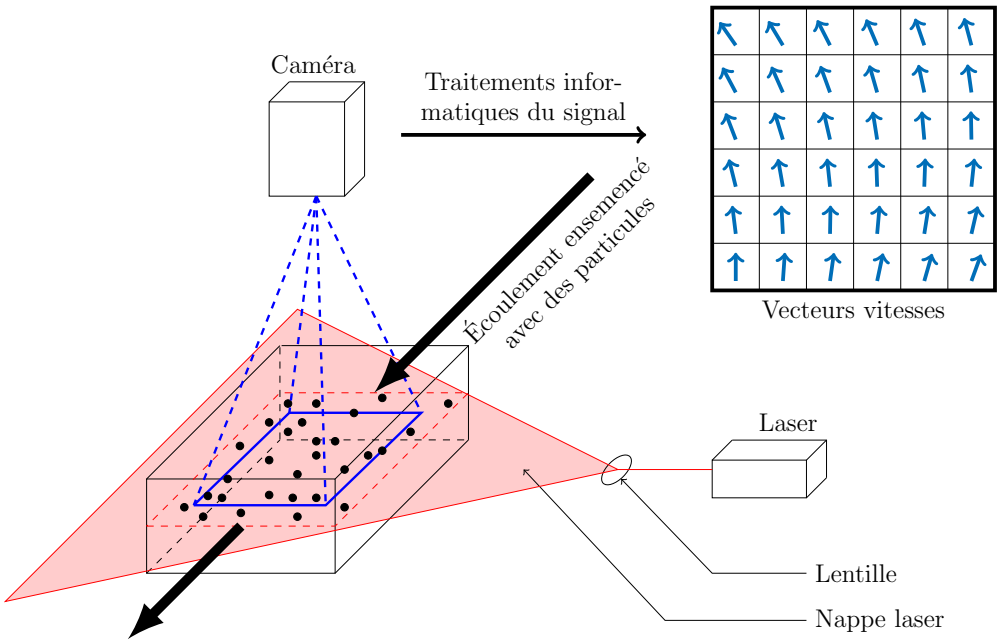


FIGURE 1.10 – Illustration expérimentale de la technique PIV.

et une caméra présente dans un plan perpendiculaire à la nappe laser photographie ces particules. Les images qui en résultent sont ensuite traitées informatiquement (voir § 1.4.1.5) dans le but de déterminer le champ du vecteur vitesse. Pour de plus amples précisions quant au dispositif expérimental, le lecteur est invité à se référer à Raffel et al. (2018).

1.4.1.2 Ensemencement

La PIV nécessite un ensemencement de particules, appelées traceurs, qui suivent les lignes de courant et réfléchissent la lumière laser. L'ensemencement est dit ''artificiel'' si les particules ont été ajoutées à l'écoulement spécialement pour la mesure. Il est dit ''naturel'' autrement. Cet ensemencement représente une partie importante de la technique de mesure. Celui-ci doit remplir un certain nombre de conditions afin d'effectuer efficacement les mesures expérimentales (Bonnet, 2012; Goldsmith, 2012; Walker, 1927) :

- La dimension des particules doit être choisie adéquatement. Le déplacement des traceurs

doit suivre le plus fidèlement possible celui de l'écoulement. Pour cela, les particules doivent être de petite taille afin de limiter leur inertie et de potentielles sédimentations ou flottations. Ces phénomènes peuvent être également limités en choisissant des particules dont la masse volumique est proche de celle du fluide étudié. Par ailleurs, la taille de ces particules ne doit pas être choisie trop faible, cela limiterait la réflexion de la lumière laser des particules. Pour un écoulement liquide, les particules potentielles d'ensemencement sont listées dans le tableau 1.1 (Raffel et al., 2018).

- La concentration des particules dans l'écoulement ne doit pas être trop élevée pour ne pas perturber l'écoulement. Cependant, il ne faut pas que cette concentration soit trop faible non plus pour permettre une analyse des images correcte. D'une manière générale, il faut 10 particules pour chaque vecteur vitesse mesuré. La concentration de ces particules doit également être la plus homogène possible.
- Les particules doivent être détectable par la caméra. Pour cela, on choisira des particules dont le pouvoir réflecteur de la lumière laser est élevé à la longueur d'onde de travail.

Généralement, l'ensemencement choisi est un compromis entre toutes les conditions citées ci-dessus.

TABLEAU 1.1 – Liste des particules potentielles d'ensemencement.

Type	Matériau	Diamètre moyen en µm
Solide	Polystyrène	10 - 100
Solide	Poudre d'alluminium	2 - 7
Solide	Billes de verre creuses (HSG)	10 - 100
Solide	Billes de polymères	10 - 500
Liquide	Gouttelettes huileuses	50 - 500
Gazeux	Bulles d'oxygène	50 - 1000

1.4.1.3 Éclairage

Les particules ainsi ensemencées sont éclairées afin de les rendre visibles par la caméra. Pour ce faire, une nappe laser, créée à partir d'un faisceau laser et d'une lentille cylindrique, illumine un plan 2D de l'écoulement. Cet éclairage peut être continu ou pulsé en synchronisation avec les images de la caméra, c'est-à-dire toutes les δt secondes. L'éclairage pulsé, plus complexe à mettre en œuvre expérimentalement, a l'avantage de rendre les images plus nettes lorsque les vitesses d'écoulement sont élevées. La puissance de l'éclairage est choisie en fonction de la taille des particules, la sensibilité de la caméra, le fluide étudié et la taille du plan de travail.

1.4.1.4 Acquisition des images

L'acquisition des images se fait à l'aide d'une ou plusieurs caméras à haute vitesse. L'utilisation d'une unique caméra permet la détermination du champ de vitesse en 2D, tandis que l'ajout d'une seconde caméra permet sa visualisation en 3D. La constante amélioration de la technologie de prise de vidéo nous offre une gamme dans le choix de la caméra de plus en plus large. Ce choix de caméra dépend alors de la résolution désirée, de la durée d'acquisition ou du

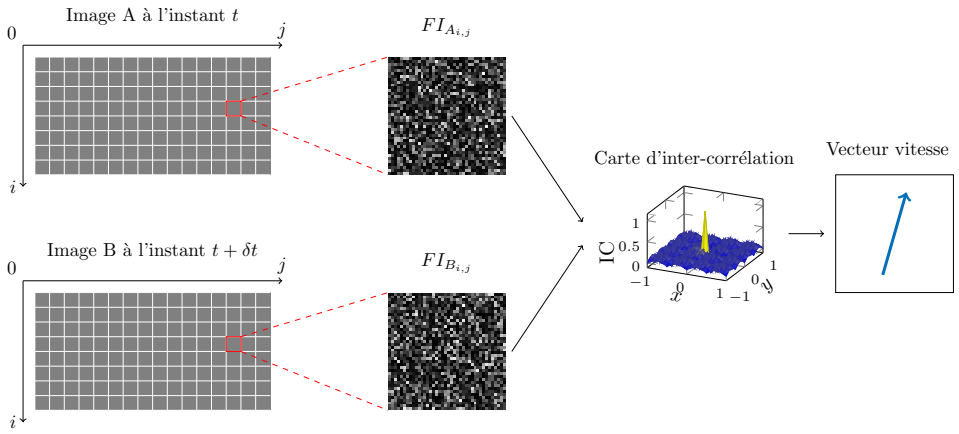


FIGURE 1.11 – Illustration de l'analyse des images PIV.

nombre d'images à la seconde (autrement dit le δt) que celle-ci permet. Le choix du δt constitue une étape importante. Il doit être assez élevé pour permettre un déplacement de particules assez grand, limitant ainsi les incertitudes sur le vecteur vitesse estimé. Cependant, ce temps entre deux images successives ne doit pas être trop élevé pour que les particules restent dans le plan de travail créé par la nappe laser.

1.4.1.5 Analyse des images

La figure 1.11 illustre l'analyse des images PIV en 4 étapes principales. La première étape consiste à découper les images en petites imagettes carrées, appelées fenêtres d'interrogation (FI) dont la taille varie généralement entre 16*16 et 128*128 pixels. Dans chacune de ses imagettes, la carte d'inter-corrélation (IC) entre deux imagettes successives de δt est calculée (pour plus de détails, voir Raffel et al. (2018, Chap 3)). Cette carte d'inter-corrélation présente un pic principal qu'il faut localiser et sa position par rapport au centre de la fenêtre d'interrogation coïncide avec le déplacement moyen $\boldsymbol{d}$ des particules présentes dans l'imagette entre t et $t + \delta t$. Pour finir, le vecteur vitesse correspondant à l'imagette est donné par la relation suivante :

$$\boldsymbol{U} = \frac{\boldsymbol{d}}{\delta t} \tag{1.11}$$

1.4.1.6 Avantages et limites de la technique de mesure

La PIV est une technique très utilisée pour caractériser les écoulements. Elle présente de nombreux avantages tels que le caractère non-intrusif de la méthode. Le seul ajout susceptible de perturber l'écoulement est celui des fines particules, qui, si elles ne sont pas ajoutées en fortes concentrations, n'influent pas sur l'écoulement. Un autre avantage de la technique de mesure est la prise de vue globale de l'écoulement permettant ainsi la détermination d'un champ de vecteur vitesse et non la vitesse en un unique point. Cependant, la PIV présente certaines limites techniques et technologiques. En effet, la PIV est une méthode de mesure indirecte, c'est-à-dire, qu'elle permet la détermination de la vitesse des particules et non du fluide. Il faut donc choisir correctement l'ensemencement pour que les traceurs suivent fidèlement l'écoulement.

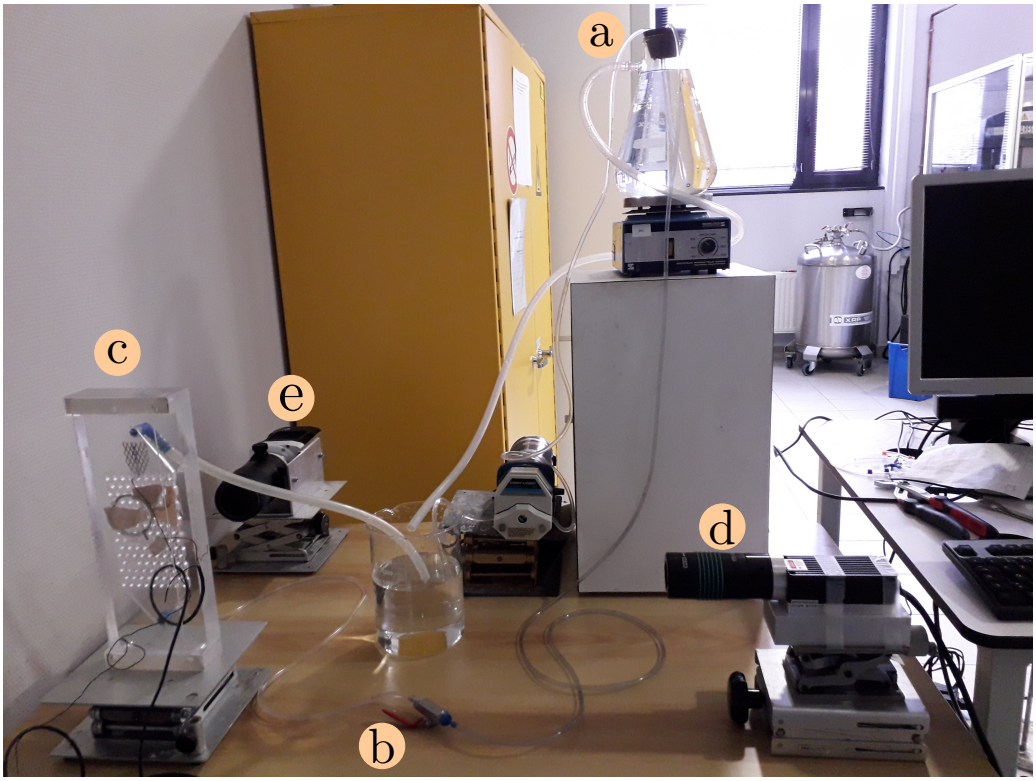


FIGURE 1.12 – Photo du banc expérimental pour les mesures par PIV.

Une autre limite de la technique est la difficulté de caractériser des écoulements à forts gradients de vitesse et ceux au voisinage de la paroi. Les vitesses variant fortement, il devient difficile de choisir adéquatement l'intervalle de temps δt. Il est également très important que les indices de réfraction du fluide et de l'objet dans lequel il s'écoule soient proches pour éviter des réfractions parasites.

1.4.2 Dispositif expérimental

La technique PIV étant une méthode optique de caractérisation d'écoulement, il faut limiter au maximum les potentielles réfractions des rayons lumineux au niveau des interfaces fluide/PMMA. En effet, des réfractions de la lumière laser pourraient entraîner des zones d'ombre dans l'écoulement, et altérer la qualité de l'acquisition des images par la caméra. Dans le cas présent, la caméra est située sur un axe perpendiculaire au plan formé par le réacteur en PMMA, par conséquent, l'altération des images reste négligeable. L'indice de réfraction du PMMA a été déterminé dans le cadre de ce travail, sa valeur de $n_{\text{PMMA}} = 1,494 \pm 0,010$ est en accord avec les travaux de la littérature (Weber, 2018). Pour minimiser les réfractions parasites, le fluide de travail doit avoir un indice de réfraction proche de 1,49. Le fluide choisi pour la campagne expérimentale est une solution aqueuse de KCSN à 64,3% massique, l'indice de réfraction de cette solution est de 1,491 à 20 °C. À cette fraction massique, la masse volumique de la solution de KSCN est de 1389 ± 3 g/L et sa viscosité dynamique de $2,433 \pm 0,009\ 10^{-3}$Pa/s à 20 °C. L'ensemencement est effectué avec des billes de verre creuses recouvertes d'une fine couche d'argent (S-HGS) les rendant très réfléchissantes. Ces particules de 10 µm de diamètre ont une

densité proche de celle du fluide ($d_{\text{part}} = 1{,}4$ vs $d_{\text{fluide}} = 1{,}39$).

La figure 1.12 présente une photographie du banc expérimental utilisé pour les mesures de champ de vitesse par PIV. Le mélange fluide/particules circule en boucle fermée et le débit est assuré par gradient de pression à l'aide d'un siphon. Contrairement aux mesures expérimentales précédentes décrites (§1.3.4), le débit ne peut être assuré par une pompe péristaltique dans le cas présent. En effet, une pompe péristaltique impose des écoulements pulsés, ce qui fausserait la détermination du champ de vitesse. Un système de trop-plein (a) au niveau du réservoir principal est présent afin d'assurer la constance de la hauteur du fluide au dessus du siphon et par conséquent, la constance du débit. Celui-ci est régulé à l'aide de la vanne (b) et déterminé par empotage. On se place à des débits qui assurent un écoulement laminaire dans le lit fixe, ceux-ci sont compris entre 3,15 et 5,19 L/h.

La mélange fluide/particules qui s'écoule dans le lit fixe (c) est éclairée par une nappe laser (d) dont la longueur d'onde est de 532 nm. Cette nappe se confond avec le plan 2D du réacteur. Une caméra Miro haute vitesse (e) située dans un axe perpendiculaire à la nappe laser filme l'écoulement des particules à raison de 100 images par seconde.

Pour finir, les images sont analysées à l'aide du logiciel PIVLab (Thielicke et Stamhuis, 2014), un logiciel open-source implémenté sous MatLab.

1.5 Mesure de la distribution des temps de séjour dans les réacteurs

1.5.1 Principe de la méthode de distribution des temps de séjour

La notion de distribution des temps de séjour (DTS) a été introduite par Danckwerts en 1953 (Danckwerts, 1953). Elle permet de caractériser le comportement hydrodynamique d'un système par une approche systémique, par opposition à l'approche conventionnelle consistant en l'écriture de bilan de matière et de quantité de mouvement. La DTS repose sur une description statistique du temps nécessaire à chaque molécule qui entre dans un système pour atteindre sa sortie. Elle permet donc l'obtention d'informations globales sur l'écoulement dans le système que l'on peut considérer comme une boîte noire.

Dans ce travail, on va appliquer cette approche systémique aux réacteurs initial et optimaux fabriqués par stratoconception®. L'objectif est à la fois de :

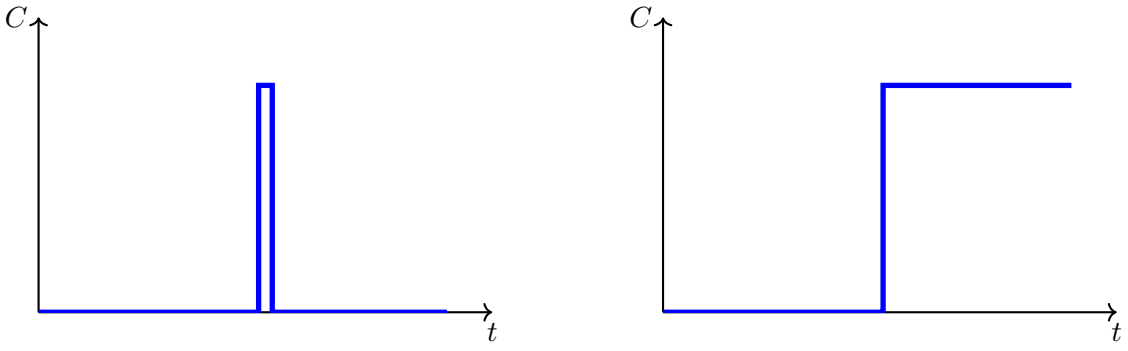
1. Comparer l'hydrodynamique des réacteurs fabriqués par rapport au réacteur piston.
2. Déterminer la présence ou non de passages préférentiels, de recirculations et de zones mortes susceptibles de dégrader les performances des réacteurs.
3. Valider les simulations CFD en comparant DTS simulées et DTS expérimentales de chaque réacteur fabriqué.

Expérimentalement, la technique de mesure d'une DTS se fait par injection d'un traceur à l'entrée du réacteur étudié, puis par le suivi temporel de la concentration en traceur à la sortie. Cette injection peut s'effectuer sous forme :

- d'une impulsion. Le traceur est injecté sur un intervalle de temps très court (idéalement inférieur à 1% du temps de passage) approximant au mieux la fonction de Dirac (voir

figure 1.13(a)).

- d'un échelon. La concentration en traceur en entrée d'unité passe brutalement d'une valeur nulle à une valeur non nulle (voir figure 1.13(b)). Une vanne 3 voies est alors utilisée sur le montage expérimental permettant l'injection du traceur.



(a) Impulsion (b) Échelon

FIGURE 1.13 – Concentration en traceur en entrée d'unité suivant l'injection, (a) impulsion, (b) échelon

Dans la pratique, il faut respecter un certain nombre de conditions pour que les mesures expérimentales de DTS sur les réacteurs soient exploitables (Villermaux, 1993) :

- le fluide porteur doit être incompressible.
- le système doit être à l'état stationnaire lors de l'injection du traceur.
- l'injection du traceur ne doit pas perturber l'écoulement du fluide.
- le traceur doit suivre les lignes de courant de l'écoulement.
- le traceur ne doit ni réagir ni s'adsorber au cours de son passage dans le réacteur.
- le traceur doit facilement être détectable en sortie. C'est-à-dire par conductimétrie, spectrophotométrie ou radioactivité. Il est préférable que la mesure soit proportionnelle à la concentration en traceur afin de faciliter l'exploitation des mesures.

Pour finir, l'exploitation de la DTS s'effectue par la méthode des moments. Soit $\mathrm{E}(t)$ (en s^{-1}) la fonction de distribution des temps de séjour. Cette fonction E est normée, c'est-à-dire que son moment d'ordre 0 défini par l'équation (1.12) est égal à 1.

$$\mu_0 = \int_0^\infty \mathrm{E}(t)\, dt = 1 \tag{1.12}$$

On définit ensuite les moments d'ordre 1 et 2 selon les relations suivantes :

$$\mu_1 = \int_0^\infty t\mathrm{E}(t)\, dt \tag{1.13}$$

$$\mu_2 = \int_0^\infty t^2\mathrm{E}(t)\, dt \tag{1.14}$$

Elles permettent de déterminer le temps de séjour moyen $t_s = \mu_1$ et l'écart type de la distribution défini par :

$$\sigma = \sqrt{\mu_2 - \mu_1^2} \tag{1.15}$$

La détermination de l'écart type permet de quantifier, pour un réacteur à lit fixe, l'écart au réacteur piston pour lequel l'écart type de la DTS est nul. Il est, par conséquent, intéressant de réduire au maximum cet écart type pour rendre l'écoulement le plus homogène possible.

1.5.2 Dispositif expérimental

La figure 1.14 présente une photographie du dispositif expérimental mis en place pour les mesures de DTS des différents réacteurs. Le fluide porteur (de l'eau (a)) est introduit en bas du réacteur (b) à l'aide d'une pompe péristaltique. Une fois le régime permanent établi, une vanne 3 voies (c) présente en entrée de réacteur permet le changement du fluide d'entrée et donc l'injection en échelon du traceur. Ce dernier est une solution d'ions triiodures I_3^- (d) facilement détectable par spectrophotométrie. Pour cela, une cellule spectrophotométrique (c) est installée en ligne à la sortie du réacteur et permet l'acquisition de l'absorbance de la solution sortant du réacteur en fonction du temps.

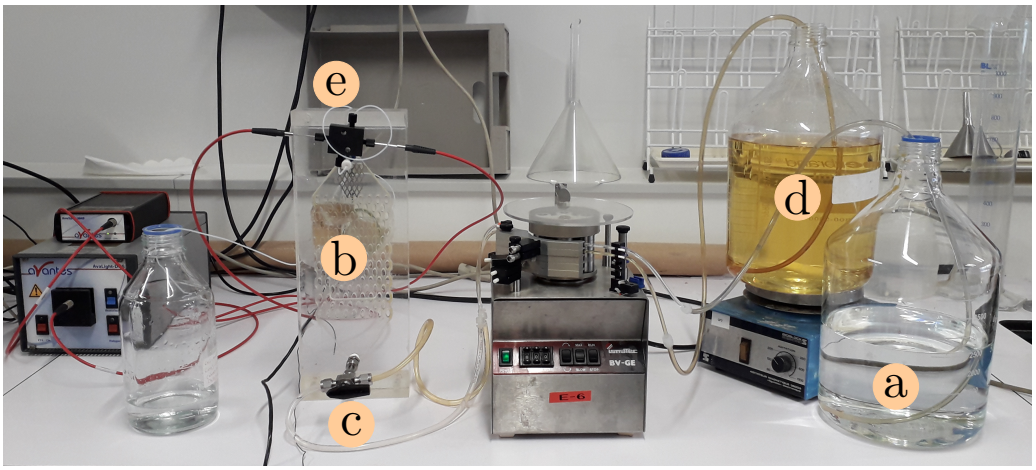


FIGURE 1.14 – Photo du banc expérimental pour les mesures de DTS.

1.6 Conclusions

Dans ce chapitre, le procédé d'impression 3D utilisé pour fabriquer les maquettes à échelle 1 a été détaillé (section 1.2), les techniques de mesure mises en œuvre ont été expliquées puis les installations expérimentales associées ont été présentées. Ces mesures expérimentales portent sur les déterminations des distributions des temps de séjour dans les réacteurs par spectrophotométrie (section 1.5), les mesures de champ de vitesse dans les maquettes par PIV (section 1.4) et les déterminations d'avancement de réaction en sortie de lits fixes par spectrophotométrie (section 1.3). Les campagnes expérimentales correspondantes ont été effectuées dans l'optique de comparer les résultats expérimentaux avec ceux issus des simulations fournies par OpenFOAM. Cette comparaison fait l'objet du chapitre 5.

Chapitre 2

Présentation de la méthode d'optimisation et application à l'hydrodynamique

Sommaire

2.1 Introduction 26
2.2 Concepts fondamentaux de l'optimisation de forme 26
2.2.1 Classement selon l'algorithme d'optimisation 27
2.2.1.1 Les méthodes déterministes 28
2.2.1.2 Les méthodes stochastiques 29
2.2.1.3 Les méthodes hybrides 30
2.2.2 Classification selon le degré de liberté de la méthode 31
2.2.3 Équations aux dérivées partielles 32
2.2.4 Mécanique des fluides numériques 36
2.3 Cas étudiés et problèmes d'optimisation associés 37
2.3.1 Descriptions des cas considérés 37
2.3.2 Définitions des problèmes d'optimisation de forme 39
2.3.2.1 Équations du modèle 39
2.3.2.2 Variables de décision 39
2.3.2.3 Fonction objectif à minimiser 39
2.3.2.4 Ensemble des contraintes 39
2.4 Formulation mathématique des problèmes 40
2.4.1 Principes fondamentaux de la méthode de Hadamard 40
2.4.2 Méthode de l'état adjoint 41
2.5 Algorithme associé à la résolution 44
2.6 Résultats numériques et discussions 46
2.6.1 Énergie dissipée dans une conduite coudée à 90° 47
2.6.2 Dissipation d'énergie dans une conduite coudée à 180° 50
2.6.3 Dissipation d'énergie autour d'un obstacle 50
2.6.4 Énergie dissipée dans un arbre à deux branches (arbre dyadique) 54
2.7 Conclusions 56

2.1 Introduction

En mécanique des fluides, les pertes de charge dans un fluide sont directement liées aux pertes d'énergie mécanique du fluide. Elles se définissent comme la différence de pression entre deux points d'un réseau de transport de fluides. Une chute de pression se produit lorsque des forces de frottement, causées par la résistance à l'écoulement, agissent sur le fluide. Les principales variables influant sur la résistance à l'écoulement sont la vitesse et la viscosité du fluide. Des vitesses d'écoulement élevées ou des viscosités de fluide élevées entraînent des pertes de charge plus importantes dans une conduite, une vanne ou un coude, tandis qu'une faible vitesse ou une faible viscosité se traduiront par une chute de pression plus faible.

Industriellement, il est très important de limiter au maximum ces pertes de charge. En effet, cette chute d'énergie dans le fluide doit être compensée par l'ajout d'une pompe ou d'un compresseur dans le réseau. Plus les pertes de charge seront importantes, plus le coût de fonctionnement de la pompe ou du compresseur sera élevé.

La perte de charge est un critère très utilisé industriellement car c'est une grandeur simple à mesurer dans la pratique. Il suffit de deux capteurs de pression placés en entrée et en sortie d'une unité pour la déterminer. Cependant, ce critère fournit une indication sur la dégradation globale de l'énergie dans le système, mais ne permet pas d'identifier localement les zones du systèmes où la perte d'énergie est la plus élevée. C'est la raison pour laquelle la dissipation d'énergie dans le fluide due aux frottements visqueux est plus utilisée. Cette grandeur est intéressante car elle est directement liée aux pertes de charge. De plus, elle dépend du gradient de vitesse dans le fluide, et il sera aisé de remonter numériquement aux zones où ces pertes d'énergie sont élevées. Dans cette étude, cette grandeur fera office de fonction objectif à minimiser.

Le présent chapitre a pour objectif :

- D'introduire les concepts fondamentaux d'optimisation de forme et les différentes classifications qui existent.
- De décrire et développer un algorithme d'optimisation géométrique par la méthode de l'état adjoint. L'objectif est de minimiser l'énergie dissipée par le fluide due aux frottements visqueux d'un écoulement dans un système.
- De tester l'algorithme sur certains types d'écoulement de fluide en dimension deux.
- De valider la méthode développée par comparaison des formes optimales obtenues avec celles des travaux de la littérature.

2.2 Concepts fondamentaux de l'optimisation de forme

La légende raconte (Slim et Fauqué, 2016) qu'au VIIIème siècle avant Jésus Christ, la princesse Didon, trahie par son frère s'enfuit de Tyr en direction de l'Afrique du Nord. Une fois accostée, elle alla rencontrer Hiarbas, un roi berbère, pour lui demander une parcelle de terre pour y fonder un royaume. Amusé, le roi lui donna une peau de bœuf carrée d'un mètre de côté et promit de lui donner "autant de terre qu'elle pourrait faire tenir dans cette peau de bœuf". La princesse réfléchit un long moment puis décida de découper cette peau en une fine lanière si bien qu'elle obtint une lanière de 4 km de long. Voulant un accès à la mer et une longueur de littoral minimale, la princesse chercha comment disposer cette lanière pour avoir la ville la plus grande

possible, ville qu'elle appela Carthage située dans l'actuelle Tunisie. La fondation de Carthage représente alors la naissance de l'optimisation de forme. Il s'agit d'un problème iso-périmétrique et Julisson (2016) donne une formulation mathématique de ce problème d'optimisation de forme sous contrainte.

Pour comprendre le fonctionnement d'un algorithme d'optimisation de forme, il convient avant tout de définir le concept d'optimisation. D'après le dictionnaire Larousse, optimiser revient à « donner à quelque chose, à une machine ou à une entreprise, le rendement optimal en créant les conditions les plus favorables ou en tirant le meilleur parti possible ». De façon mathématique, un problème d'optimisation se définit par quatre éléments (Culioli, 2012).

1. Un **modèle mathématique** permettant de décrire le comportement du système étudié. Il s'agit très souvent d'équations aux dérivées partielles telles que les équations de Navier-Stokes, les équations d'élasticité, les bilans d'énergie ou de matière etc.
2. Une **fonction objectif** ou **critère d'optimisation** à minimiser ou maximiser.
3. Un ensemble de **contraintes** dans lequel on recherche la solution, également appelé ensemble admissible du problème d'optimisation.
4. Des **variables de décision** qui seront modifiées afin de minimiser ou maximiser la fonction objectif. Dans un problème d'optimisation de forme, la seule variable de décision considérée est la forme de l'objet optimisé.

L'optimisation de forme consiste en un ensemble de techniques et méthodes mathématiques permettant de déterminer la forme d'un objet qui minimise ou maximise une fonction coût tout en satisfaisant des contraintes imposées par le procédés. Il s'agit d'une discipline située à l'intersection des mathématiques, des méthodes numériques et de la mécanique des fluides numériques (CFD). L'optimisation de forme diffère de l'optimisation statique ou dynamique au niveau des variables de décision. En optimisation statique, les variables de décision sont des paramètres constants alors qu'en optimisation dynamique, ce sont des fonctions temporelles.

Historiquement développées pour l'industrie aéronautique et particulièrement pour le design des avions (Allen et Rendall, 2013; Schramm et al., 2018), les méthodes d'optimisation de forme ont été récemment étendues à d'autres domaines où la forme des objets influence fortement ses performances. On peut citer entre autres, le génie biologique (Ramm et al., 1995), le génie mécanique (Ben Abda et Méjri, 2019; Simonetti et al., 2019), l'hydrodynamique (Courtais et al., 2019a; Henrot et Privat, 2010; Tonomura et al., 2010), le génie thermique (Marck, 2012) ou plus récemment le génie des procédés (Courtais et al., 2021b).

Dans la littérature, il existe de nombreuses méthodes d'optimisation de forme que l'on peut classer de deux façons différentes :

- une première selon le type d'algorithme utilisé,
- une seconde selon le nombre de variables de décision que la méthode permet.

2.2.1 Classement selon l'algorithme d'optimisation

Généralement, les algorithmes d'optimisation sont mis en œuvre de façon itérative. En d'autres termes, les résultats de chacune des itérations servent à modifier les variables de décision de l'itération suivante afin d'améliorer la fonction objectif considérée. Ces résultats peuvent être utilisés de trois manières différentes, ce qui nous permet de classer les algorithmes existants dans la littérature selon la méthode itérative utilisée. Les trois principales catégories sont

alors les méthodes déterministes, les méthodes stochastiques et les méthodes hybrides combinant algorithmes déterministes et stochastiques.

2.2.1.1 Les méthodes déterministes

Une grande majorité des méthodes d'optimisation de forme sont basées sur le calcul du gradient de la fonction objectif. Il s'agit de méthodes itératives où le calcul de la dérivée du critère (ou lagrangien) par rapport aux variables de décision est utilisé afin déterminer les valeurs des variables de décision pour l'itération suivante selon la relation de récurrence :

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha \boldsymbol{d}_k \tag{2.1}$$

où k représente l'itération, $\boldsymbol{x}$ le vecteur des variables de décision, α le pas de la méthode et $\boldsymbol{d}_k$ la direction de descente. À chaque itération, le but est de déterminer une direction de descente permettant une amélioration de la fonction objectif que l'on peut déterminer à partir du développement de Taylor à l'ordre 1 autour de $\boldsymbol{x}_k$, exprimé par :

$$f(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}_k) + \nabla f(\boldsymbol{x}_k) \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_k) + R(\boldsymbol{x}) \tag{2.2}$$

où $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ est la fonction objectif, une fonction continue, et $R(\boldsymbol{x})$ le résidu d'ordre 1 du développement de Taylor. Celui-ci calculé en $\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha \boldsymbol{d}_k$ donne l'équation 2.3.

$$f(\boldsymbol{x}_{k+1}) = f(\boldsymbol{x}_k) + \alpha \nabla f(\boldsymbol{x}_k) \cdot \boldsymbol{d}_k + R(\alpha) \tag{2.3}$$

où α est un petit paramètre positif permettant à $\boldsymbol{x}_{k+1}$ d'être au voisinage de $\boldsymbol{x}_k$. En admettant $R(\alpha)$ négligeable devant les autres termes, il vient

$$f(\boldsymbol{x}_{k+1}) - f(\boldsymbol{x}_k) = \alpha \nabla f(\boldsymbol{x}_k) \cdot \boldsymbol{d}_k \tag{2.4}$$

En supposant que le gradient de la fonction $\nabla f(\boldsymbol{x}_k)$ est non nul (i.e. $\nabla f(\boldsymbol{x}_k) \neq 0$) et en choisissant la direction de descente comme l'opposée du gradient de la fonction objectif ($\boldsymbol{d}_k = -\nabla f(\boldsymbol{x}_k)$), on a

$$-\alpha ||\nabla f(\boldsymbol{x}_k)||^2 < 0 \qquad \text{d'où} \qquad f(\boldsymbol{x}_{k+1}) - f(\boldsymbol{x}_k) < 0 \tag{2.5}$$

Ainsi, la relation de récurrence menant à une descente de la fonction objectif et à terme à l'optimum de cette dernière est donnée par l'équation suivante :

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \alpha \nabla f(\boldsymbol{x}_k) \tag{2.6}$$

Le développement de Taylor d'ordre 1 (2.2) n'étant valide qu'au voisinage de $\boldsymbol{x}_k$, le paramètre α présent dans l'équation (2.6) doit être choisi petit pour s'assurer de la convergence. Un exemple d'algorithme est présenté figure sur la 2.1. La figure 2.2 fournit une illustration 1D d'une méthode de gradient. L'optimisation d'une fonction $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ se fait de façon itérative par l'intermédiaire du calcul de sa dérivée f'.

La principale difficulté de ce genre de méthode réside dans le calcul du gradient de la fonction objectif. Pour cela, 4 méthodes de calcul sont décrites dans la littérature :

1. Le **calcul direct** si la fonction objectif le permet.

Définir α et ε deux réels positifs de faibles valeurs;
Initialiser $\nabla f(x)$ à une valeur supérieure à ε;
tant que $||\nabla f(x)|| > \varepsilon$ **faire**
  Calculer le gradient de la fonction $\nabla f(x)$;
  $\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x} - \alpha \nabla f(\boldsymbol{x})$;
fin

FIGURE 2.1 – Algorithme de gradient à pas constant

2. L'estimation du gradient par **différences finies** à partir du développement de Taylor d'ordre 1.
3. Le calcul par **sensibilités** qui se définissent comme étant la dérivée partielle des variables d'état par rapport aux variables de décision.
4. Le calcul par **état adjoint**, introduisant un nouveau système d'équations aux dérivées partielles permettant de calculer le gradient (Bryson, 1975).

L'avantage majeur des méthodes de gradient réside dans sa faculté à résoudre des problèmes avec un grand nombre de variables de décision. Cependant, les performances d'optimisation de ce genre de méthodes dépendent fortement du choix des valeurs initiales $\boldsymbol{x}_0$ des variables de décision et du pas de la méthode α. Si $\boldsymbol{x}_0$ n'est pas choisie adéquatement, le processus d'optimisation peut converger vers un optimum local comme l'illustre la figure 2.2 (voir la suite des $\hat{x}$). Le choix du pas de la méthode est également très important. Si α est choisi trop petit, la convergence sera très lente. S'il est choisi trop grand, l'algorithme d'optimisation risque de diverger.

2.2.1.2 Les méthodes stochastiques

La deuxième catégorie est composée de méthodes stochastiques. En d'autres termes, il s'agit de méthodes qui ne sont pas basées sur le calcul du gradient mais sur les valeurs de la fonction objectif. On peut citer entre autres les méthodes métaheuristiques qui se basent sur les phénomènes physiques. Ce sont des méthodes généralistes et sont adaptées à tout type de problème. Ici, seule la valeur de la fonction objectif importe, le processus menant à cette valeur pouvant être réduit à une boîte noire. Voici quelques exemples de méthodes métaheuristiques d'optimisation :

1. Les algorithmes **évolutionnaires** tels que les algorithmes génétiques (Ge et al., 2019; Haslinger et al., 2000; Zuo et al., 2009). Généralement, ces algorithmes sont basés sur un nombre de population N. Pour chaque élément de la population $\boldsymbol{x}$, la valeur de la fonction objectif $J(\boldsymbol{x})$ est calculée. À chaque itération de l'algorithme, cette population est amenée à évoluer en fonction des performances de ses éléments à l'aide de trois fonctions différentes : les fonctions de *sélection*, de *recombinaison* et de *mutation* faisant appel en partie au hasard.
2. Le **recuit simulé** inspiré du processus physique de réchauffement de pièces métalliques pour ensuite baisser lentement la température. Cela réduit les défauts de la pièce et donc l'énergie du système (Kirkpatrick et al., 1983).
3. L'algorithme de **colonies de fourmis** développé par Dorigo afin de déterminer les chemins optimaux (Dorigo, 1992; Solnon, 2008).

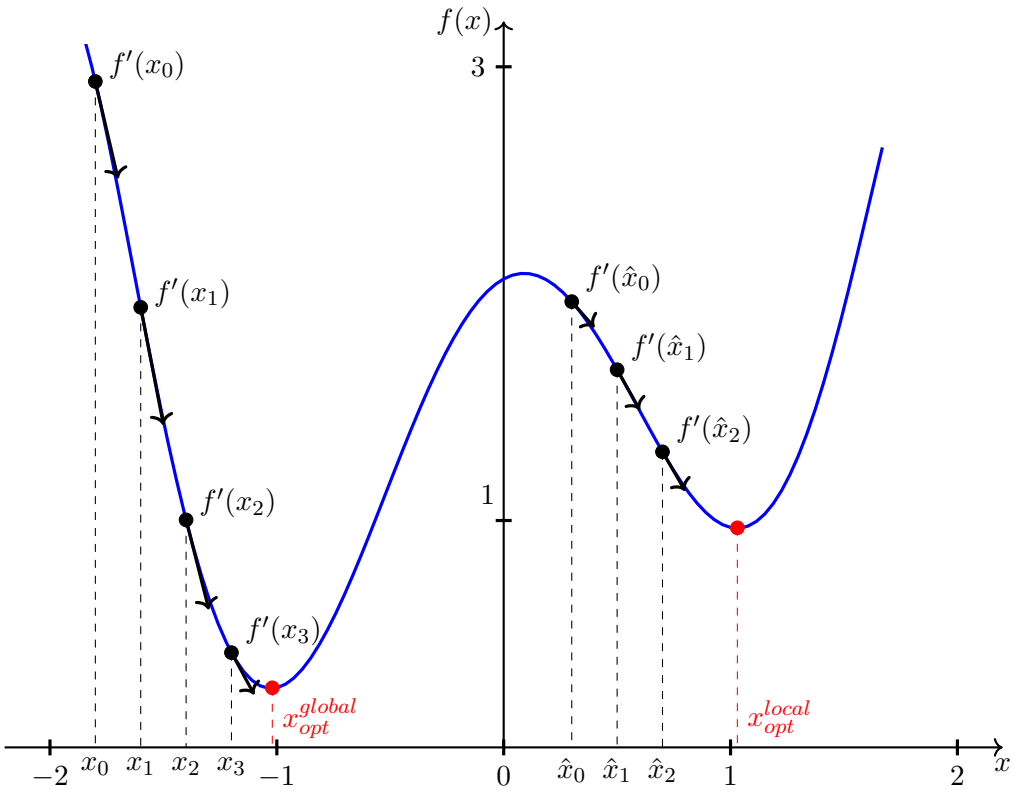


FIGURE 2.2 – Illustration d'une méthode de gradient

En résumé, les algorithmes stochastiques cherchent à reproduire des procédés d'optimisation présents dans le monde réel tel que la sélection naturelle pour les algorithmes génétiques ou le comportement des fourmis en déplacement pour l'algorithme de colonies de fourmis.

Le principal avantage de ces méthodes est de limiter la convergence de l'algorithme vers des optima locaux, sachant que la convergence vers l'optimum global n'est garanti qu'à l'issue d'un nombre infini d'itérations. Un autre avantage des méthodes métaheuristiques est que la fonction objectif ne doit pas nécessairement être dérivable contrairement aux méthodes de gradient. En revanche, le temps de calcul augmente fortement lorsque le nombre de variables de décision devient important. Cet inconvénient commence à être atténué avec l'amélioration continue de l'outil informatique et avec la parallélisation des calculs. Un autre inconvénient de ces méthodes réside dans le fait qu'elles ne garantissent pas l'amélioration de la fonction objectif à chaque itération.

2.2.1.3 Les méthodes hybrides

La dernière catégorie des méthodes d'optimisation est composée de méthodes hybrides. Celle-ci combinent les différents avantages des méthodes déterministes et stochastiques [3] tout en limitant au maximum leurs inconvénients. L'hybridation des deux méthodes optimisation peut s'effectuer de deux façons :

3. À noter qu'il est également possible d'hybrider deux méthodes stochastiques.

1. La première idée consiste à limiter au maximum la convergence de l'algorithme vers un optimum local à l'aide d'un algorithme stochastique, puis accélérer la vitesse de convergence en utilisant un algorithme déterministe (Hachimi, 2013). Il s'agit d'une stratégie dite de relais où les méthodes s'appliquent l'une après l'autre. La difficulté majeure de cette première stratégie est de choisir le moment adéquat pour effectuer le passage de la première méthode à la seconde au cours du processus d'optimisation. Pour pallier cette difficulté, il est possible d'effectuer cette alternance entre les deux algorithmes à plusieurs reprise (Li et al., 2013).
2. La seconde idée consiste en l'utilisation simultanée d'un algorithme stochastique et d'un autre déterministe. Généralement, il s'agit d'un algorithme génétique basé sur une population N où l'un des opérateurs (i.e. reproduction, combinaison ou mutation) est remplacé par un algorithme de descente locale (Liu et al., 2006; Widmer, 2001). Par exemple, Costa et al. (1995) proposent un algorithme de descente évolutif (*Evolutionary Descent Method*) où la fonction de reproduction est remplacée par une méthode de descente.

Ces méthodes d'optimisation étant des combinaisons d'algorithmes stochastique et déterministe, les avantages et inconvénients sont directement liés aux méthodes employées. Généralement, ces méthodes ont l'avantage de limiter la convergence de l'algorithme vers un minimum local de la fonction objectif.

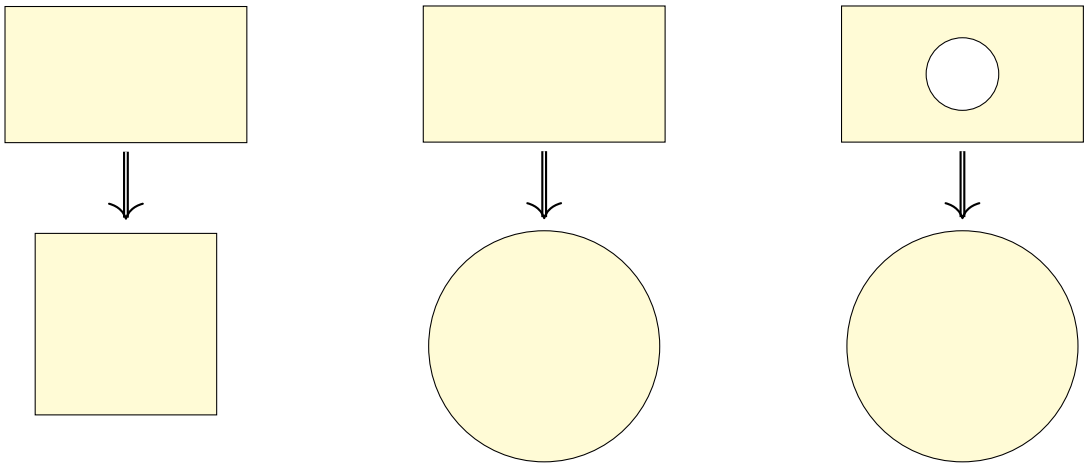
2.2.2 Classification selon le degré de liberté de la méthode

La figure 2.3 présente les trois principales familles d'optimisation de forme qui existent lorsqu'on les classe selon le degré de liberté qu'offre la méthode.

a. L'**optimisation paramétrique** (Kundu, 2007; Lin et al., 2011) où la forme générale de l'objet à concevoir est fixée et l'algorithme d'optimisation modifie la forme selon un certain jeu de paramètres (tels que le diamètre des trous, la longueur d'une arête, les coefficients de courbes splines, etc.). L'approche paramétrique consiste à reformuler le problème d'optimisation de forme en un problème d'optimisation statique. C'est la méthode la plus simple mais également la moins riche au regard des formes créées. On ne peut pas atteindre une forme ou une topologie arbitraire à l'aide de cette approche. La forme optimisée sera semblable à la forme de départ, seules les dimensions et la position de l'objet changent. La figure 2.3(a) permet d'illustrer cette première famille.

b. Optimisation **géométrique** (Courtais et al., 2019b; Henrot et Privat, 2010) : dans cette approche, la partie du bord que l'on souhaite optimiser est dite libre et on applique des champs de vecteurs judicieusement choisis pour déplacer la frontière libre. Pour réaliser les simulations numériques, on est en général amené à discrétiser le domaine à l'aide d'un maillage (constitué de points et de nœuds). Les variables de décision sont les coordonnées de ces points. Cette approche est plus riche que la précédente car elle permet a priori d'atteindre une très large famille de configurations. Cependant, notons que, si la forme n'est pas fixée, sa topologie est conservée. Par exemple, en 2D, on ne peut pas modifier le nombre de "trous". La figure 2.3(b) présente un exemple d'optimisation géométrique.

c. Optimisation **topologique** (Dong et Liu, 2020; Zhou et al., 2018) : il s'agit d'un enrichissement de la méthode précédente où l'on autorise cette fois la topologie à varier, donc en 2D la création/suppression de trous. Cette méthode est en général la plus difficile à mettre en œuvre. Un exemple d'optimisation topologique est représenté à la figure 2.3(c).



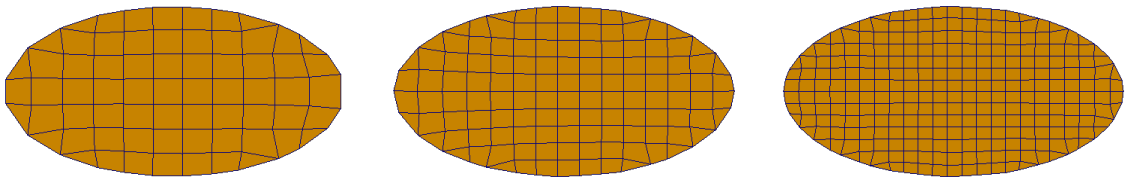
(a) Optimisation paramétrique (b) Optimisation géométrique (c) Optimisation topologique

FIGURE 2.3 – Maximisation 2D de l'aire d'un objet sous contrainte de son périmètre en utilisant un algorithme d'optimisation (*a*) paramétrique, (*b*) géométrique, (*c*) topologique

Allaire et Schoenauer (2007) fournissent plus de précisions et d'exemples sur ces méthodes d'optimisation. Chacune de ces familles d'optimisation de forme présente ses avantages et ses inconvénients. D'un côté, l'optimisation topologique assurera de très bonnes performances d'optimisation du fait de son grand nombre de degrés de liberté et de sa capacité à exploiter tout l'espace donné par l'ensemble des contraintes. Cependant, ces méthodes d'optimisation seront coûteuses en temps de calcul (CPU), et les formes obtenues, bien qu'optimales, peuvent s'avérer compliquées à fabriquer. De l'autre côté, l'optimisation paramétrique offre peu de degré de liberté et par conséquent, de fortes chances de converger vers un optimum local. Cependant, les calculs sont rapides et la forme finale est manufacturable aisément car elle est fixée par la forme initiale. L'optimisation géométrique quant à elle offre un compromis entre les deux autres familles. Le choix de la famille d'optimisation utilisée est donc celui de l'ingénieur et dépendra du problème d'optimisation considéré.

2.2.3 Équations aux dérivées partielles

Quelle que soit la famille ou méthode utilisée, l'optimisation de forme requiert un modèle de procédé très précis, c'est-à-dire capable de représenter précisément les effets des variables de décision sur la fonction objectif. Bien souvent, le modèle permettant de déterminer l'état du système associé à la forme considérée est un ensemble d'équations aux dérivées partielles (EDP). On peut citer entres autres les équations de Navier-Stokes, de la chaleur, d'élasticité, de Maxwell ou de transport de matière. Excepté pour des géométries très simples, ces différentes EDPs ne peuvent être résolues analytiquement. Leur solution est obtenue numériquement par discrétisation de l'objet entier en petites mailles dont la réunion s'appelle le maillage. La figure 2.4 présente différentes finesses de maillage d'une ellipse. Plus le maillage est fin, plus la solution numérique est précise. Une fois le maillage établi, les EDPs peuvent être résolues à l'aide de trois principales méthodes numériques : la méthode des volumes finis (Eymard et al., 2000; Versteeg et Malalasekera, 2007), la méthode des éléments finis (Zienkiewicz et al., 2014) et la méthode des différences finies (Cook, 1981). Ces méthodes diffèrent par leur façon d'approximer



(a) Maillage grossier (b) Maillage intermédiaire (c) Maillage fin

FIGURE 2.4 – Maillage 2D d'un ovale (a) maillage grossier, (b) maillage intermédiaire, (c) maillage fin

les EDPs dans les volumes de contrôle (i.e. les mailles). La méthode des différences finies utilise des approximations de dérivées, tandis que les méthodes des volumes finis et éléments finis mettent en jeu des approximations d'intégrales. Ces deux dernières méthodes se différencient par la façon de formuler le problème : formulation forte pour la méthode des volumes finis et formulation variationnelle (ou faible) pour les éléments finis.

Dans ce travail, la méthode des volumes finis est utilisée pour résoudre les différentes EDPs mises en jeu dans les problèmes d'optimisation de forme.

Méthode des volumes finis

La résolution des équations aux dérivées partielles par la méthode des volumes finis s'effectue en trois étapes principales : discrétisation de la forme en volumes de contrôle, discrétisation des équations aux dérivées partielles dans chaque volume de contrôle et la résolution numérique.

Ce paragraphe présente les grandes étapes de la résolution des équations de convection-diffusion d'une grandeur ϕ en régime permanent, et en deux dimensions par la méthode des volumes finis. Cette grandeur ϕ est solution du système d'équations aux dérivées partielles (2.7) et peut représenter la vitesse $\boldsymbol{U}$, la concentration C ou la température T si le système (2.7) provient respectivement d'un bilan de quantité de mouvement, d'un bilan matière ou d'un bilan d'énergie.

$$\underbrace{-\operatorname{div}(\eta\nabla\phi)}_{\text{Diffusion}}+\underbrace{\operatorname{div}(\rho\phi\boldsymbol{U})}_{\text{Convection}}+S=0 \tag{2.7}$$

Dans le système (2.7), η désigne le coefficient de diffusion associé à la propriété ϕ, ρ la masse volumique du fluide et S le terme source. L'objectif de la méthode consiste à réécrire l'équation (2.7) sous la forme du système linéaire suivant :

$$A\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{b} \tag{2.8}$$

où $\boldsymbol{\Phi}$ représente le vecteur des valeurs de ϕ dans chacun des nœuds, A et $\boldsymbol{b}$ désignent respectivement la matrice des coefficients associés aux volumes de contrôle et le vecteur des termes sources dans chaque volume de contrôle qu'il faut déterminer.

La première étape consiste à discrétiser la forme en volume de contrôle. Dans cet exemple, la discrétisation est un quadrillage 2D, régulier et structuré (i.e. les volumes de contrôle sont identiques pour chaque nœud) représenté par la figure 2.5. Le nœud de travail sera noté $\boldsymbol{P}$ auquel

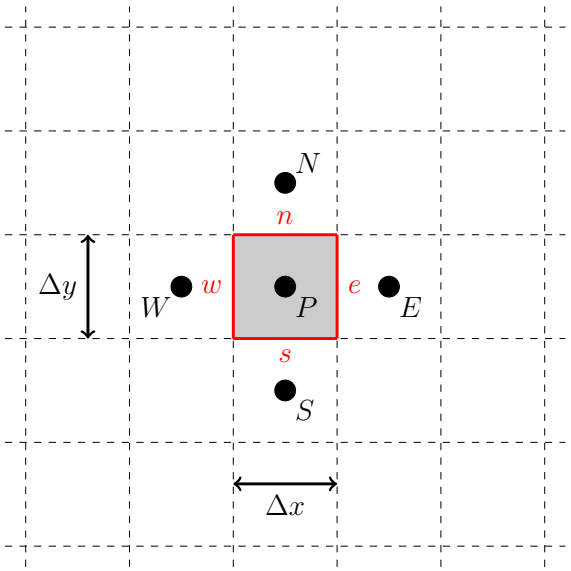


FIGURE 2.5 – Discrétisation 2D de la forme en volumes de contrôle, la partie grisée représente le volume de contrôle associé au nœud $\boldsymbol{P}$, les points $\boldsymbol{N}$, $\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{W}$ et $\boldsymbol{E}$ désigne les voisins de $\boldsymbol{P}$.

on lui associe 4 voisins notés $\boldsymbol{N}$, $\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{W}$ et $\boldsymbol{E}$. Le volume du nœud $\boldsymbol{P}$ est noté $\mathcal{V} = \Delta x \Delta y$ et la face commune aux nœuds $\boldsymbol{P}$ et $\boldsymbol{N}$ (respectivement $\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{W}$ et $\boldsymbol{E}$) est notée n (respectivement s, w et e). La deuxième étape consiste, pour chaque nœud $\boldsymbol{P}$, à intégrer le système d'EDPs sur le volume de contrôle puis à approximer cette intégration par discrétisation. Il vient alors

$$\int_{\mathcal{V}} -\operatorname{div}(\eta \nabla \phi) d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}} \operatorname{div}(\rho \phi \boldsymbol{U}) d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}} S d\mathcal{V} = 0 \tag{2.9}$$

Puis, après application du théorème de Green-Ostrogradski (A.8), on a

$$\int_{A} -\eta \nabla \phi \cdot \boldsymbol{n} dA + \int_{A} (\rho \phi \boldsymbol{U}) \cdot \boldsymbol{n} dA + \int_{\mathcal{V}} S d\mathcal{V} = 0 \tag{2.10}$$

où $\boldsymbol{n}$ désigne le vecteur normal sortant du volume de contrôle et A l'aire de la face située entre deux volumes de contrôle. En supposant les paramètres Γ et ρ homogènes sur l'ensemble du volume, l'intégration de l'équation (2.10) conduit à :

$$\begin{aligned} \eta \left[A_e \Big(\frac{\partial \phi}{\partial x}\Big)_e - A_w \Big(\frac{\partial \phi}{\partial x}\Big)_w \right] + \eta \left[A_n \Big(\frac{\partial \phi}{\partial y}\Big)_n - A_s \Big(\frac{\partial \phi}{\partial y}\Big)_s \right] \\ + \rho \Big(\phi U_x)_e - (\phi U_x)_w \Big) + \rho \Big(\phi U_y)_n - (\phi U_y)_s \Big) + \overline{S} \mathcal{V} = 0 \end{aligned} \tag{2.11}$$

où $\overline{S}$ désigne la valeur moyenne du terme source dans le volume de contrôle. Une grande majorité des termes de l'équation (2.11) sont définis sur les faces, la méthode des volumes finis consiste à approximer ces différents flux en fonction des valeurs de ϕ au niveau des nœuds mis en jeu. Par exemple, $\eta A_e (\frac{\partial \phi}{\partial x})_e$ représente le flux diffusif à travers la face e, il peut être approximé à l'aide de la relation suivante :

$$\eta A_e (\frac{\partial \phi}{\partial x})_e = \eta A_e \frac{\phi_{\boldsymbol{E}} - \phi_{\boldsymbol{P}}}{\Delta x} \tag{2.12}$$

La même approximation peut être effectuée au niveau des faces w, s et n, il vient alors

$$\begin{aligned}\eta\left[A_e\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_e - A_w\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_w + A_n\left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_n - A_s\left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_s\right] =& \eta\left(A_e\frac{\phi_{\boldsymbol{E}}-\phi_{\boldsymbol{P}}}{\Delta x} - A_w\frac{\phi_{\boldsymbol{P}}-\phi_{\boldsymbol{W}}}{\Delta x}\right.\\ &\left. + A_n\frac{\phi_{\boldsymbol{N}}-\phi_{\boldsymbol{P}}}{\Delta y} - A_s\frac{\phi_{\boldsymbol{P}}-\phi_{\boldsymbol{S}}}{\Delta y}\right)\end{aligned} \tag{2.13}$$

Généralement, le terme source S est fonction de la variable ϕ, on peut donc l'approximer en utilisant une forme linéaire comme suit.

$$\overline{S}\mathcal{V} = S_u + S_p\phi_{\boldsymbol{P}} \tag{2.14}$$

où S_u représente la partie indépendante de ϕ du terme source et S_p la partie qui dépend de ϕ.

Les derniers termes qu'il faut discrétiser sont les termes convectifs $(\rho\phi U_x)_i$ (avec $i = n$, s, w ou e). Une première idée consisterait à utiliser un schéma de discrétisation centré que l'on peut exprimer suivant la relation :

$$\phi_i = \frac{\phi_{\boldsymbol{P}} + \phi_{\boldsymbol{I}}}{2} \tag{2.15}$$

où $\boldsymbol{I}$ désigne le nœud adjacent à $\boldsymbol{P}$ et i la face commune à $\boldsymbol{P}$ et $\boldsymbol{I}$. Cependant, ce schéma de discrétisation n'est pas utilisé dans la pratique car il nécessite un maillage plus fin que d'autres schémas (tel que le schéma *upwind*) pour résoudre précisément les systèmes d'EDPs (Versteeg et Malalasekera, 2007). En effet, un schéma de discrétisation doit respecter les trois propriétés suivantes (Versteeg et Malalasekera, 2007) :

- le schéma doit être **conservatif**, c'est-à-dire que le flux sortant d'un volume de contrôle à travers une face doit être égale au flux entrant dans le volume de contrôle adjacent à travers cette même face.
- le schéma doit respecter le caractère **borné** de ϕ. En effet, à chaque nœuds, la valeur de ϕ doit être comprise entre les valeurs limites du nœud (i.e. sur les faces du volume de contrôle) en l'absence de terme source.
- le schéma doit respecter la **transportabilité** de ϕ, c'est-à-dire qu'il doit prendre en compte le sens de l'écoulement. En effet, lorsque l'écoulement est principalement dominé par la convection, la valeur de ϕ_i sur une face i sera plus impactée par la valeur de ϕ dans le nœud situé en amont de la face i par rapport à l'écoulement que par celle situé dans le nœud en aval.

L'inconvénient majeur du schéma centré réside dans le fait qu'il ne respecte pas la transportabilité de ϕ, en particulier, il ne prend pas en compte la direction dans laquelle s'effectue l'écoulement du fluide. Pour pallier cet inconvénient, on introduit un nouveau schéma de discrétisation, le schéma upwind autrement appelé schéma décentré. Celui-ci est définit comme suit :

$$\begin{aligned}\phi_w = \phi_{\boldsymbol{W}} \quad \text{et} \quad \phi_e = \phi_{\boldsymbol{P}} \qquad \text{si } U_x > 0\\ \phi_w = \phi_{\boldsymbol{P}} \quad \text{et} \quad \phi_e = \phi_{\boldsymbol{E}} \qquad \text{si } U_x < 0\end{aligned} \tag{2.16}$$

$$\begin{aligned}\phi_n = \phi_{\boldsymbol{P}} \quad \text{et} \quad \phi_s = \phi_{\boldsymbol{S}} \qquad \text{si } U_y > 0\\ \phi_n = \phi_{\boldsymbol{N}} \quad \text{et} \quad \phi_s = \phi_{\boldsymbol{P}} \qquad \text{si } U_y < 0\end{aligned} \tag{2.17}$$

À noter que si $U_x = 0$, les flux convectifs à travers les faces w et e seront nuls.

Pour finir, en introduisant les variables F_i et D_i définies par :

$$F_i = (\rho U_x)_i \quad \text{si } i = w \text{ ou } e \quad \text{ou} \quad F_i = (\rho U_y)_i \quad \text{si } i = n \text{ ou } s \tag{2.18}$$

$$D_i = \frac{\eta A_i}{\Delta x} \quad \text{si } i = w \text{ ou } e \quad \text{ou} \quad D_i = \frac{\eta A_i}{\Delta y} \quad \text{si } i = n \text{ ou } s \tag{2.19}$$

et en tenant compte des équations (2.13), (2.14), (2.16) et (2.17), l'équation (2.11) se réécrit :

$$a_{\boldsymbol{P}}\phi_{\boldsymbol{P}} = a_{\boldsymbol{W}}\phi_{\boldsymbol{W}} + a_{\boldsymbol{E}}\phi_{\boldsymbol{E}} + a_{\boldsymbol{N}}\phi_{\boldsymbol{N}} + a_{\boldsymbol{S}}\phi_{\boldsymbol{S}} + S_u \tag{2.20}$$

où le coefficient associé au nœud $\boldsymbol{P}$ vaut $a_{\boldsymbol{P}} = a_{\boldsymbol{W}} + a_{\boldsymbol{E}} + a_{\boldsymbol{N}} + a_{\boldsymbol{S}} + F_e - F_w + F_n - F_s - S_p$, les coefficients associés aux nœuds adjacents sont regroupés dans le tableau 2.1.

TABLEAU 2.1 – Valeurs des coefficients associées aux cellules adjacentes.

Coefficients	$a_{\boldsymbol{W}}$	$a_{\boldsymbol{E}}$	$a_{\boldsymbol{S}}$	$a_{\boldsymbol{N}}$
Valeurs	$D_w + \max(F_w, 0)$	$D_e + \max(-F_e, 0)$	$D_s + \max(F_s, 0)$	$D_n + \max(-F_n, 0)$

Ce processus est effectué pour chacun des nœuds du maillage, ce qui nous conduit à un système de n équations linéaires à n inconnues où n représente le nombre de volume de contrôle.

2.2.4 Mécanique des fluides numériques

Dans ce travail, deux systèmes d'équations aux dérivées partielles sont considérés : les équations de Navier-Stokes modélisant l'écoulement d'un fluide et les équations du bilan de matière modélisant le transport de matière. La résolution numérique de ces systèmes d'EDP est effectuée à l'aide d'outils de mécanique des fluides numérique (ou autrement appelée Computational Fluid Dynamics - CFD) tels que OpenFOAM, Fluent, FreeFem++ ou Comsol. La mécanique des fluides numérique est une branche de la mécanique des fluides qui utilise des algorithmes et des analyses numériques pour modéliser et résoudre les équations des écoulements de fluides. La CFD se situe donc à l'intersection de trois disciplines importantes : les mathématiques, la mécanique des fluides et les méthodes numériques. La résolution d'un problème de CFD par la méthode des volumes finis se fait en trois étapes principales :

Étape 1 - (a) Définition de la géométrie désirée dans laquelle le fluide s'écoule.

(b) Génération du maillage associé à la géométrie permettant de discrétiser la forme en volumes de contrôle. La génération du maillage est une étape très importante lors de la résolution d'un problème CFD sur laquelle il ne faut pas hésiter à s'attarder. En effet, le maillage doit respecter un certain nombre de critère de qualité, tel que le*rapport de forme* ou la *non-orthogonalité*, du maillage pour ne pas détériorer la qualité de la solution numérique. Ces critères de qualité sont définis dans le paragraphe 3.4.3.

(c) Choix des conditions initiales et aux limites, des propriétés du fluide étudié et des schémas de discrétisation.

(d) Définition des hypothèses de modélisation et établissement du modèle mathématique. Le choix du solveur et du modèle de turbulence est effectué lors de cette étape.

Étape 2 - Résolution numérique des équations aux dérivées partielles modélisant l'état du système par un algorithme itératif.

Étape 3 - Traitement des résultats, vérification de la cohérence de ces derniers et extraction des propriétés désirées.

Dans le cadre de ce travail de thèse, le logiciel CFD permettant de résoudre les équations aux dérivées partielles est OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) (Weller et al., 1998), un logiciel essentiellement consacré à la résolution des équations de la mécanique des fluides. OpenFOAM est développé en C++ et permet la résolution des EDPs par la méthode des volumes finis. Ce logiciel est libre, c'est à dire qu'il permet la modification de son code source afin de modifier le processus de calcul ou d'ajouter de nouveaux programmes.

2.3 Cas étudiés et problèmes d'optimisation associés

2.3.1 Descriptions des cas considérés

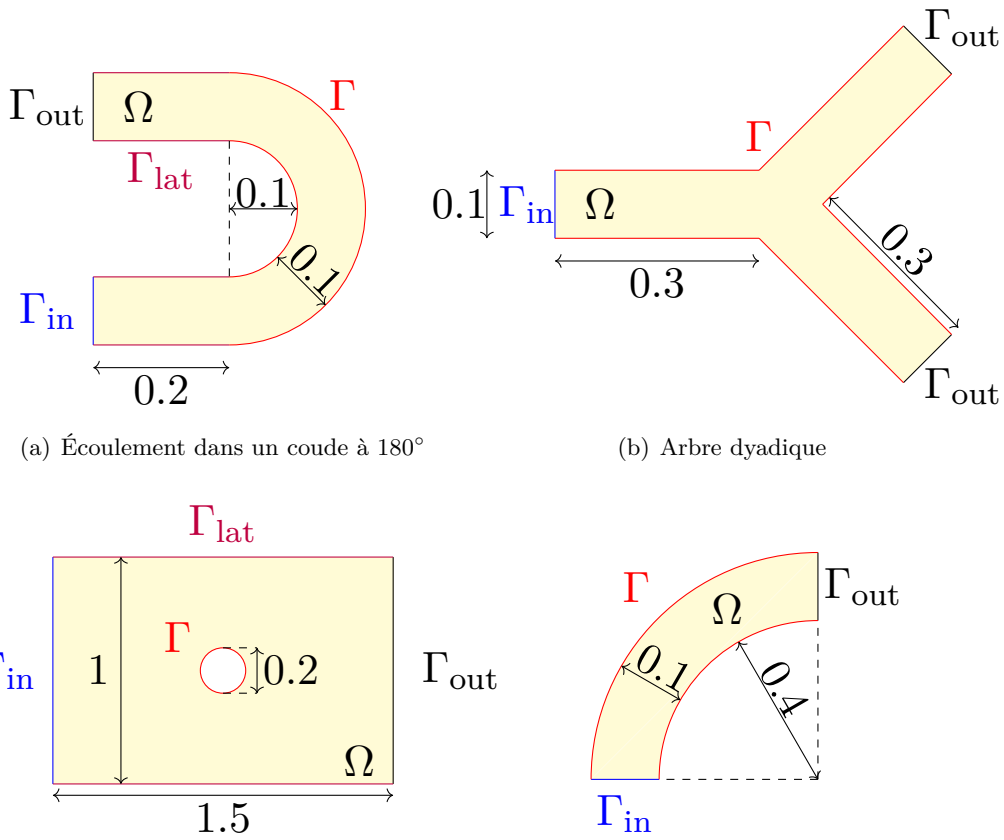
L'approche d'optimisation de forme présentée et développée dans ce chapitre est testée sur quatre configurations 2D différentes représentant des schémas typiques d'écoulement de fluide en génie des procédés. Chacune de ces configurations initiales, notée Ω_0, est présentée sur la figure 2.6, (a) représente l'écoulement dans un coude à 180°, (b) l'écoulement dans un arbre dyadique, (c) l'écoulement autour d'un obstacle et (d) l'écoulement dans un coude à 90°. La partie où s'écoule le fluide, en jaune sur la figure, est appelée domaine de travail, noté Ω. Celui-ci peut être décrit par sa frontière $\partial\Omega$ donné par $\partial\Omega = \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{out}} \cup \Gamma_{\text{lat}} \cup \Gamma$ où :

- Γ_{in} est l'entrée du domaine, frontière sur laquelle un profil quadratique de vitesse est imposé (Eq. (2.22b)) suivant la relation :

$$\boldsymbol{U_{in}} = K_{in} y\,(y - L)\boldsymbol{n} \tag{2.21}$$

  où $\boldsymbol{n}$ est la normale sortante associée à Γ_{in}, L la largeur de l'entrée, $y \in [0, L]$ la position sur l'entrée et K_{in} une constante permettant de fixer la vitesse d'entrée. Cela permet ainsi d'assurer un écoulement laminaire à l'entrée du domaine.
- Γ_{out} représente la sortie du domaine sur laquelle la composante normale du tenseur des contraintes est imposée et égale à zéro (voir Eq. (2.22e)). Cette condition aux limites traduit le fait que le fluide est libre de toute force extérieure sur Γ_{out}.
- Γ_{lat} est la paroi latérale du domaine pour les configurations ''coude à 180°''et ''obstacle''. La condition de non glissement est imposée sur Γ_{lat}, Eq. (2.22d).
- Γ représente la frontière libre du domaine. C'est l'inconnue du problème d'optimisation de forme considéré, l'unique frontière amenée à évoluer au cours des itérations de l'algorithme d'optimisation qui sera implémenté. Une contrainte de non glissement y est également imposée, Eq. (2.22d).

Dans chaque cas, de faibles vitesses $\boldsymbol{U_{in}}$ sont imposées en entrée conduisant à des nombres de Reynolds inférieurs à 250. Cela garantit un écoulement laminaire dans tout le domaine. Pour



(a) Écoulement dans un coude à 180°

(b) Arbre dyadique

(c) Écoulement autour d'un obstacle

(d) Écoulement dans un coude à 90°

FIGURE 2.6 – Formes initiales des 4 cas considérés, (a) écoulement dans un coude à 180°, (b) écoulement dans un arbre à deux branches, (c) écoulement autour d'un obstacle, (d) dans un coude à 90°.

le cas "écoulement autour d'un obstacle", le nombre de Reynolds est fixé à 10 afin d'éviter la formation des tourbillons de Von Karman derrière l'obstacle. Le fluide étudié est un fluide newtonien de viscosité cinématique ν, et le modèle permettant de décrire l'écoulement du fluide dans chacun des cas est représenté par les équations de Navier-Stokes (2.22) sans modèle de turbulence. La pression relative imposée en sortie est nulle, et l'écoulement est supposé incompressible et stationnaire.

$$\begin{cases} -\nu\Delta \boldsymbol{U} + \boldsymbol{U} \cdot \nabla \boldsymbol{U} + \nabla p = 0 & \text{dans } \Omega \quad (2.22a) \\ \nabla \cdot \boldsymbol{U} = 0 & \text{dans } \Omega \quad (2.22b) \\ \boldsymbol{U} = \boldsymbol{U_{in}} & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \quad (2.22c) \\ \boldsymbol{U} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{lat}} \cup \Gamma \quad (2.22d) \\ \sigma(\boldsymbol{U}, p)\boldsymbol{n} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} \quad (2.22e) \end{cases}$$

Dans le système d'équations aux dérivées partielles ci-dessus, $\boldsymbol{U}$ et p représentent respectivement le champ de vitesse et la pression cinématique du fluide (i.e. la pression absolue divisée par

la masse volumique du fluide) dans le domaine Ω et $\sigma(\boldsymbol{U}, p)$ représente le tenseur des contraintes visqueuses divisé par la masse volumique du fluide et est donné par la relation :

$$\sigma(\boldsymbol{U}, p) = 2\nu\varepsilon(\boldsymbol{U}) - pI \text{ avec } \varepsilon(\boldsymbol{U}) = \frac{1}{2}(\nabla\boldsymbol{U} + (\nabla\boldsymbol{U})^T) \tag{2.23}$$

où I est la matrice identité et $\nabla(\boldsymbol{U})$ est la matrice jacobienne du champ de vecteur $\boldsymbol{U}$ (voir annexe A).

2.3.2 Définitions des problèmes d'optimisation de forme

La formulation du problème de décision de forme requiert la définition d'un modèle, de variables de décision, d'un critère et de contraintes. Ces ingrédients sont détaillés ci-dessous.

2.3.2.1 Équations du modèle

Le modèle permettant de décrire l'état du système est détaillé au §2.3.1, il s'agit des équations de Navier-Stokes sans modèle de turbulence et de l'équation de continuité (2.22b).

2.3.2.2 Variables de décision

Dans un problème d'optimisation de forme, la variable de décision est la forme de l'objet donnée par la position de ses frontières $\partial\Omega$. L'entrée Γ_{in}, la sortie Γ_{out} et la paroi latérale Γ étant fixes, la variable de décision du problème est uniquement la frontière libre Γ.

2.3.2.3 Fonction objectif à minimiser

La fonction objectif considérée dans ce chapitre est la dissipation d'énergie dans le fluide due aux frottements visqueux divisée par la masse volumique du fluide donnée par l'équation suivante :

$$J(\Omega) = 2\nu \int_\Omega |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 \, dx \tag{2.24}$$

avec $|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 = \varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U})$. La notation ":" désigne le double produit interne de deux tenseurs défini par $A : B = \sum_{i,j=1}^{3} A_{i,j}B_{i,j}$ (se référer à l'annexe A pour plus de détails). $\boldsymbol{U}$ représente la vitesse du fluide, c'est-à-dire, la solution des équations de Navier-Stokes (2.22).

Il est intéressant de prendre en compte ce critère dans le problème d'optimisation car cette perte d'énergie est directement liée aux pertes de charges.

2.3.2.4 Ensemble des contraintes

L'ensemble des solutions admissibles est défini par une seule contrainte. Il s'agit d'une contrainte iso-volumique donné par la relation (2.25) qui permet d'avoir le même temps de passage entre les formes initiale et optimale.

$$C_{\mathcal{V}}(\Omega) = \mathcal{V}(\Omega) - \mathcal{V}(\Omega_0) = 0 \tag{2.25}$$

où $\mathcal{V}(\Omega) = \int_\Omega 1\, dx$ représente le volume de Ω. Pour finir, le lagrangien du problème qui agrège la fonction objectif et la contrainte est donné par l'équation suivante :

$$\mathcal{L}(\Omega, \lambda_\mathcal{V}) = J(\Omega) + \lambda_\mathcal{V} C_\mathcal{V}(\Omega) \tag{2.26}$$

où $\lambda_\mathcal{V}$ est le multiplicateur associé à la contrainte de volume.

En conclusion, le problème d'optimisation de forme peut être résumé par :

$$\begin{array}{ll} \min\limits_{\Omega} & J(\Omega) \\ \text{s.à.} & \Omega \in \mathscr{C} \\ & (\boldsymbol{U}, p) \text{ solution de Eqs. (2.22)} \end{array} \tag{$\mathscr{P}_{2.1}$}$$

où $\mathscr{C}$ désigne l'ensemble des solutions admissibles donné par :

$$\mathscr{C} := \{\Omega \subset \mathbb{R}^2 \mid C_\mathcal{V}(\Omega) = 0\}. \tag{2.27}$$

2.4 Formulation mathématique des problèmes

L'approche développée dans ce travail est une méthode itérative d'optimisation géométrique basée sur le calcul du gradient de la fonction objectif et des contraintes. Ce calcul est effectué par l'introduction d'un état adjoint associé au modèle, c'est-à-dire les équations de Navier-Stokes.

2.4.1 Principes fondamentaux de la méthode de Hadamard

En optimisation géométrique, la forme est optimisée par variation de ses frontières. Les différentes frontières définissant le domaine de travail peuvent alors être classées en deux catégories.

- les frontières fixes qui ne seront pas déformées au cours du procédé d'optimisation. C'est le cas des frontières Γ_{in}, Γ_{out} et Γ_{lat} dans les exemples présentés sur la figure 2.6.
- les frontières dites libres qui seront les variables de décision du problème. Dans le cas présent, la frontière libre est Γ.

Plus le problème d'optimisation admet de frontières libres, plus le degré de liberté de la méthode sera important. Cela permettra par exemple d'atteindre une plus large gamme de formes possibles, ce qui donnera de meilleures performances d'optimisation. La classification des frontières est le choix de l'ingénieur souhaitant optimiser l'objet et dépend principalement du procédé en question (position de l'entrée et de la sortie, frontière permettant de fixer de l'objet optimisé dans le procédé etc..).

L'approche utilisée est une méthode itérative qui détermine, à partir d'une configuration initiale d'un objet, une suite de formes qui améliorent les performances de l'objet à chaque itération en adaptant la position de ses frontières. L'approche repose sur les travaux de Hadamard (Hadamard, 1908) et s'appuie sur le concept de dérivée par rapport au domaine aussi appelée dérivée au sens de Hadamard (Allaire et Schoenauer, 2007; Henrot et Pierre, 2005). Elle consiste à déterminer à chaque itération la sensibilité de la fonction objectif ou du lagrangien par rapport

à une faible perturbation des frontières du domaine. Cette perturbation est donnée par l'équation suivante :

$$\Omega_{i+1} = (\mathrm{Id} + t\boldsymbol{V})(\Omega_i) \tag{2.28}$$

où Id est l'application identité de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^n$ ($n = 2$ ou 3), définie par $\boldsymbol{X} \mapsto \boldsymbol{X}$. t le pas de la méthode itérative et $\boldsymbol{V}$ le champ de vecteur représentant le déplacement du maillage. $t\boldsymbol{V}$ est donc la faible perturbation du maillage. La figure 2.7 illustre l'exemple d'une itération de la méthode développée.

où $\boldsymbol{X}$ représente le champ de vecteur des coordonnées de chaque nœud du maillage à l'itération i,

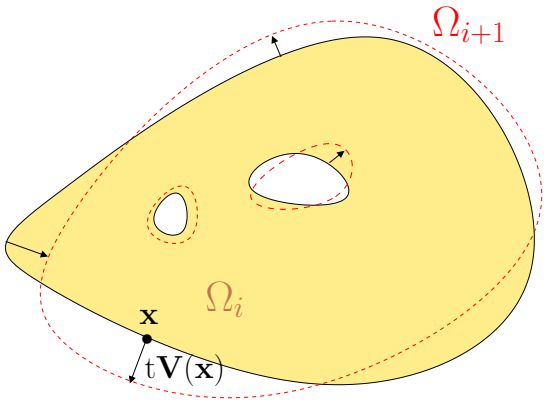


FIGURE 2.7 – Exemple d'une itération de la méthode d'optimisation de forme

L'approche repose sur la relation de récurrence (2.28) et l'objectif de la méthode est de déterminer le pas t et le champ de vecteur $\boldsymbol{V}$ menant à une descente du lagrangien.

La dérivée par rapport au domaine du lagrangien $\mathcal{L}(\Omega, \lambda_V)$ dans la direction $\boldsymbol{V}$ se calcule selon la formule (2.29) (Henrot et Pierre, 2005)

$$\mathcal{L}'(\Omega, \lambda_\mathcal{V})(\boldsymbol{V}) = \lim_{t\to 0} \frac{\mathcal{L}(\Omega_t) - \mathcal{L}(\Omega)}{t}, \qquad \text{avec} \qquad \Omega_t = (\mathrm{Id} + t\boldsymbol{V})(\Omega). \tag{2.29}$$

2.4.2 Méthode de l'état adjoint

La dérivée par rapport au domaine du lagrangien peut se décomposer de la même façon qu'une dérivée usuelle. La dérivée par rapport au domaine d'une somme est donc égale à la somme des dérivée par rapport au domaine :

$$\mathcal{L}'(\Omega, \lambda_\mathcal{V})(\boldsymbol{V}) = J'(\Omega)(\boldsymbol{V}) + \lambda_\mathcal{V} C'_\mathcal{V}(\Omega)(\boldsymbol{V}) \tag{2.30}$$

Les formules usuelles de dérivation par rapport au domaine de ces deux termes (voir par exemple (Allaire et Schoenauer, 2007; Dapogny et al., 2018; Henrot et Pierre, 2005)) donnent

$$J'(\Omega)(\boldsymbol{V}) \quad = \quad \frac{d}{dt}\left(2\nu \int_{\Omega_t} |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 \, dx \Big|_{t=0} \right)$$

$$= \quad 2\nu \int_{\partial\Omega} |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma + 4\nu \int_{\Omega} \varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx \tag{2.31}$$

$$C'_{\mathcal{V}}(\Omega)(\boldsymbol{V}) = \frac{d}{dt}\left(\int_{\Omega_t} 1\, dx \Big|_{t=0} - \mathcal{V}(\Omega_0) \right) = \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) d\sigma \tag{2.32}$$

Dans les équations ci-dessus, t s'interprète comme le pas de la méthode et $\boldsymbol{U'}$ comme la sensibilité de $\boldsymbol{U}$ par rapport à la variation de Ω. $\boldsymbol{U'}$ est la dérivée eulérienne de $\boldsymbol{U}$ et on peut montrer (voir par exemple De La Sablonière et al. (2011) et Henrot et Privat (2010)) que $\boldsymbol{U'}$ est solution du système d'équations :

$$\begin{cases} -\nu \Delta \boldsymbol{U'} + (\boldsymbol{U'} \cdot \nabla)\boldsymbol{U} + (\boldsymbol{U} \cdot \nabla)\boldsymbol{U'} + \nabla p' = 0 & \text{dans } \Omega & \text{(2.33a)} \\ \nabla \cdot \boldsymbol{U'} = 0 & \text{dans } \Omega & \text{(2.33b)} \\ \boldsymbol{U'} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{lat}} & \text{(2.33c)} \\ \boldsymbol{U'} = -\dfrac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial n}(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) & \text{sur } \Gamma & \text{(2.33d)} \\ \sigma(\boldsymbol{U'}, p')\boldsymbol{n} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} & \text{(2.33e)} \end{cases}$$

Ainsi, la dérivée par rapport au domaine du lagrangien se réécrit :

$$\mathcal{L}'(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{V}) = 2\nu \left(\int_{\partial\Omega} |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma + 2 \int_{\Omega} \varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx \right) + \lambda_{\mathcal{V}} \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) d\sigma \tag{2.34}$$

Cette expression n'est cependant pas très exploitable à des fins pratiques. En effet, l'un des termes de l'équation (2.34) ne dépend pas explicitement du produit scalaire $(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n})$, la dépendance se faisant à travers $\boldsymbol{U'}$. Sous cette forme, il sera compliqué de choisir une perturbation $\boldsymbol{V}$ adéquate menant à la négativité de l'équation (2.34). L'objectif est de mettre la dérivée du lagrangien sous la forme :

$$\mathcal{L}'(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{V}) = \int_{\partial\Omega} G(\Omega)(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) \tag{2.35}$$

où $G(\Omega)$ est le gradient de forme, une fonction définie sur le bord du domaine Ω dépendant de $\boldsymbol{U}$ mais pas du champ de vecteurs $\boldsymbol{V}$. Sous cette forme, il sera aisé de proposer un choix de déplacement conduisant à une descente du lagrangien. Trivialement, si on fait le choix de déplacer le bord du domaine suivant $(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) = -G(\Omega)$ sur $\partial\Omega$, cela impliquerait directement $\mathcal{L}'(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{V}) < 0$ et donc une descente du lagrangien. On utilise la méthode de l'adjoint, reposant sur l'introduction d'un état adjoint aux équations de Navier-Stokes ($\boldsymbol{U_a}$,p_a). Tous calculs faits (voir annexe B.1 pour les détails de ce calcul), la dérivée de forme du lagrangien s'exprime sous la forme :

$$\mathcal{L}'(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{V}) = \int_{\partial\Omega} \Big(2\nu(\varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) - \varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U})) + \lambda_{\mathcal{V}} \Big) (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma \tag{2.36}$$

si bien que le gradient de forme s'écrit :

$$G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}}) = 2\nu(\varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) - \varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U})) + \lambda_{\mathcal{V}} \tag{2.37}$$

où $\boldsymbol{U_a}$ est la vitesse de l'état adjoint ($\boldsymbol{U_a}$,p_a) associé aux équations Navier-Stokes. Cet état est défini comme solution du système

$$\begin{cases} -\nu\Delta\boldsymbol{U_a} + (\nabla\boldsymbol{U})^T\boldsymbol{U_a} - \nabla\boldsymbol{U_a}\boldsymbol{U} + \nabla p_a = -2\nu\Delta\boldsymbol{U} & \text{dans } \Omega \quad (2.38a) \\ \nabla \cdot \boldsymbol{U_a} = 0 & \text{dans } \Omega \quad (2.38b) \\ \boldsymbol{U_a} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{lat}} \cup \Gamma \quad (2.38c) \\ \sigma(\boldsymbol{U_a}, p_a)\boldsymbol{n} + (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})\boldsymbol{U_a} = 4\nu\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n} & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} \quad (2.38d) \end{cases}$$

Le calcul du gradient de forme $G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})$ nécessite ainsi la résolution de deux systèmes d'équations aux dérivées partielles : les équation de Navier-Stokes ($\boldsymbol{U}$,p) et son état adjoint ($\boldsymbol{U_a}$,p_a). D'un point de vue numérique, ce gradient est utilisé pour déterminer le champ vectoriel décrivant le déplacement $\boldsymbol{V}$, ce qui permet de construire la forme de l'objet à l'itération suivante (voir Eq. (2.28).

La détermination du champ vectoriel $\boldsymbol{V}$ se fait à l'aide de l'introduction de la norme $\gamma||\nabla\boldsymbol{\mathcal{X}}||^2 + ||\boldsymbol{\mathcal{X}}||^2$ où $\boldsymbol{\mathcal{X}} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ ($d = 2$ ou 3) est un champ de vecteur (Doğan et al., 2007). Cette norme est équivalente à la norme H^1 fréquemment utilisée (De La Sablonière et al., 2011; Henrot et Privat, 2010) (se référer à l'annexe A pour de plus amples détails). Le choix d'utiliser la norme H^1 modifiée est motivé par la volonté d'ajuster, selon le souhait de l'utilisateur, la diffusion du maillage dans le domaine par l'introduction d'un petit paramètre γ. Une norme étant toujours positive, on cherche le champ de vecteurs $\boldsymbol{V}$ de sorte qu'il satisfasse la relation (2.39).

$$\mathcal{L}'(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{V}) = -\gamma||\nabla\boldsymbol{V}||^2 - ||\boldsymbol{V}||^2 < 0 \quad (2.39)$$

L'égalité des équations (2.35) et (2.39) fournit le système d'EDPs permettant de déterminer le champ vectoriel décrivant le déplacement $\boldsymbol{V}$ (2.40). L'annexe B.2 détaille les calculs montrant que $\boldsymbol{V}$ est solution de (2.40) [4].

$$\begin{cases} -\gamma\Delta\boldsymbol{V} + \boldsymbol{V} = 0 & \text{dans } \Omega \quad (2.40a) \\ \boldsymbol{V} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{out}} \cup \Gamma_{\text{lat}} \quad (2.40b) \\ \gamma\nabla\boldsymbol{V}\boldsymbol{n} = -G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})\boldsymbol{n} & \text{sur } \Gamma \quad (2.40c) \end{cases}$$

Une fois ce système d'EDPs résolu, il ne reste qu'à diffuser le maillage en suivant la relation de récurrence (2.28) préalablement discrétisée comme suit.

$$\Omega_{i+1} = (\boldsymbol{X} + t\boldsymbol{V})(\Omega_i) \quad (2.41)$$

où $\boldsymbol{X}$ représente le champ de vecteur des coordonnées de chaque nœud du maillage à l'itération i. Le pas t de la méthode est choisi arbitrairement. Celui-ci ne doit pas être choisi trop grand car la dérivée par rapport au domaine du lagrangien (voir relation (2.29) n'est valable qu'au voisinage de Ω, c'est-à-dire pour un petit déplacement. Si le pas de la méthode est choisi trop

4. Dans cette étude, le déplacement n'est pas déterminé avec la relation triviale $(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) = -G(\Omega)$ car celle-ci permet de déterminer le déplacement uniquement sur le bord du domaine $\partial\Omega$ et non dans l'ensemble de la forme Ω. Par conséquent, il faudrait remailler à chaque itération.

Maillage de la forme initiale;
tant que $\max(\boldsymbol{V}) < 10^{-5}$ **faire**
  Résolution des équations de Navier-Stokes et de son système adjoint dans Ω_i;
  Calcul du gradient de forme sur $\partial\Omega_i$;
  Détermination du champ de vecteur $\boldsymbol{V}(x)$;
  Diffusion du maillage Ω_{i+1};
  Mise à jour du multiplicateur de Lagrange $\lambda_{\mathcal{V}}$;
  si AspectRatio>*5* **alors**
    Remaillage
  fin
fin

FIGURE 2.8 – Algorithme implémenté dans OpenFOAM

grand, la diminution du lagrangien d'une itération à l'autre n'est pas garantie et l'algorithme risque de ne pas converger. A contrario, s'il est choisit trop petit, la convergence sera très lente. La détermination de pas de la méthode peut également être issue d'un processus d'optimisation comme c'est le cas dans les algorithmes de gradient à pas optimal.

2.5 Algorithme associé à la résolution

L'algorithme permettant de déterminer les formes optimales des objets présentés dans le paragraphe 2.3.1 est décrit dans cette section.

Les systèmes d'équations aux dérivées partielles (2.22) et (2.38) sont implantées et résolues dans OpenFOAM. Dans le cas présent, les systèmes d'EDPs sont représentés par les équations de Navier-Stokes et son système adjoint associé introduit par la méthode. Les itérations sont liées entre elles à l'aide de la bibliothèque python nommée PYFOAM et plus particulièrement son utilitaire ''*pyFoamMeshUtilityRunner.py*''. L'algorithme itératif implémenté sous OpenFOAM est présenté sur la figure 2.8.

À chaque itération i, la démarche algorithmique suit les étapes suivantes :

1. Définition de la forme initiale et génération de son maillage associé à l'aide de BLOCKMESH ou SNAPPYHEXMESH (selon le cas étudié), deux outils de maillage fournis par OpenFOAM.
2. Résolution des équations de Navier-Stokes et de son système adjoint dans Ω_i. L'algorithme SIMPLE (Patankar, 1980) est utilisé pour traiter numériquement les couplages pression-vitesse présents dans les équations (2.22) et (2.38). Les principales étapes de l'algorithme SIMPLE sont détaillées en annexe C.

   La condition de sortie de l'état adjoint (2.38d) n'est pas une condition aux limites usuelles. Par conséquent, une nouvelle condition aux limites a été implémentée sous OpenFOAM. Celle-ci se base sur l'approximation de la transposée du gradient de la vitesse adjointe U_a donnée par l'équation (2.42).

$$(\nabla \boldsymbol{U_a})^T \boldsymbol{n} \simeq \frac{\boldsymbol{U_a}^{\text{patch}} - \boldsymbol{U_a}^{\text{intern}}}{\delta} \tag{2.42}$$

où $\boldsymbol{U}_{\boldsymbol{a}}^{\text{patch}}$ représente le vecteur vitesse adjointe sur la frontière, $\boldsymbol{U}_{\boldsymbol{a}}^{\text{intern}}$ le vecteur vitesse adjointe dans le cellule adjacente à la frontière et δ la distance entre le centre de la cellule adjacente et la frontière. Cette approximation permet de réécrire la condition aux limites (2.38d) sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{U}_{\boldsymbol{a}}^{\text{patch}} \simeq \frac{\nu\delta^{-1}\boldsymbol{U}_{\boldsymbol{a}}^{\text{intern}} + 4\nu\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n} + p_a\boldsymbol{n} - \nu\nabla\boldsymbol{U}_{\boldsymbol{a}}\boldsymbol{n}}{\nu\delta^{-1} + (\boldsymbol{U}\ \cdot\ \boldsymbol{n})} \tag{2.43}$$

La figure 2.9 montre le code associé à la condition de sortie de l'état adjoint.

3. Le gradient de forme $G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})$ est calculé sur le bord du domaine $\partial\Omega_i$ à l'aide de la relation (2.37).
4. Le champ de vecteur représentant le déplacement $\boldsymbol{V}(x)$ est déterminé en résolvant (2.40).
5. Chaque point du maillage est diffusé suivant le vecteur $t\boldsymbol{V}(x)$ (voir la relation de récurrence (2.28)). La diffusion du maillage est effectuée à l'aide de modifyMesh, un outil de manipulation de maillage fourni par OpenFOAM.
6. L'approche algorithmique développée dans ce travail repose sur la méthode d'Uzawa. Celle-ci consiste à déterminer, à chaque itération, la direction de descente tout en considérant le multiplicateur de Lagrange $\lambda_{\mathcal{V}}$ constant. Ce multiplicateur est ensuite mis à jour selon la valeur de la contrainte qui lui est associée. Dans le cas présent, il est mis à jour à l'aide de la relation suivante :

$$\lambda_{\mathcal{V}}^{k+1} = \lambda_{\mathcal{V}}^{k} + \beta_{\mathcal{V}} C_{\mathcal{V}}(\Omega) \tag{2.44}$$

où $\beta_{\mathcal{V}}$ est un paramètre positif de faible valeur choisi par l'utilisateur.

7. À chaque itération, la qualité du maillage est évaluée à l'aide du rapport de forme des mailles afin de s'assurer que le maillage ne détériore pas la qualité de la solution numérique. En 2D, le rapport de forme est défini comme le ratio du coté le plus grand sur le coté le plus petit d'une maille. Si ce ratio dépasse 5, la géométrie est remaillée.

```
//Valeurs des champs scalaires/vectoriels/tensoriels sur la sortie
 const fvPatchField<tensor>& EpsUp = patch().lookupPatchField<volTensorField, tensor>("EpsU");
 const fvPatchField<tensor>& gradUap = patch().lookupPatchField<volTensorField, tensor>("gradUa");
 const fvPatchField<vector>& Up = patch().lookupPatchField<volVectorField, vector>("U");
 const fvPatchField<scalar>& pap = patch().lookupPatchField<volScalarField, scalar>("pa");
 const fvPatchField<vector>& Uap = patch().lookupPatchField<volVectorField, vector>("Ua");
 const scalarField& deltainv = patch().deltaCoeffs();
 const fvPatchField<scalar>& nu = patch().lookupPatchField<volScalarField, scalar>("nu");
//Valeur du multiplicateur de Lagrange
 scalar MultLagrEn;
 std::ifstream fileMultLagrEn;
 fileMultLagrEn.open("constant/MultLagrEn");
 fileMultLagrEn >> MultLagrEn;
 fileMultLagrEn.close();
//Composante normale des différents champs
 scalarField Up_n = (Up & patch().nf());
 vectorField EpsUp_n = EpsUp&patch().nf();
 vectorField gradUap_n = gradUap&patch().nf();
//Condition aux limites
 operator==((Uap.patchInternalField()*nu*deltainv+EpsUp_n*4*nu*MultLagrEn-gradUap_n*nu+pap*patch().nf())/(nu*deltainv+Up_n+SMALL));
```

FIGURE 2.9 – Condition de sortie de l'état adjoint $\boldsymbol{U_a}$.

2.6 Résultats numériques et discussions

Les optimisations numériques des 4 cas tests présentés dans le paragraphe 2.3.1 sont illustrés et discutés dans cette section. La sous section 2.6.1 propose l'optimisation de la forme d'une conduite coudée à 90° soumise à des vitesses d'écoulement de fluide correspondant à des nombres de Reynolds de 25 et de 250. Une contrainte d'iso-volume est appliquée. Les sous sections 2.6.2 et 2.6.3 présentent respectivement les résultats de l'optimisation de forme d'une conduite coudée à 180° dans laquelle un fluide circule et l'optimisation d'un obstacle autour duquel un fluide circule. Dans chacun de ces deux cas, deux formes optimales ont été déterminées, une respectant la contrainte d'iso-volume et l'autre ne la respectant pas. Pour finir, la sous section 2.6.4 illustre l'optimisation d'un arbre à deux branches sous contrainte iso-volumique. Le tableau 2.2 présente les différents paramètres de simulation et d'optimisation considérés permettant la détermination des formes optimales.

Le tableau 2.3 présente les performances de l'algorithme d'optimisation pour chacun des cas étudiés. On peut remarquer, en particulier, que les diminutions de l'énergie dissipée et de la perte de charge pour certains cas (*C90R250* et *ObV* principalement) diffèrent l'une de l'autre. Or, la dissipation d'énergie dans le fluide est directement proportionnelle à la perte de charge selon la relation suivante :

$$J(\Omega) = Q\Delta p \tag{2.45}$$

où Q désigne le débit volumique et Δp la perte de charge. Le débit volumique n'étant pas modifié

Tableau 2.2 – Paramètres de simulation et d'optimisation.

Paramètres	Unités	Équations	Valeurs			
			Coude à 90°	Coude à 180°	Obstacle	Arbre
$\boldsymbol{U_{in}}$	$m.s^{-1}$	(2.21)	10^{-1} ou 1	10^{-2}	2.10^{-4}	5.10^{-2}
γ	m^2	(2.40)	1	1	1	1
ν	$m^2.s^{-1}$	(2.22) et (2.38)	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}
t	-	(2.28)	10^9 ou 2.10^8	3.10^{10}	5.10^{10}	10^9
$\lambda_{\mathcal{V}}^0$	-	(2.26) et (2.37)	0	10^{-12} ou 0	10^{-12} ou 0	0
$\frac{\mathcal{V}(\Omega_F)}{\mathcal{V}(\Omega_0)}$	-	(2.25)	1	1 ou ∅*	1 ou ∅*	1
$\beta_{\mathcal{V}}$	-	(2.44)	4.10^{-9}	10^{-5}	5.10^{-7}	10^{-8}

*contrainte sur le volume non considérée.

Tableau 2.3 – Performances de l'algorithme d'optimisation (simulation effectuée sur un ordinateur avec un processeur Xeon 3.7GHz).

Cas	Nom raccourci du cas	Itérations	Temps de simulation	Diminution de l'énergie dissipée	Diminution des pertes de charge
Coude à 90° (Re=25)	*C90R25*	44	1 min 30	27 %	27 %
Coude à 90° (Re=250)	*C90R250*	75	2 min 25	13,5 %	20,6 %
Coude à 180° sous contrainte de volume	*C180V*	300	40 min	30,7 %	30,6 %
Coude à 180° sans contrainte de volume	*C180NV*	125	26 min	40,9 %	41,1 %
Obstacle sous contrainte de volume	*ObV*	206	9 min 14	10,8 %	15,4 %
Obstacle sans contrainte de volume	*ObNV*	33	1 min 38	45,1 %	47,8 %
Arbre dyadique	*AD*	638	1 h 01	53,3 %	50,2 %

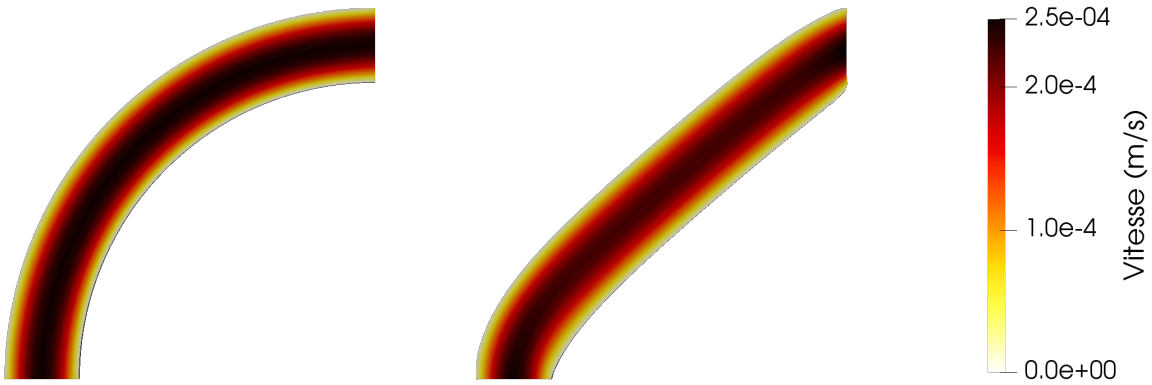
entre la forme initiale et la forme optimale, les diminutions de l'énergie dissipée et de la perte de charge devraient être égales. Cette différence observée est la conséquence d'un maillage trop grossier pour les cas *C90R250* et *ObV* qui entraîne une erreur lors du calcul des pertes de charge. Elles ont été réévaluées pour ces deux cas en maillant plus finement la forme et les diminutions des pertes de charge sont égales à celles observées sur l'énergie dissipée.

2.6.1 Énergie dissipée dans une conduite coudée à 90°

La figure 2.10 illustre les champs de vitesse dans les configurations initiale (2.10(a)) et optimale (2.10(b)) de la conduite coudée à 90° soumise à de faibles vitesses d'écoulement ($Re = 25$). La forme optimale obtenue est en accord avec la littérature (Dapogny et al., 2018). Le processus d'optimisation fait tendre la forme du coude vers une conduite droite avec une augmentation de la section, ce qui entraîne une diminution de la vitesse du fluide. Cette diminution de la

vitesse et l'augmentation de la largeur permettent une diminution des gradients de vitesse dans la conduite et donc une diminution des frottements visqueux. Ainsi, la forme optimale permet une dissipation d'énergie plus faible. Afin d'illustrer l'efficacité de l'algorithme, les courbes de convergence associées à l'optimisation de la conduite coudée sont présentées sur la figure 2.11 et les performances d'optimisation sont regroupées dans le tableau 2.3. L'optimisation du coude permet une réduction de l'énergie dissipée de 27 %. Les pertes de charge et l'énergie dissipée par le fluide étant directement corrélées, une diminution de 27 % des pertes de charge est également observée. La figure 2.11 montre également que la contrainte d'iso-volume est satisfaite.

Une deuxième optimisation de la conduite coudée à 90° a été réalisée. Les vitesses imposées en entrée sont dix fois plus grandes que lors de l'optimisation du cas précédent *C90R25*, le nombre de Reynolds correspondant est de l'ordre de 250. La figure 2.12 présente les géométries initiale (2.12(a)), optimale (2.12(b)), ainsi que la géométrie optimale déterminée lors de l'optimisation précédente (i.e. *C90R25*). Les formes optimales (2.12(b)) et (2.12(c)) étant différentes, il est intéressant de noter que la forme optimale dépend des conditions opératoires, la vitesse d'entrée dans le cas présent. La forme liant directement l'entrée et la sortie n'est plus optimale due à une vitesse d'entrée plus grande. Le conduite 2.12(b) est courbée en entrée, ce qui permet de dévier moins brutalement le fluide vers la sortie que dans la configuration 2.12(c). Une section droite menant vers la sortie est présente par la suite (voir figure (2.12(b))). Cela permet à l'écoulement d'être plus centré dans la configuration (2.12(b)) que dans la configuration (2.12(c)) et donc aux gradients de vitesse d'être plus faibles. Une diminution de 13.5 % sur l'énergie dissipée est ainsi observée pour le cas *C90R250*.



(a) Géométrie initiale (b) Géométrie optimale

FIGURE 2.10 – Champ de vitesse dans le coude à 90° ($Re = 25$), (a) géométrie initiale, (b) géométrie optimale.

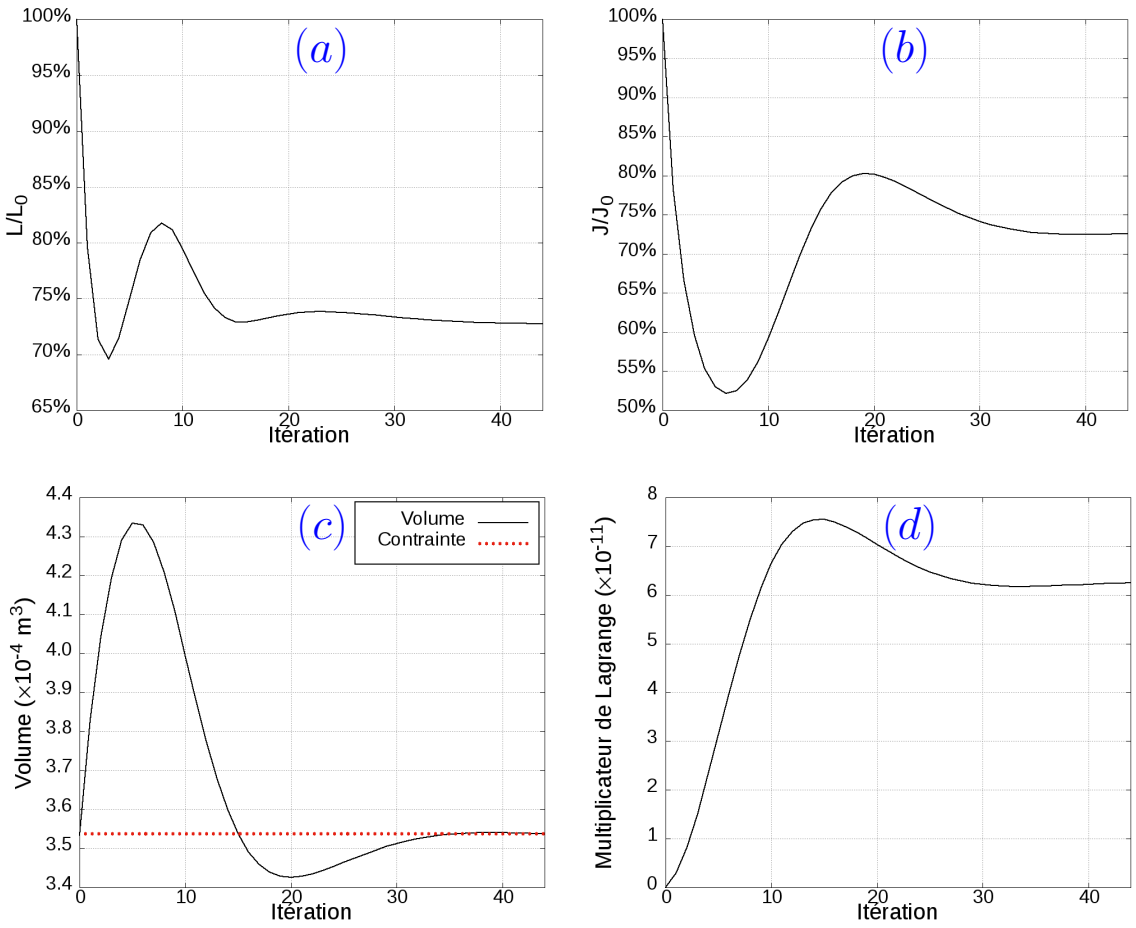
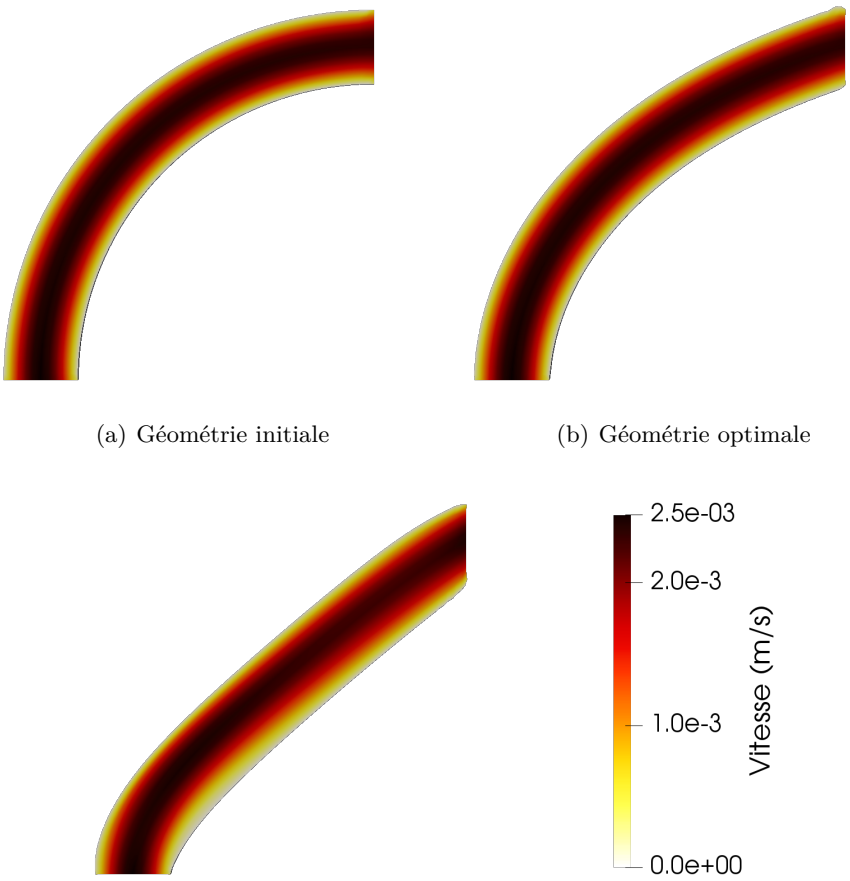


FIGURE 2.11 – Courbes de convergence de l'optimisation du coude à 90° ($Re = 25$), (a) représente l'évolution du ratio $\frac{\mathcal{L}}{\mathcal{L}_0}$, (b) le ratio $\frac{J}{J_0}$, (c) la contrainte sur le volume, et (d) le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte de volume.



(a) Géométrie initiale

(b) Géométrie optimale

(c) Géométrie optimale pour $Re = 25$

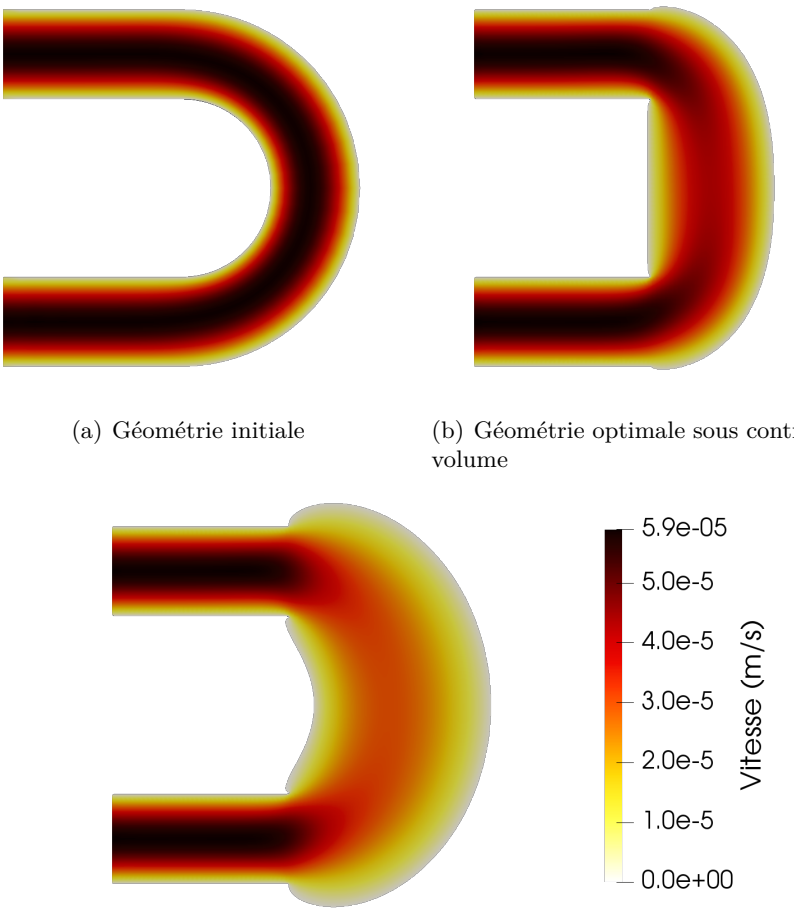
FIGURE 2.12 – Champ de vitesse dans le coude à 90° (a) $(Re = 250)$, (a) géométrie initiale, (b) géométrie optimale et (c) géométrie optimale pour $Re = 25$.

2.6.2 Dissipation d'énergie dans une conduite coudée à 180°

Les champs de vitesse dans les formes initiale (a) et optimales (avec (b) ou sans (c) contrainte de volume) de la conduite coudée à 180° sont présentés sur la figure 2.13. Ces géométries optimales sont conformes à celles trouvées dans la littérature (Tonomura et al., 2010). De la même façon que pour le cas précédent, l'algorithme d'optimisation augmente la largeur du canal afin de diminuer les gradients de vitesse dans le coude et par conséquent diminuer la fonction objectif $J(\Omega)$ de 30,7 %. Les pertes de charge diminuent d'autant. La figure 2.14 présente l'historique de convergence de l'opimisation du coude à 180° sous la contrainte de volume. Elle montre que cette contrainte est bien satisfaite.

2.6.3 Dissipation d'énergie autour d'un obstacle

La figure 2.15 présente les champs de vitesse autour des configurations initiale (2.15(a)), optimale sous contrainte de volume (2.15(b)) et optimale sans contrainte de volume (2.15(c)) de



(a) Géométrie initiale

(b) Géométrie optimale sous contrainte de volume

(c) Géométrie optimale sans contrainte de volume

FIGURE 2.13 – Champ de vitesse dans le coude à 180°, (a) géométrie initiale, (b) géométrie optimale sous contrainte de volume et (c) géométrie optimale sans contrainte de volume.

l'obstacle. Comme attendu, lorsque la contrainte de volume n'est pas considérée, l'arrangement optimal de l'objet est celui qui ne présente aucun obstacle pour ne pas perturber l'écoulement du fluide. En revanche, la suppression de l'obstacle n'est pas attendue au cours de la simulation car l'approche d'optimisation de la forme utilisée dans ce travail est une optimisation géométrique. Par conséquent, la topologie du domaine ne peut pas être modifiée et le "trou" ne peut donc pas disparaître.

La forme optimale soumise à une contrainte de volume était également attendue et est similaire à celles obtenues dans les travaux de la littérature (Borrvall et Petersson, 2003; Dapogny et al., 2018). Cet ovale est la forme géométrique qui minimise la perturbation de l'écoulement. En effet, il permet de diminuer le coefficient de traînée sans pour autant augmenter grandement le périmètre de l'obstacle (contrairement à un ovale plus aplati par exemple). Une trop forte augmentation du périmètre entraînerait une augmentation de l'énergie dissipée et des pertes de charge car la dissipation d'énergie s'effectue principalement au niveau des parois. Les performances de la méthode d'optimisation pour les cas avec et sans contrainte de volume sont

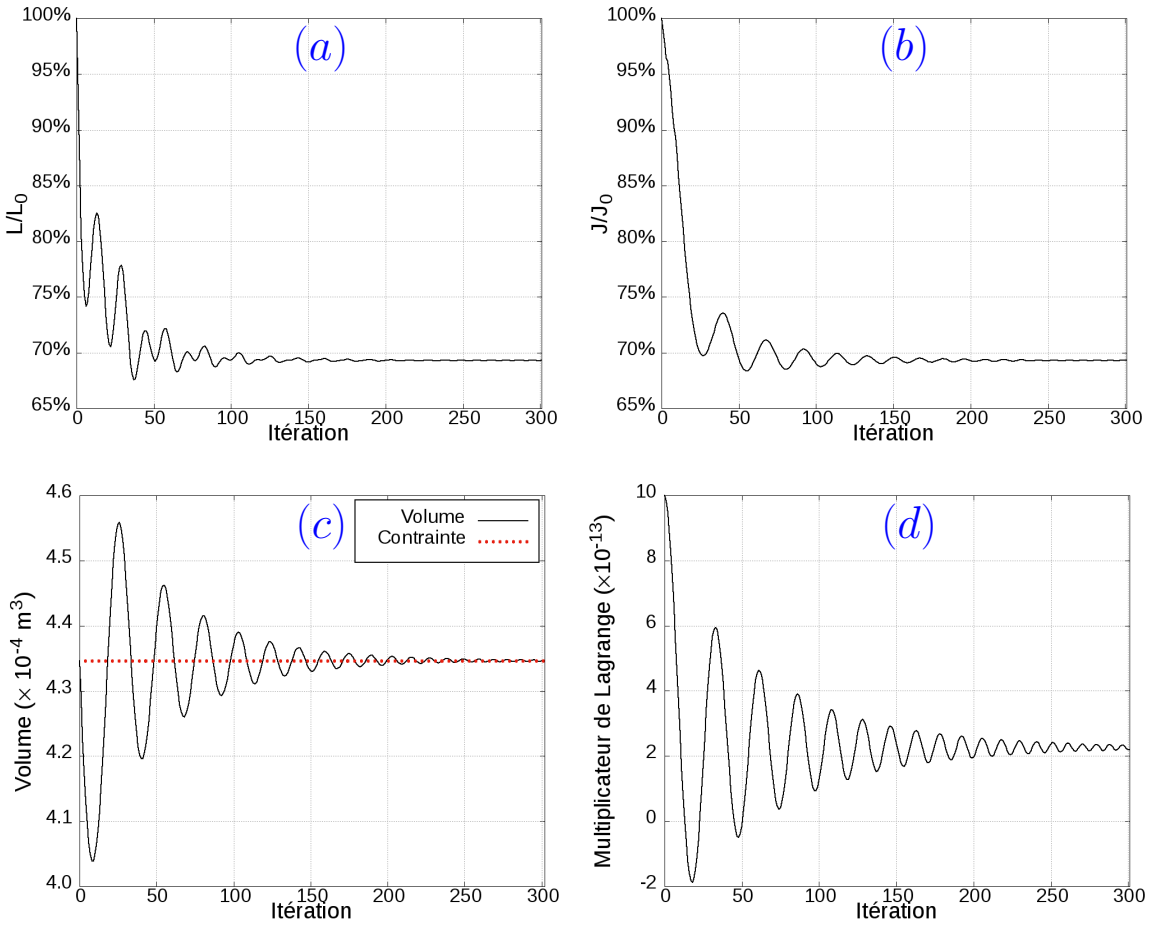
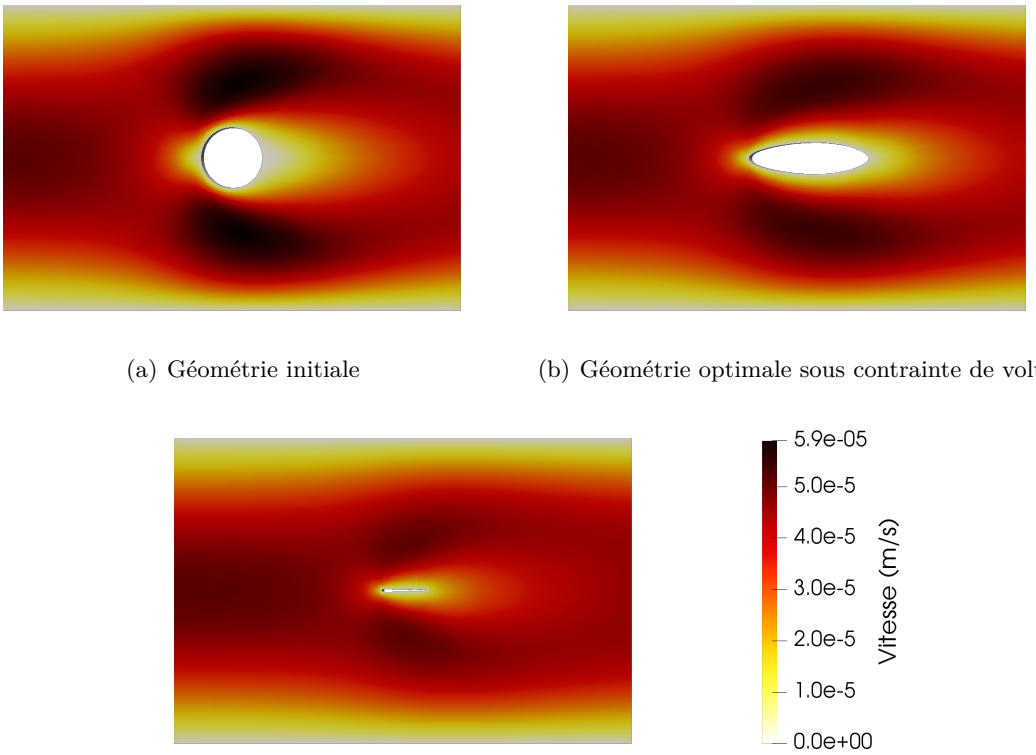


FIGURE 2.14 – Courbes de convergence de l'optimisation du coude à 180° sous la contrainte de volume, (a) représente l'évolution du ratio $\frac{\mathcal{L}}{\mathcal{L}_0}$, (b) le ratio $\frac{J}{J_0}$, (c) la contrainte sur le volume, et (d) le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte de volume.

présentées dans le tableau 2.3. Comme prévu, l'ajout d'une contrainte réduit l'ensemble des solutions admissibles. Ainsi, les performances d'optimisation sont plus faibles (10,8 % contre 45,1 %). Les courbes de convergence, présentées sur la figure 2.17, montrent bien la diminution de 10,8 % de l'énergie dissipée dans le fluide, et la satisfaction de la contrainte d'iso-volume.

D'un point de vue numérique, le cas ObV est le plus difficile à implémenter. Le multiplicateur de Lagrange initial doit être correctement choisi afin d'éviter que l'obstacle ne se referme sur lui même (voir figure 2.16). Cela entraînerait des maillages incorrects et arrêterait la simulation. Pour surmonter ce problème, le multiplicateur de Lagrange initial λ_0 est fixé à une valeur supérieure à la valeur absolue du gradient de forme $G(\Omega)$ de la première itération. Ainsi, au début de l'algorithme, le volume de l'obstacle augmentera avec l'itération au lieu de diminuer fortement (voir (2.40)).



(a) Géométrie initiale

(b) Géométrie optimale sous contrainte de volume

(c) Géométrie optimale sans contrainte de volume

FIGURE 2.15 – Champ de vitesse autour d'un obstacle (a) géométrie initiale, (b) géométrie optimale sous contrainte de volume et (c) géométrie optimale sans contrainte de volume.

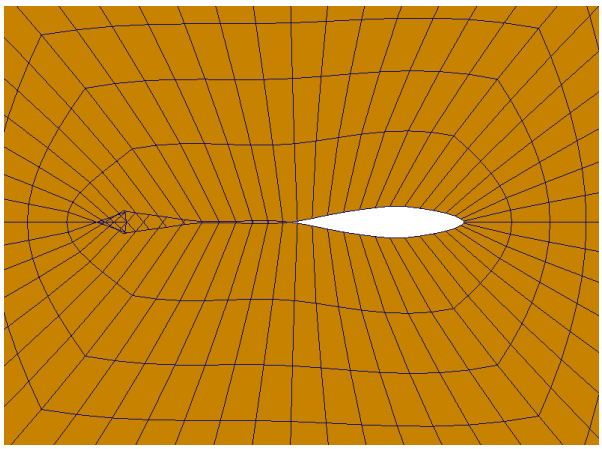


FIGURE 2.16 – Exemple de l'obstacle qui se referme.

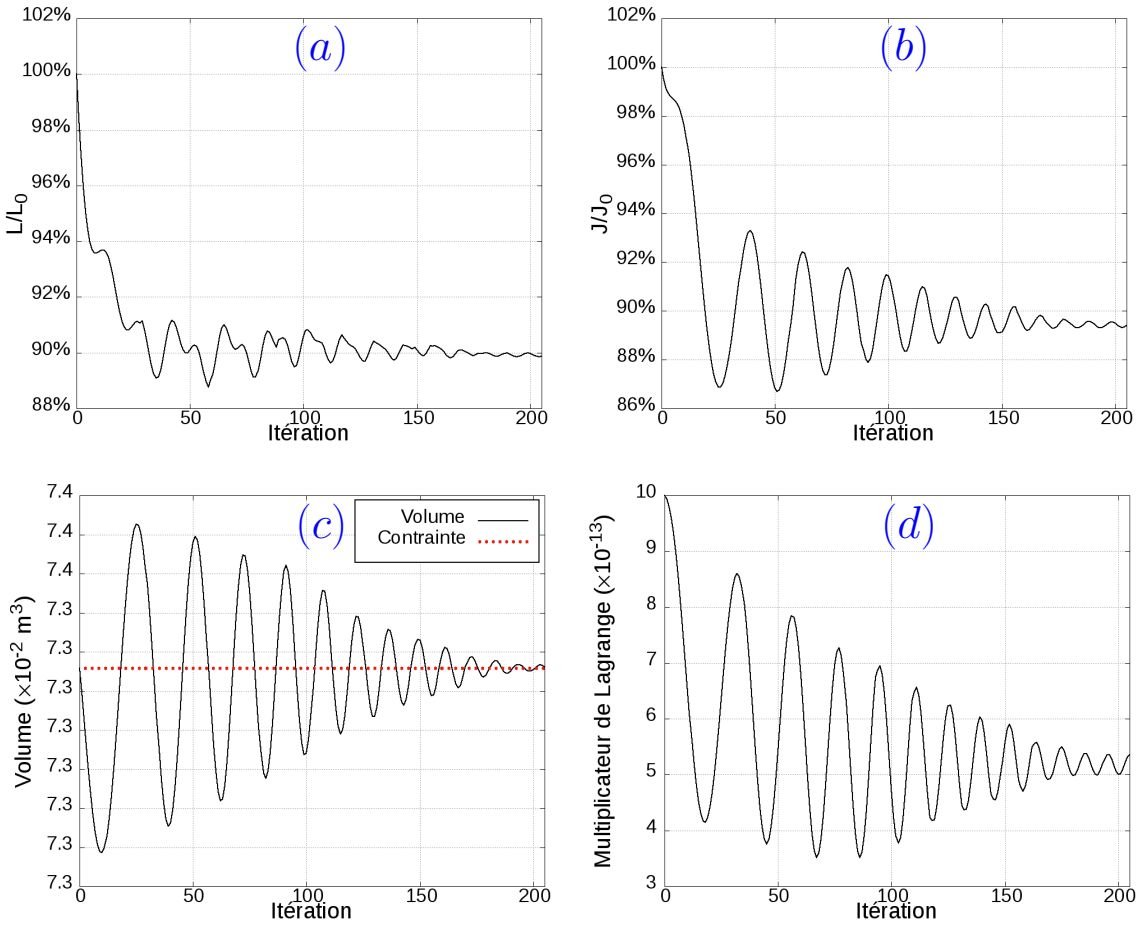


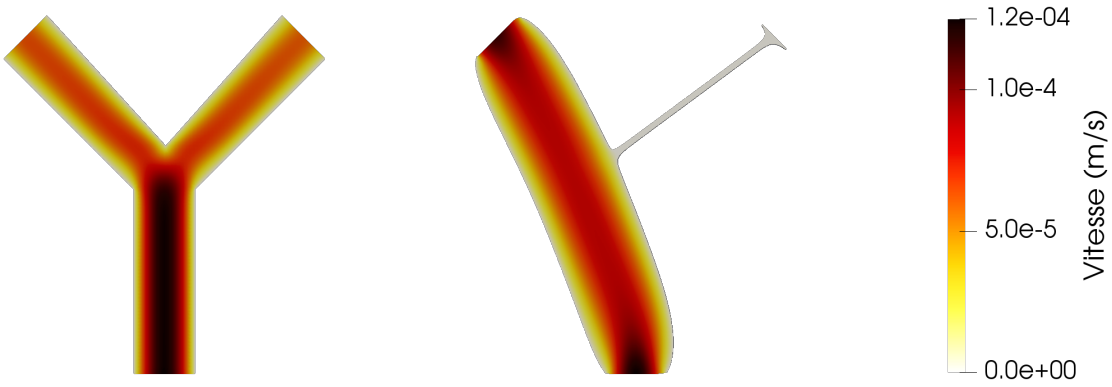
FIGURE 2.17 – Courbes de convergence de l'optimisation de l'obstacle sous la contrainte de volume, (a) représente l'évolution du ratio $\frac{\mathcal{L}}{\mathcal{L}_0}$, (b) le ratio $\frac{J}{J_0}$, (c) la contrainte sur le volume et (d) le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte de volume.

2.6.4 Énergie dissipée dans un arbre à deux branches (arbre dyadique)

Les formes initiale et optimale de l'arbre à deux branches sont présentées sur la figure 2.18. La forme optimale obtenue dans le cas présent est conforme aux résultats de la littérature (De La Sablonière et al., 2011). La configuration optimale 2.18(b) de l'arbre dyadique est celle où l'une des deux branches de l'arbre est presque éliminée, tandis que la section de l'autre a été multipliée par deux permettant ainsi une diminution des gradients de vitesse de la même manière que pour les conduites coudées (§2.6.1 et 2.6.2). On peut également remarquer que la forme de la branche principale se rapproche fortement de celle du coude à 90° pour de faibles nombres de Reynolds, la conduite joignant directement l'entrée et la sortie. Les performances de la convergence de l'algorithme sont présentées sur la figure 2.19. On peut remarquer que la contrainte d'iso-volume est bien satisfaite et une diminution de 53,3 % de l'énergie dissipée par le fluide est observée, ce qui équivaut à une réduction de 50,2 % des pertes de charge.

Le cas de l'arbre dyadique est le plus coûteux en termes de temps de calcul. En effet, la géométrie dans ce cas subit d'énormes changements. La largeur d'une branche est doublée et

l'autre a presque disparu. Par conséquent, le domaine doit être remaillé finement à de nombreuses reprises et le pas de la méthode doit être choisi relativement petit. Dans ce cas, le flux semble privilégier l'une des deux branches. La petite branche ne peut pas être supprimée car la sortie est une frontière fixe et l'algorithme géométrique ne peut pas modifier la topologie du domaine.



(a) Géométrie initiale (b) Géométrie optimale

FIGURE 2.18 – Champ de vitesse dans un arbre à deux branches (a) géométrie initiale, (b) géométrie optimale.

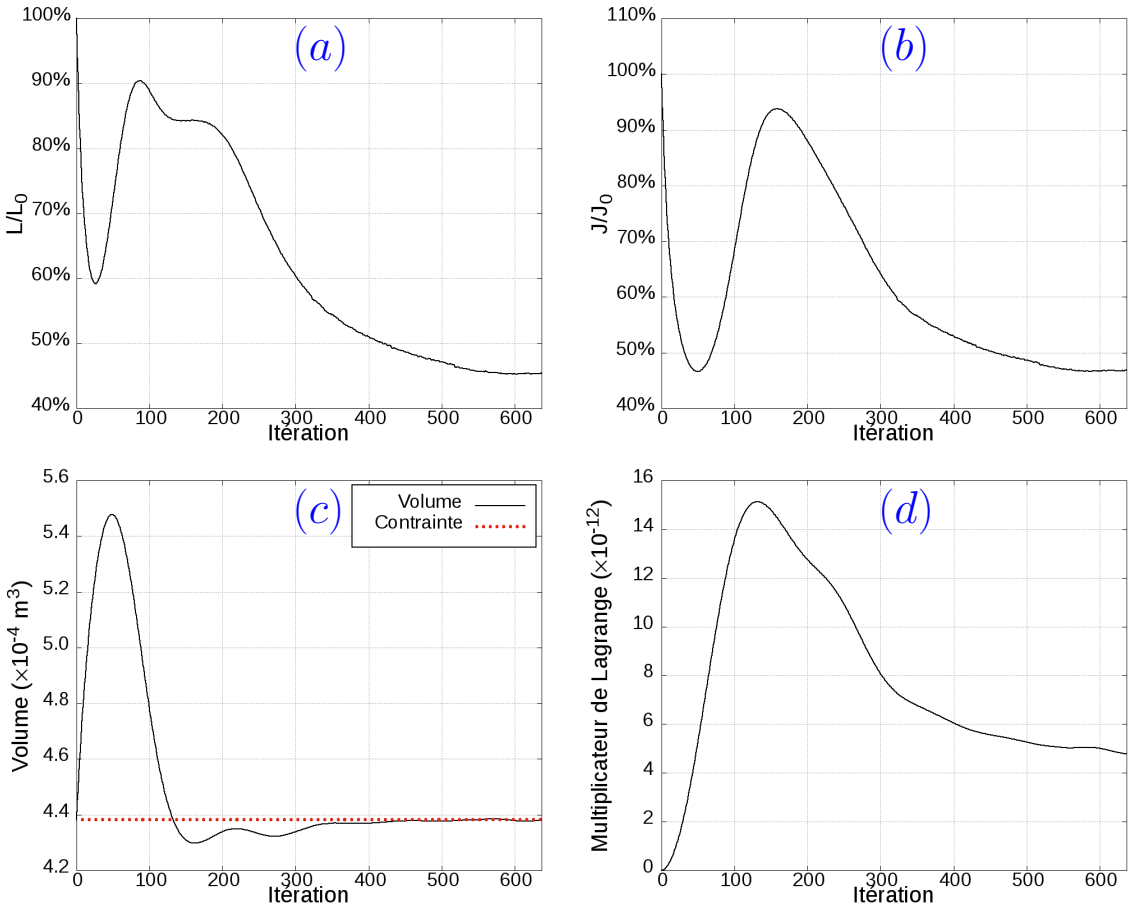


FIGURE 2.19 – Courbes de convergence de l'optimisation de l'arbre à deux branches, (a) représente l'évolution du ratio $\frac{\mathcal{L}}{\mathcal{L}_0}$, (b) le ratio $\frac{J}{J_0}$, (c) la contrainte sur le volume et (d) le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte de volume.

2.7 Conclusions

Dans ce chapitre, une approche d'optimisation géométrique a été présentée se basant sur la méthode de l'état adjoint. Il s'agit d'une méthode de gradient introduisant un état fictif afin de calculer le gradient de forme ainsi que le champ de vecteur diffusant le maillage et permettant une diminution de la fonction objectif. L'algorithme résultant a été implémenté sous le logiciel OpenFOAM puis testé sur quatre schémas classiques d'écoulement de fluide afin de comparer les arrangements optimaux obtenus avec les travaux de la littérature. Il en ressort un bon accord entre les formes finales obtenues et celles recensées dans la littérature.

La confirmation des résultats par la littérature permet de valider la méthode développée dans ce chapitre. L'algorithme implémenté sous OpenFOAM servira de base pour la suite du travail.

Dans chacun des cas étudiés, une diminution non négligeable de l'énergie dissipée par le fluide est observée entre les formes initiale et optimale. Cela se traduit par une diminution des pertes de charge et donc un gain d'énergie et de coût de fonctionnement.

Chapitre 3

Application de l'optimisation de forme à la conception optimale de réacteurs à lit fixe

Sommaire

3.1 Introduction 60
3.2 Modélisation et analyse des problèmes d'optimisation considérés . . 60
3.2.1 Présentation du réacteur à lit fixe et sa modélisation 60
3.2.1.1 Premier cas : réaction homogène 61
3.2.1.2 Second cas : réaction de surface 62
3.2.2 Définition du problème d'optimisation géométrique 62
3.2.2.1 Fonction objectif à minimiser 62
3.2.2.2 Variable de décision 62
3.2.2.3 Modélisation 63
3.2.2.4 Ensemble des solutions admissibles 63
3.3 Formulation mathématique des problèmes 64
3.3.1 Cas de la réaction homogène 66
3.3.2 Cas de la réaction de surface 66
3.4 Implémentation et résolution sous OpenFOAM 67
3.4.1 Déplacement du maillage 67
3.4.1.1 Contrainte sur la largeur locale des canaux 68
3.4.1.2 Contrainte sur l'épaisseur locale des obstacles 68
3.4.2 Maillage et remaillage de la forme 73
3.4.3 Vérification de la qualité du maillage 74
3.4.4 Résolution des systèmes d'équations aux dérivés partielles 75
3.4.5 Autres explications 75
3.5 Résultats numériques et discussions 77
3.5.1 Résultats numériques de l'optimisation du réacteur siège de la réaction homogène 77
3.5.2 Résultats numériques de l'optimisation du réacteur siège de la réaction de surface 79
3.6 Conclusions 83

3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'application de l'optimisation de forme à la conception de réacteurs à lit fixe. Il présente ainsi :

- Le réacteur à lit fixe considéré et les deux réactions mises en œuvre :
  - — Une réaction homogène ayant lieu dans la phase fluide.
  - — Une réaction hétérogène se produisant sur une surface réactive.
- L'extension de l'approche d'optimisation géométrique à ces deux cas.
- L'algorithme associé à la résolution numérique. Le traitement de contraintes d'épaisseur y est discuté.
- Les résultats numériques issus de l'optimisation des deux réacteurs à lit fixe.

3.2 Modélisation et analyse des problèmes d'optimisation considérés

3.2.1 Présentation du réacteur à lit fixe et sa modélisation

Dans le présent chapitre, la méthode d'optimisation géométrique précédemment présentée a été étendue aux réacteurs à lit fixe. L'outil qui en résulte est utilisé pour déterminer la configuration optimale du garnissage d'un réacteur dans lequel un écoulement monophasique de liquide se produit. La structure initiale du garnissage se compose d'obstacles elliptiques (dont les demi-axes sont de 5 mm et de 2,5 mm) uniformément répartis dans le réacteur, il s'agit d'un garnissage structuré. La figure 3.1 illustre schématiquement la configuration initiale du réacteur utilisé pour le processus d'optimisation.

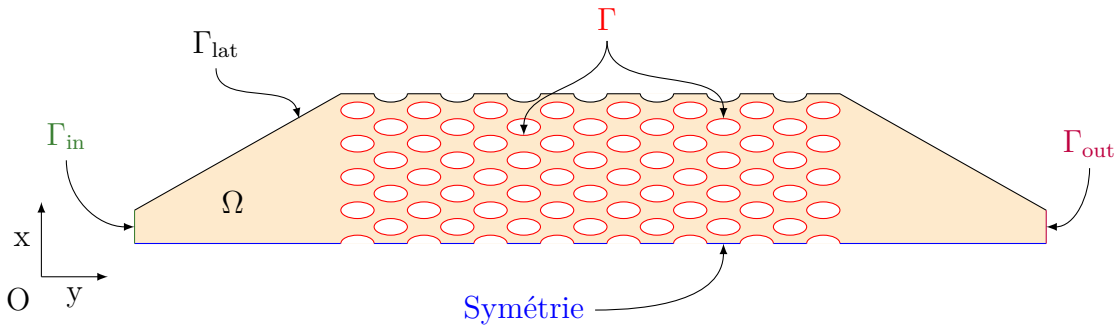


FIGURE 3.1 – Configuration initiale du réacteur à lit fixe utilisé pour le processus d'optimisation.

Le domaine étudié, dont la forme initiale Ω_0 est présentée sur la figure 3.1, est noté Ω et est délimité par l'union de ses frontières $\partial\Omega = \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out} \cup \Gamma_{lat} \cup \Gamma$. Γ_{in} et Γ_{out} représente respectivement l'entrée et la sortie de fluide du réacteur, Γ_{lat} la paroi latérale du réacteur et Γ le garnissage dont la forme est amenée à évoluer au cours du processus d'optimisation de forme. Cette dernière frontière est également appelée la ''frontière libre'', il s'agit de la variable de décision. L'écoulement du fluide est décrit par les équations de bilan de quantité de mouvement et l'équation de continuité, fournies par les équations de Navier-Stokes (2.22). Les conditions

aux limites associées aux frontières définies précédemment sont identiques à celles du chapitre précédent. Conformément aux équations (2.22a) et (2.22b), l'écoulement est supposé stationnaire et incompressible, et la pression relative est imposée nulle en sortie de réacteur.

$$\begin{cases} -\nu\Delta \boldsymbol{U} + \boldsymbol{U} \cdot \nabla \boldsymbol{U} + \nabla p = 0 & \text{dans } \Omega \quad (2.22a) \\ \nabla \cdot \boldsymbol{U} = 0 & \text{dans } \Omega \quad (2.22b) \\ \boldsymbol{U} = \boldsymbol{U_{in}} & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \quad (2.22c) \\ \boldsymbol{U} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{lat}} \cup \Gamma \quad (2.22d) \\ \sigma(\boldsymbol{U}, p)\boldsymbol{n} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} \quad (2.22e) \end{cases}$$

avec ν représentant la viscosité cinématique.

La vitesse d'entrée $\boldsymbol{U_{in}}$ est homogène le long de l'entrée et suivant la direction (Oy). Elle est fixée à de faibles valeurs afin d'imposer des nombres de Reynolds de particules faibles (voir équation (3.1)) et d'assurer un écoulement laminaire dans le réacteur.

$$\text{Re}_{\text{p}} = \frac{u d_H}{\nu} \tag{3.1}$$

où u désigne la vitesse superficielle du fluide et $d_H = \frac{4S}{P}$ le diamètre hydraulique avec $S = \pi ab$ représentant la surface des ellipses jouant le rôle d'obstacles 2D (a et b sont les demi-axes) et $P \approx \pi\sqrt{2(a^2+b^2)}$ le périmètre des ellipses. Le Reynolds de particules pour la forme initiale est de 7. L'hypothèse d'un écoulement laminaire est bien satisfaite pour le réacteur initial, cette hypothèse sera vérifiée pour les formes optimales.

Dans ce chapitre, deux réactions différentes ont été étudiées, une réaction homogène et une réaction de surface, les réacteurs associés ont été optimisés.

3.2.1.1 Premier cas : réaction homogène

La première réaction considérée est une homogène de premier ordre et de type

$$\text{A} \rightarrow \text{P} \tag{3.2}$$

dont la vitesse de réaction s'écrit

$$r_{\text{sim}} = k_{\text{sim}} C. \tag{3.3}$$

où k_{sim} désigne la constante cinétique de la réaction et C la concentration en réactif. Il est supposé ici que la réaction a uniquement lieu dans la phase fluide Ω et non sur les parois Γ_{lat} et Γ, le garnissage joue le rôle de mélangeur statique. Notons C le champ de concentration en réactif A dans le réacteur. Il est modélisé par le système d'EDPs (3.4) qui décrit le bilan de matière dans le réacteur :

$$\begin{cases} -\mathcal{D}\Delta C + \boldsymbol{U} \cdot \nabla C + k_{\text{sim}} C = 0 & \text{dans } \Omega \quad (3.4a) \\ C = C_{in} & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \quad (3.4b) \\ \dfrac{\partial C}{\partial n} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{lat}} \cup \Gamma_{\text{out}} \cup \Gamma \quad (3.4c) \end{cases}$$

où $\mathcal{D}$ représente le coefficient de diffusion du réactif A dans le solvant. Ce système d'EDPs est directement issu de l'équation de continuité :

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = R \tag{3.5}$$

où $R = -k_{\text{sim}}C$ représente le terme source et $\boldsymbol{j}$ le flux molaire. Celui-ci peut se décomposer en deux parties, le flux diffusif et le flux convectif. On a alors

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{j}_{\text{diff}} + \boldsymbol{j}_{\text{conv}} = -\mathcal{D}\nabla C + \boldsymbol{U}C \tag{3.6}$$

L'écoulement étant supposé stationnaire et en calculant la divergence de l'équation (3.6), on obtient trivialement l'équation (3.4a).

3.2.1.2 Second cas : réaction de surface

La seconde réaction étudiée est hétérogène limitée par le transfert externe. Ici, il est supposé que les obstacles formant le garnissage sont imprégnés de catalyseur ainsi que les parois latérales du réacteur Γ_{lat}. La réaction est instantanée lorsque le réactif entre en contact avec le catalyseur (voir équation (3.7c)). Le champ de concentration est modélisé par le système d'équation (3.7), système également issus de l'équation de continuité (3.5). Il est intéressant de noter que le terme de consommation kC a disparu, la réaction n'a lieu qu'en surface.

$$\begin{cases} -\mathcal{D}\Delta C + \boldsymbol{U} \cdot \nabla C = 0 & \text{dans } \Omega \quad (3.7a) \\ C = C_{in} & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \quad (3.7b) \\ C = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{lat}} \cup \Gamma \quad (3.7c) \\ \dfrac{\partial C}{\partial n} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} \quad (3.7d) \end{cases}$$

3.2.2 Définition du problème d'optimisation géométrique

3.2.2.1 Fonction objectif à minimiser

Pour chacun des cas, l'objectif est de déterminer la forme du garnissage qui minimise la concentration moyenne de réactif en sortie donnée par la relation suivante :

$$J(\Omega) = \int_{\Gamma_{\text{out}}} C \, d\sigma \tag{3.8}$$

où C désigne la solution de (3.4) ou (3.7). Il est intéressant de minimiser ce critère car la concentration moyenne de réactif en sortie et le taux de conversion sont directement liés.

3.2.2.2 Variable de décision

La variable de décision du problème est la structure du garnissage Γ, c'est-à-dire, la position et la forme des obstacles. Il s'agit de l'unique frontière amenée à évoluer au cours du processus d'optimisation, les autres étant fixes.

3.2.2.3 Modélisation

Le modèle est décrit dans la partie 3.2.1. Il est constitué de deux systèmes d'équations aux dérivées partielles, les équations de Navier-Stokes (2.22) couplée à l'équation de continuité et le système modélisant le transfert de matière (3.4) ou (3.7).

3.2.2.4 Ensemble des solutions admissibles

L'ensemble des solutions admissibles est défini par 4 contraintes dans ce problème d'optimisation, 2 sont liées au procédé et 2 autres liées à l'étape de fabrication des réacteurs par impression 3D. La première contrainte liée au procédé est une contrainte d'iso-volume permettant d'imposer un temps de passage identique entre les formes initiale et optimale, le débit n'étant également pas modifié. Cette contrainte est définie par l'équation (3.9).

$$C_{\mathcal{V}}(\Omega) = \mathcal{V}(\Omega) - \mathcal{V}(\Omega_0) = 0 \tag{3.9}$$

où $\mathcal{V}(\Omega) = \int_\Omega 1\, dx$ désigne le volume de Ω. La seconde contrainte caractérise la perte d'énergie dans le fluide due aux frottements visqueux. Il s'agit d'une contrainte d'inégalité qu'il est intéressant de prendre en compte lors de la définition du problème d'optimisation car cette perte d'énergie est directement corrélée aux pertes de charge, elle s'exprime selon la relation suivante :

$$C_{\mathcal{E}}(\Omega) < 0 \qquad \text{où} \qquad C_{\mathcal{E}}(\Omega) = 2\nu \int_\Omega |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2\, dx - \underbrace{2\nu \int_{\Omega_0} |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2\, dx}_{\mathcal{E}_0} \leqslant 0. \tag{3.10}$$

où $(\boldsymbol{U}, p)$ désigne la solution de (2.22).

Les deux dernières contraintes prennent en compte le caractère manufacturable du réacteur final (voir paragraphe 1.2.2 expliquant l'origine des contraintes), on les appellera pour la suite du manuscrit les contraintes de fabrication. Il s'agit de contraintes d'inégalité imposant respectivement une épaisseur et une largeur minimale aux obstacles et canaux (i.e. la partie fluide). Ces contraintes font intervenir des distances minimales entre deux obstacles ou sur un même obstacle, or, la dérivée par rapport au domaine du minimum d'une distance est une tâche complexe (Feppon et al., 2020). Par conséquent, ces deux contraintes ne sont pas considérées conventionnellement en les incluant dans le lagrangien mais sont prises en compte par post-traitement de la déformation du maillage $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{X})$. Ce post-traitement est détaillé dans les paragraphes 3.4.1.1 et 3.4.1.2.

L'agrégation de la fonction objectif et des deux contraintes de procédé forme le lagrangien du problème d'optimisation. Cette nouvelle fonctionnelle s'exprime selon l'équation suivante :

$$\mathcal{L}(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}}, \lambda_{\mathcal{E}}) = K_{\text{crit}} J(\Omega) + \lambda_{\mathcal{V}} C_{\mathcal{V}}(\Omega) + \lambda_{\mathcal{E}} C_{\mathcal{E}}(\Omega) \tag{3.11}$$

où K_{crit} est une constante qui permet d'avoir le même ordre de grandeur entre le produit $K_{\text{crit}} J(\Omega)$ et la contrainte $C_{\mathcal{E}}(\Omega)$ présent dans l'équation (3.11) afin de faciliter l'analyse de la contrainte sur l'énergie. Pour finir, l'ensemble de cette section peut se résumer par le problème

d'optimisation suivant :

$$\begin{array}{ll} \min\limits_{\Omega} & J(\Omega) \\ \text{s.à.} & \Omega \in \mathscr{C} \\ & (\boldsymbol{U}, p) \text{ solution de Eqs. (2.22)} \\ & C \text{ solution de Eqs. (3.4) ou (3.7)} \end{array} \qquad (\mathscr{P}_{3.1})$$

où $\mathscr{C}$ désigne l'ensemble des contraintes donné par

$$\mathscr{C} := \{\Omega \subset \mathbb{R}^2 \mid C_{\mathcal{V}}(\Omega) = 0 \text{ et } C_{\mathcal{E}}(\Omega) \leqslant 0\}. \tag{3.12}$$

3.3 Formulation mathématique des problèmes

La méthode d'optimisation développée pour la résolution du problème ($\mathscr{P}_{3.1}$) repose sur le même principe que l'approche présentée dans le chapitre précédant. La forme est optimisée par déformation du garnissage Γ suivant la relation de récurrence (3.13).

$$\Omega_{i+1} = (\mathrm{Id} + t\boldsymbol{V})(\Omega_i) \tag{3.13}$$

La différence majeure entre les deux méthodes réside dans le calcul du gradient de forme. Là où l'introduction d'un unique état adjoint suffisait dans le chapitre précédant, l'extension aux transferts de matière de la méthode impose un nouveau système d'EDPs à résoudre. Par conséquent, un second état adjoint doit être introduit. D'une manière générale, il faut introduire autant d'état adjoint qu'il y a d'équations aux dérivées partielles modélisant le système.

De la même façon que pour le développement de la méthode précédente, on calcule les dérivées par rapport au domaine du critère et des contraintes séparément. On a donc (Allaire et Schoenauer, 2007; Courtais et al., 2020) :

$$J'(\Omega)(\boldsymbol{V}) = \frac{d}{dt}\int_{\Gamma_{\text{out}}} C\,dx\bigg|_{t=0} = \int_{\Gamma_{\text{out}}} C'\,d\sigma \tag{3.14}$$

$$C'_{\mathcal{V}}(\Omega)(\boldsymbol{V}) = \frac{d}{dt}\left(\int_{\Omega_t} 1\,dx\bigg|_{t=0} - \mathcal{V}(\Omega_0)\right) = \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})d\sigma \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned} C'_{\mathcal{E}}(\Omega)(\boldsymbol{V}) &= \frac{d}{dt}\left(2\nu\int_{\Omega_t} |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2\,dx\bigg|_{t=0} - \mathcal{E}(\Omega_0)\right) \\ &= 2\nu\int_{\partial\Omega} |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma + 4\nu\int_{\Omega} \varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\,dx \end{aligned} \tag{3.16}$$

Dans les équations (3.14), (3.15) et (3.16), $\boldsymbol{U'}$ et C' désignent respectivement les sensibilités de $\boldsymbol{U}$ et C par rapport aux variations du domaine. $\boldsymbol{U'}$ est solution du système d'équation (2.33) déjà présenté dans le chapitre précédent.

$$\begin{cases} -\nu\Delta \boldsymbol{U}' + (\boldsymbol{U}' \cdot \nabla)\boldsymbol{U} + (\boldsymbol{U} \cdot \nabla)\boldsymbol{U}' + \nabla p' = 0 & \text{dans } \Omega & (2.33a) \\ \nabla \cdot \boldsymbol{U}' = 0 & \text{dans } \Omega & (2.33b) \\ \boldsymbol{U}' = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{lat}} & (2.33c) \\ \boldsymbol{U}' = -\dfrac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial n}(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) & \text{sur } \Gamma & (2.33d) \\ \sigma(\boldsymbol{U}', p')\boldsymbol{n} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} & (2.33e) \end{cases}$$

Le système d'équations modélisant C' dépend du cas étudié. Pour une réaction homogène de premier ordre, on peut montrer que C' est solution de (3.17) (Courtais et al., 2021a).

$$\begin{cases} -\mathcal{D}\Delta C' + \boldsymbol{U} \cdot \nabla C' + \boldsymbol{U}' \cdot \nabla C + k_{\text{sim}} C' = 0 & \text{dans } \Omega & (3.17a) \\ C' = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} & (3.17b) \\ \dfrac{\partial C'}{\partial n} = -\dfrac{\partial C^2}{\partial n^2}(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) + \nabla C \cdot (\nabla(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) - (\nabla(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{n})\boldsymbol{n}) & \text{sur } \Gamma & (3.17c) \\ \dfrac{\partial C'}{\partial n} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} \cup \Gamma_{\text{lat}} & (3.17d) \end{cases}$$

Dans le système ci-dessus, l'équation (3.17b) découle des formules de dérivation usuelles, les équations (3.17a) et (3.17d) des formules de dérivation d'un produit et d'une adaptation astucieuse du théorème de Schwarz (Henrot et Pierre, 2005, Chap. 5) et l'équation (3.17c) est une formule de dérivation par rapport au domaine pour une condition aux limites de type Neumann sur la frontière libre (Henrot et Pierre, 2005, Chap. 5). Pour le cas d'une réaction de surface, C' est solution du système suivant :

$$\begin{cases} -\mathcal{D}\Delta C' + \boldsymbol{U} \cdot \nabla C' + \boldsymbol{U}' \cdot \nabla C = 0 & \text{dans } \Omega & (3.18a) \\ C' = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{lat}} & (3.18b) \\ \dfrac{\partial C'}{\partial n} = -\dfrac{\partial C}{\partial n}(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) & \text{sur } \Gamma & (3.18c) \\ \dfrac{\partial C'}{\partial n} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} & (3.18d) \end{cases}$$

Similairement au chapitre précédent, l'objectif de la méthode consiste à exprimer la dérivée du lagrangien sous la forme suivante :

$$\mathcal{L}'(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}}, \lambda_{\mathcal{E}})(\boldsymbol{V}) = \int_{\partial\Omega} G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}}, \lambda_{\mathcal{E}})(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) \tag{3.19}$$

où $G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}}, \lambda_{\mathcal{E}})$ désigne le gradient de forme dont il faut déterminer l'expression et $\boldsymbol{V}$ le déplacement du maillage, solution du système suivant :

$$\begin{cases} -\gamma\Delta \boldsymbol{V} + \boldsymbol{V} = 0 & \text{dans } \Omega & (3.20a) \\ \boldsymbol{V} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{out}} \cup \Gamma_{\text{lat}} & (3.20b) \\ \gamma\nabla \boldsymbol{V}\boldsymbol{n} = -G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}}, \lambda_{\mathcal{E}})\boldsymbol{n} & \text{sur } \Gamma & (3.20c) \end{cases}$$

Le modèle étant sensiblement différent suivant le cas étudié, les formulations du gradient de forme et des états adjoints introduits sont présentées séparément pour chacun des cas. La section 3.3.1 est consacrée au cas RH (Réaction Homogène) et la section 3.3.2 au cas RS (Réaction de Surface).

3.3.1 Cas de la réaction homogène

Les calculs permettant d'exprimer le gradient de forme sous la forme Eq. (3.21) sont détaillés en annexe B.3.

$$G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}}, \lambda_{\mathcal{E}}) = 2\nu(\varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) - \lambda_{\mathcal{E}}\varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U})) - \frac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}}\mathcal{D}C_a\Delta C + \lambda_{\mathcal{V}} \tag{3.21}$$

Dans l'expression du gradient de forme $G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}}, \lambda_{\mathcal{E}})$, K_{BC} représente la constante introduite dans la condition aux limites (3.23d) et permettant d'homogénéiser celle-ci et ($\boldsymbol{U_a}$,p_a) désigne l'état adjoint de ($\boldsymbol{U}$,p) définit comme la solution du système suivant :

$$\begin{cases} \mathscr{H}(\boldsymbol{U}, \boldsymbol{U_a}) + \nabla p_a = -\lambda_{\mathcal{E}} 2\nu\Delta\boldsymbol{U} - \dfrac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}} C_a \nabla C & \text{dans } \Omega & (3.22a) \\ \nabla \cdot \boldsymbol{U_a} = 0 & \text{dans } \Omega & (3.22b) \\ \boldsymbol{U_a} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{lat}} \cup \Gamma & (3.22c) \\ \sigma(\boldsymbol{U_a}, p_a)\boldsymbol{n} + (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})\boldsymbol{U_a} = 4\nu\lambda_{\mathcal{E}}\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n} & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} & (3.22d) \end{cases}$$

où $\mathscr{H}(\boldsymbol{U}, \boldsymbol{U}_a) = -\nu\Delta\boldsymbol{U}_a + (\nabla\boldsymbol{U})^T\boldsymbol{U_a} - \nabla\boldsymbol{U_a}\boldsymbol{U}$ et C_a représente l'état adjoint de la concentration C, solution du système suivant :

$$\begin{cases} -\mathcal{D}\Delta C_a - \boldsymbol{U} \cdot \nabla C_a + k_{\text{sim}} C_a = 0 & \text{dans } \Omega & (3.23a) \\ C_a = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} & (3.23b) \\ \dfrac{\partial C_a}{\partial n} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{lat}} \cup \Gamma & (3.23c) \\ C_a(\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n}) + \mathcal{D}\dfrac{\partial C_a}{\partial n} = K_{\text{BC}} & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} & (3.23d) \end{cases}$$

Le paramètre K_{BC} présent dans l'équation (3.23d) est une constante non nulle dont la valeur est choisie par l'utilisateur. Dans ce travail, ce paramètre est fixé à 3.10^{-3} mol.m^{-2}.s^{-1} afin de permettre aux champ C et C_a d'avoir le même ordre de grandeur.

3.3.2 Cas de la réaction de surface

Le même raisonnement est effectué pour la détermination de l'expression du gradient de forme dans le cas présent. L'annexe B.4 présente l'ensemble des calculs permettant de formuler le gradient de forme suivant l'expression suivante :

$$G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}}, \lambda_{\mathcal{E}}) = 2\nu(\varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) - \lambda_{\mathcal{E}}\varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U})) + \frac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}}\mathcal{D}\frac{\partial C_a}{\partial \boldsymbol{n}}\frac{\partial C}{\partial \boldsymbol{n}} + \lambda_{\mathcal{V}} \tag{3.24}$$

Dans l'équation (3.24), $\boldsymbol{U_a}$ est la vitesse du premier état adjoint ($\boldsymbol{U_a}$,p_a) solution du système (3.22). On peut remarquer que l'état adjoint associé aux équations de Navier-Stokes est identique pour les deux cas. C_a représente l'état adjoint à C et est défini comme la solution du système d'EDPs suivant :

$$\begin{cases} -\mathcal{D}\Delta C_a - \boldsymbol{U} \cdot \nabla C_a = 0 & \text{dans } \Omega \quad (3.25a) \\ C_a = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{lat}} \cup \Gamma \quad (3.25b) \\ C_a(\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n}) + \mathcal{D}\dfrac{\partial C_a}{\partial n} = K_{\text{BC}} & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} \quad (3.25c) \end{cases}$$

3.4 Implémentation et résolution sous OpenFOAM

La figure 3.2 présente l'approche algorithmique développée dans ce travail. Celui-ci est une extension de l'algorithme présenté dans le chapitre précédent. Il comprend en plus l'extension au phénomène de transfert de matière, la prise en compte de contrainte d'épaisseur, une amélioration du calcul de la qualité du maillage ou une modification du critère de convergence. Il est également implémenté sous OpenFOAM et piloté par des scripts pyFoam pour lier les itérations de l'algorithme entre elles.

Maillage de la forme initiale (voir § 3.4.2);
tant que convergence non atteinte (voir § 3.4.5) **faire**
  Résolution des équations de Navier-Stokes, du bilan matière et de leurs systèmes adjoints dans Ω_i (voir § 3.4.4);
  Calcul du gradient de forme sur $\partial\Omega_i$;
  Détermination du champ de vecteur $\boldsymbol{V}(x)$ en tenant compte des contraintes de fabrication (voir § 3.4.1);
  Diffusion du maillage Ω_{i+1};
  Mise à jour des multiplicateurs de Lagrange $\lambda_{\mathcal{V}}$ et $\lambda_{\mathcal{E}}$ (voir § 3.4.5);
  si Mauvaise qualité du maillage (voir § 3.4.3) **alors**
    Remaillage (voir § 3.4.2)
  fin
fin

Figure 3.2 – Algorithme implémenté dans OpenFOAM

Dans ce qui suit, nous allons détailler l'algorithme et discuter en particulier de sa précision.

3.4.1 Déplacement du maillage

Comme expliqué dans la section 3.4.2, de fines mailles ont été ajoutées en proche paroi au niveau de la frontière libre afin d'améliorer la modélisation dans ces régions en particulier pour le cas RS où la réaction est limitée par le transfert de réactif à la paroi. Afin de limiter la déformation de ces mailles et de garder la taille de celle-ci constante, les déplacements $\boldsymbol{V}$ modélisant la déformation de Γ sont extrudés dans l'ensemble de ces fines mailles. Pour cela, la fonction fournie par OpenFOAM nommée ''*wallDistData*''est utilisée. Les vecteurs $\boldsymbol{V}$ sont modifiés dans la zone de proche paroi. Dans chacune de ces mailles, le déplacement est égale à celui de la cellule touchant à l'obstacle (voir figure 3.3). Cette modification de $\boldsymbol{V}$ n'influera pas sur la configuration optimale car l'ensemble des termes du lagrangien sont fonction de $\boldsymbol{U}$, C et

du volume. Ces variables dépendent de la forme du réacteur, donc des frontières externes et pas du maillage si celui-ci est assez fin.



(a) Déplacement non extrudé (b) Déplacement extrudé

FIGURE 3.3 – Exemple de l'extrusion du déplacement $\boldsymbol{V}$ en proche paroi, la zone grisée représente l'obstacle.

L'objectif de ces travaux de thèse est de fabriquer des réacteurs à lit fixe par le procédé de stratoconception (voir § 1.2.2). Le caractère manufacturable des objets finaux est donc une part importante de ces travaux. La stratoconception est un procédé de fabrication additive qui permet de limiter les contraintes liées à l'étape de fabrication (voir chapitre 1), cependant, certaines subsistent. Celles-ci sont au nombre de deux et doivent être prises en compte dans l'algorithme d'optimisation, notamment lors de l'étape de diffusion du maillage par post-traitement du vecteur $\boldsymbol{V}$ après calcul de celui-ci.

3.4.1.1 Contrainte sur la largeur locale des canaux

La première contrainte est une contrainte d'inégalité qui impose une largeur locale minimale sur les canaux ($d^{\text{channel}} > d^{\text{channel}}_{\text{min}}$). Elle est traitée par une méthode de projection en deux étapes principales. La première consiste à déterminer la largeur locale pour chaque point $\boldsymbol{x}$ d'un canal. Cette distance est calculée en bouclant sur tous les autres points appartenant à un autre obstacle Γ. Le point le plus proche est appelé $\boldsymbol{x}^{\text{near}}$. La seconde étape consiste à calculer le produit scalaire des vecteurs $\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\text{near}}$ et $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{x})$. Si ce produit scalaire est positif et $d(\boldsymbol{x}) = ||\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\text{near}}|| < d^{\text{channel}}_{\text{min}}$ alors le vecteur $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{x})$ est projeté sur la ligne orthogonale au vecteur $\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\text{near}}$. La figure 3.4 illustre le fonctionnement du traitement de la contrainte.

3.4.1.2 Contrainte sur l'épaisseur locale des obstacles

La seconde contrainte de fabrication impose une épaisseur locale minimale sur les obstacles ($d^{\text{obstacle}} > d^{\text{obstacle}}_{\text{min}}$). Il s'agit aussi d'une contrainte d'inégalité également traitée par une méthode de projection en deux étapes. La première consistant en la détermination de l'épaisseur locale et la seconde en la projection du vecteur $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{x})$. La principale difficulté du traitement de cette contrainte réside dans le calcul de l'épaisseur locale. L'estimation de celle-ci est triviale à l'œil nu mais son automatisation est complexe dans la pratique. En effet, choisir la bonne direction pour quantifier cette longueur peut s'avérer être une tâche ardue. Dans ce travail, on va construire une version fine de l'obstacle centrée à l'intérieur de celui-ci, appelée squelette et

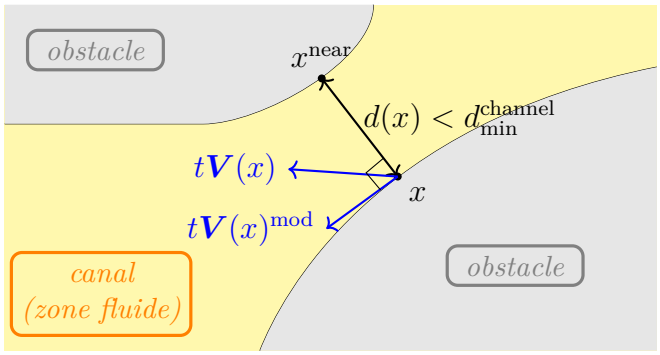


FIGURE 3.4 – Illustration du traitement de la contrainte sur les canaux.

on calculera l'épaisseur de l'obstacle comme le double de la distance entre sa frontière et son squelette. En deux dimensions, le squelette d'un obstacle est la courbe qui est équidistante de l'obstacle de chaque coté (voir figure 3.5), sa définition mathématique est la suivante.

Définition 1. *Le squelette d'un obstacle est défini comme l'ensemble des centres des boules maximales incluses dans l'obstacle.*

Définition 2. *Une boule B_1 incluse dans une forme F est dite maximale s'il n'existe pas de boule B_2 également incluse dans F contenant B_1 strictement au sens de l'inclusion.*

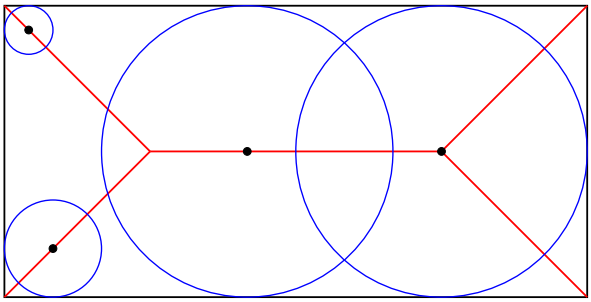


FIGURE 3.5 – Illustration graphique de la construction du squelette d'un objet rectangulaire, les cercles bleus représentent les boules maximales, les points noirs leurs centres et le trait rouge désigne le squelette.

Dans le cadre de ces travaux, deux constructions de squelettes ont été développées, la première fabriquant une approximation peu robuste du squelette, c'est-à-dire, que cette approximation est représentative du squelette uniquement lorsque la forme de l'obstacle est régulière. La seconde construit le squelette à partir des diagrammes de Voronoï.

Construction d'une ligne médiane d'un obstacle

Cette construction n'étant qu'une approximation du squelette et non le squelette lui même, on l'appellera la ligne médiane dans la suite de cette section. Elle est construite en trois étapes principales illustrées par la figure 3.6. La première consiste à déterminer les deux points de l'obstacle les plus éloignés l'un de l'autre, notés $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{B}$. Le vecteur $\boldsymbol{AB}$ qui en résulte sera appelé ''*vecteur pseudo directeur*''de l'obstacle. La deuxième étape vise à identifier, pour chaque

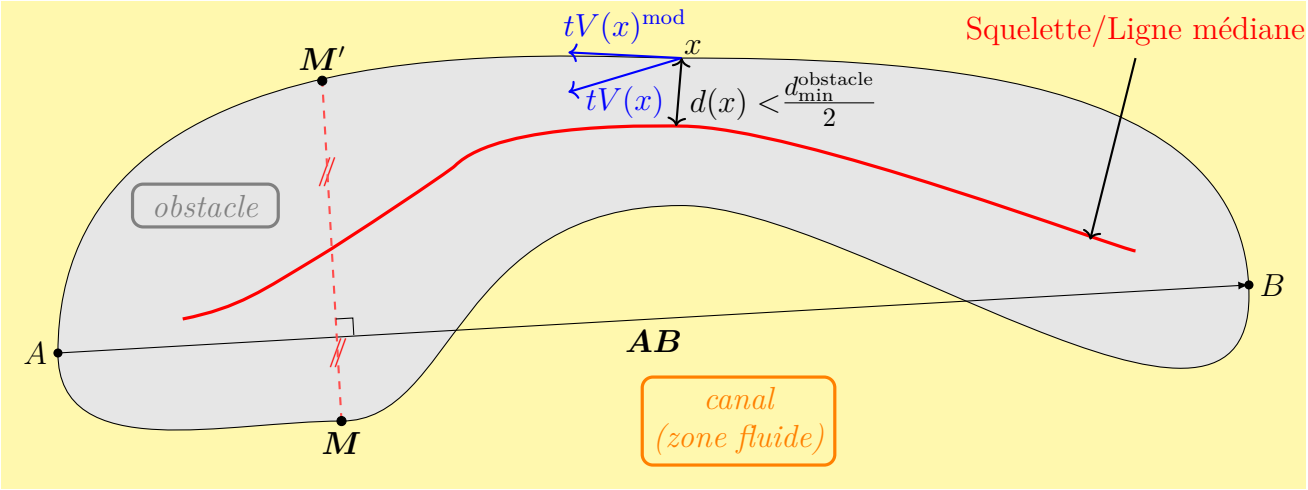


FIGURE 3.6 – Illustration graphique du traitement de la contrainte d'épaisseur et de la construction de la ligne médiane.

point $\boldsymbol{M}$ de l'obstacle, le point $\boldsymbol{M'}$ défini comme la première intersection entre la frontière de l'obstacle et un vecteur orthogonal à $\boldsymbol{AB}$ partant de $\boldsymbol{M}$. La fonction d'OpenFOAM appelée ''*intersections*''est utilisée pour déterminer cette intersection. Le point médian de $\boldsymbol{M}$ et de son intersection $\boldsymbol{M'}$ est calculé. Pour finir, la ligne médiane est construite par interpolation linéaire entre les points médians calculés.

Cette approximation du squelette est de bonne qualité lorsque la forme de l'obstacle est standard 3.7(a), cependant, cette construction s'avère très peu robuste lorsque la configuration de l'obstacle devient plus complexe 3.7(b). Une amélioration de l'algorithme de construction du squelette s'impose donc.

Construction du squelette d'un obstacle à partir du diagramme de Voronoï

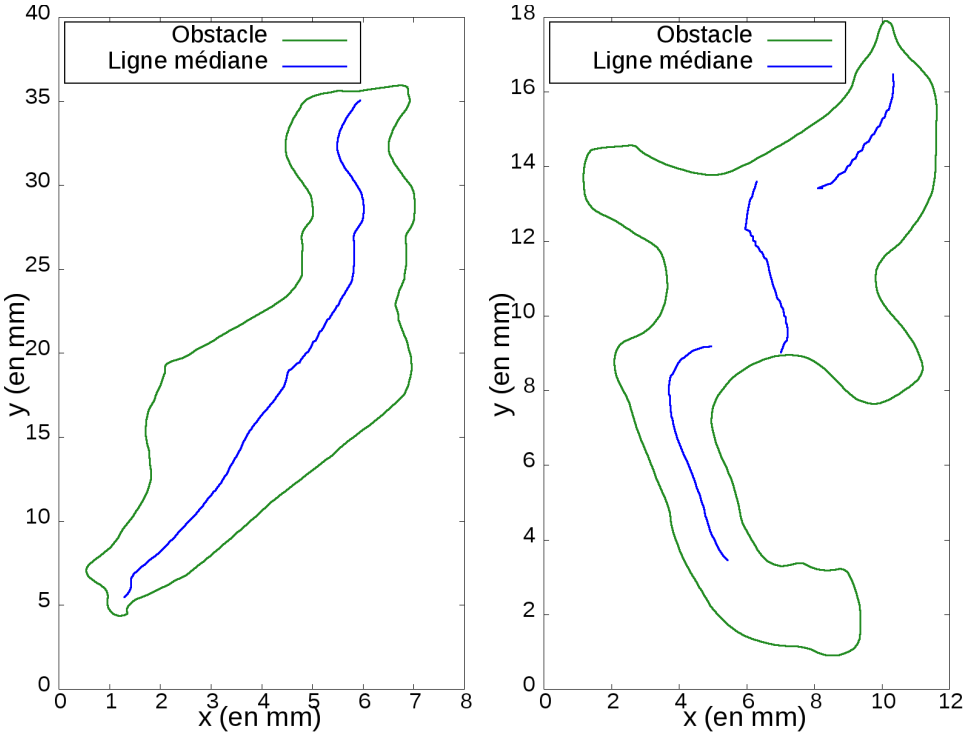
Une seconde construction du squelette a été développée basée sur les travaux de Attali (1995). Celle-ci construit le squelette d'une forme à partir de son diagramme de Voronoï, la forme étant représentée par un ensemble discret de points. Le diagramme de Voronoï d'un ensemble de points P se construit à partir des régions de Voronoï. En 2D, la région de Voronoï d'un point $\boldsymbol{P_k}$ se définit comme la surface où l'ensemble des points appartenant à cette surface sont plus proche du point $\boldsymbol{P_k}$ que de tout autre point de P. Elle se définit mathématiquement comme suit.

Définition 3. *Soit X un sous-ensemble de $\mathbb{R}^d$ et $P = \{\boldsymbol{P_1}, \boldsymbol{P_2}, ..., \boldsymbol{P_n}\} \subset X$ un ensemble de points. La région de Voronoï R_k du point $\boldsymbol{P_k}$ est définie de la manière suivante*

$$R_k = \{\boldsymbol{x} \in X \,|\, d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{P_k}) < d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{P_j}), \quad \forall j \neq k\}$$

où $d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{P_k})$ désigne la distance entre $\boldsymbol{x}$ et $\boldsymbol{P_k}$.

La figure 3.8 illustre la construction du diagramme de Voronoï d'un ensemble de 10 points. Ce diagramme se compose de deux principaux éléments, les sommets définis comme l'intersection d'au moins trois régions de Voronoï et les arêtes définies comme la frontière entre deux régions de



(a) Forme standard (b) Forme complexe

FIGURE 3.7 – Ligne médiane d'un obstacle suivant la forme de celui-ci, (a) forme standard, (b) forme complexe.

Voronoï et bornées par 2 sommets. Selon Attali (1995), le squelette peut aussi bien être fabriqué à partir des sommets que des arêtes. Dans ce travail, le squelette est construit à partir des arêtes de Voronoï car cette construction permet d'obtenir directement le squelette contrairement à celle qui le fabrique à partir des sommets qui nécessite une dernière étape d'interpolation linéaire entre les sommets conservés.

Une fois le diagramme de Voronoï construit (figure 3.9(a)), celui-ci est simplifié en deux étapes en vue d'obtenir le squelette final :

Étape 1 - On conserve uniquement les arêtes dont les sommets sont inclus dans l'obstacle (voir figure 3.9(b)).

Étape 2 - La seconde simplification est réalisée au travers de deux critères. (i) Pour tous sommets de Voronoï $\boldsymbol{s}$, on introduit la fonction $r(\boldsymbol{s})$ qui associe à $\boldsymbol{s}$ le rayon de la boule maximale inclue dans l'obstacle et centrée sur $\boldsymbol{s}$. (ii) Chaque point $\boldsymbol{s}$ possède trois projections sur l'obstacle, appelé $\boldsymbol{p_1}$, $\boldsymbol{p_2}$ et $\boldsymbol{p_3}$, le second critère est défini par $\alpha(\boldsymbol{s}) = \max(\widehat{\boldsymbol{p_1 s p_2}}, \widehat{\boldsymbol{p_1 s p_3}}, \widehat{\boldsymbol{p_2 s p_3}})$. Les bornes supérieures choisies pour ces deux critères sont respectivement 2.10^{-4} m et $\frac{\pi}{2}$. Si l'un de ces deux critères n'est pas vérifié pour l'un des sommets de l'arête, l'arête entière est supprimée du squelette (voir figure 3.9(c)).

La figure 3.10 présente une comparaison entre la ligne médiane et le squelette d'un obstacle ayant une forme standard ou une forme complexe. La figure montre bien que lorsque la configuration de l'obstacle n'est pas complexe, la ligne médiane et le squelette se superposent. En

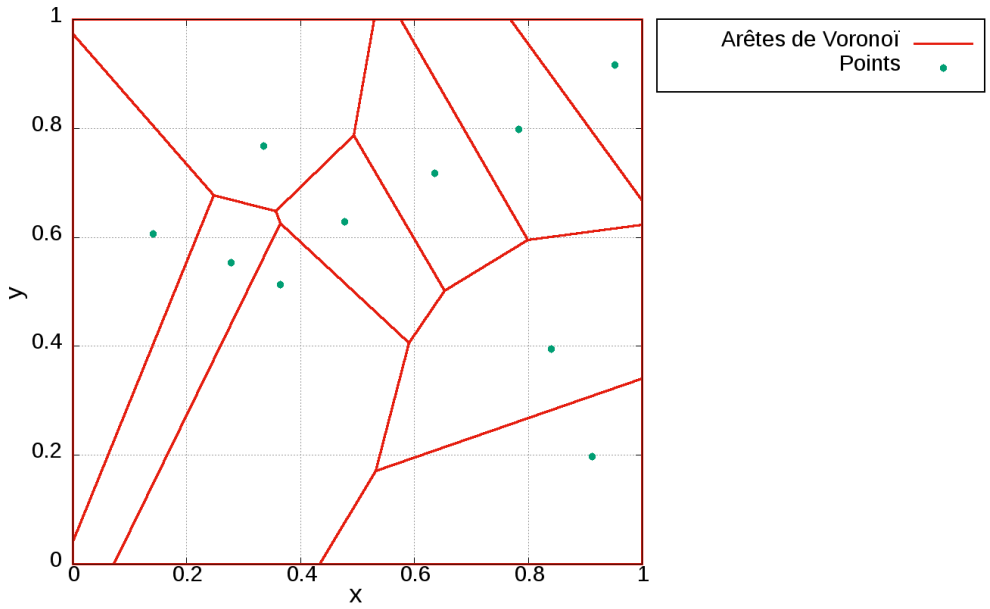
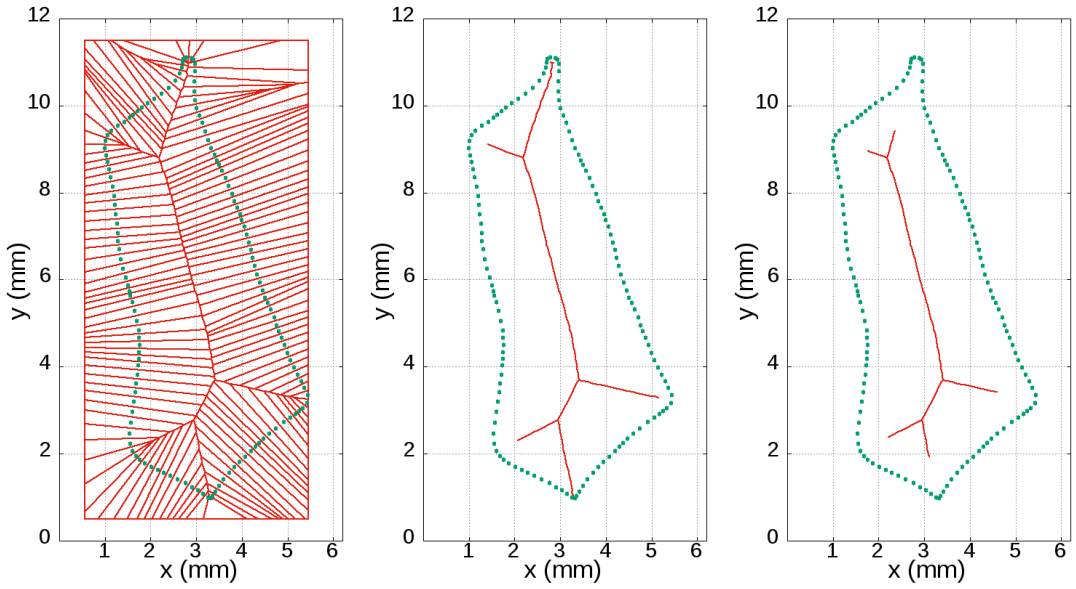


FIGURE 3.8 – Diagramme de Voronoï d'un ensemble de 10 points.



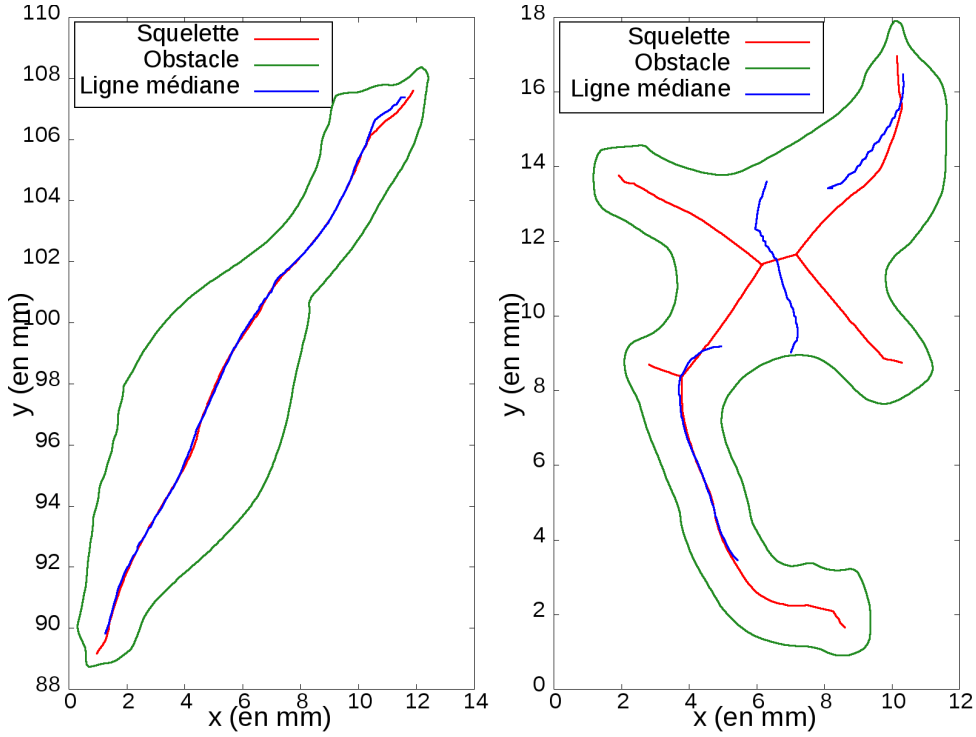
(a) Diagramme de Voronoï d'un obstacle

(b) Première simplification

(c) Seconde simplification : squelette

FIGURE 3.9 – Simplification du diagramme de Voronoï en squelette, les points verts désignent les points appartenant à l'obstacle et la courbe rouge le diagramme de Voronoï (a) et le squelette simplifié (b) et (c).

revanche, lorsque l'obstacle a une forme plus complexe, les deux constructions ne se superposent pas. La construction du squelette via le graphe de Voronoï décrit correctement la forme de l'obstacle, tandis que la construction de la ligne médiane offre une description de mauvaise qualité.



(a) Forme standard (b) Forme complexe

FIGURE 3.10 – Comparaison de la ligne médiane et du squelette d'un obstacle suivant sa forme, (a) forme standard, (b) forme complexe.

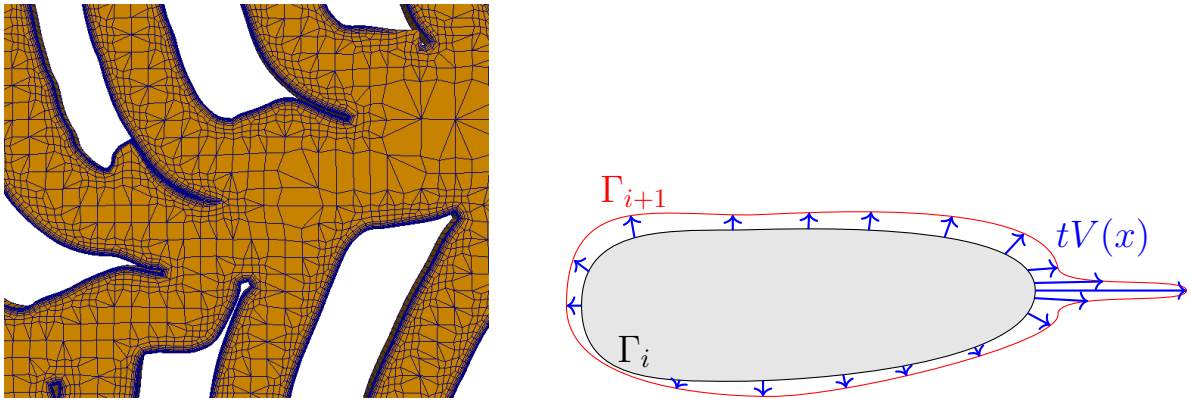
Une fois la ligne médiane ou le squelette construit, le même processus de projection est effectué. Si la distance minimale entre l'obstacle au point $\boldsymbol{x}$ et le squelette qu'on appelle $d(\boldsymbol{x})$, est plus petite que $\frac{d_{\min}^{\text{obstacle}}}{2}$ et $d(\boldsymbol{x}) > d(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{V}(\boldsymbol{x}))$, alors le vecteur $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{x})$ est projeté parallèlement au squelette (voir figure 3.6).

3.4.2 Maillage et remaillage de la forme

Comme expliqué dans le paragraphe 2.2.3, excepté pour des configurations très simples, les systèmes d'EDP gouvernants l'écoulement et le transfert de matière ne peuvent être résolus analytiquement. Dans le cas présent, OpenFOAM les résout par la méthode des volumes finis, méthode qui nécessite la génération d'un maillage. Ce maillage est généré par CFMESH, une bibliothèque open-source, puis sa qualité est améliorée à l'aide de SNAPPYHEXMESH, un mailleur fourni par OpenFOAM.

Le gradient de forme $G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}}, \lambda_{\mathcal{E}})$ est une fonction définie sur la frontière libre Γ et dépend de dérivées premières et secondes des différents états (voir équations (3.21) et (3.24)). Par conséquent, les différents états doivent être calculés avec précision au voisinage de la paroi Γ. Ainsi, 2 couches de fines mailles sont ajoutées au niveau de la frontière Γ pour le cas d'une réaction homogène. Pour le cas d'une réaction de surface, 5 couches de mailles sont ajoutées au niveau des surfaces réactives afin d'avoir une bonne modélisation du transfert de matière en proche paroi.

La figure 3.11(a) illustre la configuration que peuvent prendre les obstacles durant le processus d'optimisation du cas de la réaction de surface. Comme on peut le constater, des ''queues'' peuvent apparaître aux extrémités de certains obstacles. Leurs formations étaient attendues car elles permettent une augmentation significative de la surface réactive sans pour autant modifier le volume du réacteur. Cependant, ces très fines extrémités ne sont pas manufacturables par le procédé de stratoconception qui impose une épaisseur locale minimale au obstacle. Le traitement par projection des contraintes de fabrication ne permet pas de prévenir la formation de ces ''queues'' dont le processus est illustré par la figure 3.11(b). Le traitement de ces fines extrémités est donc effectué lors de l'étape de remaillage : lorsque les extrémités sont trop fines, elles sont rognées de l'obstacle.



(a) Configuration possible des obstacles

(b) Formation des queues

FIGURE 3.11 – Illustration de la possible configuration de certains obstacles (a), illustration du processus de formation de fines extrémités (b).

3.4.3 Vérification de la qualité du maillage

À chaque itération, la bonne qualité du maillage est vérifiée pour savoir si cette discrétisation du volume va impacter la qualité de la solution. Cette vérification est effectuée à l'aide de trois critères très souvent utilisés en CFD. Ces critères, illustrés sur la figure 3.12 sont les suivants (voir Holzinger (2015) pour plus de détails) :

- Le **rapport de forme** défini en 2D comme le rapport du côté le plus long sur le côté le plus court d'une cellule. Il s'agit du rapport $r_{\text{AR}} = \frac{l}{s}$ sur la figure 3.12.
- L'**asymétrie des faces**, autrement appelée *face skewness*, définit comme le rapport suivant : skew $= \frac{|\boldsymbol{d_i}|}{|\boldsymbol{c_i}|}$, où $|\boldsymbol{d_i}|$ est la distance entre l'intersection du segment reliant les centres de deux cellules adjacentes avec leur face commune et le centre de cette face et $|\boldsymbol{c_i}|$ la distance entre les centres des deux cellules.
- La **non-orthogonalité des faces** qui mesure l'inclinaison d'une face connectant deux cellules par rapport au segment qui relie les centres de ces cellules. Elle est représentée par l'angle $\theta = \arccos(\frac{\boldsymbol{A_i} \cdot \boldsymbol{C_i}}{|\boldsymbol{A_i}||\boldsymbol{C_i}|})$ sur la figure 3.12.

Le processus de remaillage est enclenché si les critères mentionnés ci-dessus sont respectivement supérieur à 20, 3,8 et 65°. Ces bornes maximales ont été choisies car OpenFOAM valide la qualité d'un maillage en calculant (entre autres) les valeurs maximales de l'asymétrie et de la

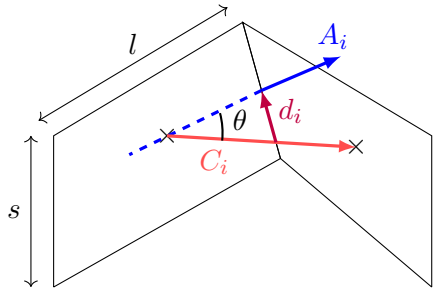


FIGURE 3.12 – Illustration des critères de qualité du maillage

non-orthogonalité des faces du maillage. Si ces valeurs sont respectivement supérieures à 4 et 70°, la qualité du maillage n'est pas validée. Des valeurs légèrement inférieures ont été choisies afin de s'assurer de ne pas dépasser les valeurs maximales définies par OpenFOAM après chaque déplacement du maillage. Le choix de la borne supérieure pour le rapport de forme est fait par retour d'expérience. Les maillages initiaux des réacteurs ont des facteurs de forme maximaux compris entre 8 et 15 selon le cas, la borne supérieure de 20 pour ce critère a donc été fixée. Cependant, ce choix n'est pas critique car la majorité des lancements du processus de remaillage est due à une violation des critères sur l'asymétrie et la non-orthogonalité des faces.

3.4.4 Résolution des systèmes d'équations aux dérivés partielles

De la même manière que dans le chapitre précédent, les couplages pression-vitesse présents dans les équations de Navier-Stokes (2.22) et dans son état adjoint associé (3.22) sont traités numériquement par un algorithme SIMPLE (Patankar, 1980).

Les conditions de sortie des états adjoints ((3.22d), (3.23d) et (3.25c)) ne sont pas des conditions aux limites usuelles. Il faut donc les implémenter sous OpenFOAM. La condition de sortie de l'état adjoint ($\boldsymbol{U_a}$, p_a) est la même que dans le chapitre précédent, l'implémentation reste donc la même. En revanche, une nouvelle condition aux limites a été développée pour calculer l'état adjoint C_a. Elle repose sur l'approximation suivante :

$$\nabla C_a \cdot \boldsymbol{n} \simeq \frac{C_a^{\text{patch}} - C_a^{\text{intern}}}{\delta} \tag{3.26}$$

où C_a^{patch} et C_a^{intern} désignent respectivement la valeur de la concentration adjointe sur la frontière et celle dans la cellule adjacente à la frontière, et δ représente la distance entre la frontière et le centre de la cellule adjacente. Tout calcul fait, la condition aux limites (3.23d) et (3.25c) se réécrit selon la relation suivante :

$$C_a^{\text{patch}} \simeq \frac{\mathcal{D}\delta^{-1} C_a^{\text{intern}} + K_{BC}}{\mathcal{D}\delta^{-1} + (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})} \tag{3.27}$$

Le code associé et implémenté sous OpenFOAM est présenté sur la figure 3.13.

3.4.5 Autres explications

L'algorithme d'optimisation développé dans ces travaux repose sur la méthode d'Uzawa. Celle-ci consiste à déterminer, à chaque itération, la direction de descente tout en considérant

```
//Valeurs des champs scalaires/vectoriels sur la frontière
    const fvPatchField<vector>& Up = patch().lookupPatchField<volVectorField,
    vector>("U");
    const fvPatchField<scalar>& adjConcp = patch().lookupPatchField<volScalarField
    , scalar>("adjConc");

//Valeurs des constantes lu dans le fichier "transportProperties"
    const dictionary& transportProperties = db().lookupObject<IOdictionary>
    (
        "transportProperties"
    );
    scalar Diff(readScalar(transportProperties.lookup("DiffBC")));
    scalar corrBCBC(readScalar(transportProperties.lookup("corrBCBC")));

//Composante normale de la vitesse au niveau de la frontière
    scalarField Up_n = (Up & patch().nf());

//Inverse de la distance entre la frontière et le centre de la cellule adjacente
    const scalarField& deltainv = patch().deltaCoeffs();

//Valeur de la concentration dans la cellule adjacente
    scalarField adjConcnei = adjConcp.patchInternalField();

//Condition de sortie
operator==((corrBCBC+Diff*deltainv*adjConcnei)/(Up_n+Diff*deltainv));
```

FIGURE 3.13 – Condition de sortie de l'état adjoint C_a.

les multiplicateurs de Lagrange $\lambda_{\mathcal{V}}$ et $\lambda_{\mathcal{E}}$ constants. Ces multiplicateurs sont ensuite mis à jour suivant les valeurs des fonctions contraintes qui leurs sont associées. Dans le cas présent, ils sont mis à jour à l'aide des relations suivantes :

$$\lambda_{\mathcal{V}}^{k+1} = \lambda_{\mathcal{V}}^{k} + \beta_{\mathcal{V}} C_{\mathcal{V}}(\Omega) \tag{3.28}$$

$$\lambda_{\mathcal{E}}^{k+1} = \max\left(0, \lambda_{\mathcal{E}}^{k} + \beta_{\mathcal{E}} C_{\mathcal{E}}(\Omega)\right) \tag{3.29}$$

où $\beta_{\mathcal{V}}$ et $\beta_{\mathcal{E}}$ sont des petits paramètres positifs. Ils doivent être choisis ni trop grands car les simulations risquent de diverger, ni trop petits car cela ralentirait la convergence. Les relations (3.28) et (3.29) n'ont pas la même formulation car la contrainte sur le volume est une contrainte d'égalité tandis que la contrainte sur l'énergie est une contrainte d'inégalité (voir la condition de non-négativité de Karush-Kuhn-Tucker (Karush, 2014; Kuhn et Tucker, 2014)). Cela explique pourquoi $\lambda_{\mathcal{V}}$ peut prendre des valeurs négatives tandis que $\lambda_{\mathcal{E}}$ ne peut pas.

Pour finir, le critère de convergence a été modifié dans cette extension. Ici, le critère de convergence est défini comme le rapport entre l'écart type et la moyenne des 100 dernières valeurs prises par le lagrangien. Si ce rapport est inférieur à 10^{-4}, la convergence est considérée comme atteinte. Ce nouveau critère est plus pertinent dans ce cadre car il permet de vérifier directement si le lagrangien continue d'être amélioré ou non au fil des itérations. Choisir un critère de convergence sur le déplacement $\boldsymbol{V}$ comme dans le chapitre précédent ne serait pas pertinent dans cet algorithme car ce critère serait faussé par le traitement des contraintes de fabrication qui modifie $\boldsymbol{V}$.

3.5 Résultats numériques et discussions

Cette section est consacrée à la présentation des résultats numériques obtenus en implémentant l'algorithme décrit dans la section précédente. La présente section est séparée en deux sous sections, la première présentant les résultats associés à l'optimisation du réacteur siège de la réaction homogène et la seconde pour l'optimisation du réacteur où la réaction de surface a lieu. Les paramètres de simulation utilisés dans les deux cas considérés sont regroupés dans le tableau 3.1.

Tableau 3.1 – Paramètres de simulation.

Paramètres	Valeur		Unités	Équations impliquées
	Cas RH	Cas RS		
ν	10^{-6}	10^{-6}	$m^2.s^{-1}$	(2.22a), (3.22a), (3.21) et (3.24)
U_{in}	10^{-2}	10^{-2}	$m.s^{-1}$	(2.22c)
$\mathcal{D}$	10^{-9}	10^{-9}	$m^2.s^{-1}$	(3.4a) et (3.7a)
k_{sim}	10^{-2}	10^{-2}	s^{-1}	(3.4a)
K_{crit}	3.10^{-5}	3.10^{-5}	$m^6.s^{-3}.mol^{-1}$	(3.11), (3.21), (3.24) et (3.22a)
γ	10^{-4}	10^{-4}	m^{-2}	(3.20a) et (3.20c)
K_{BC}	3.10^{-3}	3.10^{-3}	$mol.m^{-2}.s^{-1}$	(3.21), (3.24) et (3.22d)
t	20	5.10^{-2}	-	(3.13)
$\beta_{\mathcal{V}}$	5.10^{-3}	2	-	(3.28)
$\beta_{\mathcal{E}}$	2.10^{2}	5.10^{4}	-	(3.29)
$\lambda^0_{\mathcal{V}}$	3.10^{-8}	0	-	(3.28), (3.21) et (3.24)
$\lambda^0_{\mathcal{E}}$	0	0,5	-	(3.29), (3.21) et (3.24)

3.5.1 Résultats numériques de l'optimisation du réacteur siège de la réaction homogène

Les figures 3.14(a) et 3.14(b) présentent respectivement les profils de concentration dans les configurations initiale et optimale (sans considérer les contraintes de fabrication) du réacteur à lit fixe. Comme on peut le voir, une zone morte est présente au niveau de l'entrée de la configuration initiale du réacteur (en clair sur la figure 3.14(a)). Cette zone morte est une région du réacteur où la concentration en réactif est faible, ce qui entraîne de faibles vitesses de réaction dans cette région (la vitesse de réaction étant proportionnel à la concentration en réactif $r_{\text{sim}} = k_{\text{sim}}C$). Par conséquent, ce volume mort du réacteur est pratiquement inutile pour la conversion, volume mort qui a disparu dans la configuration optimale du réacteur.

Cependant, cette première configuration optimale du réacteur n'est pas directement utilisable dans la pratique. En effet, le procédé de stratoconception utilisé pour la fabrication du réacteur impose des largeurs minimales aux canaux et aux obstacles. Une nouvelle optimisation du réacteur a donc été effectuée en considérant ces contraintes d'épaisseur. Dans ce cadre, l'algorithme fabriquant la ligne médiane de l'obstacle a été utilisé pour le traitement de la contrainte d'épaisseur sur les obstacles. En effet, l'algorithme construisant le squelette à partir des diagrammes de Voronoï n'avait pas encore été implémenté dans la méthode d'optimisation de forme. La faible robustesse de l'algorithme générant la ligne médiane n'est ici pas critique car les obstacles ne

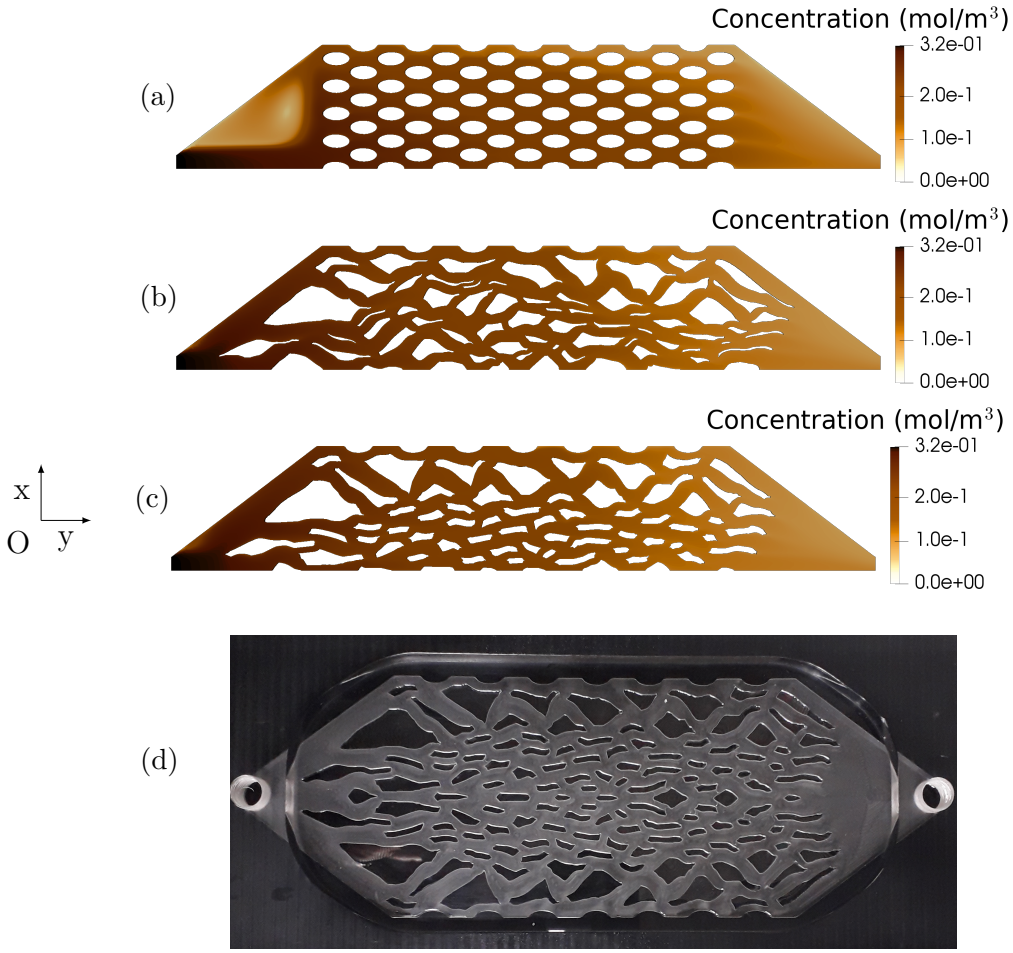


FIGURE 3.14 – Cas de la réaction homogène, configuration initiale du réacteur à lit fixe (a), forme optimale sans considérer les contraintes de fabrication (b), forme optimale en considérant les contraintes de fabrication (c), réacteur optimal fabriqué par impression 3D.

présentent pas de configurations complexes au cours du processus d'optimisation. Les configurations des obstacles étaient suffisamment régulières pour ne pas avoir besoin d'un algorithme plus sophistiqué.

La figure 3.14(c) illustre le résultat de cette nouvelle optimisation. Similairement à ce qui a été observé lors de l'optimisation précédente, la zone morte présente dans la configuration initiale a disparu et les formes que présentent les obstacles et les canaux dans le réacteur permettent la fabrication de celui-ci. Le réacteur fabriqué est montré sur la figure 3.14(d). Dans le cas présent, l'ajout des contraintes de fabrication dans le problème rend l'optimisation légèrement plus difficile puisque 200 itérations supplémentaires sont nécessaires pour atteindre la convergence.

La figure 3.15 présente l'historique de convergence du processus d'optimisation. Comme on peut le constater, les contraintes sur l'énergie et sur le volume sont toutes deux satisfaites à convergence et il est intéressant de noter que la contrainte d'inégalité sur l'énergie dissipée par le fluide est active. Il peut donc être intéressant d'augmenter la borne maximale relative à cette contrainte dans l'optique d'obtenir une potentielle meilleure conversion. Ce point sera discuté dans le chapitre 4 qui traite de l'optimisation multi-critère des deux cas étudiés. La

courbe associée à la contrainte sur l'énergie présente du bruit qui est dû à l'étape de remaillage. En effet, la dissipation d'énergie étant fonction des gradients de vitesse dans le domaine, la contrainte sur l'énergie est sensible à l'étape de remaillage. Cependant, cette sensibilité est négligeable. Pour limiter ce bruit présent sur la courbe (d), il aurait fallu mailler plus finement la forme, mais cela ce serait fait en débit du temps de calcul. La figure 3.15 montre également une diminution de presque 10% de la concentration moyenne en réactif à la sortie du lit fixe ce qui amène une amélioration du taux de conversion de la réaction de 2,7% (71,5% contre 74,2%). L'amélioration des performances du réacteur s'explique par deux raisons principales. La première est la disparition de la zone morte et le seconde concerne la meilleure homogénéité de l'écoulement de la phase fluide dans le réacteur. En effet, cette meilleure homogénéité s'illustre de deux manières :

1. La figure 3.14 montre que le gradient de concentration dans la direction x est plus faible dans la configuration optimale que dans la forme initiale.
2. La figure 3.16 présente la distribution des temps de séjour dans les configurations initiale et optimale. Les deux courbes montrent la meilleure homogénéité de l'écoulement fluide dans la configuration optimale où l'écart type de la distribution est 3,5 fois plus petit (21 vs 73 s).

La vérification de l'hypothèse sur l'écoulement laminaire dans le réacteur est effectué par le calcul du nombre de Reynolds dans les canaux du réacteur. Ici, le nombre de Reynolds de particules n'aurait aucune signification car les obstacles n'ont pas tous les mêmes dimensions. Le nombre de Reynolds pour les canaux s'exprime par l'équation suivante :

$$\mathrm{Re_c} = \frac{ud}{\nu} \tag{3.30}$$

où u est la norme de la vitesse moyenne s'écoulant de le canal, d la largeur du canal et ν la viscosité cinématique du fluide. Tous calculs faits, on s'aperçoit que le nombre de Reynolds $\mathrm{Re_c}$ n'excède pas 16 dans le réacteur, ce qui valide l'hypothèse d'un écoulement laminaire.

Finalement, l'influence de la configuration initiale du réacteur sur sa forme optimale a été analysée afin de vérifier la présence d'optima locaux dans le cas présent. La figure 3.17 présente les résultats numériques en commençant le processus d'optimisation d'une configuration du garnissage légèrement perturbée : (a) les obstacles initiaux sont agrandis (demi-axes augmentés de 0,5 mm), (b) les obstacles initiaux sont rétrécis (demi-axes diminués de 0,5 mm), (c) le garnissage est décalé de 3 mm vers l'entrée et (d) le garnissage est décalé de 3 mm vers la sortie. Les formes optimales obtenues sont légèrement différentes entre elles, ce qui montre la présence d'optima locaux dans ce problème d'optimisation. Cependant, l'ensemble de ses optima locaux sont au même niveau de performance, la fonction objectif est améliorée dans les mêmes proportions (entre 9,7 et 9,8 %).

3.5.2 Résultats numériques de l'optimisation du réacteur siège de la réaction de surface

Cette sous section est consacrée à la présentation des résultats numériques issus de l'optimisation géométrique du réacteur à lit fixe siège d'une réaction hétérogène limitée par le transfert de matière externe. Dans ce cadre, la génération du squelette, pour le traitement de la contrainte d'épaisseur sur les obstacles, est effectuée à l'aide des graphes de Voronoï car les obstacles sont susceptibles de se présenter sous des formes complexes.

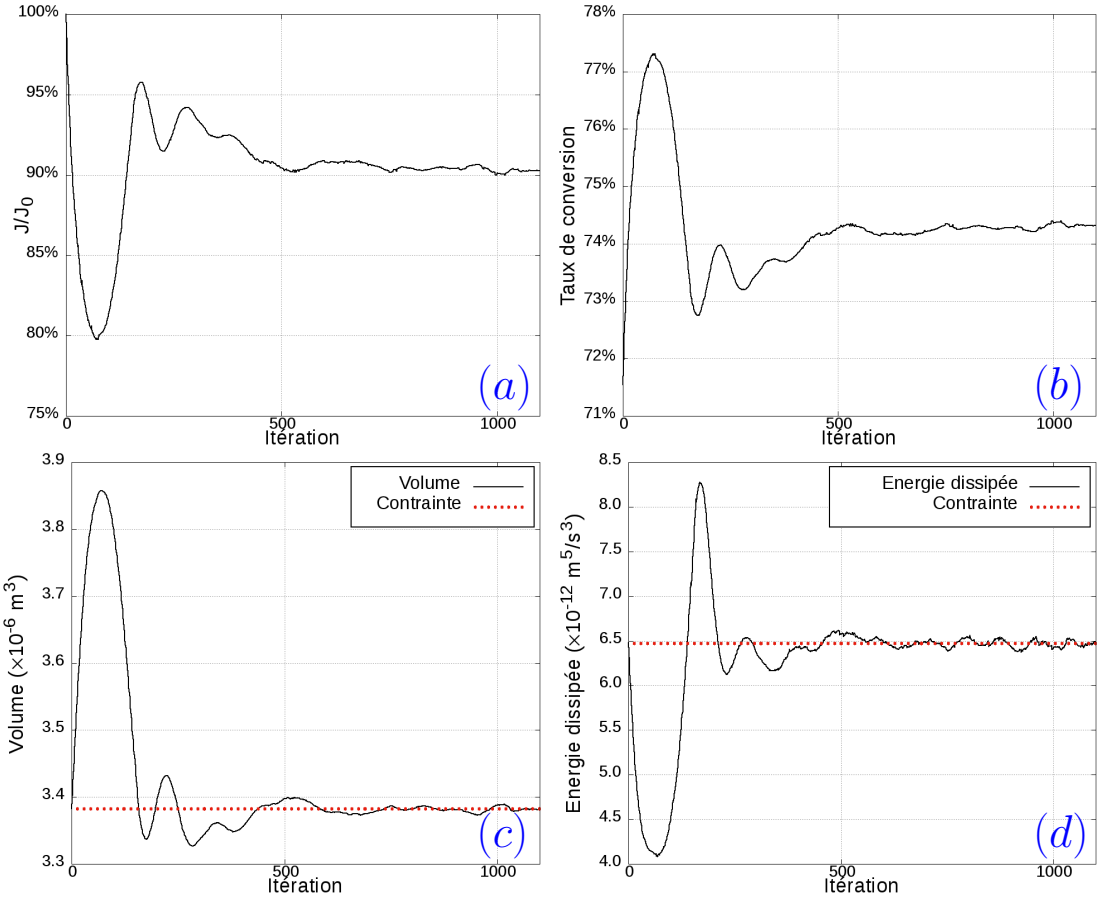


FIGURE 3.15 – Performances du processus d'optimisation, (a) représente le rapport $\frac{J}{J_0}$, (b) le taux de conversion, (c) la contrainte sur le volume, (d) la contrainte sur l'énergie.

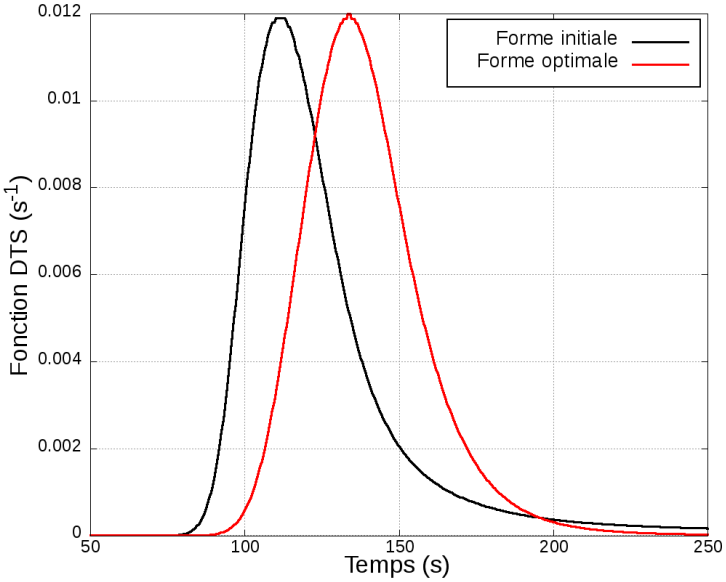


FIGURE 3.16 – Distribution des temps de séjour dans les réacteurs initial et optimal.

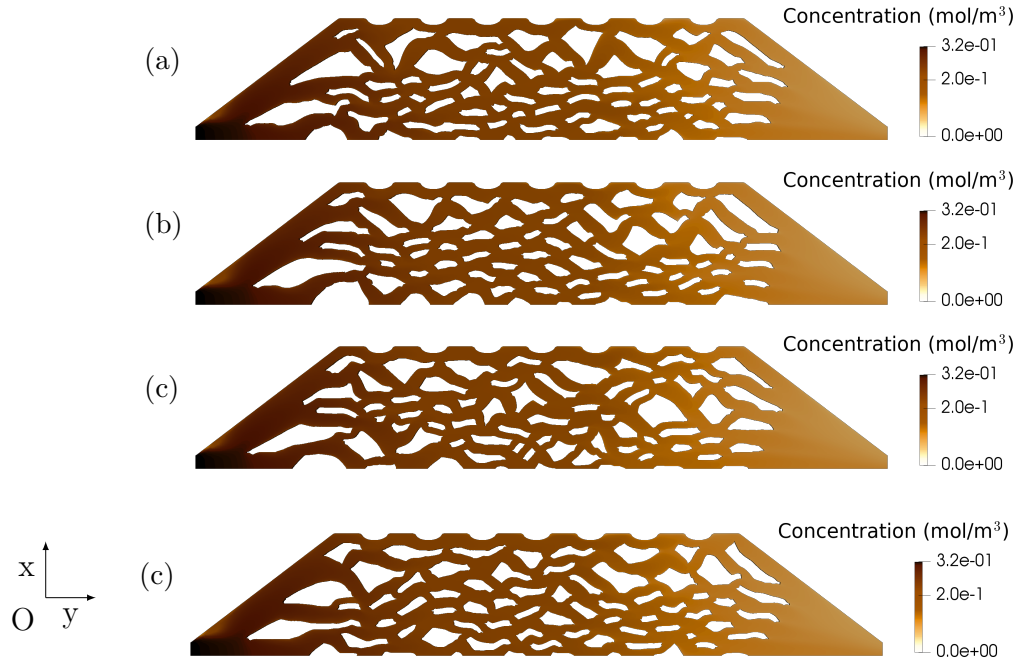


FIGURE 3.17 – Formes optimales du réacteur en commençant le processus d'optimisation d'une configuration du garnissage légèrement perturbée : (a) les obstacles initiaux sont agrandis (demi-axes augmentés de 0,5 mm), (b) les obstacles initiaux sont rétrécis (demi-axes diminués de 0,5 mm), (c) le garnissage est décalé de 3 mm vers l'entrée et (d) le garnissage est décalé de 3 mm vers la sortie.

La figure 3.18 présente les résultats numériques de l'optimisation du lit fixe. Plus précisément, les figures 3.18(a) et 3.18(b) illustrent respectivement les profils de concentration dans les configurations initiale et optimale (sous contrainte d'iso-énergie) du réacteur. L'optimisation du réacteur permet ici une diminution de la fonction objectif de presque 6% qui se traduit par une amélioration de 4,7% de la conversion en sortie de réacteur (19,6% contre 24,3%). L'amélioration des performances du réacteur s'explique principalement par une augmentation de 50% de la surface réactive. Cependant, la configuration 3.18(b) du réacteur présente une mauvaise homogénéité dans l'écoulement de fluide. En effet, la forte augmentation de la surface des parois mène à une augmentation des pertes de charges et de l'énergie dissipée car les gradients de vitesse sont plus élevés en proche paroi. Ainsi, le réacteur présente un court circuit en son centre (proche de l'axe de symétrie) afin de satisfaire la contrainte. La figure 3.19 présente la distribution des temps de séjour des réacteurs optimisés. La courbe associée à l'optimisation sous contrainte d'iso-énergie présente deux pics dont le premier est associé au court circuit.

Le réacteur a été optimisé à deux nouvelles reprises en augmentant la valeur maximale permise pour l'énergie dissipée d'un facteur 1,4 puis en supprimant cette contrainte. Les configurations optimales associées et leurs profils de concentration sont respectivement présentés dans les figures 3.18(c) et 3.18(d). Comme on peut le voir sur la figure 3.18, plus on augmente la valeur limite associée à la contrainte $C_{\mathcal{E}}$, plus l'écoulement de fluide devient homogène et plus le court circuit présent dans le réacteur perd de l'importance. Cette meilleure homogénéité et la disparition du court circuit conduisent à une amélioration des performances des réacteurs optimaux. En effet, la fonction objectif a diminué de 8% et de 20% pour les configurations 3.18(c) et 3.18(d), ce

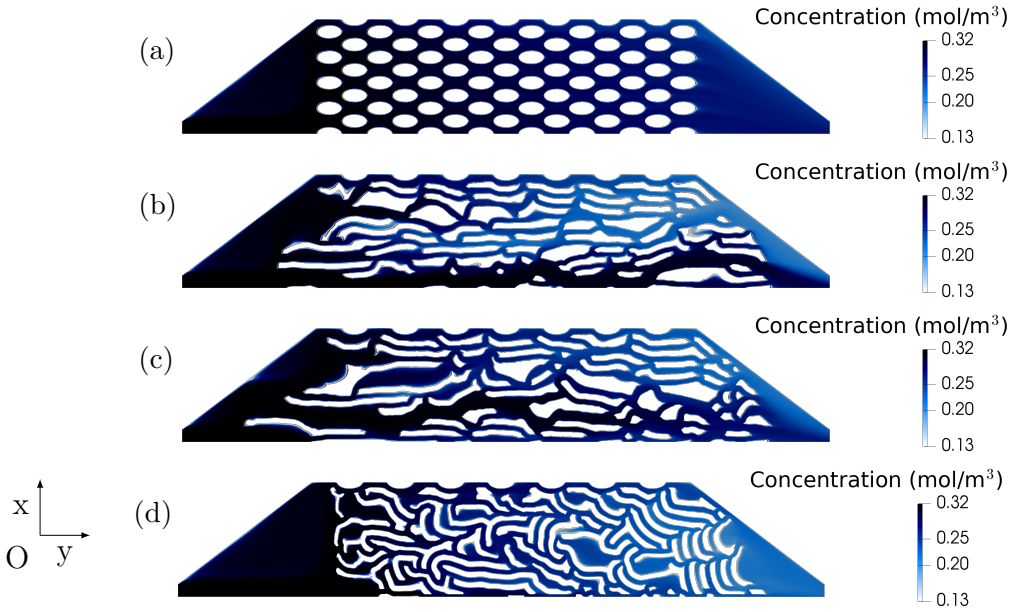


FIGURE 3.18 – Cas de la réaction surfacique, configuration initiale du réacteur à lit fixe (a), forme optimale sous contrainte d'iso-énergie (b), forme optimale sous une contrainte 1,4 fois plus élevée que la perte d'énergie initiale (c), sans contrainte sur l'énergie (d).

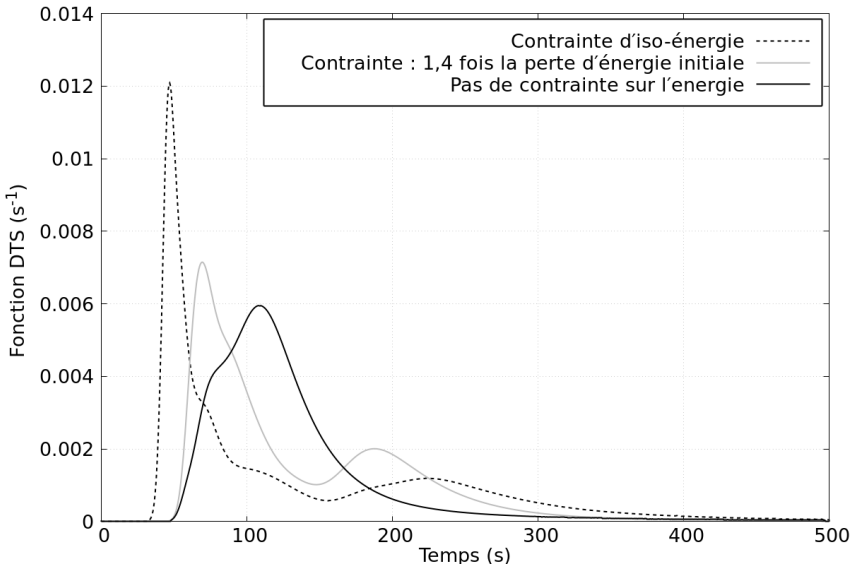


FIGURE 3.19 – Distribution des temps de séjour des réacteurs optimisés.

qui améliore la conversion du réacteur de 6,4% et de 16% respectivement. La figure 3.19 montre la diminution du court circuit lorsque l'on augmente la valeur associé à la contrainte $C_{\mathcal{E}}$. En effet, le pic associé au court circuit est moins élevé pour la configuration 3.18(c) et a disparu pour la configuration 3.18(d).

Pour les trois réacteurs optimaux, les nombres de Reynolds de conduite ont été calculés, ceux-ci n'excèdent pas 67, 48 et 17 respectivement pour les formes 3.18(b), 3.18(c) et 3.18(d), ce qui valide l'hypothèse effectuée sur le régime de l'écoulement.

3.6 Conclusions

L'approche d'optimisation géométrique présentée dans le chapitre précédent a été améliorée et étendue aux phénomènes de transfert de matière. L'algorithme résultant de cette extension a été testé sur deux réacteurs à lit fixe, l'un siège d'une réaction homogène d'ordre 1, l'autre d'une réaction surfacique limitée par le transfert externe. Dans chacun des cas, l'optimisation de la forme du garnissage interne Γ a été réalisée afin de minimiser la concentration moyenne de réactif à la sortie du réacteur sous contrainte d'iso-volume, imposant une valeur maximale sur l'énergie dissipée et de fabrication. La configuration optimale du garnissage permet un gain non négligeable sur le taux de conversion, c'est-à-dire, de 2,7% pour une réaction homogène et de 4,7% pour l'autre cas (sous contrainte d'iso-énergie). Il est à noter que dans chacun des cas, la contrainte sur l'énergie est active. Il peut donc être intéressant d'effectuer une optimisation multi-objectif de ces réacteurs à lit fixe en minimisant simultanément la dissipation d'énergie et la concentration moyenne de réactif à la sortie du réacteur. Le chapitre suivant y est dédié.

L'algorithme d'optimisation développé présente certaines limites qui doivent être étudiées en détail. La première concerne le traitement des contraintes d'épaisseur, ce traitement est peu robuste et souffre d'une trop grande rigidité. En effet, il ne permet pas la violation de ces contraintes au cours du processus d'optimisation au contraire d'une contrainte directement inclue dans le lagrangien. Sur ce point, il peut être intéressant de s'inspirer des travaux de Allaire et al. (2016) pour améliorer la robustesse du traitement des contraintes de fabrication. Une deuxième limite de l'algorithme concerne le temps de calcul que prend l'optimisation d'un réacteur. Une optimisation dure entre 3 et 7 jours (simulations effectuées sur un ordinateur avec un processeur Xeon 3,7GHz) selon le cas considéré. Ce temps de calcul dépend principalement du nombre de cellules dans le maillage, nombre plus grand dans le cas RS que dans le cas RH (voir section 3.4.2). Par conséquent, l'optimisation du cas RS met approximativement 7 jours à converger tandis que celle du cas RH met 3 jours. Dans le cas présent, le calcul parallèle ne réduirait pas significativement le temps que prend une optimisation car l'approche développée est une méthode itérative et le nombre de mailles dans le maillage est compris entre 50000 et 120000. En revanche, ce temps de calcul pourrait être diminué en limitant le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence, et donc le nombre de résolutions CFD, en utilisant un algorithme de gradient à pas optimal. Le temps de calcul pour s'avérer être une étape très limitante lors de la détermination du front de Pareto dans le chapitre qui suivra. La dernière limite concerne la famille d'optimisation de forme utilisée dans le cadre de ces travaux. En effet, l'optimisation géométrique ne permet aucun changement de topologie qui pourrait s'avérer pertinent dans le cas présent.

Chapitre 4

Optimisation multicritère de réacteurs à lit fixe

Sommaire

4.1 Introduction 86
4.2 Revue bibliographique 86
4.2.1 Optimisation multicritère 86
4.2.1.1 Approches basées sur le concept de dominance au sens de Pareto 87
4.2.1.2 Approches scalaires 89
4.2.1.3 Autres approches 92
4.2.2 Algorithme d'aide à la décision multicritère 94
4.2.2.1 Les méthodes d'agrégation complète 95
4.2.2.2 Les méthodes de surclassement 96
4.2.3 Choix de la méthode d'optimisation multicritère 99
4.3 Formulation du problème d'optimisation 99
4.4 Détermination des fronts de Pareto 101
4.4.1 Optimisation multicritère du cas RH 101
4.4.2 Optimisation multicritère du cas RS 104
4.5 Aide à la décision multicritère : méthode MAUT 105
4.5.1 Choix de la meilleure forme à mettre en œuvre pour le cas RH 108
4.5.2 Choix de la meilleure forme à mettre en œuvre pour le cas RS 108
4.6 Conclusions 110

4.1 Introduction

Dans l'industrie, il est rare que l'ingénieur en génie des procédés soit face à un problème d'optimisation monocritère. Bien souvent, il est amené à optimiser simultanément un ensemble de fonctions objectif. Lorsque celles-ci sont antagonistes, il n'existe plus une unique solution optimale au problème mais un ensemble de solutions optimales, appelées solutions de Pareto. L'ingénieur choisira la ''meilleure'' solution du front de Pareto en effectuant un compromis entre les différentes fonctions objectif dont l'importance sera évaluée.

Ce chapitre présente une revue bibliographique des méthodes d'optimisation multicritère recensées dans la littérature, ainsi que les algorithmes d'aide à la décision existants pour le choix de la solution optimale (section 4.2). Ensuite, l'optimisation multicritère des réacteurs à lit fixe étudiés dans le chapitre précédent a été effectuée en considérant les critères suivants : (i) concentration moyenne en réactif à la sortie, (ii) dissipation d'énergie dans le fluide. L'approche de pondération linéaire des fonctions objectif est utilisée pour déterminer les fronts de Pareto associés aux problèmes d'optimisation de forme considérés. Pour finir, le choix de la meilleure forme optimale pour chacun des cas a été effectué à l'aide d'un algorithme d'aide à la décision.

4.2 Revue bibliographique

4.2.1 Optimisation multicritère

L'optimisation multicritère a été introduite par Edgeworth en 1881 dans ses travaux en économie (Edgeworth, 1881), puis développée par Pareto à la fin du XIXième siècle. Il s'agit d'une discipline très importante dans le domaine de l'optimisation de procédés. En effet, la considération de plusieurs fonctions coûts antagonistes est fréquente industriellement, c'est-à-dire que l'amélioration d'une fonction coût impliquera la détérioration d'une autre. On peut citer entre autres les critères de pertes de charge et de transfert d'énergie thermique pour un échangeur de chaleur ou plus généralement le coût de fonctionnement d'un procédé et ses performances.

Dans la littérature, on peut recenser un grand nombre de méthodes d'optimisation multicritère que l'on peut classer en trois principales familles (Collette et Siarry, 2011). Cette classification s'effectue suivant l'instant où le compromis entre les différentes fonctions objectif est choisi par le décideur. Ces trois familles sont les suivantes :

- Les méthodes *a priori* où le choix du compromis est effectué avant le processus d'optimisation. Ces méthodes présentent l'avantage de ne calculer qu'une unique solution optimale réduisant ainsi le temps de calcul. Cependant, si le compromis choisi par l'utilisateur s'avère éloigné de la solution souhaitée, le processus d'optimisation doit être réitéré en totalité. Ces méthodes présentent d'autres inconvénients tels que la difficulté potentielle de la prise en compte du compromis dans le problème d'optimisation.
- Les méthodes *interactives* où le compromis s'effectue en même temps que le processus d'optimisation. Ces méthodes ont le principal inconvénient de retenir l'attention de l'utilisateur durant une grande partie du processus.
- Les méthodes *a posteriori* établissent dans un premier temps un ensemble de solutions optimales, puis l'utilisateur choisit la solution qu'il juge la plus adéquate. Ce choix est

généralement fait à l'aide d'algorithmes d'aide à la décision. La modélisation du compromis n'étant pas utile dans ce cas, la phase de formulation du problème d'optimisation est facilitée. Le principal inconvénient de ces méthodes est lié au temps nécessaire à la détermination du front de Pareto.

Dans cette section, différentes méthodes d'optimisation multicritère recensées dans la littérature sont présentées.

Un problème d'optimisation multicritère se définit sous la forme ($\mathscr{P}_{4.1}$).

$$\min_{\boldsymbol{X}\in\mathscr{C}} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{X}) = \Big(f_1(\boldsymbol{X}), f_2(\boldsymbol{X}), \ldots, f_n(\boldsymbol{X})\Big)^T \qquad (\mathscr{P}_{4.1})$$

où $n \geqslant 2$ est le nombre de fonctions objectif considérées, $\boldsymbol{X}$ le vecteur des variables de décision, $\boldsymbol{f}$ l'ensemble des fonctions objectif considérées et $\mathscr{C}$ représente l'ensemble des valeurs de $\boldsymbol{X}$ respectant les contraintes. Cette définition permettra d'illustrer les approches multicritères présentées dans la suite de la section.

Une fois le problème d'optimisation multicritère défini, il peut se résoudre suivant un certain nombre d'approches que l'on peut classer en trois grandes familles, les approches scalaires qui consistent en la transformation du problème multicritère en un problème monocritère, les approches de Pareto et les autres approches.

4.2.1.1 Approches basées sur le concept de dominance au sens de Pareto

À la fin du XIXième siècle, Vilfredo Pareto définit la notion suivante (Pareto, 1896) : ''*dans un problème multicritère, il existe un équilibre tel que l'on ne peut pas améliorer un critère sans détériorer au moins un des autres critères*''. Cette notion nous permet ainsi de définir un nouveau concept, le concept de dominance au sens de Pareto. Contrairement aux approches scalaires, les approches de Pareto ne sont pas basées sur la transformation du problème en un problème monocritère, mais sur le concept de dominance au sens de Pareto (Goldberg, 1989), les fonctions objectif étant considérées sans distinction.

Dominance au sens de Pareto

La notion de dominance au sens de Pareto consiste à comparer deux points de l'espace des solutions. La définition mathématique de cette dominance est la suivante.

Définition 4. *Soit $\boldsymbol{X_1} \in \mathscr{C}$ et $\boldsymbol{X_2} \in \mathscr{C}$. La solution $\boldsymbol{X_1}$ domine $\boldsymbol{X_2}$ au sens de Pareto si et seulement si $\forall\, i \in [1,n]$, $f_i(\boldsymbol{X_1}) \leqslant f_i(\boldsymbol{X_2})$ et $\exists\, i \in [1,n]$, $f_i(\boldsymbol{X_1}) < f_i(\boldsymbol{X_2})$.*

La figure 4.1 illustre cette notion de dominance :

- Le point $\boldsymbol{A}$ domine les points $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{C}$ et $\boldsymbol{D}$.
- Les points $\boldsymbol{B}$ et $\boldsymbol{C}$ sont dits indifférents entre eux et dominent uniquement le point $\boldsymbol{D}$.
- Le point $\boldsymbol{D}$ est dominé par les trois autres points.

On définit ensuite les solutions non dominées comme optimales et l'ensemble de celles-ci est appelé front de Pareto.

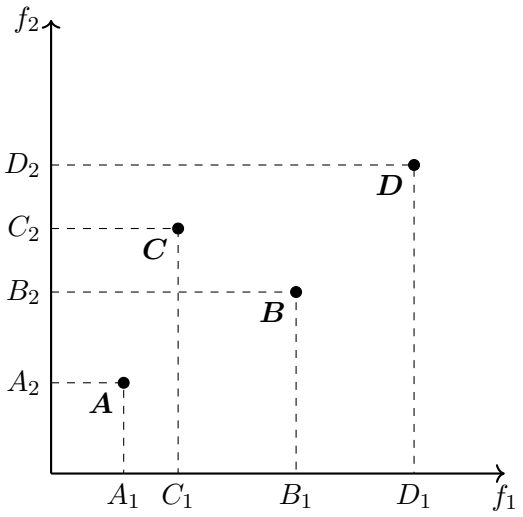


FIGURE 4.1 – Illustration graphique 2D de la notion de dominance au sens de Pareto.

Il existe un grand nombre d'approches basées sur le concept de dominance au sens de Pareto. On peut citer entre autres les méthodes MOGA (Multiple Objectives Genetic Algorithm), NSGA (Non dominated Sorting Genetic Algorithm), NPGA (Niched Pareto Genetic Algorithm), WARGA (Weighted Average Ranking Genetic Algorithm) ou SPEA (Strength Pareto Evolutionary Algorithm). Cette revue bibliographique ne détaille que l'approche MOGA, les autres approches n'étant que des extensions et améliorations de cette dernière. Le lecteur est invité à se référer à Collette et Siarry (2011) pour plus de précisions quant à ces approches.

Méthode MOGA (Multiple Objectives Genetic Algorithm)

L'approche MOGA, proposée par Fonseca et Fleming (1993), est une méthode stochastique basée sur le concept de dominance au sens de Pareto. Celle-ci introduit une population de N individus et définit une fonction appelée rang de l'individu permettant de classer les individus suivant le nombre d'autres individus qui le dominent. À chaque itération i, le rang d'un individu X_j est exprimé suivant la relation (4.1).

$$\text{rang}(X_j, i) = 1 + n_{j,i}^{\text{d}} \tag{4.1}$$

où X_j est l'individu dont le rang est calculé, et $n_{j,i}^{\text{d}}$ représente le nombre d'individus qui dominentX_j.

À cette fonction rang, on associe une fonction performance. Bien souvent, cette fonction est choisie linéaire et décroissante par rapport au rang de l'individu. Pour finir, un algorithme génétique (sélection en fonction de la fonction performance, recombinaison et mutation) est appliqué à la population permettant la définition de la population pour l'itération suivante.

Dans certaines configurations, l'approche MOGA ne permet pas une répartition des solutions sur l'ensemble du front de Pareto, elles peuvent converger vers le même optimum. Les extensions NSGA et NPGA permettent d'outrepasser cet inconvénient (Horn et Nafpliotis, 1993; Srinivas et Deb, 1994).

4.2.1.2 Approches scalaires

L'approche scalaire d'un problème d'optimisation multicritère consiste à transformer le problème en un ou plusieurs problèmes d'optimisation monocritère, puis le résoudre un certain nombre de fois en faisant varier des paramètres bien choisis.

Pondération linéaire des fonctions objectif

La première approche scalaire est la méthode de pondération ou d'agrégation linéaire des fonctions objectif. Celle-ci consiste à affecter un poids différent à chacune des fonctions objectif comme suit :

$$\min_{\boldsymbol{X}\in\mathscr{C}} \tau_1 f_1(\boldsymbol{X}) + \tau_2 f_2(\boldsymbol{X}) \cdots + \tau_n f_n(\boldsymbol{X}) \qquad (\mathscr{P}_{4.2})$$

où $\tau_i > 0$ pour $i \leqslant n$ sont les poids associés à chacune des fonctions coût. Généralement, on définit $\sum_{i=1}^{n} \tau_i = 1$.

Le problème ($\mathscr{P}_{4.2}$) est résolu un certain nombre de fois en modifiant les poids τ_i associés aux fonctions objectif pour estimer le front de Pareto. Chacune de ces pondérations τ_i représente l'importance attribuée à la fonction objectif f_i par l'utilisateur. Il s'agit d'une méthode *a priori* où le choix de la solution finale est effectué au travers de la pondération choisie. Cependant, la méthode peut se transformer en approche *a posteriori* si le décideur effectue le choix une fois l'ensemble des solutions de Pareto déterminé à l'aide d'un algorithme d'aide à la décision.

Cette méthode, bien que la plus simple à mettre en œuvre, possède un inconvénient majeur. Elle ne permet que la détermination de la partie convexe du front de Pareto. En effet, prenons l'exemple de la minimisation d'une agrégation de deux critères antagonistes selon l'équation suivante :

$$J(\boldsymbol{X}) = \tau_1 f_1(\boldsymbol{X}) + \tau_2 f_2(\boldsymbol{X}) \qquad (4.2)$$

où f_1 et f_2 sont deux fonctions coûts antagonistes et τ_1 et τ_2 leurs poids respectifs.

L'optimisation de l'équation (4.2) consiste tout simplement à minimiser la constante ζ dans l'équation suivante :

$$f_2 = -\frac{\tau_1}{\tau_2} f_1 + \zeta \qquad (4.3)$$

Le point optimal associé aux paramètres τ_1 et τ_2 sera alors le point tangent entre l'ensemble des solutions admissibles $\mathscr{C}$ et la droite D d'équation (4.3). La figure 4.2 illustre l'incapacité de l'approche d'agrégation linéaire pour déterminer la partie concave du front de Pareto (Das et Dennis, 1997). Un second inconvénient concerne la répartition des points optimaux sur le front de Pareto. Celle-ci peut s'avérer inhomogène et nécessite une bonne connaissance du problème par l'utilisateur. Cet inconvénient n'est pas rédhibitoire étant donné que le front de Pareto peut-être complété après son obtention.

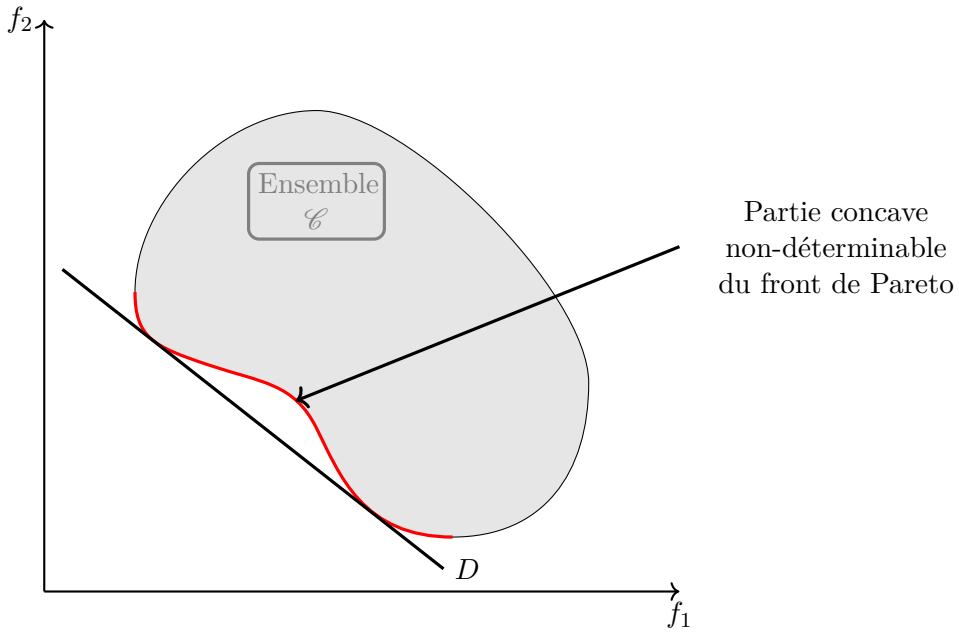


FIGURE 4.2 – Illustration graphique de l'approche par pondération des fonctions objectif, la ligne rouge représente le front de Pareto.

Méthode ε-contrainte

Il s'agit également d'une méthode monocritère. L'approche ε-contrainte consiste en l'optimisation d'une seule fonction objectif choisie comme prioritaire, et considérant les autres comme des contraintes d'inégalité. Cela revient à transformer le problème ($\mathscr{P}_{4.1}$) de la manière suivante :

$$\begin{aligned} &\min_{\boldsymbol{X} \in \mathscr{C}} && f_1(\boldsymbol{X}) \\ &f_i(\boldsymbol{X}) \leqslant \varepsilon_i \,,\ i \neq 1 \end{aligned} \qquad (\mathscr{P}_{4.3})$$

où $f_1(\boldsymbol{X})$ est la fonction prioritaire, $\boldsymbol{\varepsilon} = \left(\varepsilon_2, \varepsilon_3, \ldots, \varepsilon_n\right)^T$ est le jeu de paramètres que l'utilisateur va faire varier pour déterminer le front de Pareto. De la même façon que l'approche par pondération, il s'agit d'une méthode *a priori*. Cette méthode nécessite également une bonne connaissance du problème étudié par l'utilisateur dans l'optique de choisir des jeux de paramètres $\boldsymbol{\varepsilon}$ adéquats. De plus, la partie du front de Pareto où la pente est faible est difficile à déterminer avec cette méthode (i.e. une grande variation de la fonction objectif prioritaire entraînant de faibles variations sur les autres fonctions objectif).

La figure 4.3 illustre le fonctionnement de la méthode qui reformule le problème comprenant 2 critères (f_1 et f_2) en un problème monocritère (f_1). La méthode définit une nouvelle contrainte $f_2 \leqslant \varepsilon_2$ qui vient s'ajouter à l'ensemble $\mathscr{C}$. La solution du nouveau problème est donc à chercher dans l'union de la contrainte introduite et de l'ensemble $\mathscr{C}$ notée $\mathscr{C}'$ et représentée par la partie hachuré sur la figure 4.3. Pour l'exemple considéré, la solution de la minimisation du critère f_1 sous la contrainte $\boldsymbol{X} \in \mathscr{C}'$ est le point suivant : $(f_1^{\min}, \varepsilon_2)$.

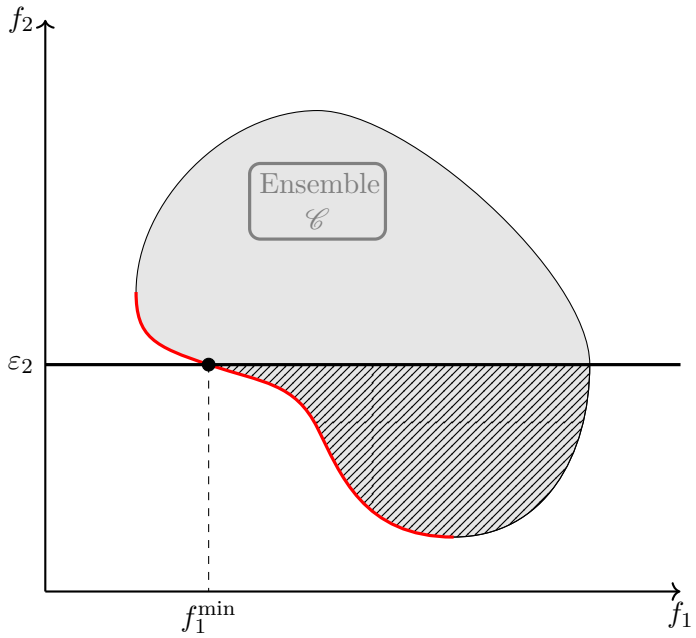


FIGURE 4.3 – Illustration graphique de l'approche ε-contrainte, la ligne rouge représente le front de Pareto, la partie hachurée désigne l'union de l'ensemble $\mathscr{C}$ et de la contrainte $f_2 \leqslant \varepsilon_2$.

Méthode de distance par rapport à un objectif de référence

L'approche de la distance par rapport à un objectif de référence, ou approche min-max, consiste à définir un objectif d'optimisation irréalisable $\boldsymbol{P}^{\text{obj}}$ et minimiser la distance relative ou absolue entre l'ensemble $\mathscr{C}$ et $\boldsymbol{P}^{\text{obj}}$ (Azarm et Tahmasebi, 1996). Il s'agit d'une approche *a priori* car le choix du point $\boldsymbol{P}^{\text{obj}}$ est effectué avant le commencement du processus d'optimisation. Généralement, le point utopique est choisi par le décideur, c'est-à-dire, le point ayant pour coordonnée l'optimum des fonctions objectif optimisées séparément. L'approche consiste à transformer le problème ($\mathscr{P}_{4.1}$) en le problème monocritère suivant :

$$\min_{\boldsymbol{X}\in\mathscr{C}} \left(\sum_{i=1}^{n} \left| \frac{P_i^{\text{obj}} - f_i(\boldsymbol{X})}{P_i^{\text{obj}}} \right|^p \right)^{\frac{1}{p}} \qquad (\mathscr{P}_{4.4})$$

où $p \in [1, \infty]$ désigne le degré de la norme permettant le calcul de la distance. Généralement, on choisit les valeurs :

- $p = 1$ désigne la distance de Manhattan.
- $p = 2$ désigne la distance euclidienne.
- $p = \infty$ désigne la distance de Tchebychev

Il est possible de transformer la méthode en approche *a posteriori* en déterminant les solutions de Pareto en variant la position de l'objectif de référence $\boldsymbol{P}^{\text{obj}}$.

Méthode de but à atteindre

L'approche de but à atteindre, autrement appelée *goal attainment method*, consiste à définir un point initial irréalisable $\boldsymbol{P}^{\text{ini}}$ et une direction de recherche $\boldsymbol{D}^{\text{r}}$. Le point optimal est défini

comme l'intersection la plus proche de $\boldsymbol{P}^{\text{ini}}$ entre l'ensemble des solutions $\mathscr{C}$ et la droite passant par $\boldsymbol{P}^{\text{ini}}$ et de vecteur directeur $\boldsymbol{D}^{\text{r}}$ (Rahmani et Amjady, 2019). Mathématiquement, cela revient à transformer le problème multicritère ($\mathscr{P}_{4.1}$) en le problème monocritère suivant :

$$\begin{aligned} &\min_{\boldsymbol{X} \in \mathscr{C}} && \alpha \\ &f_1(\boldsymbol{X}) - \alpha D_1^{\text{r}} \leqslant P_1^{\text{ini}} \\ &\vdots \\ &f_n(\boldsymbol{X}) - \alpha D_n^{\text{r}} \leqslant P_n^{\text{ini}} \end{aligned} \qquad (\mathscr{P}_{4.5})$$

La figure 4.4 illustre le fonctionnement de l'approche. Les valeurs des composantes de la direction de recherche $\boldsymbol{D}^{\text{r}}$ peuvent être assimilées au poids accordé aux fonctions objectif correspondantes. Pour finir, la répétition de la résolution du problème ($\mathscr{P}_{4.5}$) en modifiant la direction de recherche $\boldsymbol{D}^{\text{r}}$ et le point initial $\boldsymbol{P}^{\text{ini}}$ permet la détermination du front de Pareto. L'utilisation de cette approche peut s'avérer complexe, la direction de recherche $\boldsymbol{D}^{\text{r}}$ et le point initial $\boldsymbol{P}^{\text{ini}}$ doivent être adéquatement choisis pour éviter la divergence du problème (i.e. pas d'intersection entre $\mathscr{C}$ et la droite passant par $\boldsymbol{P}^{\text{ini}}$ et de vecteur directeur $\boldsymbol{D}^{\text{r}}$). De plus, la méthode peut converger vers des points n'appartenant pas au front de Pareto si $\boldsymbol{P}^{\text{ini}}$ n'est pas judicieusement choisi.

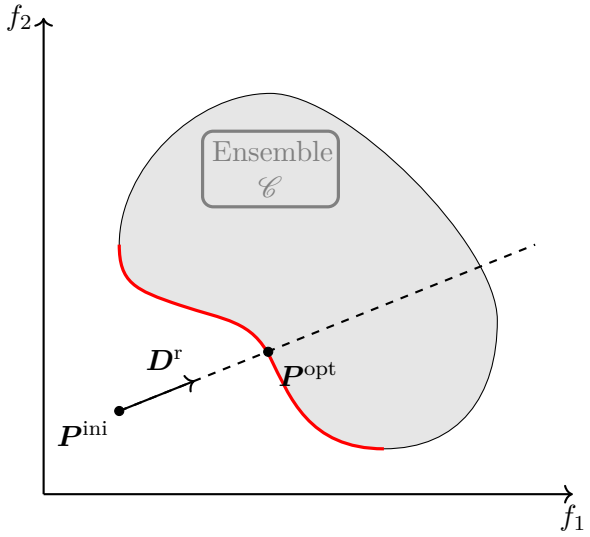


FIGURE 4.4 – Illustration graphique de l'approche dite de but à atteindre, la ligne rouge représente le front de Pareto et $\boldsymbol{P}^{\text{opt}}$ le point optimal.

4.2.1.3 Autres approches

Méthode d'ordonnancement lexicographique

L'approche d'ordonnancement lexicographique est une méthode *a priori* qui consiste à résoudre le problème d'optimisation autant de fois qu'il y a de fonctions objectif (Fourman, 1985). Dans cette approche, le décideur va ordonner les fonctions objectif suivant l'importance qu'il

leur accorde et les optimiser les unes après les autres en gardant les résultats d'optimisation précédents comme contraintes d'égalité.

Ainsi, dans un premier temps, la fonction prioritaire est optimisée, on définit alors le problème ($\mathscr{P}_{4.7}$).

$$\min_{\boldsymbol{X}\in\mathscr{C}} f_1(\boldsymbol{X}) \tag{$\mathscr{P}_{4.7}$}$$

Notons $\hat{f}_1$ le résultat correspondant au problème ($\mathscr{P}_{4.7}$). On résout ensuite le problème ($\mathscr{P}_{4.8}$).

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{X}\,\in\,\mathscr{C}} \quad & f_2(\boldsymbol{X}) \\ f_1(\boldsymbol{X}) &= \hat{f}_1 \end{aligned} \tag{$\mathscr{P}_{4.8}$}$$

L'optimisation est réitérée n fois suivant le problème de récurrence ($\mathscr{P}_{4.k}$).

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{X}\,\in\,\mathscr{C}} \quad & f_k(\boldsymbol{X}) \\ f_1(\boldsymbol{X}) &= \hat{f}_1 \\ &\vdots \\ f_{k-1}(\boldsymbol{X}) &= \hat{f}_{k-1} \end{aligned} \tag{$\mathscr{P}_{4.k}$}$$

Le résultat final est celui de la $n^{\text{ième}}$ optimisation du problème ($\mathscr{P}_{4.k}$). La méthode est très simple à mettre en œuvre et ne demande pas de réitérer le processus d'optimisation plusieurs fois, ce qui réduit le temps de calcul. Cependant, le résultat optimal dépend fortement de l'ordonnancement choisi par le décideur. Deux ordonnancements différents convergent généralement vers deux solutions très différentes. La phase d'ordonnancement est donc particulièrement importante.

Méthode du but programmé

L'approche du but programmé (Jones et Tamiz, 2010), autrement appelée *goal programming*, est semblable à la méthode du but à atteindre. Les deux différences entre les approches résident dans la transformation du problème. La méthode du but à atteindre transforme le problème multicritère en un problème monocritère sous contraintes d'inégalité, tandis que l'approche du but programmé convertit le problème ($\mathscr{P}_{4.1}$) en un autre problème multicritère sous contraintes d'égalité. Elle introduit un point objectif $\boldsymbol{P}^{\text{ini}}$ et transforme le problème comme suit.

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{X}\,\in\,\mathscr{C}} \quad & (\delta_1^+ + \delta_1^-, \ldots, \delta_n^+ + \delta_n^-)^T \\ f_1(\boldsymbol{X}) =& P_1^{\text{ini}} + \delta_1^+ - \delta_1^- \\ &\vdots \\ f_n(\boldsymbol{X}) =& P_n^{\text{ini}} + \delta_n^+ - \delta_n^- \end{aligned} \tag{$\mathscr{P}_{4.6}$}$$

Dans le problème ($\mathscr{P}_{4.6}$), $\delta_n^+ \geqslant 0$ et $\delta_n^- \geqslant 0$ représentent respectivement les déviations positives et négatives par rapport au point objectif $\boldsymbol{P}^{\text{opt}}$. Le produit $\delta_n^+\delta_n^-$ est nul, c'est-à-dire que l'une des déviations au moins est nulle. Pour finir, il faut transformer le problème ($\mathscr{P}_{4.6}$) en un

problème monocritère à l'aide de la méthode d'agrégation ou d'ordonnancement lexicographique par exemple. La méthode étant semblable à l'approche but à atteindre, elle présente les mêmes inconvénients.

Méthode VEGA (Vector Evaluated Genetic Algorithm)

En 1985, Schaffer développe un algorithme génétique permettant une résolution *a posteriori* d'un problème multicritère, l'approche VEGA (Schaffer, 1985). Le principe de base de la méthode suit les étapes suivantes à chaque itération :

1. Définition d'une population dont la taille N est un multiple du nombre de fonctions objectif n.
2. La population est séparée en sous groupe de $\frac{N}{n}$ individus, chacun de ces sous groupes est associé à une fonction objectif.
3. Les performances des individus dans les sous groupes et par rapport au critère associé sont calculées.
4. La population est ensuite remélangée et un algorithme génétique (sélection, recombinaison et mutation) est appliqué à la population permettant la définition de la population pour l'itération suivante.

La présente approche possède un inconvénient majeur lié à l'étape de sélection. En effet, les performances des individus dans les sous groupes n'étant déterminées que par rapport à un unique objectif, la sélection favorisera les individus performants dans un seul objectif. La méthode a donc tendance à éliminer les individus dits ''intermédiaires'' dont la performance pour chacun des objectifs est satisfaisante mais n'est pas maximale pour un seul objectif. La méthode possède un second inconvénient, celle-ci ne permet pas la détermination de la partie concave du front de Pareto (Collette et Siarry, 2011).

4.2.2 Algorithme d'aide à la décision multicritère

Une fois l'ensemble des solutions de Pareto du problème multicritère déterminé, il faut choisir le meilleur compromis à mettre en œuvre. Pour cela, le décideur est amené à classer les différentes alternatives suivant ses préférences (i.e. quelle importance accordée à une fonction objectif.). Ces préférences sont souvent subjectives et dépendent du procédé considéré. Lors de cette étape, le concept de dominance n'a plus d'utilité étant donné que chacune des solutions de Pareto est non dominée. Il faut donc trouver une nouvelle manière de classer ces solutions.

Le classement des solutions de Pareto est effectué à l'aide d'algorithmes d'aide à la décision multicritère (Multiple-Criteria Decision Analysis : MDCA). Ces algorithmes travaillent sur des ensembles finis et permettent de noter les performances d'une solution optimale par rapport aux attentes du décideur. Ce dernier n'aura plus qu'à choisir la solution dont la note est maximale.

Ce processus d'aide à la décision s'effectue en deux étapes principales faisant intervenir deux acteurs (Rivallain, 2013).

1. le **décideur** qui choisit l'importance accordée à chacun des critères suivant ses préférences et exigences.
2. l'**homme d'étude** qui implémente les préférences du décideur dans un outil d'aide à la décision bien choisi.

Dans la littérature, il existe un grand nombre d'outils d'aide à la décision que l'on peut classer en deux grandes familles, les méthodes d'agrégation complète et les méthodes de surclassement (Roy, 1985). Ces familles se différencient par la façon de noter ou classer les différentes solutions de Pareto.

4.2.2.1 Les méthodes d'agrégation complète

La première approche consiste en l'introduction de fonctions d'utilité adéquatement choisies par le décideur permettant le calcul des performances de chacune des solutions de Pareto (Roy, 1985). Ces fonctions d'utilité ont pour objectif de noter les solutions du front de Pareto, la notation d'une solution étant indépendante des performances des autres solutions. Cette approche émet une hypothèse majeure : les solutions de Pareto sont toutes commensurables entres elles (Roy, 1985), c'est-à-dire qu'elles sont toutes comparables une à une à l'aide d'une unité. Or, cela n'est pas forcément le cas dans un problème d'optimisation multicritère. Dans cette section, les méthodes d'agrégation complète les plus utilisées sont présentées.

Méthode MAUT (Multiple Attribute Utility Theory)

La théorie de l'utilité multi-attribut est un outil d'aide à la décision introduit par Keeney et al. (1979). Le principe de la méthode est très simple et s'effectue en cinq étapes principales.

Étape 1 - Le décideur détermine les valeurs extrêmes de chaque objectif prises par les solutions de Pareto, c'est-à-dire, le maximum et le minimum de chacun des critères.

Étape 2 - Le décideur associe à chaque critère i une fonction utilité u_i qui permettra de noter la performance d'une solution ou alternative a_j par rapport à chacun des critères. La fonction utilité doit être monotone et continue (Olson, 1997). La forme de cette fonction est choisie par le décideur en fonction de ses préférences et exigences. Dans la littérature, on recense trois principales formes, les formes exponentielles, linéaires et puissances :

$$u_i(x_i) = A_1 + A_2 e^{A_3 x_i} \quad \text{(Butler et al., 2001; Kim et Song, 2009)} \tag{4.4}$$

$$u_i(x_i) = A_1 + A_2 x_i \quad \text{(Das et al., 2016; Voola et Vinaya Babu, 2017)} \tag{4.5}$$

$$u_i(x_i) = (A_1 + A_2 x_i)^{A_3} \quad \text{(Benyahia et al., 2011; Fonseca et al., 2020)} \tag{4.6}$$

où A_1, A_2 et A_3 sont des constantes choisies par l'utilisateur suivant ses exigences. Généralement, les valeurs des fonctions utilité appartiennent à l'intervalle [0,1]. Pour cela, certaines de ces constantes peuvent s'exprimer en fonction des valeurs maximales et minimales des objectifs.

Étape 3 - Le décideur associe des poids τ_i à ces fonctions utilités en accord avec ses préférences.

Étape 4 - Calcul de la fonction d'utilité multi-attribut suivant la relation (4.7) pour chacune des alternatives permettant la notation de ces dernières.

$$U(\boldsymbol{a_j}) = \sum_{i=1}^{n} \tau_i u_i(\boldsymbol{a_j}) \tag{4.7}$$

Étape 5 - Classement des alternatives par rapport aux valeurs de la fonction d'utilité multi-attribut et détermination de la meilleure solution.

Méthode UTA (Utility Theory Additive)

L'approche UTA, développée par Jacquet-Lagreze et Siskos (1982), repose sur le même principe que la méthode MAUT. La différence majeure entre les deux approches réside dans la construction des fonctions d'utilité. Pour chaque critère, le décideur affecte une note à chaque solution de Pareto permettant de déterminer ses performances par rapport au critère considéré. Ensuite, les fonctions d'utilité ne sont pas choisies par le décideur mais résultent de multiples régressions linéaires entre les notes affectées aux solutions sur des sous intervalles situés entre les valeurs extrêmes des critères. La fonction d'utilité globale doit satisfaire les conditions de monotonie et de continuité. Elle s'écrit suivant la relation (4.8).

$$U(\boldsymbol{a_j}) = \sum_{i=1}^{n} \hat{u}_i(\boldsymbol{a_j}) + \sigma(\boldsymbol{a_j}) \tag{4.8}$$

où $\hat{u}_i(\boldsymbol{a_j})$ représente l'utilité de l'alternative $\boldsymbol{a_j}$ sur l'objectif i et $\sigma(\boldsymbol{a_j})$ l'erreur associée aux régressions linéaires qu'il faut minimiser. Pour de plus amples informations, le lecteur est invité à se référer à Jacquet-Lagreze et Siskos (1982) et à An (2011).

Méthode AHP (Analytic Hierarchy Process)

L'approche AHP proposée par Saaty (1980) repose sur une hiérarchisation des données du problème. L'arbre qui en résulte (voir figure 4.5) possède pour sommet l'objectif global de la méthode. Les niveaux intermédiaires sont dédiés aux critères et potentiels sous critères. Pour finir, le niveau inférieur est dédié aux différentes alternatives ou actions $\boldsymbol{a_j}$. À chaque niveau, les performances des données du problème (i.e. critères, sous critères ou actions) par rapport au niveau supérieur sont comparées deux à deux à l'aide de l'échelle de Saaty (Saaty, 1980). Cela permet ainsi l'estimation des performances d'une donnée par rapport à une autre. Pour finir, la meilleure alternative est celle pour laquelle l'agrégation totale des poids associés à l'action est la plus élevée. Dans l'exemple illustré par la figure 4.5, l'agrégation totale pour l'action A se calcule suivant la relation (4.9).

$$\mathrm{AT_A} = \sum_{i=1}^{3} \tau_i w_{i\mathrm{A}} = \tau_1 w_{1\mathrm{A}} + \tau_2 w_{2\mathrm{A}} + \tau_3 w_{3\mathrm{A}} \tag{4.9}$$

où τ_i représente le poids du critère i par rapport à l'objectif principal et $w_{i\mathrm{A}}$ le poids de l'action A par rapport au critère i.

La méthode AHP est simple d'utilisation, cependant, le nombre de comparaisons deux à deux peut s'avérer très élevé lorsqu'il y a un grand nombre d'alternatives ou de critères. Cela peut rendre la méthode assez fastidieuse d'utilisation voire inutilisable.

4.2.2.2 Les méthodes de surclassement

Les méthodes de surclassement, autrement appelées méthodes d'agrégation partielle, acceptent la possible incomparabilité de deux solutions. Cependant, la détermination d'une unique meilleure solution peut s'avérer impossible. Dans ce cadre, la note attribuée à une solution dépend des autres optima.

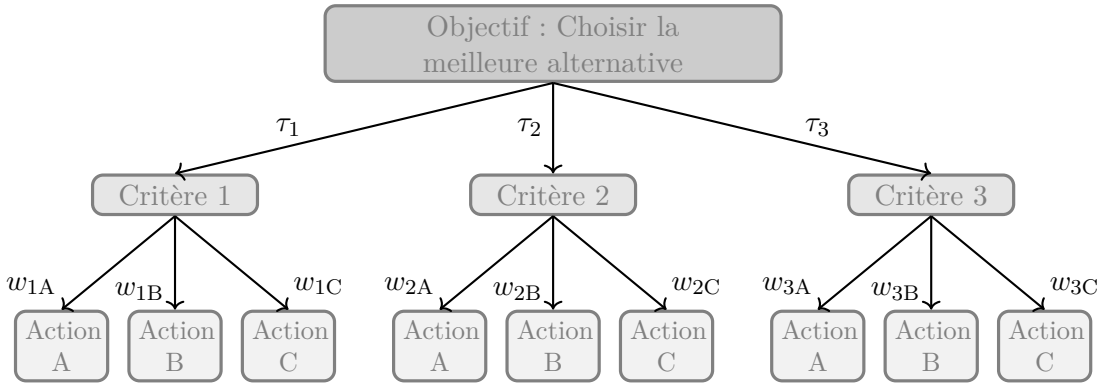


FIGURE 4.5 – Exemple illustratif de l'approche AHP pour un problème à trois critères et 3 alternatives ou actions.

Méthode ELECTRE (Élimination Et Choix Traduisant la Réalité)

La méthode ELECTRE a été développée par Bernard Roy en 1968 (Roy, 1968; Vincke, 1989). L'objectif de l'approche consiste à choisir la meilleure alternative parmi un groupe de solution, c'est-à-dire, celle qui surclasse les autres. Ce surclassement permet de comparer deux solutions. On dit alors qu'une solution A surclasse une autre solution B si les performances de A sont meilleures que celles de B dans une majorité de critères sans pour autant être fortement moins performante dans les autres objectifs. L'approche ELECTRE introduit deux indices qui ne doivent pas dépasser un certain seuil pour vérifier ce surclassement :

- l'indice de concordance qui permet de vérifier qu'une solution est plus performante qu'une autre dans une majorité de critères.
- l'indice de discordance qui impose qu'il n'existe pas de critère où les performances de l'alternative sont nettement inférieures à l'autre.

L'approche ELECTRE s'effectue en cinq étapes principales (Collette et Siarry, 2011).

Étape 1 - Le décideur affecte un poids P_i aux différents critères f_i selon ses préférences.

Étape 2 - Pour chaque critère f_i, les performances des solutions sont comparées deux à deux. Soit $\boldsymbol{a_j}$ et $\boldsymbol{a_k}$ deux alternatives, on définit les ensembles de comparaison comme suit :

- $J^+(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) = \{i \in [1, n] \mid f_i(\boldsymbol{a_j}) > f_i(\boldsymbol{a_k})\}$.
- $J^=(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) = \{i \in [1, n] \mid f_i(\boldsymbol{a_j}) = f_i(\boldsymbol{a_k})\}$.
- $J^-(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) = \{i \in [1, n] \mid f_i(\boldsymbol{a_j}) < f_i(\boldsymbol{a_k})\}$.

où n désigne le nombre de critères.

Étape 3 - Conversion des ensembles de comparaison en valeurs numériques pour chaque couple d'actions. On calcule donc les sommes des poids des critères appartenant aux ensembles $J^+(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k})$, $J^=(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k})$ et $J^-(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k})$ selon les relations suivantes :

- $P^+(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) = \sum_i P_i$ où $i \in J^+(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k})$.
- $P^=(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) = \sum_i P_i$ où $i \in J^=(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k})$.
- $P^-(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) = \sum_i P_i$ où $i \in J^-(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k})$.

Étape 4 - Détermination des indices de concordance C_{jk} et de discordance D_{jk} pour chaque couple d'alternatives ($\boldsymbol{a_j}$,$\boldsymbol{a_k}$) suivant les relations (4.10) et (4.11).

$$C_{jk} = \frac{P^+(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) + P^=(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k})}{P^+(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) + P^=(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) + P^-(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k})} \tag{4.10}$$

$$D_{jk} = \begin{cases} 0 & \text{si } J^-(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) = \varnothing \\ \frac{\max(f_i(\boldsymbol{a_k}) - f_i(\boldsymbol{a_j}))}{\delta_i} & \text{avec } i \in J^-(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) \end{cases} \tag{4.11}$$

où δ_i représente l'amplitude de l'échelle associée au critère i, c'est-à-dire, la différence de ses valeurs extrêmes.

Étape 5 - Surclassement des actions par introduction de valeurs seuils sur les indices de concordance et de discordance.

Il existe un certain nombre d'extensions à la méthode ELECTRE qui permettent de classer les solutions à l'aide de valeurs numériques plutôt que de déterminer uniquement la meilleure (Collette et Siarry, 2011). On peut citer par exemple ELECTRE Is, II, III, Iv et TRI (Maystre et al., 1994; Roy et Bouyssou, 1993).

Méthode PROMETHEE (Preference Ranking Organisation Method for Enrichment Evaluations)

La méthode PROMETHEE proposée par Brans et al. (1986) diffère de l'approche ELECTRE par le fait qu'elle associe des valeurs numériques aux surclassements afin d'en exprimer leurs intensités. L'approche consiste en 4 étapes principales.

Étape 1 - Les différentes alternatives sont comparées deux à deux pour chaque critère i et la préférence d'une action $\boldsymbol{a_j}$ par rapport à une autre $\boldsymbol{a_k}$ est évaluée selon la relation suivante :

$$P_i(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) = \widetilde{F}(f_i(\boldsymbol{a_j}) - f_i(\boldsymbol{a_k})) \tag{4.12}$$

où $\widetilde{F}(x)$ représente la fonction de préférence, il s'agit d'une fonction non décroissante pour $x > 0$, qui tend vers 1 lorsque x tend vers l'infini et égale à 0 pour $x \leqslant 0$.

Étape 2 - Pour chaque couple d'action ($\boldsymbol{a_j}$,$\boldsymbol{a_k}$), les indices de surclassement sont calculés suivant l'équation (4.13).

$$P(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) = \frac{\sum_{i=1}^{n} \tau_i P_i(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k})}{\sum_{i=1}^{n} \tau_i} \tag{4.13}$$

où n désigne le nombre de critères et τ_i le poids accordé par le décideur au critère i. Plus $P(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k})$ sera élevé, plus la préférence sera forte pour l'alternative $\boldsymbol{a_j}$ devant l'alternative $\boldsymbol{a_k}$.

Étape 3 - Pour chaque alternative $\boldsymbol{a_j} \in A$, on définit la notion de flux entrant et de flux sortant selon les équations (4.14) et (4.15).

$$\phi^-(\boldsymbol{a_j}) = \sum_{\substack{\boldsymbol{a_k} \in A \\ \boldsymbol{a_k} \neq \boldsymbol{a_j}}} P(\boldsymbol{a_k}, \boldsymbol{a_j}) \tag{4.14}$$

$$\phi^+(\boldsymbol{a_j}) = \sum_{\substack{\boldsymbol{a_k} \in A \\ \boldsymbol{a_k} \neq \boldsymbol{a_j}}} P(\boldsymbol{a_j}, \boldsymbol{a_k}) \tag{4.15}$$

Étape 4 - Les valeurs des flux sortant et entrant permettent de classer les différentes alternatives.

L'approche permet de classer les alternatives suivant les préférences du décideur, cependant, il arrive que certaines solutions soient impondérables. L'extension PROMETHEE II de la méthode présentée permet de surpasser cet inconvénient.

4.2.3 Choix de la méthode d'optimisation multicritère

En optimisation géométrique, la variable de décision est définie comme la position et la forme de la frontière libre Γ. Sous OpenFOAM, la position et la forme d'une frontière sont décrites par les coordonnées de l'ensemble des points appartenant à cette frontière, la surface s'obtenant par interpolation linéaire. Ainsi, dans cette étude, le vecteur des variables de décision peut se définir comme le vecteur des coordonnées des points appartements à la frontière libre. Lors des optimisations effectuées dans le chapitre précédent, le nombre de points appartenant à Γ était compris entre 9000 et 16000 suivant le cas considéré et l'avancement du processus d'optimisation. Ce grand nombre de points et donc de variables de décision rendrait difficile d'utilisation les algorithmes génétiques type VEGA ou MOGA. En effet, le temps de calcul augmente considérablement lorsque le nombre de variables de décision devient élevé (cf. 2.2.1.2).

De plus, la transformation du problème multicritère en un problème de distance à des points irréalisables (i.e. méthodes de distance par rapport à un objectif de référence, de but à atteindre et but programmé) rendrait le calcul de la dérivé de forme très complexe car la détermination des sensibilités des paramètres α, δ^+ ou δ^- par rapport à la forme serait une tâche difficile. De plus, la détermination du front de Pareto se ferait par variation du point irréalisable, ce qui nécessiterait une bonne compréhension du problème d'optimisation multicritère. La méthode d'ordonnancement lexicographique n'est pas utilisée car celle-ci ne permettrait uniquement l'obtention de deux points du front de Pareto. En effet, avec 2 fonctions objectif, il n'existe que 2 ordonnancements différents.

Pour finir, la méthode ε-contraintes nécessite une très bonne connaissance du problème d'optimisation multicritère pour fixer les valeurs de la contrainte adéquatement. De plus, les zones du front de Pareto où la pente est très faible (comme ce sera le cas dans le paragraphe 4.4.1), sont difficiles à déterminer. Pour ces deux raisons, la méthode ϵ-contraintes n'est pas utilisée pour la détermination des fronts de Pareto.

Les justifications précédentes nous amènent à utiliser la méthode de pondérations linéaires des fonctions objectif pour la détermination des fronts de Pareto.

Le choix de l'algorithme d'aide à la décision s'est porté sur une méthode d'agrégation totale car les méthodes de surclassement ne permettent pas de comparer l'ensemble des solutions et donc la détermination d'une seule meilleure alternative. Ensuite, il a été choisi d'utiliser la méthode MAUT car celle-ci amène moins de subjectivité et de choix du décideur. Ici, le décideur influe sur peu de paramètres, tandis que pour les méthodes AHP et UTA, le décideur choisit pour chaque action et chaque paramètre un certain poids (i.e. $\hat{u}_i(\boldsymbol{a_j})$ ou $w_{i\mathrm{A}}$ suivant la méthode). Cela, en plus de rendre la méthode très subjective, rend la méthode fastidieuse d'utilisation. Par exemple, pour un ensemble de 30 alternatives optimales et 2 critères, le décideur influerait sur 60 paramètres.

4.3 Formulation du problème d'optimisation

Dans le chapitre 3, nous avons pu remarquer les possibles allures antagonistes, suivant la variable de décision (i.e. la forme), entre le critère de conversion et la contrainte sur l'énergie dissipée. C'est-à-dire qu'il n'existe pas une unique solution au problème mais un ensemble de

solutions optimales. Une optimisation multicritère des deux réacteurs à lit-fixe s'avère donc intéressante et l'objectif de l'optimisation sera de déterminer un ensemble de solutions de Pareto puis de choisir la meilleure de ces solutions à mettre en œuvre à l'aide de la méthode MAUT.

Dans un premier temps, nous allons chercher à déterminer une approximation du front de Pareto, c'est-à-dire, l'ensemble des formes Ω solutions du problème suivant :

$$\begin{aligned} \min_{\Omega} \quad & \boldsymbol{J}(\Omega) = \Big(J_1(\Omega), J_2(\Omega)\Big)^T \\ \text{s.à.} \quad & \Omega \in \mathscr{C} \\ & (\boldsymbol{U}, p) \text{ solution de Eqs. (2.22)} \\ & C \text{ solution de Eqs. (3.4) ou (3.7)} \end{aligned} \tag{$\mathscr{P}_{4.9}$}$$

Dans le problème ci-dessus, $\mathscr{C}$ s'interprète comme l'ensemble des solutions admissibles que doit satisfaire la variable de décision décrite par la forme du domaine Ω. Les contraintes considérées ici sont définies par la contrainte d'iso-volume donnée par l'équation (3.9) et les deux contraintes de fabrication dont les traitements sont expliqués dans les paragraphes 3.4.1.1 et 3.4.1.2. $\boldsymbol{J}(\Omega)$ représente le vecteur des deux fonctions objectif, $J_1(\Omega)$ désigne le critère sur l'énergie et $J_2(\Omega)$ celui sur la concentration moyenne de réactif en sortie du réacteur. Pour finir, les modèles décrivant l'écoulement de fluide et le transfert de matière restent les mêmes pour les deux cas considérés, ceux-ci sont détaillés dans le paragraphe 3.2.1.

La résolution du problème d'optimisation multicritère ($\mathscr{P}_{4.9}$) repose sur la méthode de pondération linéaire des critères. Le principe de la méthode est détaillé dans le paragraphe 4.2.1.2. Celui-ci consiste à agréger les fonctions objectif en un seul critère en affectant un poids à chacune d'elles. Cette agrégation est définie par la relation suivante :

$$J(\Omega) = \tau J_1(\Omega) + (1-\tau) K_{\text{crit}} J_2(\Omega) = 2\nu\tau \int_{\Omega} |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 \, dx + (1-\tau) K_{\text{crit}} \int_{\Gamma_{\text{out}}} C \, d\sigma \tag{4.16}$$

où $\tau \in [0,1]$ et $(1-\tau)$ représentent respectivement les poids accordés au critère sur l'énergie (J_1) et à celui sur la concentration de réactif en sortie (J_2). K_{crit} est une constante permettant aux deux termes de l'équation (4.16) d'avoir le même ordre de grandeur. En d'autres termes, K_{crit} s'exprime approximativement par le rapport (4.17).

$$K_{\text{crit}} \approx \frac{J_1(\Omega_0)}{J_2(\Omega_0)} \tag{4.17}$$

Ce rapport est calculé pour la forme initiale, c'est-à-dire pour $\Omega = \Omega_0$. Finalement, l'agrégation des deux critères nous permet de transformer le problème multicritère ($\mathscr{P}_{4.9}$) en le problème monocritère suivant :

$$\begin{aligned} \min_{\Omega} \quad & J(\Omega) \\ \text{s.à.} \quad & \Omega \in \mathscr{C} \\ & (\boldsymbol{U}, p) \text{ solution de Eqs. (2.22)} \\ & C \text{ solution de Eqs. (3.4) ou (3.7)} \end{aligned} \tag{$\mathscr{P}_{4.10}$}$$

Ce problème sera résolu un certain nombre de fois en faisant varier le poids τ afin de déterminer le front de Pareto pour les cas RH et RS. Le lagrangien du problème d'optimisation est

défini par l'expression suivante :

$$\mathcal{L}(\Omega) = \tau J_1(\Omega) + (1-\tau) K_{\text{crit}} J_2(\Omega) + \lambda_{\mathcal{V}} C_{\mathcal{V}}(\Omega) \tag{4.18}$$

En comparant les trois termes de l'équation (4.18) avec l'expression du lagrangien déterminée dans le chapitre 3 (équation (3.11)), on remarque que l'expression du lagrangien ci-dessus est semblable à celle du chapitre précédent. En effet, le terme associé à la contrainte sur le volume est identique, celui associé au critère sur la conversion est simplement multiplié par un facteur $(1-\tau)$. Le critère sur l'énergie $J_1(\Omega)$ s'exprime par rapport à la contrainte sur l'énergie considérée dans le chapitre précédent (voir équation (3.10)) selon la relation suivante :

$$J_1(\Omega) = C_{\mathcal{E}}(\Omega) - \mathcal{E}_0 \tag{4.19}$$

où $\mathcal{E}_0$ représentait la perte d'énergie dans la forme initiale du réacteur, une constante indépendante de la forme. Cette constante disparaît lors du calcul de la dérivée de forme. Il vient alors

$$J_1'(\Omega) = C_{\mathcal{E}}'(\Omega) \tag{4.20}$$

En conclusion, le calcul de la dérivée de forme de l'équation (4.18) est similaire à celui du chapitre précédent et s'exprime de la façon suivante :

$$\mathcal{L}'(\Omega) = \tau J_1'(\Omega) + (1-\tau) K_{\text{crit}} J_2'(\Omega) + \lambda_{\mathcal{V}} C_{\mathcal{V}}'(\Omega) \tag{4.21}$$

Ainsi, la dérivée du lagrangien (4.21) par rapport au domaine ne diffère de celle déterminée dans le chapitre précédent que par des poids accordés aux fonctionnelles $J_1'(\Omega)$ et $J_2'(\Omega)$. En effet, $\lambda_{\mathcal{E}}$ est remplacé par τ et K_{crit} par $(1-\tau)K_{\text{crit}}$. Ces constantes étant indépendantes de la forme, l'ensemble des calculs de dérivée par rapport au domaine sont semblables à ceux détaillés dans les annexes B.3 et B.4. Cela conduit à des gradients de forme et états adjoints similaires à ceux présentés dans le chapitre précédent (voir (3.21), (3.24), (3.22), (3.23) et (3.25)) où les paramètres $\lambda_{\mathcal{E}}$ et K_{crit} sont respectivement remplacés par τ et $(1-\tau)K_{\text{crit}}$.

4.4 Détermination des fronts de Pareto

Cette section est consacrée à la présentation des résultats numériques issus de l'optimisation multicritère des cas RH et RS. Dans ce cadre, les paramètres d'optimisation sont les mêmes que ceux présentés dans le tableau 3.1.

4.4.1 Optimisation multicritère du cas RH

La résolution de ce problème d'optimisation multicritère s'effectue en deux étapes principales :

1. Comme expliqué dans la section précédente, on transforme le problème multicritère en un problème monocritère par agrégation des deux critères en une seule fonction objectif en introduisant un poids τ compris entre 0 et 1 à chaque critère.

2. Le problème est résolu un certain nombre de fois (ici 25 fois) en faisant varier le poids τ entre ses bornes. L'algorithme utilisé pour résoudre chaque problème d'optimisation monocritère repose sur celui présenté dans la section 3.4 du chapitre précédent. La génération du squelette est donc effectuée par construction de la ligne médiane. La configuration initiale du réacteur présentée par la figure 3.1 est utilisée comme état initial de toutes les optimisations monocritère effectuées dans cette section.

La figure 4.6 présente le front de Pareto associé à l'optimisation multicritère du cas RH. Celui-ci montre très rapidement l'intérêt de l'optimisation multicritère dans le cas présent. En effet, la forme optimale sous la contrainte d'énergie déterminée dans le chapitre précédent (en vert sur la figure) est loin d'être la meilleure forme à mettre en œuvre. Comme on peut le constater sur la figure, il est possible d'améliorer la dissipation d'énergie dans le réacteur de 2.10^{-12} m^5/s^3 en entraînant une détérioration de la conversion négligeable.

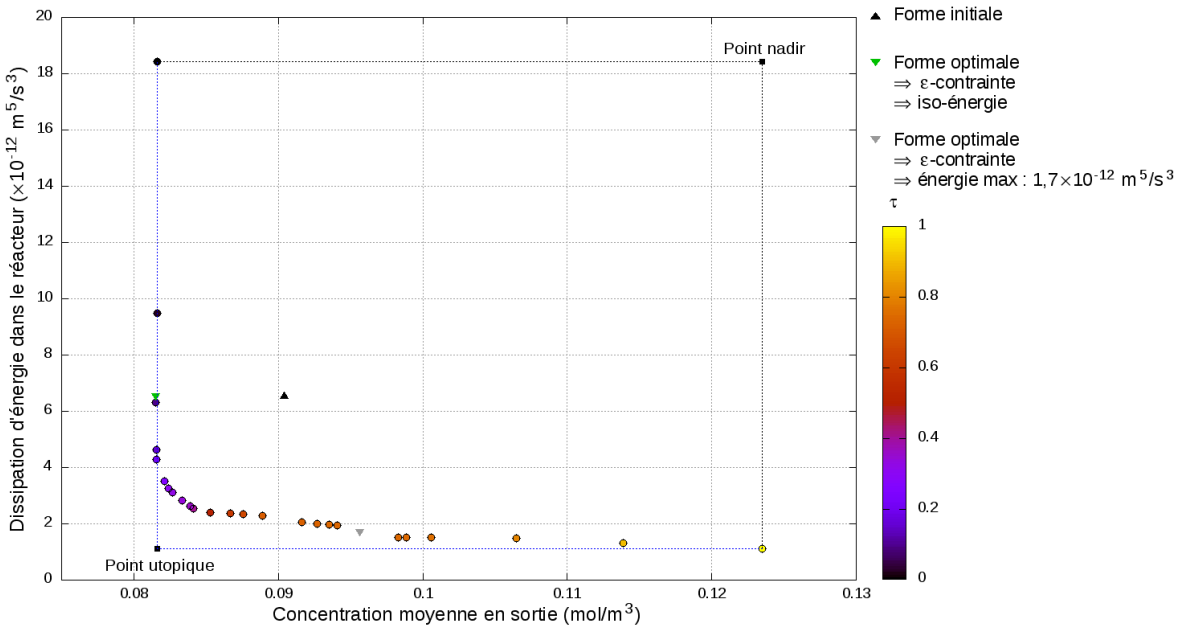


FIGURE 4.6 – Front de Pareto du cas RH.

L'optimisation des critères pris séparément (i.e. pour $\tau = 0$ et $\tau = 1$) nous permet de définir les bornes minimales de ces deux critères. La borne minimale pour le critère de dissipation d'énergie est de $1{,}12.10^{-12}$ m^5/s^3, tandis que pour le critère de concentration moyenne de réactif en sortie elle vaut $8{,}16.10^{-2}$ mol/m^3. Ainsi, il en résulte un point utopique dont les coordonnées sont $(8{,}16.10^{-2}\,;\,1{,}12.10^{-12})$. La forme correspondant à ce point ne respecte pas l'ensemble des contraintes $\mathscr{C}$, par conséquent, la mise en œuvre d'une telle configuration est irréalisable. On définit ensuite le point nadir comme le point dont les coordonnées sont les plus mauvaises valeurs prises par les critères sur l'ensemble des solutions de Pareto $(J_1^{\max}\,;\,J_2^{\max})$. Ces coordonnées sont les suivantes : $(1{,}24.10^{-1}\,;\,1{,}84.10^{-11})$. Les déterminations des points utopique et nadir seront utiles par la suite en particulier lors de la détermination de la meilleure forme à l'aide de la méthode MAUT.

Les profils de concentration et de vitesse dans les formes optimales associées à τ sont présentées sur la figure 4.7. On peut remarquer que pour $\tau = 0$, l'écoulement de fluide est homogène et la zone morte présente dans la forme initiale a disparu, ce qui améliore la conversion de 10%.

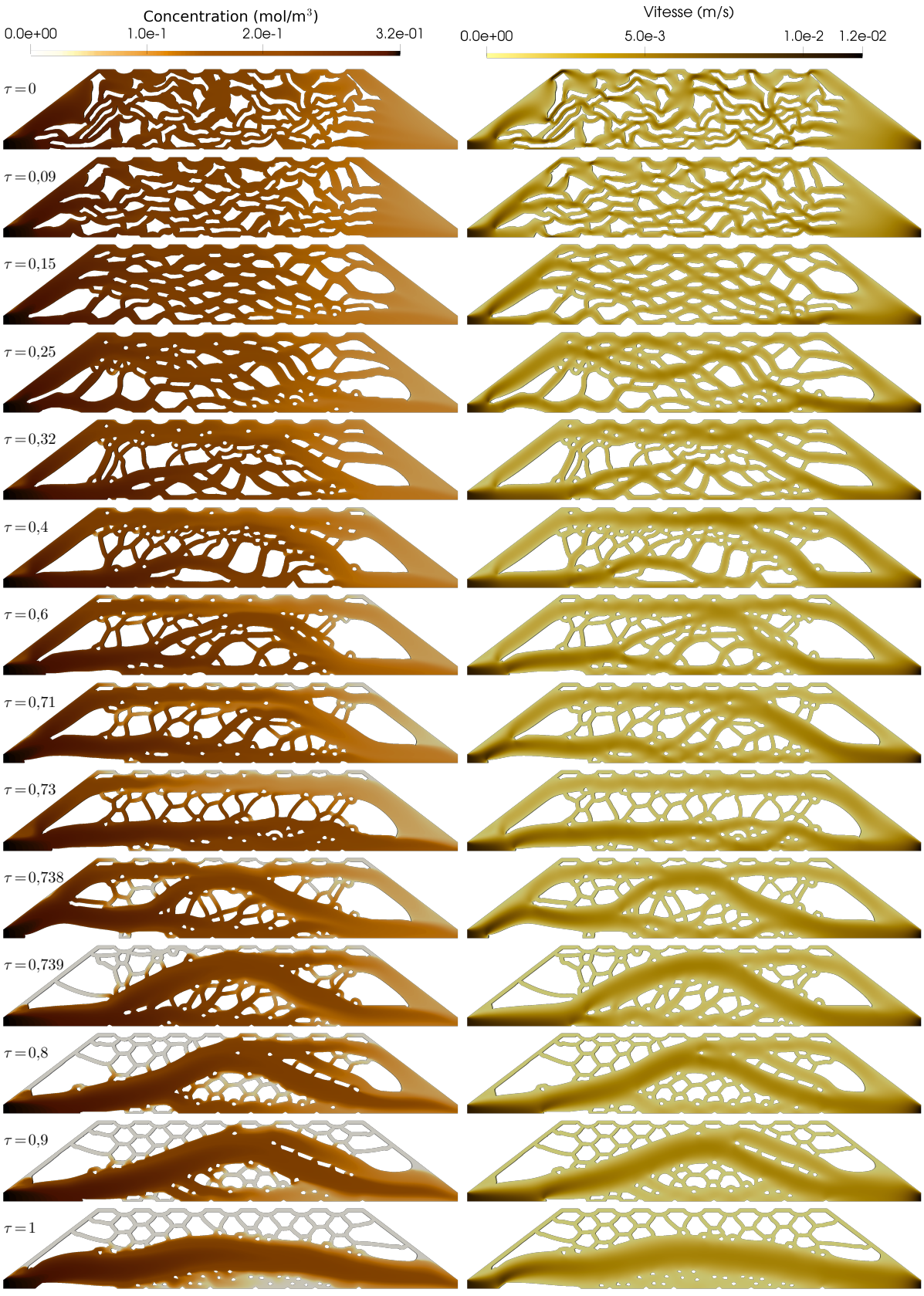


FIGURE 4.7 – Profils de vitesse et de concentration en fonction de tau, cas RH.

En revanche, sur cette configuration, il y a des régions où le gradient de vitesse est élevé (canaux étroits où la vitesse est élevée) dans le lit fixe, ce qui entraînera une forte dissipation d'énergie. Ce résultat était attendu puisque la dissipation d'énergie n'affecte pas la fonction objectif ($\tau = 0$ donc le critère dépend uniquement de la concentration de réactif en sortie). En augmentant le poids τ et jusqu'à une valeur de 0,2, l'écoulement reste homogène ce qui détériore très peu la conversion. En revanche, la largeur moyenne des canaux augmente ce qui diminue en moyenne les gradients de vitesse dans le réacteur et donc améliore le critère sur la dissipation d'énergie. Si on continue d'augmenter le poids τ, les canaux deviennent de moins en moins étroits, ce qui assure des gradients de vitesse de plus en plus faibles dans le réacteur mais aussi une inhomogénéité de l'écoulement de plus en plus marquée, tandis que plusieurs zones mortes apparaissent (voir $\tau = 0{,}71 : 1$). Pour finir, lorsque seule la dissipation d'énergie est optimisée ($\tau = 1$), le réacteur ressemble à un large canal afin de minimiser les gradients de vitesse et les zones mortes occupent une place très importante dans le réacteur.

Sur la figure 4.6, le triangle gris de coordonnées ($9{,}56.10^{-2}$; $1{,}7.10^{-12}$) a été déterminé par la méthode ε-contrainte car le front de Pareto est légèrement concave dans la zone proche de ce point. Ainsi, cette partie du front de Pareto ne pouvait être déterminer par la méthode de pondération des fonctions objectif.

4.4.2 Optimisation multicritère du cas RS

La résolution du problème multicritère du cas RS est effectuée de la même manière que pour le cas RH à la différence majeure que le squelette est généré via le calcul des diagrammes de Voronoï des obstacles. Pour ce cas, 38 solutions de Pareto ont été déterminées par variation du poids τ entre 0 et 1. Sur un ordinateur muni d'un processeur Xeon 3.7GHz, la détermination d'un seul point du front de Pareto nécessite entre 7 et 10 jours de calcul (contrairement à 3 jours pour le cas RH). Par conséquent, l'obtention de l'ensemble du front de Pareto à l'aide d'un seul ordinateur sera longue en temps de calcul. Ainsi, il a été décidé de travailler avec le mésocentre de calcul de l'université de Lorraine (EXPLOR) afin de paralléliser les calculs. Tous les points de la frontière de Pareto sont donc calculés en même temps sur des nœuds différents du super calculateur.

La figure 4.8 présente le front de Pareto issu de l'optimisation multicritère du cas RS et une partie des configurations associées aux solutions de Pareto est présentée sur la figure 4.9. Comme pour le cas précédent, les valeurs optimales de chaque critère pris séparément nous permet de définir le point utopique ($2{,}06.10^{-1}$; $1{,}11.10^{-12}$) et le point nadir ($3{,}02.10^{-1}$; $4{,}34.10^{-11}$). En analysant les formes présentes la figure 4.9, on remarque, pour $\tau = 0$, la surface réactive a augmenté significativement (de l'ordre de 180%) entre les formes initiale et optimale. Cette forte augmentation explique en grande partie l'amélioration de la conversion du réacteur, notamment due à une bonne homogénéité de l'écoulement dans le lit fixe. En revanche, les vitesses sont élevées dans des zones où les canaux sont étroits, ce qui augmente la perte d'énergie dans le fluide. Ensuite, lorsque l'on augmente le poids τ accordé au critère sur la dissipation d'énergie, l'homogénéité de l'écoulement dans le réacteur se dégrade ($\tau = 0 : 0{,}2$), des passages préférentiels de plus en plus importants se forment ($\tau = 0{,}2 : 0{,}7$) et pour finir des zones mortes de faibles concentrations (zone bleue sur les figures) et où le fluide s'écoule peu apparaissent ($\tau = 0{,}7 : 1$). Ces trois phénomènes expliquent pourquoi le critère de conversion se dégrade tandis que celui associé à la perte d'énergie s'améliore lorsque le poids τ augmente.

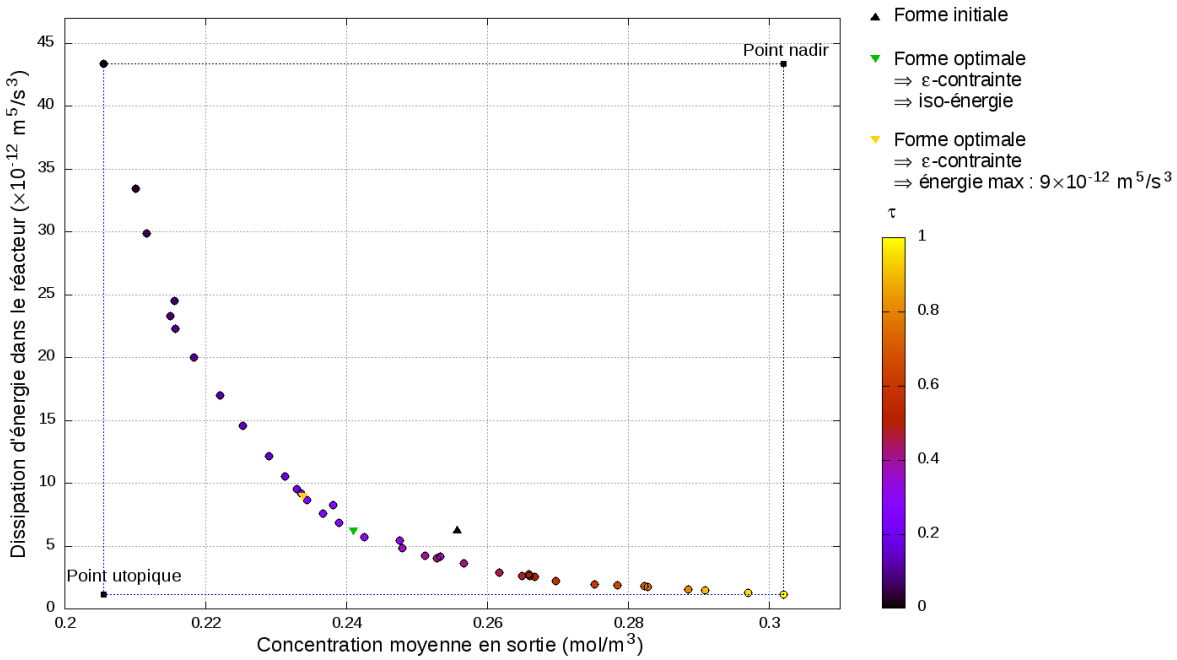


FIGURE 4.8 – Front de Pareto du cas RS.

4.5 Aide à la décision multicritère : méthode MAUT

Une fois ces deux ensembles de solutions de Pareto déterminés, il faut choisir quelle est la meilleure configuration optimale du réacteur selon les attentes du décideur. Dans ces travaux, le choix de la solution est effectué à l'aide de la méthode MAUT autrement appelée théorie de l'utilité multi-attributs et présentée dans les grandes lignes à la page 95. La méthode introduit une fonction d'utilité globale suivant la relation (4.22) afin de noter les performances des solutions de Pareto $\boldsymbol{X} = (x_1, x_2)^T$ selon les préférences du décideur.

$$U(\boldsymbol{X}) = w u_1(x_1) + (1-w) u_2(x_2) \tag{4.22}$$

Dans l'équation ci-dessus, $u_1(x_1)$ et $u_2(x_2)$ représentent les fonctions d'utilité individuelle associées aux critères 1 et 2 dont l'objectif est de noter les performances d'une solution pour un unique critère. w et $(1-w)$ désignent les poids (i.e. l'importance) accordés aux fonctions d'utilité individuelle, ils sont le choix du décideur. Basé sur les travaux de Benyahia et al. (2011) et de Fonseca et al. (2020), il a été décidé d'accorder aux fonctions d'utilité individuelle la forme puissance, exprimée par l'équation (4.23).

$$u(x) = (A_1 + A_2 x)^{A_3} \tag{4.23}$$

Afin de normaliser les fonctions d'utilité individuelle entre 0 et 1, on définit les constantes A_1, A_2 et A_3 en fonction des coordonnées des points utopique $(J_1^{\min}\,;\, J_2^{\min})$ et nadir $(J_1^{\max}\,;\, J_2^{\max})$ comme suit (i= 1 ou 2).

$$A_{1,i} = \frac{J_i^{\max}}{J_i^{\max} - J_i^{\min}} \quad ; \quad A_{2,i} = \frac{-1}{J_i^{\max} - J_i^{\min}} \quad ; \quad A_{3,i} = \alpha_i \tag{4.24}$$

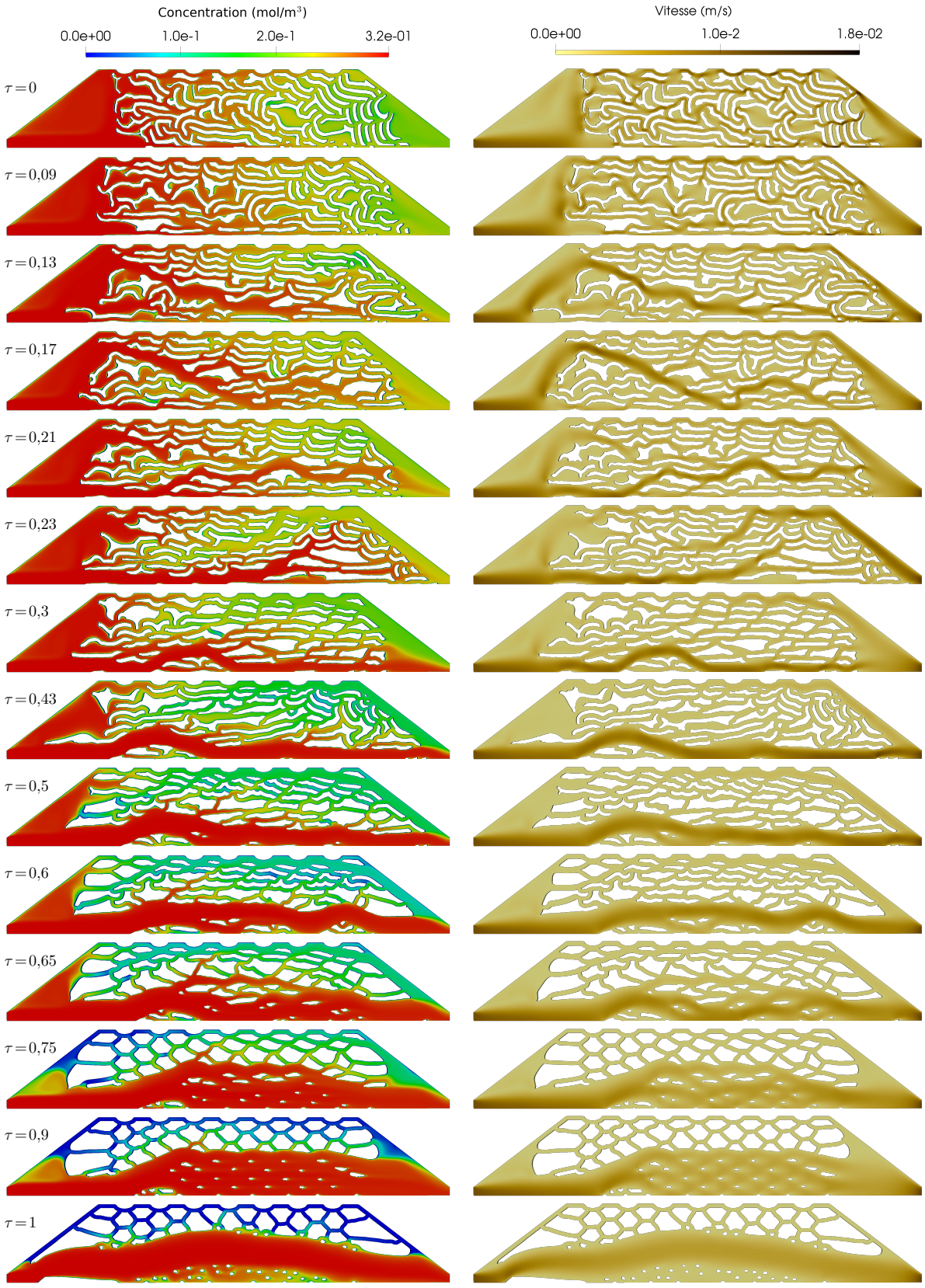


FIGURE 4.9 – Profils de vitesse et de concentration en fonction de tau, cas RS.

Les constantes ci-dessus nous permettent de définir les deux fonctions d'utilité individuelle selon les expressions (4.25) et (4.26). Ces deux fonctions ont des comportements antagonistes lorsque l'on se déplace sur le front de Pareto (en augmentant le poids τ par exemple). En effet, lorsque J_1 diminue, J_2 augmente. Ainsi, u_1 augmente et u_2 diminue et inversement.

$$u_1(x_1) = \left(\frac{J_1^{\max} - J_1(x_1)}{J_1^{\max} - J_1^{\min}} \right)^{\alpha_1} \tag{4.25}$$

$$u_2(x_2) = \left(\frac{J_2^{\max} - J_2(x_2)}{J_2^{\max} - J_2^{\min}} \right)^{\alpha_2} \tag{4.26}$$

Dans les équations (4.25) et (4.26), α_1 et α_2 s'interprètent comme les tolérances relatives par rapport à chaque critère. La figure 4.10 illustre l'influence que le paramètre α_i a sur la fonction d'utilité individuelle. Plus le paramètre α_i est faible ($\alpha_i = 0{,}2$ par exemple), plus la fonction d'utilité individuelle u_i sera tolérante au fait que la solution ne soit pas très performante pout l'objectif i. D'après cette figure, s'éloigner de l'optimum $J_i^{\min}$ n'a pas une grande influence vis-à-vis de la fonction d'utilité individuelle si $\alpha_i = 0{,}2$. En revanche, si on impose une tolérance α_i élevée, la fonction d'utilité individuelle sera très peu tolérante si les performances de la solution dans l'objectif i ne sont pas maximales. Sur la figure 4.10, la performance J_i^{test} pour l'objectif i défini par l'équation (4.27) permet d'illustrer cette différence de tolérance suivant la valeur de α_i. En effet, on obtient des valeurs variant de 0,95 pour $\alpha_i = 0,2$ à 0,32 pour $\alpha_i = 5$.

$$J_i^{\text{test}} = 0,8 J_i^{\min} + 0,2 J_i^{\max} \tag{4.27}$$

D'un point de vue industriel par exemple, choisir $\alpha_i = 0{,}1$ pour un critère sur la dépense énergétique signifie que cette dépense n'a pas une très grande importance pour l'ingénieur-décideur. Pour résumer, imposer des tolérances relatives élevées va orienter le choix vers les valeurs extrêmes du front de Pareto (i.e. $\tau = 1$ ou $\tau = 0$) en favorisant les solutions très performantes pour un seul objectif au détriment des autres. A contrario, imposer des tolérances relatives faibles orientera le choix vers les solutions dites ''intermédiaires'' dont les performances sont satisfaisantes pour tous les objectifs.

Les paramètres α_i et w_i sont regroupés dans le tableau 4.1. Ceux-ci prennent en compte le fait que le décideur privilégie la productivité et la qualité du produit fini (i.e. la concentration de réactif en sortie) devant les coûts énergétiques de production (i.e. la dissipation d'énergie) sans pour autant les négliger. Pour finir, la solution retenue sera celle dont la fonction d'utilité globale est la plus élevée.

Tableau 4.1 – Tolérance relative et poids accordés aux fonctions d'utilité individuelle.

Paramètres	Objectif 1	Objectif 2
w	0,4	0,6
α	0,5	1

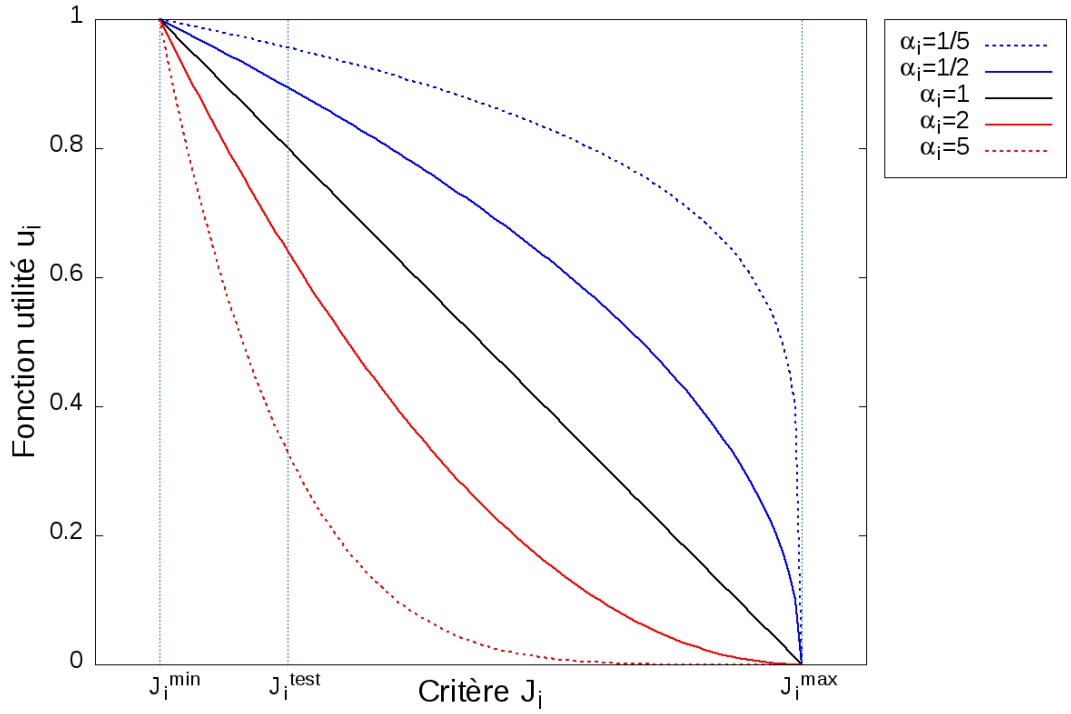


FIGURE 4.10 – Allure de la fonction d'utilité en fonction de la valeur de la tolérance relative α.

4.5.1 Choix de la meilleure forme à mettre en œuvre pour le cas RH

La figure 4.11 présente le classement des solutions de Pareto du cas RH effectué par la méthode MAUT. Le classement effectué sur la base des valeurs des fonctions d'utilité globale privilégie les solutions dont les performances en terme de conversion sont très bonnes. Ce résultat était attendu car le critère de conversion a été privilégié par rapport à celui sur la dissipation d'énergie lors du choix des paramètres α_i et w_i. Finalement la configuration optimale du lit fixe retenue est celle associée au poids τ =0,25, le réacteur qui en résulte a été fabriqué par stratoconception® afin de valider expérimentalement ce choix. La comparaison entre la forme finale issue des simulations et le réacteur fabriqué est montré sur la figure 4.12.

4.5.2 Choix de la meilleure forme à mettre en œuvre pour le cas RS

Le classement des solutions optimales pour le cas RS déterminées dans la section 4.4.2 est présenté par la figure 4.13. Comme pour le cas précédent, les solutions ayant les meilleures notes sont celles dont les performances sont satisfaisantes dans le critère de conversion, ce qui était également attendu. Pour finir, la forme finale retenue est celle issue de l'optimisation dont le poids τ était de 0,09 (voir figure 4.9). Cette configuration n'a pu être fabriquée par manque de temps.

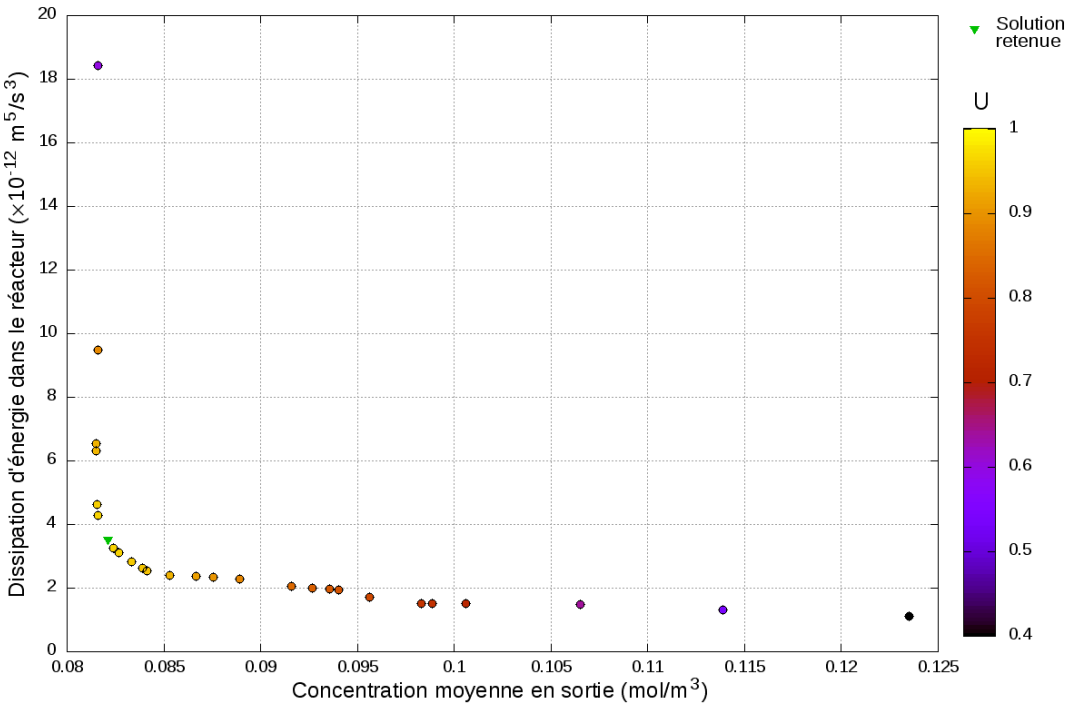
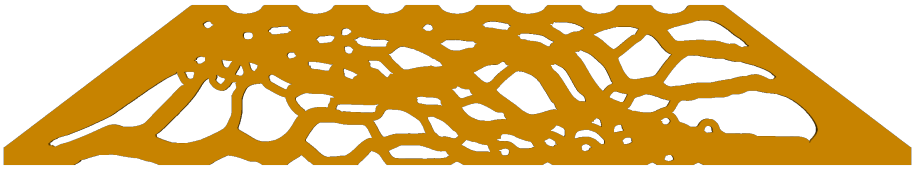
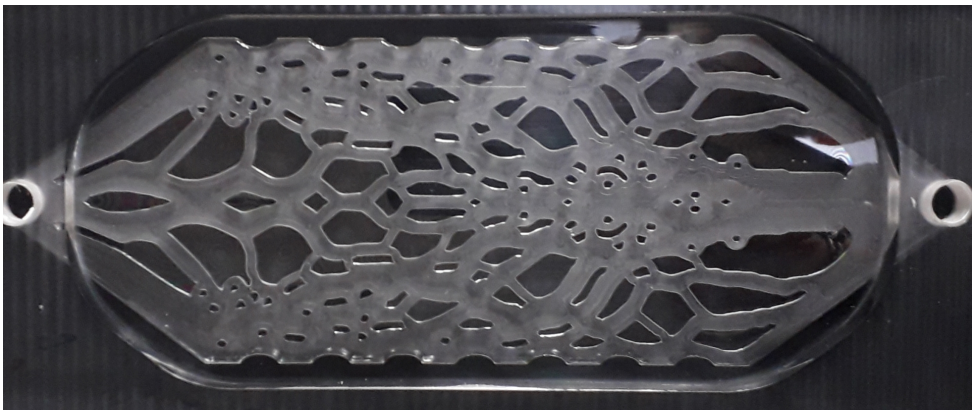


FIGURE 4.11 – Classement des solutions pour le cas RH, le triangle vert représente la solution retenue, la couleur des autres points désigne la valeur de la fonction d'utilité globale.



(a) Configuration du réacteur retenue à l'aide de la méthode MAUT.



(b) Réacteur optimal fabriqué par stratoconception®.

FIGURE 4.12 – Comparaison entre la forme retenue à l'aide de la méthode MAUT et le réacteur correspondant fabriqué par stratoconception®.

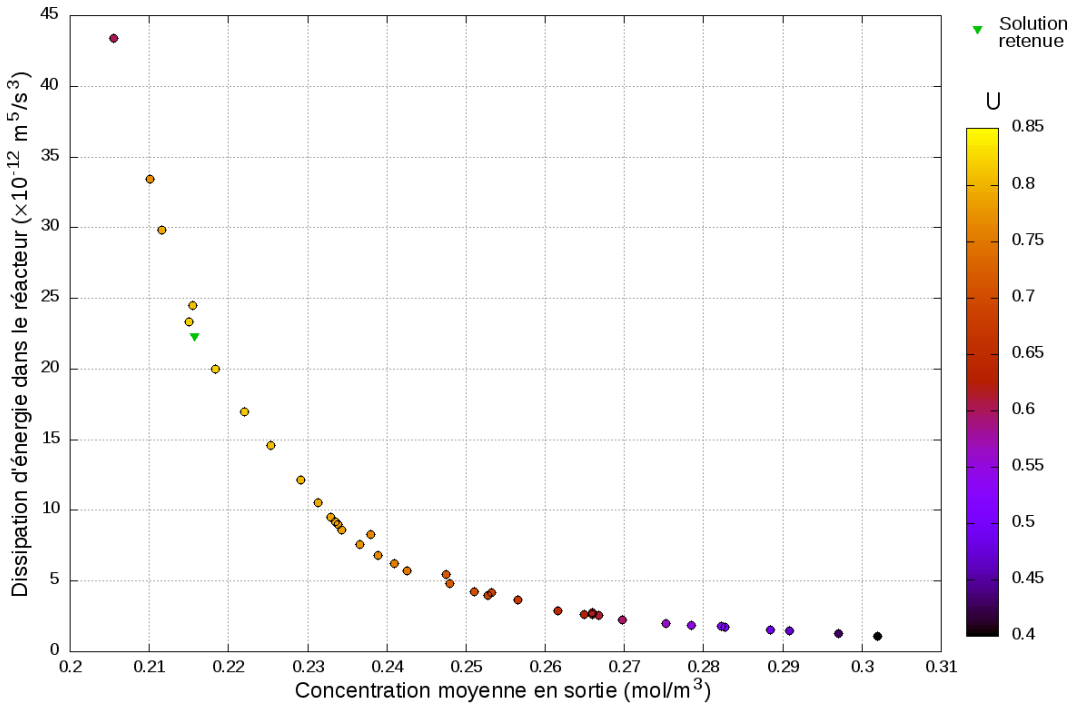


FIGURE 4.13 – Classement des solutions pour le cas RS, le triangle vert représente la solution retenue, la couleur des autres points désigne la valeur de la fonction d'utilité globale.

4.6 Conclusions

Dans ce chapitre, l'approche d'optimisation géométrique a été utilisée pour déterminer un ensemble de solutions optimales par optimisation multicritère où les deux fonctions objectif étaient la concentration de réactif en sortie et la dissipation d'énergie, deux critères dont les allures sont antagonistes. Le front de Pareto a été déterminé par variation d'un paramètre τ issu de la méthode de pondération des fonctions objectif. Finalement, pour les deux cas, la ''meilleure'' forme optimale a été déterminée à l'aide d'un outil d'aide à la décision : la méthode MAUT. Pour le cas RH, la configuration du réacteur choisie a été fabriquée par impression 3D et des mesures ont été effectuées. Ce point fait l'objet du chapitre suivant.

Certaines limites présentées dans les conclusions du chapitre précédent se sont avérées contraignantes, à commencer par le temps de calcul nécessaire pour l'optimisation d'un réacteur. En effet, sans la parallélisation des calculs en particulier pour le cas RS à l'aide du mésocentre de l'université de Lorraine, le front de Pareto aurait été moins fourni en nombre de solutions et sa détermination aurait pris quelque mois au lieu d'une quinzaine de jours. De même, l'algorithme d'optimisation géométrique développé dans ces travaux s'avère être une limite contraignante. En effet, elle l'est davantage que dans le chapitre précédent car certaines zones mortes qui apparaissent lorsque le critère sur la dissipation d'énergie est important (i.e. pour $\tau > 0{,}7$) seraient amenées à disparaître si les changements de topologie était pris en compte.

Ce chapitre a montré l'intérêt d'effectuer une optimisation multicritère des cas RH et RS. En effet, l'optimisation multicritère, bien que plus coûteuse en terme de temps de calcul, nous

a permis de choisir la solution finale dans un ensemble de solutions optimales en fonction des importances accordées aux deux fonctions objectif. On peut également noter que dans les deux cas la solution retenue, qui offre le meilleur compromis entre les critères, n'est pas l'une de celles déterminées dans le chapitre 3, or cette solution n'aurait pas été déterminée par simple optimisation monocritère. Pour finir, l'intérêt de l'optimisation multicritère est manifeste lorsque l'on optimise le cas RH. En effet, l'optimum du cas RH déterminé dans le chapitre 3 est loin d'être la meilleure solution car il est possible d'améliorer le critère sur la perte d'énergie en entraînant une détérioration négligeable de la conversion (voir figure 4.6).

Chapitre 5

Comparaison des mesures expérimentales aux résultats des simulations numériques

Sommaire

5.1 Introduction . . . 114
5.2 Simulations CFD des réacteurs . . . 114
5.3 Comparaison des DTS théoriques et expérimentales sur les 4 réacteurs . . . 117
5.3.1 Test de Fisher-Snedecor . . . 118
5.3.2 Test de Student . . . 119
5.3.3 Test de Welch . . . 120
5.3.4 Exploitation des tests . . . 120
5.4 Comparaison des champs de vitesse issus des simulations avec les mesures expérimentales . . . 121
5.4.1 Problèmes rencontrés lors des mesures PIV sur la configuration initiale du réacteur . . . 121
5.4.2 Comparaisons qualitative et quantitative des champs de vitesse expérimentaux et simulés . . . 123
5.4.2.1 Comparaison qualitative . . . 123
5.4.2.2 Comparaison quantitative . . . 126
5.5 Comparaison des mesures expérimentales et simulées du taux de conversion . . . 128
5.6 Conclusions . . . 129

5.1 Introduction

La campagne de mesures expérimentales détaillée dans le chapitre 1 a été réalisée sur 4 maquettes à l'échelle 1 représentant la configuration initiale et trois configurations optimales du réacteur déterminées dans les chapitres 3 et 4. Dans ce chapitre, nous allons comparer les résultats issus de ces expériences aux simulations CFD des 4 configurations fabriquées du réacteur. Plus précisément, l'écoulement du fluide et le transfert de matière dans les réacteurs sont modélisés de deux façons, en deux dimensions (comme dans les chapitres 3 et 4) et en trois dimensions (plus représentative de l'expérience). La comparaison expérience/simulation 3D est intéressante car elle permet de vérifier la qualité du modèle CFD en 3D nécessaire à l'optimisation du réacteur sous sa forme 3D qui pourrait constituer une suite à ce travail.

5.2 Simulations CFD des réacteurs

La présente section détaille les simulations CFD en deux et trois dimensions des réacteurs à lit fixe initial et optimaux. Plus précisément, elle présente l'ensemble des hypothèses et paramètres de simulations (i.e. viscosité cinématique du fluide, constante cinétique, vitesse d'entrée, etc...) permettant de modéliser l'écoulement du fluide et le transfert de matière et de les comparer aux données issues des expériences. Ces dernières sont au nombre de 3 :

- La détermination des DTS dans les maquettes, les simulations associées seront notées *SimuDTS*.
- La vélocimétrie par image de particules (PIV) pour mesurer le champ de vitesse sur un plan 2D, les simulations correspondantes seront notées *SimuPIV*.
- La mesure des conversions à la sortie du réacteur, les simulations correspondantes seront notées *SimuAv*.

Pour les simulations 2D et 3D, les hypothèses détaillées dans le chapitre 3 ont été réutilisées. C'est-à-dire que l'écoulement du fluide newtonien est supposé laminaire, stationnaire, incompressible, et en régime permanent. Des conditions de non-glissement au niveau des parois sont imposées et la pression relative est supposée nulle à la sortie du réacteur. L'écoulement est donc modélisé par les équations de Navier-Stokes sans modèle de turbulence ainsi que de l'équation de continuité :

$$\begin{cases} -\nu\Delta\boldsymbol{U} + \boldsymbol{U} \cdot \nabla\boldsymbol{U} + \nabla p = 0 & \text{dans } \Omega \quad (2.22a) \\ \nabla \cdot \boldsymbol{U} = 0 & \text{dans } \Omega \quad (2.22b) \\ \boldsymbol{U} = \boldsymbol{U_{in}} & \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \quad (2.22c) \\ \boldsymbol{U} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{lat}} \cup \Gamma \quad (2.22d) \\ \sigma(\boldsymbol{U}, p)\boldsymbol{n} = 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{out}} \quad (2.22e) \end{cases}$$

Ce modèle est résolu par OpenFOAM via son solveur simpleFoam qui traite le couplage pression-vitesse avec l'algorithme SIMPLE (voir annexe C). Les différences majeures avec les résolutions numériques des équations de Navier-Stokes effectuées dans les chapitres 3 et 4 résident dans les paramètres de simulations. En effet, les paramètres de viscosité cinématique ν et de constante cinétique k_{sim} diffèrent par rapport à ceux présentés précédemment. Les valeurs utilisées dans les simulations sont regroupées dans le tableau 5.1.

Tableau 5.1 – Paramètres de simulations CFD.

Simulations	Valeurs		
	ν ($m^2.s^{-1}$)	$\mathcal{D}$ ($m^2.s^{-1}$)	k_{sim} (s^{-1})
SimuAv	10^{-6}	10^{-9}	$7{,}56.10^{-3}$
SimuPIV	$1{,}84.10^{-6}$	∅	∅
SimuDTS	10^{-6}	10^{-9}	∅

Les vitesses imposées en entrée diffèrent également de celles présentées dans les chapitres 3 et 4, les paragraphes qui suivent présentent les systèmes d'injection de fluide dans les réacteurs.

Simulation 2D

La vitesse $\boldsymbol{U}_{in}$ n'est plus imposée égale à 10^{-2} m/s mais est fonction du débit Q que l'on souhaite simuler. Celle-ci s'exprime selon la relation suivante :

$$\boldsymbol{U}_{in} = -\frac{Q}{hL}\boldsymbol{n} \tag{5.1}$$

où $\boldsymbol{n}$ désigne la normale sortante à Γ_{in}, L la largeur de l'entrée et h la hauteur que le réacteur aurait s'il était en 3D pour avoir le même volume que le réacteur utilisé pour les mesures expérimentales. h s'exprime comme suit :

$$h = \frac{\mathcal{V}_E}{A_R} \tag{5.2}$$

où A_R représente l'aire du réacteur 2D et $\mathcal{V}_E$ le volume du réacteur expérimental (i.e. 121 mL). Cette définition de $\boldsymbol{U}_{in}$ pour les simulations 2D du réacteur permet de garantir l'égalité des temps de passage entre simulations et mesures expérimentales.

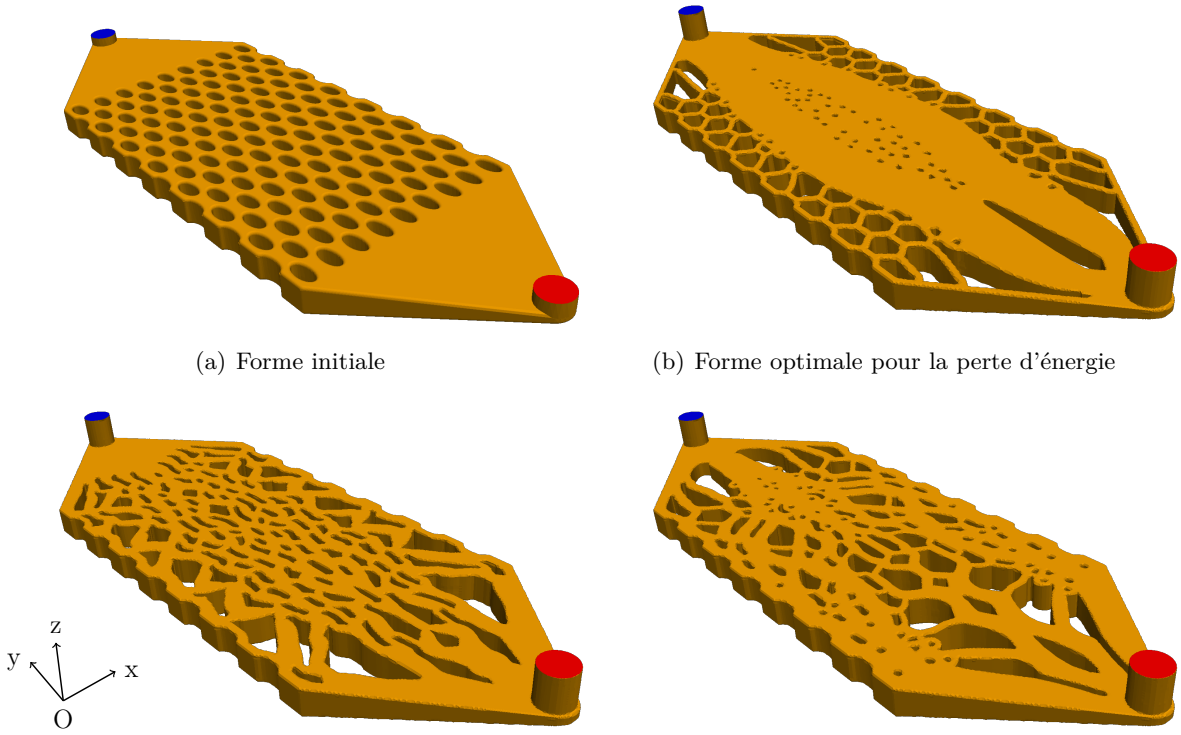
Pour finir, le maillage utilisé est identique à celui du cas RH et contient environ 65 000 mailles.

Simulation 3D

Les formes 3D numériques des réacteurs sont présentées sur la figure 5.1. Pour la suite du manuscrit, on notera :

- *R1* la configuration initiale du réacteur.
- *R2* la configuration optimale du réacteur pour la perte d'énergie.
- *R3* la configuration optimale du réacteur pour la conversion sous contrainte de perte d'énergie constante.
- *R4* la configuration optimale du réacteur choisie à l'aide de la méthode MAUT (voir chapitre 4).

Pour les 4 configurations du réacteur, on dénombre 3 frontières différentes : l'entrée (Γ_{in}) en rouge sur la figure, la sortie (Γ_{out}) en bleu et la paroi (Γ_{lat}) en orange. On note également $\Gamma_{sup} \subset \Gamma_{lat}$ la paroi supérieure (z=1 cm) et $\Gamma_{inf} \subset \Gamma_{lat}$ la paroi inférieure (z=0 cm). Ces formes sont maillées aussi finement dans le plan (Oxy) que les formes 2D et suivant l'axe Oz, on peut



(a) Forme initiale

(b) Forme optimale pour la perte d'énergie

(c) Forme optimale pour la conversion

(d) Forme optimale choisie

FIGURE 5.1 – Représentation 3D et numérique des réacteurs, (a) forme initiale, (b) forme optimale pour la perte d'énergie, (c) forme optimale pour la conversion, (d) forme optimale choisie.

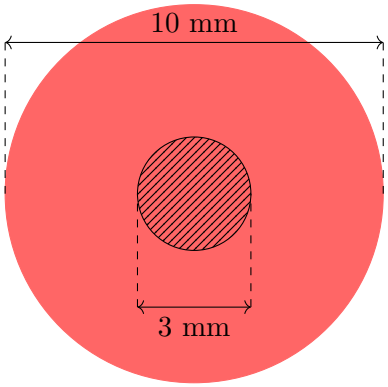


FIGURE 5.2 – Représentation schématique de l'entrée prenant en compte le raccord.

dénombrer entre 10 et 12 mailles empilées les unes sur les autres. Le maillage correspondant contient donc environ 800 000 mailles.

Le système d'injection diffère de celui présenté dans le cas 2D. Celui-ci prend en compte le caractère 3D de l'écoulement lors des mesures expérimentales. En effet, l'injection du fluide, effectuée selon l'axe Oz, est plus représentatif de l'expérience que dans le cas 2D où celle-ci s'effectuait selon l'axe Oy. De plus, le système d'injection prend en compte le raccord présent à l'entrée du réacteur pour connecter le tube et l'entrée (voir figure 1.8 par exemple). Ainsi, sur l'entrée circulaire de 10 mm de diamètre, uniquement un disque centré de 3 mm de diamètre (rayon r=1,5 mm) est utilisé pour l'injection du fluide, le reste de l'entrée est considéré comme une paroi (voir figure 5.2). La vitesse se calcule donc comme suit :

$$\boldsymbol{U}_{\text{in}} = -\frac{Q}{\pi r^2}\boldsymbol{n} \tag{5.3}$$

où $\boldsymbol{n}$ désigne la normale sortante à Γ_{in}.

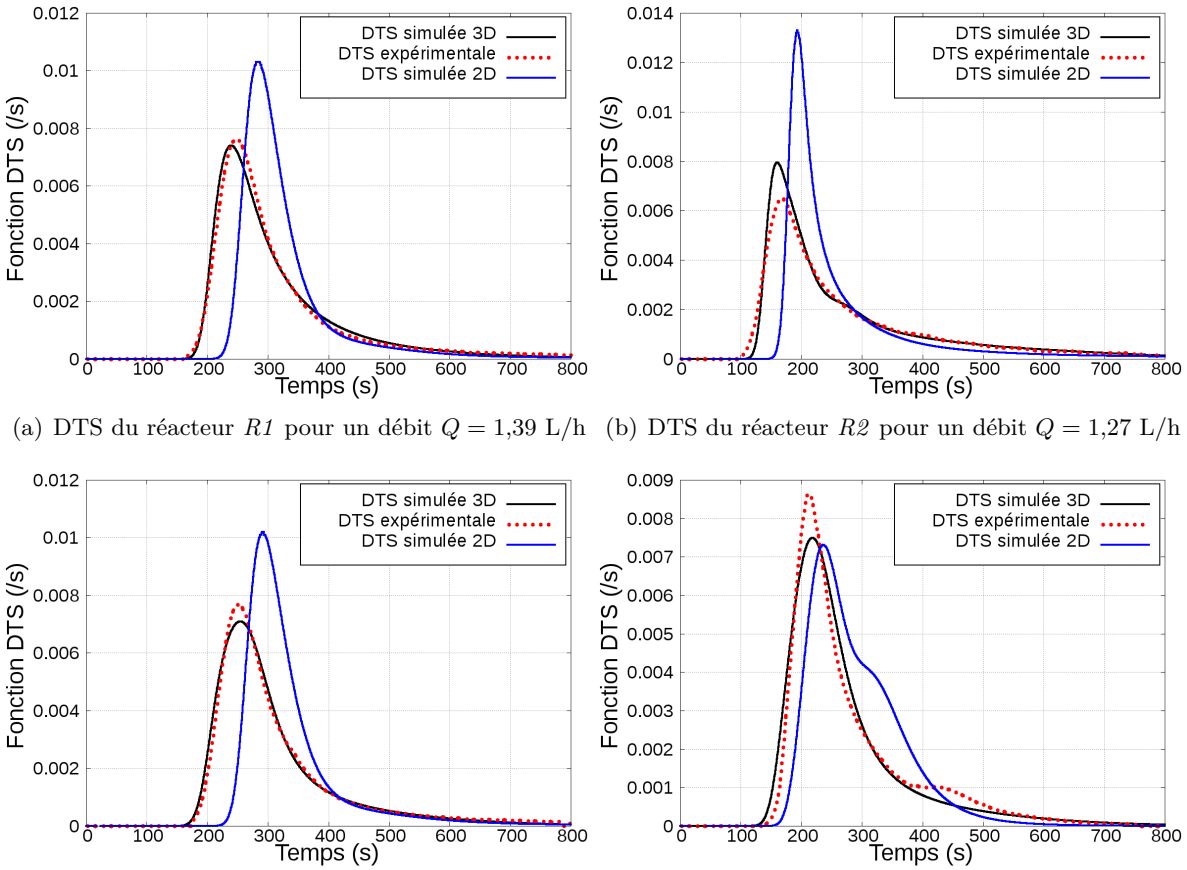
5.3 Comparaison des DTS théoriques et expérimentales sur les 4 réacteurs

Les distributions des temps de séjour dans les réacteurs *R1*, *R2*, *R3* et *R4* ont été déterminées et sont présentées dans la figure 5.3 pour des débits respectifs de 1,39 ; 1.27 ; 1,45 et 1,67 L/h. Tout d'abord, on peut constater que les allures des DTS simulées et expérimentales sont semblables, cependant, la DTS simulée 2D est, d'une manière générale, plus resserrée que la DTS simulée 3D. En effet, les écarts types des distributions 2D sont plus faibles que ceux des distributions 3D (voir tableau 5.2), par conséquent, l'écoulement est plus homogène en 2D qu'en 3D. Ce résultat est inattendu au premier abord car comme on a pu le constater dans la section 5.4, la zone morte est plus étendue en 2D qu'en 3D. Cependant, la troisième dimension amène une nouvelle source d'inhomogénéité dans l'écoulement avec une dispersion dans le sens de l'écoulement. En effet, à x et y fixés, les vitesses au niveau des parois Γ_{sup} et Γ_{inf} sont plus faibles que celles dans le plan P_{cent}.

Compte tenu des différences entre les débits, il est délicat de comparer les valeurs des écarts types et des moyennes des DTS des réacteurs présentés dans le tableau 5.2. Cependant, on peut tout de même noter que les temps de séjour moyens $\bar{t}$ sont plus faibles pour le réacteur *R1* que pour le réacteur *R2* en dépit du fait que le débit soit plus élevé. Ce constat résulte de la présence d'une zone morte plus importante dans la configuration *R2* que dans la configuration *R1* du réacteur, ce qui fait diminuer le temps séjour moyen $\bar{t}$ (Villermaux, 1993). On peut appuyer ces propos en regardant les écarts types. En effet, les écarts types des DTS de la configuration *R2* sont plus importants. Pour finir, il est également intéressant de constater que les écarts types des DTS simulées en 3D et expérimentales sont conformes aux conclusions effectuées dans le chapitre 4 sur les configurations 2D du réacteur. En effet, l'écoulement le moins homogène s'effectue dans le réacteur *R2* ($s \simeq 185$ s) et le plus homogène dans le réacteur *R3* ($s \simeq 108$ s).

Il est également intéressant de constater qu'on observe une légère inflexion sur les DTS simulée en 3D et expérimentale du réacteur *R4* (figure 5.3(d)), tandis qu'on en observe pas pour la DTS simulée en 2D. Cette inflexion est due à une recirculation dans le réacteur sous sa

forme 3D qui n'est pas modélisée lorsque la simulation est effectuée en 2D. La même inflexion est observée dans les résultats présentés dans l'annexe F.1.



(a) DTS du réacteur *R1* pour un débit $Q = 1{,}39$ L/h (b) DTS du réacteur *R2* pour un débit $Q = 1{,}27$ L/h

(c) DTS du réacteur *R3* pour un débit $Q = 1{,}45$ L/h (d) DTS du réacteur *R4* pour un débit $Q = 1{,}67$ L/h

FIGURE 5.3 – Distributions des temps de séjour des réacteurs, (a) *R1*, (b) *R2*, (c) *R3* et (d) *R4*.

Pour vérifier statistiquement l'égalité des DTS, on va vérifier l'égalité des moyennes à l'aide d'un test de Student ou de Welch ainsi que l'égalité des variances par un test de Fisher-Snedecor, supposant que les distributions suivent des lois normales.

5.3.1 Test de Fisher-Snedecor

Le test de Ficher-Snedecor consiste à vérifier l'hypothèse double d'égalité des écarts types $\sigma_A = \sigma_B$ où A et B désigne deux distributions observées indépendantes l'une de l'autre (par exemple la DTS simulée 2D ou 3D et la DTS expérimentale). Le test s'effectue en deux étapes principales (Dodge, 2008) :

Étape 1 - Calculer la variable F de Fisher selon la relation suivante :

$$F = \frac{s_A^2}{s_B^2} \tag{5.4}$$

où s_A et s_B sont des estimations des écarts types des distributions A et B.

TABLEAU 5.2 – Valeurs du temps de séjour moyen et de l'écart type des DTS en fonction de la configuration du réacteur.

Réacteur	$R1$ (Q=1,39 L/h)	$R2$ (Q=1,27 L/h)	$R3$ (Q=1,45 L/h)	$R4$ (Q=1,67 L/h)
Simulation 2D	$\overline{t_{2D}} = 297{,}9$ s $s_{2D} = 89{,}6$ s	$\overline{t_{2D}} = 224{,}8$ s $s_{2D} = 97{,}0$ s	$\overline{t_{2D}} = 307{,}5$ s $s_{2D} = 87{,}2$ s	$\overline{t_{2D}} = 285{,}0$ s $s_{2D} = 72{,}7$ s
Simulation 3D	$\overline{t_{3D}} = 313{,}6$ s $s_{3D} = 113{,}6$ s	$\overline{t_{3D}} = 301{,}6$ s $s_{3D} = 183{,}1$ s	$\overline{t_{3D}} = 311{,}3$ s $s_{3D} = 108{,}5$ s	$\overline{t_{3D}} = 274{,}2$ s $s_{3D} = 107{,}4$ s
Expérience	$\overline{t_E} = 315{,}4$ s $s_E = 117{,}6$ s	$\overline{t_E} = 314{,}8$ s $s_E = 187{,}4$ s	$\overline{t_E} = 313{,}2$ s $s_E = 107{,}6$ s	$\overline{t_E} = 281{,}4$ s $s_E = 110{,}3$ s

Étape 2 - L'hypothèse d'égalité des écarts types $\sigma_A = \sigma_B$ est acceptée si :

$$F \in [F_{1-\alpha_s/2;n_A-1;n_B-1}; F_{\alpha_s/2;n_A-1;n_B-1}]$$

Dans les bornes de l'intervalle ci-dessus, α_s représente le niveau de signification, c'est-à-dire le risque d'erreur d'accepter l'hypothèse alors qu'elle est fausse en réalité. Dans ce travail, on fixe $\alpha_s = 0{,}05$, n_A et n_B désigne le nombre de points observés pour les distributions A et B.

5.3.2 Test de Student

Lorsque les écarts types de deux distributions sont égaux, le test de Student consiste à vérifier l'hypothèse double d'égalité des moyennes $\mu_A = \mu_B$. Il s'effectue en 2 étapes (Dodge, 2008) :

Étape 1 - La variable discriminante est la variable de Student, que l'on calcule comme suit :

$$u = \frac{\bar{x_A} - \bar{x_B}}{\sqrt{s_I^2(\frac{1}{n_A} - \frac{1}{n_b})}} \tag{5.5}$$

où $\bar{x_A}$ et $\bar{x_B}$ sont des estimations des moyennes des distributions A et B et s_I^2 est la variance de A et B lorsqu'on les met en commum calculée par :

$$\begin{aligned} s_I^2 &= \frac{1}{n_A + n_B - 2}\Big(\sum_{i=1}^{n_A}(x_{A_i} - \bar{x_A})^2 + \sum_{i=1}^{n_B}(x_{B_i} - \bar{x_B})^2\Big) \\ &= \frac{1}{n_A + n_B - 2}\Big((n_A - 1)s_{\mathrm{A}}^2 + (n_B - 1)s_{\mathrm{B}}^2\Big) \end{aligned} \tag{5.6}$$

Étape 2 - L'hypothèse d'égalité des moyennes $\mu_A = \mu_B$ est acceptée si :

$$u \in [-t_{\alpha_s/2;n_A+n_B-2}; t_{\alpha_s/2;n_A+n_B-2}]$$

avec $n_A + n_B - 2$ représentant le degré de liberté, le niveau de signification est également fixé égale à 0,05.

5.3.3 Test de Welch

Lorsque les écart types des distributions sont différents $\sigma_A \neq \sigma_B$, l'égalité des moyennes se vérifie à l'aide du test t de Welch qui est une adaptation du test de Student (Welch, 1947). Le test de Welch effectue les mêmes étapes que le test précédent mais diffère du test de Student par (Sawilowsky, 2002) :

1. La fonction discriminante est définie par l'expression suivante :

$$u' = \frac{\bar{x_A} - \bar{x_B}}{\sqrt{\frac{s_A^2}{n_A} + \frac{s_B^2}{n_B}}} \tag{5.7}$$

   où s_A et s_B sont des estimations des écarts types des distributions A et B.

2. Le degré de liberté se détermine selon l'équation suivante :

$$\text{DDL} = \frac{\frac{s_A^2}{n_A} + \frac{s_B^2}{n_B}}{\frac{s_A^4}{n_A^2(n_A+1)} + \frac{s_B^4}{n_B^2(n_B+1)}} - 2 \tag{5.8}$$

Pour finir, l'hypothèse $\mu_A = \mu_B$ si et seulement si :

$$u' \in [-t_{\alpha_s/2;\text{DDL}}; t_{\alpha_s/2;\text{DDL}}]$$

5.3.4 Exploitation des tests

Les valeurs des variables de Student, de Welch et de Fisher-Snedecor permettant de comparer DTS simulées et DTS expérimentales sont disponibles dans le tableau 5.3. Les bornes supérieures et inférieures permettant de valider ou non les hypothèses d'égalité des moyennes et écarts types des DTS sont les suivantes :

$$u \in [-1{,}96\,;\ 1{,}96]$$

$$u' \in [-1{,}96\,;\ 1{,}96]$$

$$F \in [0{,}88\,;\ 1{,}13]$$

Le tableau 5.3 présente les variables de Student, de Welch et de Fisher-Snedecor. Lorsqu'elles ne sont pas comprises entre les bornes définies ci-dessus, la notation (R) est écrite dans la cellule, ce qui implique que les hypothèses d'égalité des moyennes ou des écarts types des DTS sont rejetées. A contrario, lorsque les valeurs de u, u' et F sont entre les bornes la notation (A) implique que l'hypothèse est acceptée. On remarque qu'elles sont toujours acceptées lors de la comparaison Expérience/Simulation 3D et très souvent refusées lors de la comparaison Expérience/Simulation 2D. De plus, on remarque que pour la simulation 2D, les valeurs de la variable de Fisher sont toutes inférieures à 1 (donc $s_{2D} < s_E$), ce qui confirme la meilleure homogénéité de l'écoulement dans les simulations 2D que dans l'expérience.

D'autres DTS à des débits différents des réacteurs *R1*, *R2*, *R3* et *R4* sont présentées en annexe F.1.

TABLEAU 5.3 – Valeurs des coefficients de Student, de Welch et de Fisher-Snedecor, (A) = Hypothèse d'égalité acceptée, (R) = Hypothèse d'égalité refusée.

Réacteur	$R1$ (Q=1,39 L/h)	$R2$ (Q=1,27 L/h)	$R3$ (Q=1,45 L/h)	$R4$ (Q=1,67 L/h)
Simulation 2D	$u' = -3{,}45$ (R) $F = 0{,}58$ (R)	$u' = -11{,}9$ (R) $F = 0{,}26$ (R)	$u' = -1{,}16$ (A) $F = 0{,}56$ (R)	$u' = 0{,}78$ (A) $F = 0{,}43$ (R)
Simulation 3D	$u = -0{,}35$ (A) $F = 0{,}93$ (A)	$u = -1{,}58$ (A) $F = 0{,}95$ (A)	$u = -0{,}37$ (A) $F = 1{,}01$ (A)	$u = -1{,}47$ (A) $F = 0{,}95$ (A)

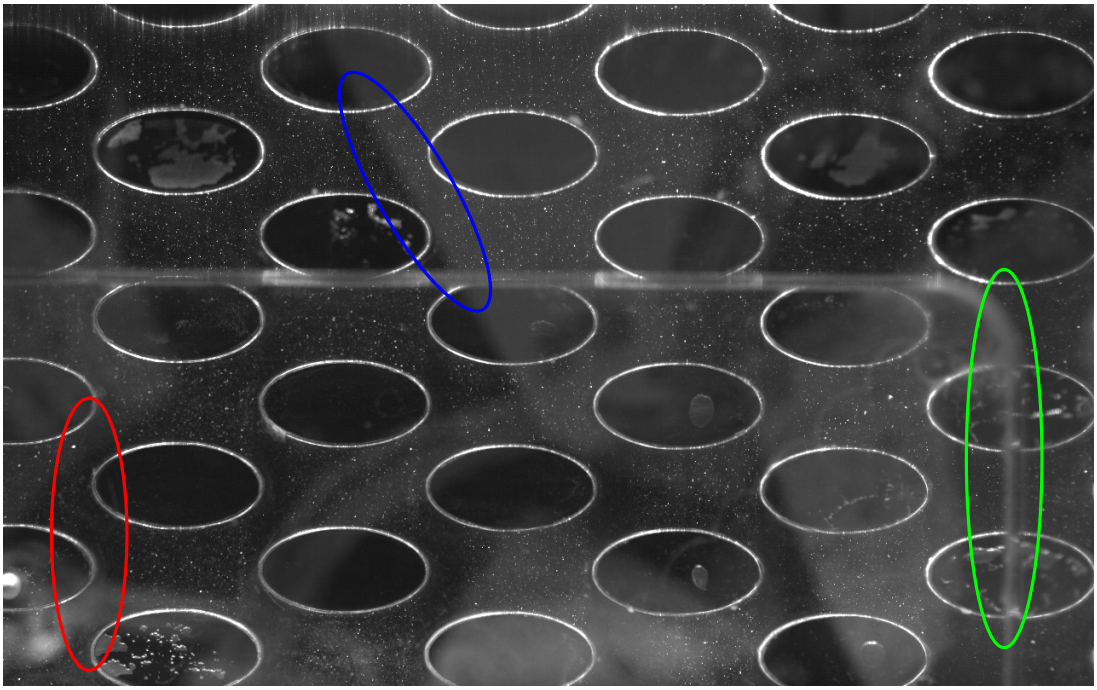
5.4 Comparaison des champs de vitesse issus des simulations avec les mesures expérimentales

5.4.1 Problèmes rencontrés lors des mesures PIV sur la configuration initiale du réacteur

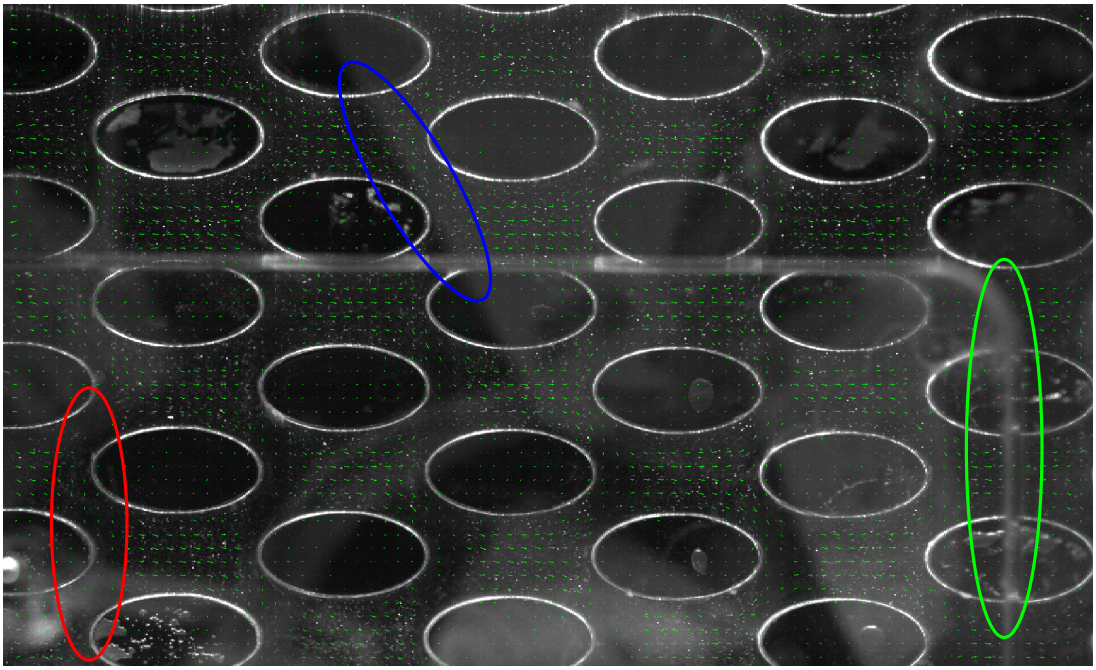
Lors des mesures PIV sur la forme initiale du réacteur, on a rencontré trois problèmes susceptibles de conduire à des pertes d'informations lors du traitement des images par le logiciel PIVLab (Thielicke et Stamhuis, 2014) :

1. Des zones d'ombre, où l'intensité de la lumière laser est plus faible que dans le reste du réacteur, apparaissent derrière les extrémités des obstacles cylindriques (entourées en rouge sur la figure 5.4). Dans ces zones, les particules ensemencées ne sont plus assez éclairées et donc non visibles lors de la prise de vue. Il en résulte donc une vitesse nulle ou très faible dans ces zones, ce qui n'est pas le cas dans la réalité.
2. Initialement, une fenêtre de visualisation a été installée pour faciliter les prises de vue sur une zone précise située à mi-parcours dans le garnissage (voir figure 5.5). Or au final, l'analyse PIV a été effectuée sur l'ensemble du réacteur et les bords de la fenêtre de visualisation (entouré en vert sur la figure 5.4) empêchent la visualisation des particules. Il en résulte également une vitesse nulle non représentative de la réalité.
3. La technique PIV nécessite un fond noir derrière l'écoulement pour faciliter la visualisation des particules ensemencées qui sont de couleur blanche sur les images. Lors des manipulations, un fond noir a été installé derrière le réacteur en PMMA. Cependant, des câbles et du ruban adhésif marron (voir figure 5.5), utiles pour une future mesure de gradient de vitesse par polarographie sur microélectrodes, éclaircissent le fond noir dans certaines zones (interface sombre-clair entourée en bleu sur la figure 5.4). Ce qui engendre dans une moindre mesure une perte d'information.

Pour pallier ces différents problèmes lors des mesures PIV sur les configurations optimales du réacteur à lit fixe, il a été décidé, lors de la fabrication des réacteurs *R2*, *R3* et *R4*, de polir les obstacles pour éviter les zones d'ombres, d'augmenter la fenêtre de visualisation à l'ensemble du réacteur et d'ajouter une plaque opaque de couleur noire faisant office de fond noir qui sera uniforme (voir figure 4.12(b)).



(a) Exemple d'une image photographiée par la caméra.



(b) Champ de vecteur vitesse déterminé par le logiciel PIVLab.

FIGURE 5.4 – Illustration des problèmes rencontrés sur la configuration initiale du réacteur.

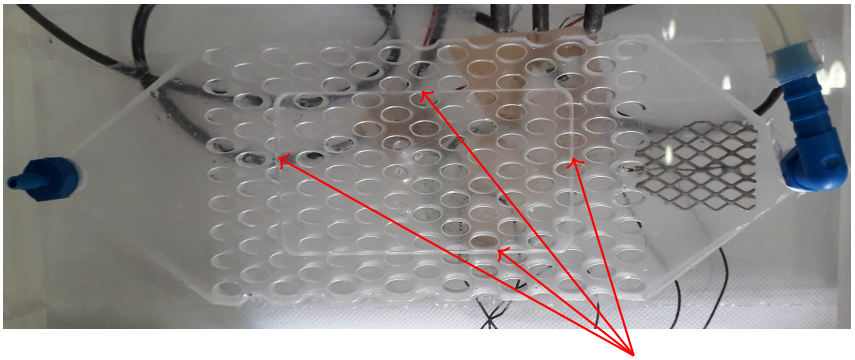


FIGURE 5.5 – Réacteur initial, mise en évidence de la fenêtre de visualisation.

5.4.2 Comparaisons qualitative et quantitative des champs de vitesse expérimentaux et simulés

Des mesures de champ de vitesse par PIV ont été effectuées sur la configuration initiale du réacteur à lit fixe à trois débits différents : 3,14 ; 4,94 et 5,19 L/h. Les simulations 2D et 3D correspondantes ont été réalisées et les figures 5.6, 5.7 et F.5 (la figure F.5 est disponible dans l'annexe F.2) présentent les comparaisons entre simulations et expériences. Plus particulièrement, les figures comparent, pour un débit donné, les champs de vitesse :

- pour une simulation 2D (1),
- dans le plan perpendiculaire à l'axe Oz et passant par le centre du réacteur (z=0,5 cm) pour une simulation 3D (2), on appellera ce plan P_{cent},
- trois mesures expérimentales situées dans le même plan que la simulation 3D correspondant à trois zones distinctes dans le réacteur : la zone d'entrée et la partie inférieure du garnissage (3a), la partie centrale du garnissage (3b) et la partie supérieure du garnissage (3c) (voir figures 5.6, 5.7 et F.5).

En raison d'un retard sur la fabrication des réacteurs optimaux *R2*, *R3* et *R4* dû à la pandémie mondiale de COVID-19, les mesures PIV sur ces réacteurs n'ont pu être effectuées ; elles seront réalisées dans un futur proche. Ce retard n'est pas critique car l'objectif principal de ce chapitre n'est pas uniquement de comparer les configurations du réacteur entre elles, mais de vérifier la qualité des simulations en terme de nombre de volume de contrôle dans le maillage et d'hypothèses effectuées sur l'écoulement en les comparant aux résultats expérimentaux.

5.4.2.1 Comparaison qualitative

La figure 5.6 compare, dans un premier temps qualitativement, les champs de vitesse simulés et expérimentaux pour un débit de 3,14 L/h. Cette comparaison montre l'inadéquation entre la simulation 2D (1) et les mesures expérimentales (3a,3b,3c) en particulier au niveau de l'entrée du réacteur (3a) où la zone morte est plus prononcée dans la simulation 2D que dans la réalité. Ce résultat était attendu car le système d'injection du fluide diffère considérablement entre l'expérience et la simulation 2D. En effet, dans les simulations 2D, l'injection du fluide est effectuée suivant l'axe Oy, c'est-à-dire, dans la direction moyenne du fluide dans le réacteur (de

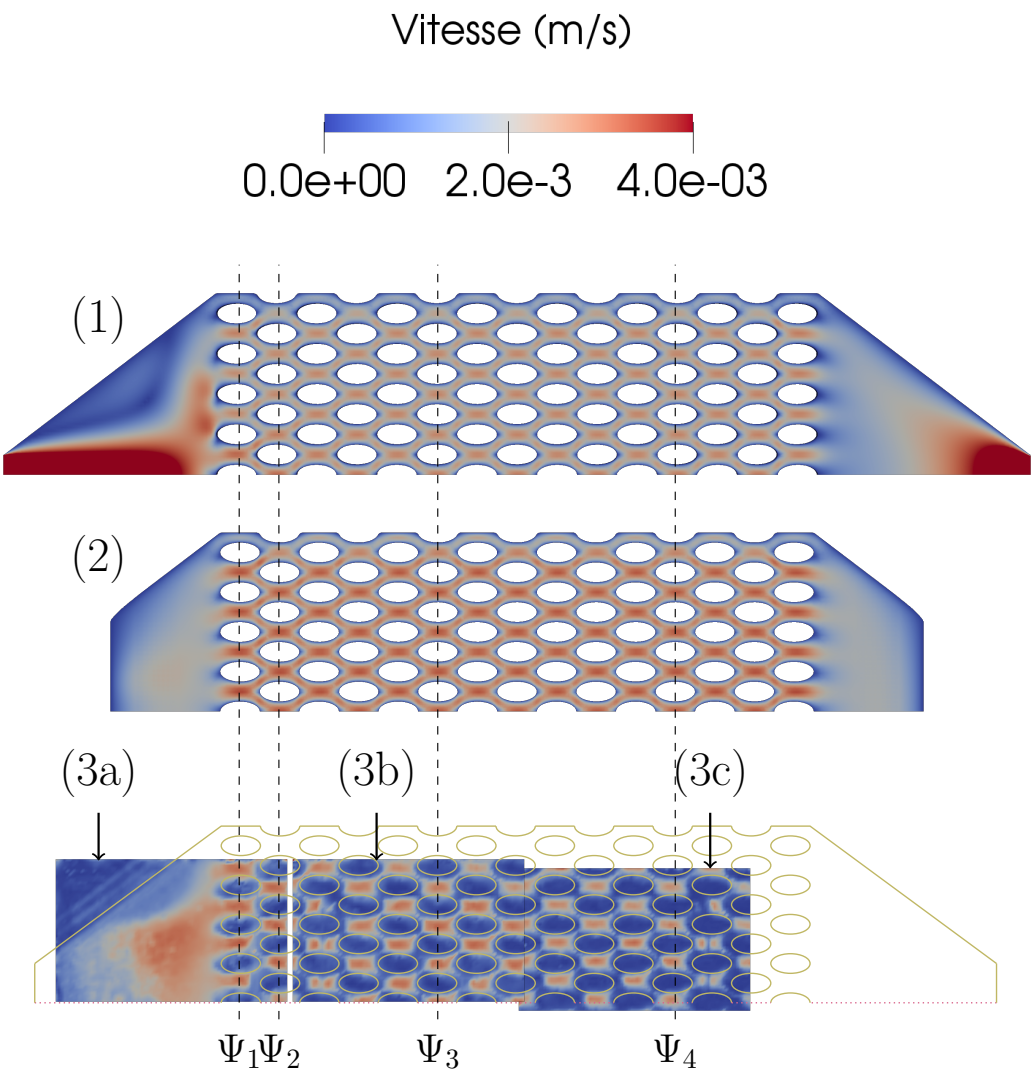


FIGURE 5.6 – Comparaison des champs de vitesse pour un débit de 3,14 L/h, (1) représente le champ de vitesse pour une simulation 2D, (2) le champ de vitesse dans le plan parallèle à (Oxy) et centré suivant l'axe Oz dans le réacteur pour une simulation 3D et (3a), (3b) et (3c) les mesures expérimentales par PIV. Les axes Ψ représentent les droites selon lesquelles la comparaison quantitative des profils de vitesse sera effectuée.

l'entrée vers la sortie). A contrario, dans l'expérience, le fluide est injecté perpendiculairement au plan (Oxy) qui est le plan de l'écoulement dans le garnissage. Ainsi, la trajectoire du fluide est déviée à l'entrée du réacteur pour tendre vers une trajectoire dans le plan (Oxy) [5]. Cette singularité qui dévie le fluide explique la zone morte moins prononcée que dans la simulation 2D. L'injection de fluide étant plus représentative de l'expérience dans la modélisation 3D, cette zone morte est également peu prononcée et en adéquation avec (3a) dans la simulation 3D.

5. Ces propos sont également illustrés par la figure 5.6(3a). En effet, l'expérience montre que la vitesse du fluide est faible juste après l'entrée du réacteur or ce n'est pas le cas dans la réalité. Cette faible vitesse déterminée expérimentalement est la conséquence du fait que l'écoulement ne suit pas le plan de la prise d'image. Ainsi, les particules ensemencées ne suivent également pas le plan et donc ne permettent pas de remonter à une vitesse.

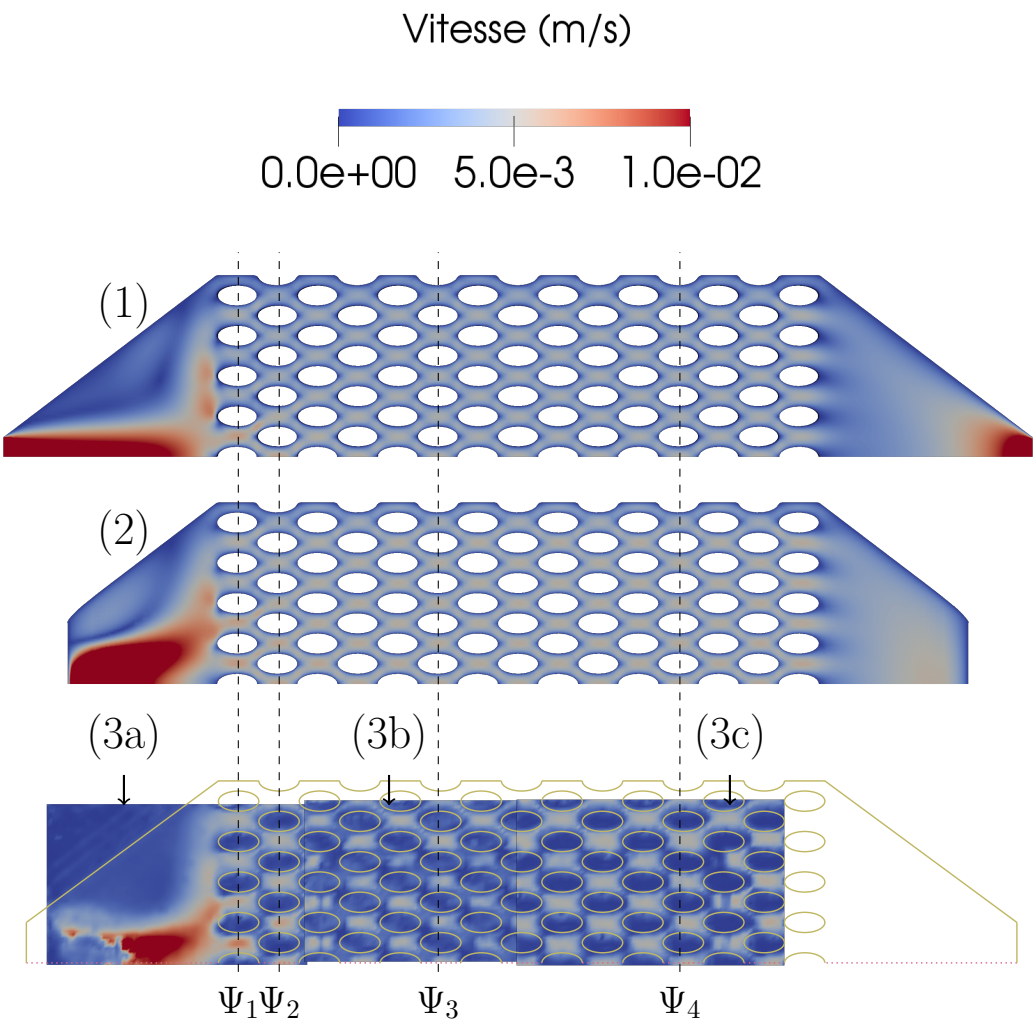


FIGURE 5.7 – Comparaison des champs de vitesse pour un débit de 4,94 L/h, (1) représente le champ de vitesse pour une simulation 2D, (2) le champ de vitesse dans le plan parallèle à (Oxy) et centré suivant l'axe Oz dans le réacteur pour une simulation 3D et (3a), (3b) et (3c) les mesures expérimentales par PIV. Les axes Ψ représentent les droites selon lesquelles la comparaison quantitative des profils de vitesse sera effectuée.

Le figure 5.7 compare les champs de vitesse simulés en 2D et 3D avec le champ de vitesse mesuré expérimentalement lorsque le débit est de 4,94 L/h. D'un point de vue qualitatif, les mêmes conclusions peuvent être effectuées que celles émises dans le paragraphe précédent. En effet, les mesures expérimentales sont en meilleure adéquation avec la simulation 3D qu'avec celle réalisée en 2D. De plus, la figure montre que lorsque l'on augmente le débit à 4,94 L/h, la zone mort présente dans la mesure (3a) est plus étendue que lorsque le débit est de 3,14 L/h. Ce résultat est confirmé par la simulation CFD en 3D où l'on voit que la zone morte est également plus étendue.

La comparaison qualitative des champs de vitesse pour le débit de 5,19 L/h est disponible en annexe F.2. La sous-section suivante présente une comparaison quantitative des profils de vitesse suivant les droites Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 et Ψ_4.

5.4.2.2 Comparaison quantitative

La figure 5.8 présente les profils de vitesse expérimentaux (pointillés rouges) et simulés en 2D (trait continu bleu) et en 3D (trait continu noir) suivant les 4 axes Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 et Ψ_4 et pour un débit de 3,14 L/h. Tout d'abord, on peut remarquer que les profils associés aux simulations 2D et 3D sont des successions de segments. Ce résultat inattendu n'est pas la conséquence de mauvaises simulations mais celle de la manière que Paraview (le logiciel de traitement des résultats CFD utilisé) utilise pour tracer un profil de vitesse suivant une droite. En effet, Paraview détermine les vitesses sur les intersections entre la droite et les faces des volumes de contrôle du maillage puis interpole linéairement entre les vitesses déterminées (Ayachit, 2015). Interpoler par des splines cubiques par exemple aurait été plus judicieux et représentatif de l'écoulement laminaire simulé, mais Paraview ne le permet pas.

En ce qui concerne les résultats, excepté au voisinage des parois, c'est-à-dire pour des distances du plan de symétrie (Oyz) dans la direction x (l'abscisse des graphes) proche de 2,5 mm modulo 5 mm, le profil de vitesse issu des mesures PIV semble concorder avec celui issu de la simulation 3D, tandis que les courbes issues des simulation 2D semblent moins concorder. Au voisinage de la paroi, les écarts entre vitesses simulées et expérimentales sont plus conséquents car les mesures PIV sont peu précises dans cette zone (voir section 1.4.1.6). Pour caractériser l'écoulement au voisinage de la paroi, il pourrait être intéressant d'effectuer des mesures de gradient de vitesse par polarographie sur micro-électrode (Dumas, 2006; Lesage, 2000). Les mêmes conclusions peuvent être émises sur les profils de vitesse suivant les 4 droites Ψ pour les débits de 4,94 et de 5,19 L/h dont les graphes correspondants sont disponibles dans l'annexe F.2.

Pour quantifier les adéquations entre expériences et simulations, les erreurs des moindres carrés (Root Mean Square Errors, RMSE en anglais) entre profils simulés et expérimentaux ont été déterminées pour chaque droite Ψ selon l'équation suivante :

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{\mathrm{NB}_P} (U_i^{\mathrm{S}} - U_i^{\mathrm{E}})^2}{\mathrm{NB}_P}} \tag{5.9}$$

où NB_P désigne le nombre de points expérimentaux, U^{S} la vitesse simulée (en 2D ou en 3D) et U^{E} expérimentale. Ces RMSE ont toutes été déterminées sans tenir compte des valeurs de vitesse au voisinage de la paroi, c'est-à-dire lorsque la distance à la paroi est inférieure à 0,5 mm. Elles sont regroupées dans les tableaux 5.4, 5.5 et 5.6. On remarque bien que d'une manière générale et excepté pour le profil de vitesse suivant la droite Ψ_3 pour le débit Q = 4,94 L/h où il semble y avoir une erreur de mesure, les RMSE sont plus faibles lorsque l'on compare la simulation 3D à l'expérience. Cela conforte la comparaison qualitative qui stipule une meilleure adéquation de l'expérience avec la simulation 3D qu'avec la simulation 2D.

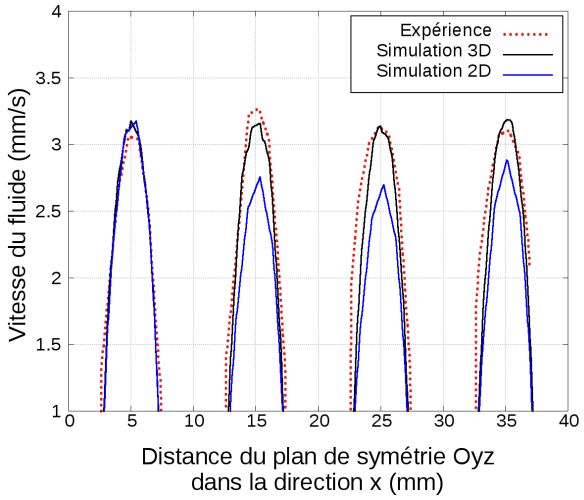
Les mêmes conclusions peuvent être tirées vis-à-vis des mesures PIV que celles déjà effectuées lors de la détermination des DTS des réacteurs. En effet, la modélisation 3D de l'écoulement est plus représentative de la réalité car les simulations 3D prennent en compte la dispersion suivant le sens de l'écoulement, ce qui n'est pas le cas dans la modélisation 2D.

TABLEAU 5.4 – Valeurs des RMSE suivant chaque axe pour le débit de 3,14 L/h.

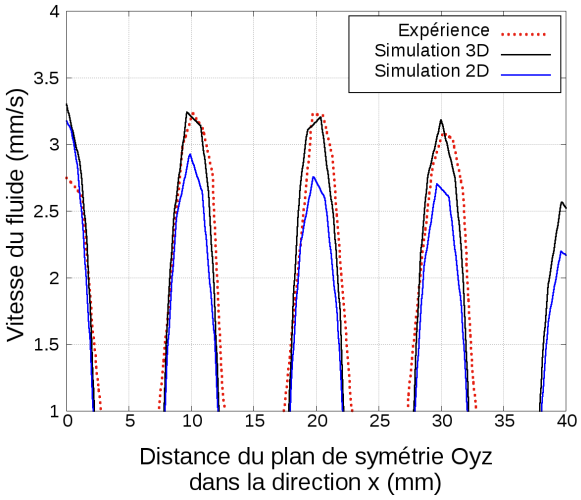
Axe	Ψ_1	Ψ_2	Ψ_3	Ψ_4
RMSE Expérience/Simulation 2D (m/s)	$1{,}14.10^{-3}$	$1{,}44.10^{-3}$	$7{,}99.10^{-4}$	$6{,}68.10^{-4}$
RMSE Expérience/Simulation 3D (m/s)	$7{,}80.10^{-4}$	$9{,}65.10^{-4}$	$3{,}39.10^{-4}$	$3{,}11.10^{-4}$

TABLEAU 5.5 – Valeurs des RMSE suivant chaque axe pour le débit de 4,94 L/h.

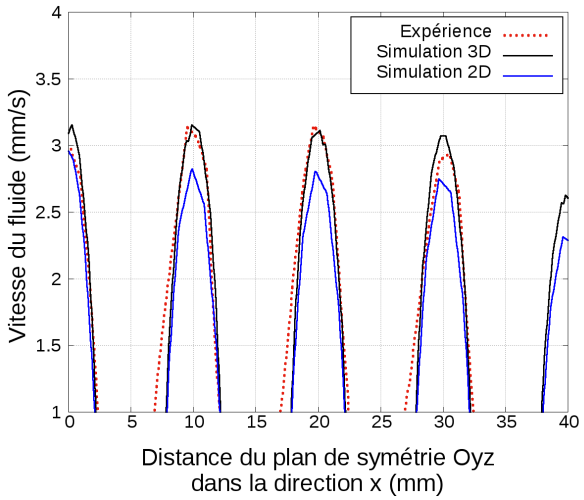
Axe	Ψ_1	Ψ_2	Ψ_3	Ψ_4
RMSE Expérience/Simulation 2D (m/s)	$6{,}41.10^{-4}$	$5{,}88.10^{-4}$	$4{,}63.10^{-4}$	$3{,}35.10^{-4}$
RMSE Expérience/Simulation 3D (m/s)	$4{,}37.10^{-4}$	$4{,}34.10^{-4}$	$1{,}00.10^{-3}$	$5{,}42.10^{-4}$



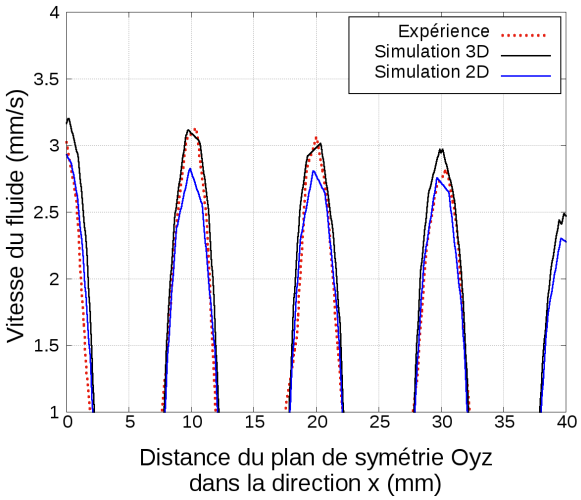
(a) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_1



(b) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_2



(c) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_3



(d) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_4

FIGURE 5.8 – Comparaison des profils de vitesse issus des simulations 2D et 3D avec les mesures expérimentales pour un débit $Q = 3{,}14$ L/h suivant les axes, (a) Ψ_1, (b) Ψ_2, (c) Ψ_3 et (d) Ψ_4 (débit de 3,14 L/h).

TABLEAU 5.6 – Valeurs des RMSE suivant chaque axe pour le débit de 5,19 L/h.

Axe	Ψ_1	Ψ_2	Ψ_3	Ψ_4
RMSE Expérience/Simulation 2D (m/s)	$1{,}47.10^{-3}$	$1{,}18.10^{-3}$	$8{,}68.10^{-4}$	$9{,}83.10^{-4}$
RMSE Expérience/Simulation 3D (m/s)	$9{,}90.10^{-4}$	$9{,}93.10^{-4}$	$4{,}84.10^{-4}$	$1{,}01.10^{-3}$

TABLEAU 5.7 – Comparaison des conversions du réacteur initial simulé en 2D et 3D avec la conversion expérimentale.

Débit (L/h)	2,85	3,15	3,40	3,73	4,94	5,19
Absorbance de la solution sortante	0,787	0,746	0,766	0,661	0,539	0,507
Concentration en $S_2O_8^{2-}$ à la sortie (mol/m^3)	0,882	0,959	0,918	1,133	1,380	1,445
Conversion expérimentale de la réaction (%)	65,2	62,1	63,7	55,1	45,1	42,4
Conversion théorique de la réaction (cas 2D) (%)	65,3	61,7	59,0	55,7	46,2	44,6
Différence de conversion entre théorie 2D et expérimentale (%)	0,1	0,4	4,7	0,6	1,1	2,2
Conversion théorique de la réaction (cas 3D) (%)	66,1	62,6	60,0	56,8	47,5	45,9
Différence de conversion entre théorie 3D et expérimentale (%)	0,9	0,5	3,7	1,7	2,4	3,4

5.5 Comparaison des mesures expérimentales et simulées du taux de conversion

À l'instar des mesures PIV, les mesures de conversion à la sortie du réacteur ont été effectuées uniquement sur la forme initiale du réacteur en raison du retard sur la fabrication des réacteurs optimaux *R2*, *R3* et *R4*. Par conséquent, il ne sera pas possible de discuter de la potentielle amélioration de la conversion pour les réacteurs *R3* et *R4*.

Le tableau 5.7 présente la comparaison des conversions du réacteur simulé en 2D et 3D avec la conversion expérimentale déterminée par spectrophotométrie. Tout d'abord, bien que l'écart type de la DTS du réacteur *R1* soit plus faible en 2D qu'en 3D (donc l'homogénéité de l'écoulement de fluide dans le réacteur est meilleure), la conversion lorsque le réacteur est modélisé en 2D est inférieure à celle du réacteur modélisé en 3D. Cela s'explique par la présence d'une zone morte plus prononcée en 2D qu'en 3D (voir figure 5.6) qui diminue le temps de séjour moyen des molécules dans le réacteur (voir tableau 5.2).

Ensuite, le tableau 5.7 montre que la conversion du réacteur simulé en 2D est plus proche de celle déterminée par spectrophotométrie que celle du réacteur simulé en 3D malgré le fait que l'écoulement de fluide soit moins représentatif de la réalité en 2D. Cette incohérence est possiblement due à des incertitudes lors des manipulations, telles que l'incertitude sur la constante

cinétique déterminée ou sur la dilution qui permet de stopper la réaction à la sortie du réacteur. En effet, par exemple, une erreur de 6 % sur la constante cinétique entraîne une erreur de 1,9 % sur la conversion (pour un débit de 3,73 L/h). Une autre explication, plus probable, réside dans une hypothèse effectuée sur la modélisation de l'entrée. En entrée, on a supposé que le mélange était parfait, c'est-à-dire, que la concentration de réactif est homogène sur l'entrée. Or, cela n'est pas forcément le cas dans l'expérience qui met uniquement en œuvre un raccord en T pour réaliser le mélange. Pour les mesures futures, il sera donc intéressant d'installer un mélangeur statique ou de mélanger les réactifs par agitation mécanique avant l'entrée du réacteur.

5.6 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons comparé les résultats issus de la campagne expérimentale présentée dans le chapitre 1 aux simulations CFD pour les quatre maquettes à l'échelle 1 fabriquées par impression 3D.

Ce chapitre a montré une meilleure adéquation avec l'expérience lorsque l'écoulement du fluide dans le réacteur est simulé en trois dimensions qu'en deux dimensions. Ce premier résultat s'explique de deux façons :

- l'injection de fluide dans le réacteur est mieux modélisée en 3D,
- les simulations 2D ne prennent pas en compte la dispersion suivant l'axe Oz qui amène une nouvelle source d'inhomogénéité de l'écoulement de fluide.

Ces erreurs lors de la modélisation 2D de l'écoulement du fluide dans le réacteur ne sont pas critiques et peuvent être utilisées dans un premier temps pour optimiser la géométrie du réacteur comme ce fut le cas dans ces travaux. En revanche, une première perspective à ces travaux de thèse pourrait donc être d'optimiser la forme du réacteur en trois dimensions. Cependant, certains problèmes seront rencontrés et sont discutés dans les conclusions et perspectives.

Pour finir, pour les futures expériences visant à déterminer la conversion des réacteurs optimaux, il sera intéressant d'installer un mélangeur statique ou de mélanger la solution par agitation mécanique en amont du réacteur afin d'améliorer le mélange et de se rapprocher du mélange parfait qui est simulé.

Conclusions générales et perspectives

Cette thèse est un travail prospectif qui vise à appliquer en Génie des Procédés des méthodes d'optimisation de forme développées dans d'autres domaines d'ingénierie. L'objet d'étude était un réacteur à lit fixe, mais la méthodologie est générale et pourra, moyennant certains ajustements, être appliquée à d'autres systèmes tels que les échangeurs de chaleur.

Cette étude a permis de développer une méthodologie d'optimisation géométrique dont le calcul du gradient est basé sur la méthode de l'état adjoint. La méthode d'optimisation a été implanté dans le logiciel libre de CFD OpenFOAM. Elle a ensuite été testée et utilisée dans le but de déterminer la forme optimale du garnissage permettant de minimiser la dissipation d'énergie dans le fluide due aux frottements visqueux dans le réacteur, de maximiser la conversion du réacteur ou d'optimiser simultanément ces deux fonctions objectif. La méthode d'optimisation de forme étant sensible à la qualité de la résolution CFD modélisant l'écoulement de fluide dans le réacteur, les configurations initiale et optimales du réacteur sont fabriquées afin de valider expérimentalement les simulations CFD.

Après avoir effectué des tests préliminaires sur des systèmes très simples, la méthode d'optimisation de forme est appliquée aux transferts de matière et à la conception optimale de réacteurs à lit fixe (chapitre 3). L'objectif était alors de déterminer la forme du garnissage permettant de maximiser la conversion du réacteur sous contrainte d'iso-volume et de perte d'énergie maximale. Les réacteurs optimaux étant destinés à être fabriqués par impression 3D, deux contraintes liées à l'étape de fabrication ont été implémentées dans l'algorithme d'optimisation. Il s'agit de deux contraintes imposant une largeur minimale aux canaux et une épaisseur minimale aux obstacles. Deux types de réactions sont alors étudiées, (i) une réaction homogène de premier ordre (cas RH) et (ii) une réaction de surface limitée par le transfert externe (cas RS). Dans chacun des cas, l'optimisation de la forme du garnissage permet une amélioration significative de la conversion des réacteurs.

Nous avons ensuite optimisé simultanément la conversion et la dissipation d'énergie, deux critères dont les allures sont antagonistes, à l'aide de l'optimisation multicritère. Un ensemble de solutions optimales a alors été déterminé (le front de Pareto). La configuration offrant le meilleur compromis entre les deux critères a été choisie grâce à une méthode d'aide à la décision (méthode MAUT), puis fabriquée par impression 3D dans le but de l'expérimenter et valider les simulations CFD. D'un point de vue ingénierie, optimiser simultanément plusieurs critères puis choisir la meilleure solution optimale grâce à une méthode d'aide à la décision est une nécessité, car dans l'industrie, il est fréquent que l'ingénieur soit confronté à un problème multicritère. À

notre connaissance, c'est le premier usage de ces méthodes dans le cadre de l'optimisation de forme.

Pour finir, la campagne expérimentale détaillée dans le chapitre 1 a été réalisée et le dernier chapitre présente la comparaison entre résultats expérimentaux et simulations CFD en 2D et en 3D. Il en résulte une meilleure adéquation lorsque l'écoulement est simulé en 3D même si les résultats des simulations 2D ne sont pas aberrants. Même si l'on peut regretter l'absence de certains résultats expérimentaux, on peut tout de même dire que la forme optimale déterminée en 2D a malgré tout améliorée les performances du réacteur (en améliorant l'homogénéité de l'écoulement, voir section 5.3), même si on s'attend à ce que l'optimisation du réacteur sous sa forme 3D donne de meilleurs résultats.

À court terme, la suite de ces travaux de thèse sera dédiée au parachèvement de la campagne de mesures expérimentales ayant pris du retard en raison de la pandémie de COVID-19. Plus particulièrement, la suite consistera à valider l'amélioration de la conversion des formes optimales *R3* et *R4*.

La méthodologie d'optimisation de forme développée est encourageante et prometteuse ; elle permet un gain significatif dans la conversion ou la perte d'énergie. Cependant, elle montre certaines limites sur lesquelles il faut continuer de travailler.

Une première limite concerne la famille d'optimisation de forme choisie dans ces travaux. En effet, la méthode d'optimisation géométrique développée dans ces travaux ne permet pas les changements de topologie (i.e. création ou disparition de trous en 2D). Ainsi, optimiser la forme du garnissage à l'aide d'une méthode d'optimisation topologique pourrait être une suite intéressante à ce travail. Elle permettrait d'augmenter le degré de liberté de la méthode d'optimisation en acceptant les changements de topologie. Cependant, cela augmenterait les chances de converger vers un minimum local. De plus, l'utilisation d'une méthode d'optimisation topologique augmenterait les temps de calcul qui sont déjà une limite contraignante. Un autre inconvénient à l'utilisation des algorithmes topologiques réside dans le caractère manufacturable de l'objet final. En effet, certes les performances de l'objet simulé seront meilleures, cependant, la forme optimale sera plus complexe et, par conséquent, techniquement difficile à fabriquer. Si le choix est fait d'optimiser topologiquement la forme du réacteur, il serait intéressant de s'inspirer des travaux de Santhanakrishnan et al. (2018), de Feppon et al. (2019) ou de Othmer et al. (2007) qui mettent en œuvre une méthode de *level set*. On peut également envisager de modifier la topologie de la forme initiale (i.e. le nombre de trous). En effet, en travaillant par énumération sur le nombre d'inclusions, et en résolvant à chaque fois le problème d'optimisation géométrique, il sera possible d'étudier l'influence de la topologie sans modifier fondamentalement la méthodologie développée dans ce travail. En revanche, cela se ferait au détriment du temps de calcul.

Une seconde limite concerne le traitement des contraintes d'épaisseur qui, dans l'algorithme développé, souffrent d'une trop grande rigidité et ne permettent pas leur violation au cours du processus d'optimisation. Il serait intéressant de traiter ces contraintes directement dans le lagrangien. Cependant, celles-ci impliquent des distances minimales et la dérivation par rapport au domaine d'une fonction comportant un minimum est une tâche complexe. Dans leurs travaux, Allaire et al. (2016) reformulent ces contraintes d'épaisseur par des fonctions de pénalisation qui sont dérivables par rapport au domaine. Il serait sûrement intéressant de s'en inspirer. Une autre piste pour améliorer le traitement de ces contraintes d'épaisseur serait de les reformuler par des

fonctions barrières (Nesterov, 2018) et de les agréger au lagrangien.

Ensuite, ces travaux de thèse ont montré la nécessité d'optimiser le réacteur sous sa forme 3D. En effet, la dispersion suivant le sens de l'écoulement est non négligeable, ce qui amène une nouvelle source d'inhomogénéité de l'écoulement de fluide qui n'est pas modélisé par la simulation 2D du réacteur. L'ajout de la troisième dimension est donc nécessaire. De plus, elle va permettre de gagner en degrés de liberté et donc d'améliorer les performances des réacteurs déjà fabriqués. Cependant, certains problèmes seront rencontrés, et sur lesquels il faudra réfléchir :

- Le temps de calcul sera considérablement augmenté par l'ajout de la troisième dimension. En effet, le temps de calcul est directement lié au nombre de volumes de contrôle dans le maillage et celui-ci passera de 50 000/100 000 à 800 000 voir 1 000 000. Dans ce cas, une première idée pour limiter les temps de calcul consistera à paralléliser la résolution CFD (partie qui prend le plus de temps au cours du processus d'optimisation). Une seconde idée sera d'utiliser la méta-modélisation tels que les modèles *surrogates models* (Rabhi et al., 2018) qui permettront également de réduire les temps de calcul liés à la résolution CFD. Une autre idée pour limiter les temps de calcul consiterait à diminuer le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence en utilisant un algorithme de gradient à pas optimal tel que la méthode de recherche linéaire par exemple (Gould et Leyffer, 2003). Cependant, la détermination du pas optimal risque d'être également couteux en temps de calcul.
- Les contraintes d'épaisseur seront plus complexes à traiter, en particulier, la contrainte sur la largeur minimale des pores qui nécessitera la construction de leur squelette. En effet, dans la forme 2D du réacteur, les obstacles sont tous disjoints les uns des autres ce qui permet de les nommer différemment et facilite le calcul de la largeur locale d'un canal. En revanche, dans la forme 3D les parois seront toutes liées et nommer différemment les obstacles ne sera pas possible. Ainsi, la construction du squelette des canaux sera nécessaire. Les squelettes peuvent également être déterminés à partir des diagrammes de Voronoï, mais ils seront plus complexes à déterminer car au lieu d'être une réunion de segments comme présenté dans le chapitre 3, le squelette sera une réunion de surfaces.

Pour finir, le passage en trois dimensions offre deux directions de recherche distinctes :

1. Optimiser la forme des réacteurs à l'échelle industrielle qui amènerait certains problèmes techniques tels que le traitement de la turbulence dans les équations de l'état adjoint ($\boldsymbol{U_a}$, p_a). Sur ce point, les travaux de la littérature ne sont pas unanimes. Selon Schramm et al. (2018) la modélisation de la turbulence de l'état adjoint n'est pas toujours nécessaire, alors que selon Papoutsis-Kiachagias et al. (2015) elle l'est.
2. Optimiser la forme de réacteurs intensifiés. Cela permettrait de toujours considérer l'écoulement laminaire et ne pas avoir à modéliser la turbulence si celle-ci est nécessaire. Cependant, les limites inférieures des contraintes d'épaisseur liées aux procédés de stratoconception® seraient difficiles à respecter. Il faudrait alors changer de procédé de fabrication additive pour permettre des épaisseurs minimales en accord avec les réacteurs intensifiés.

Pour les persectives à plus long terme, il peut également être intéressant d'optimiser la forme d'un réacteur avec évacuation de la chaleur ou bien étudier une réaction en chaine. Cela ajouterait un nouveau système d'équations aux dérivées partielles au modèle et donc un nouvel état adjoint serait introduit pour résoudre le problème d'optimisation. Cependant, la méthodologie resterait la même dans les grandes lignes. L'étude d'un réacteur à lit fixe avec un écoulement polyphasique gaz-liquide serait également une perspective intéressante car les applications sont nombreuses, cependant, la modélisation étant assez complexe, le calcul de la dérivée de forme

du critère le sera également. Finalement, optimiser la forme d'un mobile d'agitation est également une perspective intéressante. Actuellement, lorsqu'ils sont optimisés, ces mobiles le sont par optimisation paramétrique au travers de l'angle et de la longueur des pales par exemple. Cependant, il faudra traiter la turbulence et gérer un maillage dynamique même ici on peut déjà penser à faire tourner la cuve plutôt que l'agitateur pour modéliser le mélange.

Bibliographie

G. Allaire, F. Jouve, et G. Michailidis. Thickness control in structural optimization via a level set method. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 53(6), 1349–1382, 2016, http://dx.doi.org/10.1007/s00158-016-1453-y.

G. Allaire, C. Dapogny, R. Estevez, A. Faure, et G. Michailidis. Structural optimization under overhang constraints imposed by additive manufacturing technologies. *Journal of Computational Physics*, 351, 295–328, 2017a, http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2017.09.041.

G. Allaire, C. Dapogny, R. Estevez, A. Faure, et G. Michailidis. Structural optimization under overhang constraints imposed by additive manufacturing technologies. *Journal of Computational Physics*, 351(2), 295–328, 2017b, http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2017.09.041.

G. Allaire et M. Schoenauer. *Conception optimale de structures*, 58. Springer-Verlag, Berlin, 2007, ISBN : 978-3-540-36710-9, http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-36856-4.

C. B. Allen et T. C. Rendall. CFD-based optimization of hovering rotors using radial basis functions for shape parameterization and mesh deformation. *Optimization and Engineering*, 14(1), 97–118, 2013, http://dx.doi.org/10.1007/s11081-011-9179-6.

J.-H. An. *Le choix d'un système de transport durable : analyse comparative des systèmes de transport guidé de surface*. Thèse de doctorat, Université Paris-Est, 2011.

J.-C. André, A. Le Méhauté, et O. De Witte. Dispositif pour réaliser un modèle de pièce industrielle, 1984. FR Patent 2,567,668.

P. W. Atkins, J. De Paula, et J. Keeler. *Atkins' physical chemistry*. Oxford university press, 2018, ISBN : 978-0-19969-740-3.

D. Attali. *Squelettes et graphes de Voronoï 2D et 3D*. Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier - Grenoble I, 1995.

U. Ayachit. *The paraview guide : a parallel visualization application*. Kitware, Inc., 2015, ISBN : 978-1-93093-429-0.

S. Azarm et F. Tahmasebi. Multiobjective optimal design of a simplified p4r mechanism. *Engineering Optimization*, 27(2), 139–153, 1996, http://dx.doi.org/10.1080/03052159608941403.

C. Barlier. Procédé pour la création et la réalisation de pièces par cao et pièces ainsi obtenues, 1991. FR Patent FR2673302A1.

C. Barlier et A. Bernard. *Fabrication additive-2e éd. : Du prototypage rapide à l'impression 3D*. Dunod, 2020, ISBN : 978-2-10079-860-5.

J. J. Beaman et C. R. Deckard. Selective laser sintering with assisted powder handling, 1990. US Patent 4,938,816.

A. Ben Abda et B. Méjri. Topological sensitivity analysis for identification of voids under Navier's boundary conditions in linear elasticity. *Inverse Problems*, 35(10), 105003, 2019, http://dx.doi.org/10.1088/1361-6420/ab2c91.

B. Benyahia, M. A. Latifi, C. Fonteix, et F. Pla. Multicriteria dynamic optimization of an emulsion copolymerization reactor. *Computers and Chemical Engineering*, 35(12), 2886–2895, 2011, http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2011.05.014.

D. Bonnet. *Vélocimétrie par images de particules (VIP) pour le diagnostic d'écoulements dans la bouche d'air automobile*. Thèse de doctorat, Université de Franche-Comté, 2012.

T. Borrvall et J. Petersson. Topology optimization of fluids in Stokes flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 41(1), 77–107, 2003, http://dx.doi.org/10.1002/fld.426.

J. P. Brans, P. Vincke, et B. Mareschal. How to select and how to rank projects : The Promethee method. *European Journal of Operational Research*, 24(2), 228–238, 1986, http://dx.doi.org/10.1016/0377-2217(86)90044-5.

A. E. Bryson. *Applied optimal control : optimization, estimation and control*. CRC Press, 1975, ISBN : 978-0-47026-774-5.

J. Butler, D. J. Morrice, et P. W. Mullarkey. A multiple attribute utility theory approach to ranking and selection. *Management Science*, 47(6), 800–816, 2001, http://dx.doi.org/10.1287/mnsc.47.6.800.9812.

J.-C. Charpentier et S. Rode. Réacteurs à lit fixe catalytique à écoulement gaz-liquide. *Techniques de l'Ingénieur*, 33(0), 1–22, 2011.

Y. Collette et P. Siarry. *Optimisation multiobjectif : Algorithmes*. Editions Eyrolles, 2011, ISBN : 978-2-212-11168-2.

D. L. Cook. *Finite-difference techniques for vectorized fluid dynamics calculations*. Springer Science & Business Media, 1981, ISBN : 978-3-64286-717-0, http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-86715-6.

D. Costa, A. Hertz, et C. Dubuis. Embedding a sequential procedure within an evolutionary algorithm for coloring problems in graphs. *Journal of Heuristics*, 1(1), 105–128, 1995, http://dx.doi.org/10.1007/BF02430368.

A. Courtais, F. Lesage, Y. Privat, P. Frey, et A. M. Latifi. Adjoint system method in shape optimization of some typical fluid flow patterns. *Computer Aided Chemical Engineering*, 46, 871–876. 2019a, http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-818634-3.50146-6.

A. Courtais, F. Lesage, Y. Privat, P. Frey, et A. M. Latifi. Numerical shape optimization in fluid mechanics at low reynolds number. *2019 22nd International Conference on Process Control (PC19)*, 280–285. IEEE, 2019b.

A. Courtais, F. Lesage, Y. Privat, C. Pelaingre, et A. M. Latifi. Shape Optimization of a Fixed-bed Reactor using Additive Manufacturing. *Computer Aided Chemical Engineering*, 48, 1939–1944. 2020, http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-823377-1.50324-4.

A. Courtais, A. M. Latifi, F. Lesage, et Y. Privat. Shape optimization of fixed-bed reactors in process engineering. *In preparation*, 2021a.

A. Courtais, F. Lesage, Y. Privat, C. Pelaingre, et A. M. Latifi. Optimal conception of fixed-bed reactors by stratoconception process using geometry optimization. *In preparation*, 2021b.

J.-C. Culioli. *Introduction à l'optimisation*. Ellipses, 2012, ISBN : 978-2-72987-624-1.

P. V. Danckwerts. Continuous flow systems. Distribution of residence times. *Chemical Engineering Science*, 2(1), 1–13, 1953, http://dx.doi.org/10.1016/0009-2509(53)80001-1.

C. Dapogny, P. Frey, F. Omnès, et Y. Privat. Geometrical shape optimization in fluid mechanics using FreeFem++. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 58(6), 2761–2788, 2018, http://dx.doi.org/10.1007/s00158-018-2023-2.

D. Das, S. Bhattacharya, et B. Sarkar. Decision-based design-driven material selection : A normative-prescriptive approach for simultaneous selection of material and geometric variables in gear design. *Materials and Design*, 92, 787–793, 2016, http://dx.doi.org/10.1016/j.matdes.2015.12.064.

I. Das et J. E. Dennis. A closer look at drawbacks of minimizing weighted sums of objectives for Pareto set generation in multicriteria optimization problems. *Structural Optimization*, 14 (1), 63–69, 1997, http://dx.doi.org/10.1007/BF01197559.

X. D. De La Sablonière, B. Mauroy, et Y. Privat. Shape minimization of the dissipated energy in dyadic trees. *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B*, 16(3), 767–799, 2011, http://dx.doi.org/10.3934/dcdsb.2011.16.767.

G. Doğan, P. Morin, R. H. Nochetto, et M. Verani. Discrete gradient flows for shape optimization and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(37-40), 3898–3914, 2007, http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2006.10.046.

Y. Dodge. *The Concise Encyclopedia of Statistics*. Number 3. Springer-Verlag New York, 2008, ISBN : 978-0-387-33828-6.

X. Dong et X. Liu. Multi-objective optimal design of microchannel cooling heat sink using topology optimization method. *Numerical Heat Transfer ; Part A : Applications*, 77(1), 90–104, 2020, http://dx.doi.org/10.1080/10407782.2019.1682872.

M. Dorigo. *Optimization, Learning and Natural Algorithms*. Thèse de doctorat, Politecnico di Milano, 1992.

T. Dumas. *Ecoulement de liquide dans un empilement de sphères : expérimentation locale et simulation fine à l'échelle d'un pore*. Thèse de doctorat, INPL, 2006.

F. Edgeworth. *Mathematical Physics : An Essay on the Application of Mathematics to the Moral Sciences*. Oxford University Press, 1881, ISBN : 978-0-54821-665-1.

R. Eymard, T. Gallouët, et R. Herbin. Finite volume methods. *Handbook of numerical analysis*, 7, 713–1018, 2000, http://dx.doi.org/10.1016/S1570-8659(00)07005-8.

F. Feppon, G. Allaire, F. Bordeu, J. Cortial, et C. Dapogny. Shape optimization of a coupled thermal fluid–structure problem in a level set mesh evolution framework. *SeMA Journal*, 76 (3), 413–458, 2019, http://dx.doi.org/10.1007/s40324-018-00185-4.

F. Feppon, G. Allaire, et C. Dapogny. A variational formulation for computing shape derivatives of geometric constraints along rays. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 54(1), 181–228, 2020, http://dx.doi.org/10.1051/m2an/2019056.

C. M. Fonseca et P. J. Fleming. Genetic Algorithms for Multiobjective Optimization : Formulation, discussion and generalization. *Icga*, 93, 416–423. Citeseer, 1993.

J. D. Fonseca, A. M. Latifi, A. Orjuela, G. Rodríguez, et I. D. Gil. Modeling, analysis and multi-objective optimization of an industrial batch process for the production of tributyl citrate. *Computers and Chemical Engineering*, 132, 106603, 2020, http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.106603.

M. P. Fourman. Compaction of Symbolic Layout Using Genetic Algorithms. *Proceedings of the 1st International Conference on Genetic Algorithms*, 141–153, 1985.

Y. Ge, F. Xin, Y. Pan, Z. Liu, et W. Liu. Optimal Arrangement Design of a Tube Bundle in Cross-Flow Using Computational Fluid Dynamics and Multi-Objective Genetic Algorithm. *Journal of Heat Transfer*, 141(7), 71801, 2019, http://dx.doi.org/10.1115/1.4043570.

D. E. Goldberg. *Genetic algorithms in search, optimization and machine learning.* Addison Wesley, 1989, ISBN : 978-0-20115-767-3.

J. Goldsmith. Particle Image Velocimetry and its Applications to Granular Media. *Division of Fluid Dynamics Department of Applied Mechanics Chalmers university of technology. Goteborg, Sweden*, 1–39, 2012.

M. G. Gore. *Spectrophotometry and spectrofluorimetry : a practical approach.* Oxford University Press New York, 2000, ISBN : 978-0-19963-812-3.

N. I. Gould et S. Leyffer. An introduction to algorithms for nonlinear optimization. *Frontiers in numerical analysis*, 109–197. 2003.

H. Hachimi. *Hybridation d'algorithmes métaheuristiques en optimisation globale et leurs applications.* Thèse de doctorat, Institut national des sciences appliquées de Rouen, 2013.

J. Hadamard. *Mémoire sur le problème d'analyse relatif à l'équilibre des plaques élastiques encastrées*, 33. Imprimerie nationale, 1908.

J. Haslinger, D. Jedelský, T. Kozubek, et J. Tvrdík. Genetic and Random Search Methods in Optimal Shape Design Problems. *Journal of Global Optimization*, 16(2), 109–131, 2000, http://dx.doi.org/10.1023/A:1008380715489.

A. Henrot et M. Pierre. *Variation et optimisation de forme*, 48. Springer-Verlag, Berlin, 2005, http://dx.doi.org/10.1007/3-540-37689-5.

A. Henrot et M. Pierre. *Shape Variation and Optimization.* European Mathematical Society Publishing House, 2018, http://dx.doi.org/10.4171/178.

A. Henrot et Y. Privat. What is the optimal shape of a pipe ? *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 196(1), 281–302, 2010, http://dx.doi.org/10.1007/s00205-009-0243-8.

G. Holzinger. OpenFOAM : A little User-Manual. *CD-Laboratory-Particulate Flow Modelling, Johannes Keplper University : Linz, Austria*, 2015.

J. Horn et N. Nafpliotis. Multiobjective Optimization Using The Niched Pareto Genetic Algorithm. *IlliGAL Report No. 93005*, 93005, 82–87, 1993.

C. W. Hull. Apparatus for production of three-dimensional objects by stereolithography, 1984. United States Patent, Appl., No. 638905, Filed.

E. Jacquet-Lagreze et J. Siskos. Assessing a set of additive utility functions for multicriteria decision-making, the UTA method. *European Journal of Operational Research*, 10(2), 151–164, 1982, http://dx.doi.org/10.1016/0377-2217(82)90155-2.

D. Jones et M. Tamiz. *Practical goal programming*, 141. Springer, 2010, ISBN : 978-1-44195-771-9.

S. Julisson. *Optimisation de formes de coques minces pour des géométries complexes.* Thèse de doctorat, Université Paris-Saclay, 2016.

W. Karush. Minima of functions of several variables with inequalities as side conditions. *Traces and Emergence of Nonlinear Programming*, 217–245, 2014, http://dx.doi.org/10.1007/978-3-0348-0439-4_10.

R. L. Keeney, H. Raiffa, et D. W. Rajala. Decisions with multiple objectives : Preferences and value trade-offs. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, 9(7), 403–403, 1979, http://dx.doi.org/10.1109/TSMC.1979.4310245.

S. K. Kim et O. Song. A MAUT approach for selecting a dismantling scenario for the thermal column in KRR-1. *Annals of Nuclear Energy*, 36(2), 145–150, 2009, http://dx.doi.org/10.1016/j.anucene.2008.11.034.

S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, et M. P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220(4598), 671–680, 1983, http://dx.doi.org/10.1126/science.220.4598.671.

H. W. Kuhn et A. W. Tucker. Nonlinear programming. *Traces and Emergence of Nonlinear Programming*, 247–258. Springer, 2014.

B. Kundu. Performance and optimum design analysis of longitudinal and pin fins with simultaneous heat and mass transfer : Unified and comparative investigations. *Applied Thermal Engineering*, 27(5-6), 976–987, 2007, http://dx.doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2006.08.003.

F. Lesage. *Modélisation et expérimentation des transferts de matière et de quantité de mouvement dans les réacteurs à lit fixe.* Thèse de doctorat, INPL, 2000.

Z. Li, K. F. Cedric Yiu, et Z. Feng. A hybrid descent method with genetic algorithm for microphone array placement design. *Applied Soft Computing Journal*, 13(3), 1486–1490, 2013, http://dx.doi.org/10.1016/j.asoc.2012.02.027.

L. Lin, R. Wu, et X. X. Zhang. Optimization for geometric parameters of micro-channel heat sink using inverse problem method. *Journal of Zhejiang University (Engineering Science)*, 45 (4), 734–740, 2011, http://dx.doi.org/10.3785/j.issn.1008-973X.2011.04.024.

T. Liu, L. Ye, H. Chen, J. Li, Z. Wu, et R. Zhou. A combined steepest descent and genetic algorithm (SD/GA) approach for the optimization of solvation parameters. *Molecular Simulation*, 32(6), 427–435, 2006, http://dx.doi.org/10.1080/08927020600812672.

G. Marck. *Optimisation Topologique des Transferts de Chaleur et de Masse - Application aux échangeurs de Chaleur*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2012.

L. Y. Maystre, J. Pictet, et J. Simos. *Méthodes multicritères ELECTRE : description, conseils pratiques et cas d'application à la gestion environnementale*, 8. PPUR presses polytechniques, 1994, ISBN : 978-2-88074-267-6.

P. C. Moews et R. H. Petrucci. The oxidation of Iodide Ion by persulfate Ion. *Journal of Chemical Education*, 41(10), 549–551, 1964, http://dx.doi.org/10.1021/ed041p549.

Y. Nesterov. *Lectures on convex optimization*, 137. Springer, 2018, ISBN : 978-3-31991-577-7.

D. L. Olson. Decision aids for selection problems. *Journal of the Operational Research Society*, 48(5), 541–542, 1997, http://dx.doi.org/10.1057/palgrave.jors.2600636.

C. Othmer, E. De Villiers, et H. G. Weller. Implementation of a continuous adjoint for topology optimization of ducted flows. 1, 407–413, 2007, http://dx.doi.org/10.2514/6.2007-3947.

E. Papoutsis-Kiachagias, A. Zymaris, I. Kavvadias, D. Papadimitriou, et K. Giannakoglou. The continuous adjoint approach to the $k\breve{}\varepsilon$ turbulence model for shape optimization and optimal active control of turbulent flows. *Engineering Optimization*, 47(3), 370–389, 2015, http://dx.doi.org/10.1080/0305215X.2014.892595.

V. Pareto. *Cours d'économie politique : professé à l'Université de Lausanne*, 1. F. Rouge, 1896.

S. V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow.* Taylor & Francis, 1980, ISBN : 978-1-31527-513-0.

S. V. Patankar et D. B. Spalding. *A calculation procedure for the transient and steady-state behaviour of shell-and-tube heat exchangers.* Imperial College of Science and Technology, Department of Mechanical Engineering, 1972.

C. Pelaingre. *Contribution au développement et à la modélisation d'outillage rapides obtenus par Stratoconception : application aux moules d'injection des thermoplastiques".* Thèse de doctorat, Ecole Doctorale de l'Ecole des Mines de Paris, 2005.

C. Pelaingre, C. Barlier, D. Cunin, et C. Levaillant. Pièce mécanique avec au moins un circuit de transport de fluide et son procédé de conception par strates, 2002. WO2004034165A1.

M. Pinta et C. Riandey. Les effets de matrice et leur correction dans le dosage des traces par absorption atomique. *Boletin Géologico et Minero*, 465-474, 75–84, 1969.

Y. Privat. *Quelques problèmes d'optimisation de formes en sciences du vivant.* Thèse de doctorat, Université Henri Poincaré - Nancy I, 2008.

A. Rabhi, A. Chkifa, S. Benjelloun, et A. Latifi. Surrogate-based modeling in flotation processes. *Computer Aided Chemical Engineering*, 43, 229–234. 2018, http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-444-64235-6.50041-3.

M. Raffel, C. E. Willert, F. Scarano, C. J. Kähler, S. T. Wereley, et J. Kompenhans. *Particle image velocimetry : a practical guide*. Springer, 2018.

S. Rahmani et N. Amjady. Enhanced goal attainment method for solving multi-objective security-constrained optimal power flow considering dynamic thermal rating of lines. *Applied Soft Computing Journal*, 77, 41–49, 2019, http://dx.doi.org/10.1016/j.asoc.2019.01.014.

E. Ramm, K. Maute, et R. Reitinger. *Shape and Topology Optimization of Structures*. Thèse de doctorat, Danmarks Tekniske Universitet (DTU), 1995.

M. Rivallain. *Étude de l'aide à la décision par optimisation multicritère des programmes de réhabilitation énergétique séquentielle des bâtiments existants*. Thèse de doctorat, Université Paris-Est, 2013.

M. Rouaud. *Calcul d'incertitudes*. Paris, France : Creative Commons, 2014.

B. Roy. Ranking and choice in pace of multiple points of view (electre method). *Revue francaise d'informatique de recherche operationnelle*, 2(8), 57, 1968.

B. Roy. *Méthodologie multicritère d'aide à la décision*. Economica, 1985, ISBN : 978-2-71780-901-5.

B. Roy et D. Bouyssou. *Aide multicritère à la décision : méthodes et cas*. Economica Paris, 1993, ISBN : 978-2-71782-473-5.

T. L. Saaty. *The analytic hierarchy process : planning, priority setting, resource allocation*. McGraw-Hill International Book Co., New York ; London, 1980, ISBN : 978-0-07054-371-3.

A. Sakly. *Fabrication additive de pièces à base d'alliages métalliques complexes*. Thèse de doctorat, Université de Lorraine, 2013.

M. S. Santhanakrishnan, T. Tilford, et C. Bailey. Performance assessment of density and level-set topology optimisation methods for three dimensional heat sink design. *Journal of Algorithms and Computational Technology*, 12(3), 273–287, 2018, http://dx.doi.org/10.1177/1748301818779019.

S. S. Sawilowsky. Fermat, Schubert, Einstein, and Behrens-Fisher : The probable difference between two means when $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$. *Journal of Modern Applied Statistical Methods*, 1(2), 461–472, 2002, http://dx.doi.org/10.22237/jmasm/1036109940.

J. D. Schaffer. Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms. *Proceedings of the 1st International Conference on Genetic Algorithms*, 93–100. L. Erlbaum Associates Inc., 1985.

M. Schramm, B. Stoevesandt, et J. Peinke. Optimization of airfoils using the adjoint approach and the influence of adjoint turbulent viscosity. *Computation*, 6(1), 5, 2018, http://dx.doi.org/10.3390/computation6010005.

H. L. Simonetti, V. S. Almeida, V. M. A. Leitão, et F. de Assis das Neves. Application of evolutionary structural optimization based on the boundary element method using initial stress fields. *Structures*, 20, 550–559, 2019, http://dx.doi.org/10.1016/j.istruc.2019.06.006.

H. Slim et N. Fauqué. *La Tunisie antique de Hannibal à saint Augustin*. Société des Editions Mengès, 2016, ISBN : 978-2-85620-421-4.

C. Solnon. *Optimisation par colonies de fourmis*. Hermes Science Publications, 2008, ISBN : 978-2-74621-863-5.

N. Srinivas et K. Deb. Muiltiobjective Optimization Using Nondominated Sorting in Genetic Algorithms. *Evolutionary Computation*, 2(3), 221–248, 1994, http://dx.doi.org/10.1162/evco.1994.2.3.221.

I. Stratasys. Fused deposition modelling for fast, safe plastic models. *12th Annual Conference on Computer Graphics, Chicago*, 326, 1991.

W. Thielicke et E. J. Stamhuis. PIVlab – Towards User-friendly, Affordable and Accurate Digital Particle Image Velocimetry in MATLAB. *Journal of Open Research Software*, 2(1), 2014, http://dx.doi.org/10.5334/jors.bl.

O. Tonomura, M. Kano, et S. Hasebe. Shape optimization of microchannels using CFD and adjoint method. *Computer Aided Chemical Engineering*, 28, 37–42. 2010, http://dx.doi.org/10.1016/S1570-7946(10)28007-0.

H. K. Versteeg et W. Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics : the finite volume method*. Pearson education, 2007, ISBN : 978-3-54059-434-5.

J. Villermaux. *Génie de la réaction chimique*. Technique et Documentation, 1993, ISBN : 978-2-85206-759-2.

P. Vincke. *L'aide multicritère à la décision*. Editions de l'ULB et Editions Ellipses, 1989, ISBN : 978-2-80040-970-2.

P. Voola et A. Vinaya Babu. Study of aggregation algorithms for aggregating imprecise software requirements' priorities. *European Journal of Operational Research*, 259(3), 1191–1199, 2017, http://dx.doi.org/10.1016/j.ejor.2016.11.040.

G. T. Walker. *The Flapping Flight of Birds. II*. Thèse de doctorat, University of Groningen, 1927.

M. J. Weber. *Handbook of Optical Materials*. CRC press, 2018, http://dx.doi.org/10.1201/9781315219615.

B. L. Welch. The generalisation of student's problems when several different population variances are involved. *Biometrika*, 34(1-2), 28–35, 1947, http://dx.doi.org/10.1093/biomet/34.1-2.28.

H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, et C. Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in Physics*, 12(6), 620, 1998, http://dx.doi.org/10.1063/1.168744.

M. Widmer. Les métaheuristiques : des outils performants pour les problèmes industriels. *3ème Conférence Francophone de MOdélisation et SIMulation MOSIM*, 1, 25–27, 2001.

T. Wohlers, I. Campbell, et O. Diegel. Wohlers report 2016. wohlers associates. *Inc. : Fort Collins, CO, USA*, 2019.

M. Zhou, H. Lian, O. Sigmund, et N. Aage. Shape morphing and topology optimization of fluid channels by explicit boundary tracking. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 88(6), 296–313, 2018, http://dx.doi.org/10.1002/fld.4667.

O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, et P. Nithiarasu. *The Finite Element Method for Fluid Dynamics : Seventh Edition*, 6. Elsevier, 2014, ISBN : 978-1-85617-635-4, http://dx.doi.org/10.1016/C2009-0-26328-8.

Z. H. Zuo, Y. M. Xie, et X. Huang. Combining genetic algorithms with BESO for topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 38(5), 511–523, 2009, http://dx.doi.org/10.1007/s00158-008-0297-5.

Annexe A

Formulaire mathématique

A.1 Notations

Dans cette annexe, Ω désigne un sous domaine de $\mathbb{R}^d$ ($d = 2$ ou 3 désigne la dimension du problème) borné et constitué d'un seul morceau (on appelle cela un domaine ''connexe'' en mathématiques). On supposera également dans tout ce qui suit que Ω est un ouvert régulier, autrement dit qu'en tout point de Ω, on peut se déplacer localement dans toutes les directions tout en restant dans Ω. La frontière de Ω (également appelée bord de Ω) sera notée $\partial\Omega$.

Toutes ces hypothèses techniques permettent d'assurer que les manipulations algébriques à venir (notamment les intégrations par parties) sont licites.

À titre d'illustration, Ω est représenté sur la figure A.1. Dans cette annexe, les notations suivantes sont définies :

— $\boldsymbol{n} = \begin{pmatrix} n_1 \\ \vdots \\ n_d \end{pmatrix}$: la normale sortante (unitaire) à Ω définie en tout point de $\partial\Omega$;

— f et $g : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ deux fonctions scalaires régulières. $\nabla f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_d} \end{pmatrix}$ est le gradient de f et $\frac{\partial f}{\partial n} = \nabla f \cdot \boldsymbol{n}$ désigne la dérivée normale de f définie en tout point de $\partial\Omega$.

— $\boldsymbol{h}$, $\boldsymbol{q}$ et $\boldsymbol{r} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ trois fonctions vectorielles régulières. $\nabla \boldsymbol{h} = \left(\frac{\partial h_i}{\partial x_j}\right)_{1 \leq i,j \leq d}$ est la matrice jacobienne (ou gradient) du champ de vecteurs $\boldsymbol{h}$.

— le tenseur des déformations d'un champ de vecteurs $\boldsymbol{h}$ régulier est défini par :

$$\varepsilon(\boldsymbol{h}) = \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial h_i}{\partial x_j} + \frac{\partial h_j}{\partial x_i} \right) \right)_{1 \leq i,j \leq d}.$$

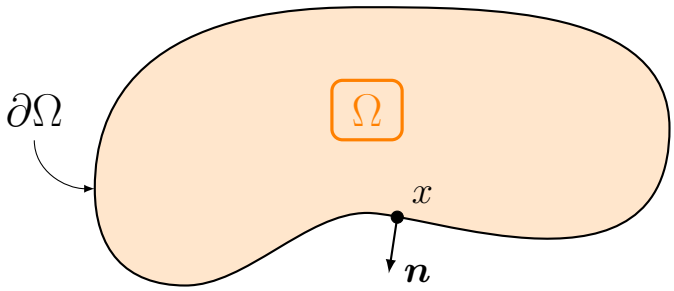


FIGURE A.1 – Ω, sous domaine de $\mathbb{R}^d$

— le double produit contracté de deux tenseurs de déformation $\varepsilon(\boldsymbol{h})$ et $\varepsilon(\boldsymbol{q})$:

$$\varepsilon(\boldsymbol{h}) : \varepsilon(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d}\left(\frac{\partial h_i}{\partial x_j}+\frac{\partial h_j}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial q_i}{\partial x_j}+\frac{\partial q_j}{\partial x_i}\right).$$

— Soit $\boldsymbol{h} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$, une fonction vectorielle, on définit la norme H^1 comme suit

$$||\boldsymbol{h}||_{H^1} = ||\boldsymbol{h}||^2 + ||\nabla \boldsymbol{h}||^2 = \int_\Omega \nabla \boldsymbol{h} : \nabla \boldsymbol{h}\, dx + \int_\Omega \boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{h}\, dx \tag{A.1}$$

A.2 Formulaire d'intégration par partie

La détermination des expressions des différents gradients de forme et des états adjoints nécessite la connaissance et l'utilisation des formules d'intégration par partie énoncées dans ce paragraphe.

La 1ère équation de Green (A.2) généralise la formule d'intégration par parties en dimension un bien connu. Bien souvent, on utilisera la vitesse $\boldsymbol{U}$ pour $\boldsymbol{h}$ et la pression p pour f.

$$\boxed{\int_\Omega \frac{\partial f}{\partial x_i} g\, dx = \int_{\partial\Omega} f g n_i\, d\sigma - \int_\Omega \frac{\partial g}{\partial x_i} f\, dx}. \tag{A.2}$$

L'équation (A.2) ne sera pas utile directement mais elle permet de démontrer la 2ème formule de Green. Dans l'équation (A.2), en remplaçant f par $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ puis en sommant sur toutes les composantes, il vient :

$$\int_\Omega g \underbrace{\sum_{i=1}^{d}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}}_{=\Delta f} dx = \int_{\partial\Omega} g \underbrace{\sum_{i=1}^{d}\frac{\partial f}{\partial x_i} n_i}_{=\nabla h \,\cdot\, \boldsymbol{n} = \frac{\partial h}{\partial n}} d\sigma - \int_\Omega \underbrace{\sum_{i=1}^{d}\frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial g}{\partial x_i}}_{=\nabla f \,\cdot\, \nabla g} dx \tag{A.3}$$

Ce qui fournit la 2ème formule de Green :

$$\boxed{\int_\Omega g\Delta f\, dx = \int_{\partial\Omega} g\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{n}}\, d\sigma - \int_\Omega \nabla f \cdot \nabla g\, dx}. \tag{A.4}$$

Cette 2ème formule de Green est également valable pour des champs de vecteur (Privat, 2008). Cela donne l'équation (A.5)

$$\boxed{\int_\Omega \boldsymbol{h} \cdot \Delta \boldsymbol{q}\, dx = \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{h} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \boldsymbol{n}}\, d\sigma - \int_\Omega \nabla \boldsymbol{q} : \nabla \boldsymbol{h}\, dx}. \tag{A.5}$$

La première formule de Green (A.2) permet également de montrer la formule d'intégration par parties à trois facteurs (A.6). La preuve est fournie par Courtais et al. (2021a). Soient $\boldsymbol{h}$, $\boldsymbol{q}$, $\boldsymbol{r}$, trois champs de vecteurs de $\mathbb{R}^d$ dans $\mathbb{R}^d$ tels que $\operatorname{div} \boldsymbol{q} = 0$ dans Ω.

$$\boxed{\int_\Omega (\nabla \boldsymbol{h}\boldsymbol{q}) \cdot \boldsymbol{r}\, dx = -\int_\Omega (\nabla \boldsymbol{h}\boldsymbol{q}) \cdot \boldsymbol{r}\, dx + \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{r})\, d\sigma}. \tag{A.6}$$

En mécanique des fluides, la formule de la divergence (A.7) résulte de la première formule de Green (A.2). Bien souvent, on utilisera la vitesse $\boldsymbol{U}$ pour $\boldsymbol{h}$ et la pression p pour f.

$$\boxed{\int_\Omega f \operatorname{div} \boldsymbol{h}\, dx = \int_{\partial\Omega} f(\boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma - \int_\Omega \boldsymbol{h} \cdot \nabla f\, dx}. \tag{A.7}$$

En effet, d'après la première formule de Green (A.2), on a

$$\begin{aligned}\int_\Omega f \operatorname{div} \boldsymbol{h}\, dx &= \sum_{i=1}^d \int_\Omega f \frac{\partial h_i}{\partial x_i}\, dx \underset{\text{(A.2)}}{=} \sum_{i=1}^d \int_{\partial\Omega} h_i f n_i\, d\sigma - \sum_{i=1}^d \int_\Omega h_i \frac{\partial f}{\partial x_i}\, dx \\ &= \int_{\partial\Omega} f(\boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma - \int_\Omega \boldsymbol{h} \cdot \nabla f\, dx\end{aligned}$$

L'équation (A.7) est une extension sur théorème de la divergence, autrement appelé théorème de Green-Ostrogradski. En effet, en prenant la fonction scalaire f égale à 1 sur l'ensemble du domaine, il vient :

$$\boxed{\int_\Omega \operatorname{div} \boldsymbol{h}\, dx = \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma}. \tag{A.8}$$

Une autre formule d'intégration par parties généralisant la 2ème formule de Green (voir par exemple Henrot et Privat (2010)) s'avère souvent fort utile dans le contexte de la mécanique des fluides.

$$\boxed{\int_\Omega (\Delta \boldsymbol{h} + \nabla \operatorname{div} \boldsymbol{h}) \cdot \boldsymbol{q}\, dx = 2\int_{\partial\Omega} \varepsilon(\boldsymbol{h})\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{q}\, d\sigma - 2\int_\Omega \varepsilon(\boldsymbol{h}) : \varepsilon(\boldsymbol{q})\, dx}. \tag{A.9}$$

Pour finir, une dernière formule d'intégration par partie pour des intégrales frontières (i.e sur les bords du domaine $\partial\Omega$) est donné par la relation (A.10) (Henrot et Pierre, 2018, Chap 5).

$$\boxed{\int_{\partial\Omega} \nabla f \cdot \nabla g\, d\sigma = -\int_{\partial\Omega} f \Delta g\, d\sigma + \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\partial f}{\partial n}\frac{\partial g}{\partial n} + f\frac{\partial^2 g}{\partial n^2} + \mathcal{H} f \frac{\partial g}{\partial n}\right) d\sigma} \tag{A.10}$$

Où $\mathcal{H}$ représente la courbure moyenne du domaine Ω définie par $\mathcal{H} = \operatorname{div} \boldsymbol{n}$

Annexe B

Démonstrations mathématiques des expressions des gradients de forme et états adjoints

---

B.1 Démonstration de l'expression du gradient de forme (2.37)

En utilisant la formule d'intégration par parties (A.9), l'équation (2.34) devient

$$\begin{aligned}\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) =& 2\nu\Bigg(\int_{\partial\Omega}|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma-\int_{\Omega}(\Delta\boldsymbol{U}+\nabla(\operatorname{div}\boldsymbol{U}))\cdot\boldsymbol{U'}\,dx\\&+2\int_{\partial\Omega}\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'}\,d\sigma\Bigg)+\lambda_{\mathcal{V}}\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})d\sigma\end{aligned}\tag{B.1}$$

La divergence de $\boldsymbol{U}$ étant nulle dans tout le domaine d'après (2.22b)), il vient :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) =& 2\nu\Bigg(\int_{\partial\Omega}|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma-\int_{\Omega}\Delta\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U'}\,dx\\&+2\int_{\partial\Omega}\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'}\,d\sigma\Bigg)+\lambda_{\mathcal{V}}\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})d\sigma\end{aligned}\tag{B.2}$$

La multiplication de la première équation de l'état adjoint (2.38a) par $\boldsymbol{U'}$ et intégrée sur tout le domaine Ω donne l'équation suivante :

$$\begin{aligned}-\nu\int_{\Omega}\Delta\boldsymbol{U}_a\cdot\boldsymbol{U'}\,dx+\int_{\Omega}(\nabla\boldsymbol{U})^T\boldsymbol{U_a}\cdot\boldsymbol{U'}\,dx-\int_{\Omega}\nabla\boldsymbol{U_a}\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U'}\,dx\\-\int_{\Omega}\nabla p_a\cdot\boldsymbol{U'}\,dx=-2\nu\int_{\Omega}\Delta\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U'}\,dx.\end{aligned}\tag{B.3}$$

Les intégrations par parties (A.9), (A.6) et (A.7) de chacun des termes de cette expression fournissent successivement :

$$\begin{aligned} -\nu \int_\Omega \Delta \boldsymbol{U}_a \cdot \boldsymbol{U'}\, dx &\underset{\text{(A.9)}}{=} 2\nu \int_\Omega \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx - 2\nu \int_{\partial\Omega} \varepsilon(\boldsymbol{U_a})\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma \\ &\underset{\text{(2.33c)}}{=} 2\nu \int_\Omega \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx - 2\nu \int_{\Gamma_{\text{out}}\cup\Gamma} \varepsilon(\boldsymbol{U_a})\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_\Omega (\nabla \boldsymbol{U})^T \boldsymbol{U_a} \cdot \boldsymbol{U'}\, dx &\underset{\text{(A.6)}}{=} -\int_\Omega \nabla \boldsymbol{U_a} \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U}\, dx + \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma \\ &\underset{\text{(2.22d) et (2.33c)}}{=} -\int_\Omega \nabla \boldsymbol{U_a} \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U}\, dx + \int_{\Gamma_{\text{out}}} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -\int_\Omega \nabla \boldsymbol{U_a} \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U'}\, dx &\underset{\text{(A.6)}}{=} \int_\Omega \nabla \boldsymbol{U'} \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx - \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a})\, d\sigma \\ &\underset{\text{(2.22d) et (2.33c)}}{=} \int_\Omega \nabla \boldsymbol{U'} \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx - \int_{\Gamma_{\text{out}}} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a})\, d\sigma \end{aligned}$$

$$\int_\Omega \nabla p_a \cdot \boldsymbol{U'}\, dx \underset{\text{(A.7)}}{=} -\int_\Omega p_a \operatorname{div} \boldsymbol{U'}\, dx + \int_{\partial\Omega} p_a (\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma \underset{\text{(2.33}b\text{) et (2.33c)}}{=} \int_{\Gamma_{\text{out}}\cup\Gamma} p_a (\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma.$$

Ces intégration par parties permettent de réécrire l'équation (B.3) sous la forme

$$\begin{aligned} &\int_\Omega 2\nu\varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx - \nabla \boldsymbol{U_a} \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U}\, dx + \nabla \boldsymbol{U'} \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx \\ &+ \int_{\Gamma_{\text{out}}} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n}) - \int_{\Gamma_{\text{out}}} \sigma(\boldsymbol{U_a}, p_a)\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma - (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a})\, d\sigma \\ &\qquad - \int_\Gamma \sigma(\boldsymbol{U_a}, p_a)\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma = -2\nu \int_\Omega \Delta \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U'}\, dx \end{aligned} \tag{B.4}$$

La première équation du système vérifié par $\boldsymbol{U'}$ multipliée par $\boldsymbol{U_a}$ et intégrée sur tout le domaine Ω fournit

$$-\nu \int_\Omega \Delta \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx + \int_\Omega \nabla \boldsymbol{U} \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx + \int_\Omega \nabla \boldsymbol{U'} \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx - \int_\Omega \nabla p' \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx = 0 \tag{B.5}$$

L'intégration par parties de chacun des termes est la suivante :

$$\begin{aligned} -\nu \int_\Omega \Delta \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx &\underset{\text{(A.9)}}{=} 2\nu \int_\Omega \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx - 2\nu \int_{\partial\Omega} \varepsilon(\boldsymbol{U'})\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U_a}\, d\sigma \\ &\underset{\text{(2.38c)}}{=} 2\nu \int_\Omega \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx - 2\nu \int_{\Gamma_{\text{out}}} \varepsilon(\boldsymbol{U'})\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U_a}\, d\sigma \end{aligned}$$

$$\int_\Omega \nabla \boldsymbol{U}\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{U_a}\,dx \underset{(A.6)}{=} -\int_\Omega \nabla \boldsymbol{U_a}\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{U}\,dx + \int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U'})(\boldsymbol{U_a}\cdot\boldsymbol{n})d\sigma$$
$$\underset{(2.22d)\text{ et }(2.33c)}{=} -\int_\Omega \nabla \boldsymbol{U_a}\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{U}\,dx + \int_{\Gamma_{\text{out}}}(\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U'})(\boldsymbol{U_a}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma$$

$$\int_\Omega \nabla p'\cdot\boldsymbol{U_a}\,dx \underset{(A.7)}{=} -\int_\Omega \operatorname{div}(\boldsymbol{U_a})p'\,dx + \int_{\partial\Omega} p'(\boldsymbol{U_a}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma \underset{(2.38b)\text{ et }(2.38c)}{=} \int_{\Gamma_{\text{out}}} p'(\boldsymbol{U_a}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma$$

Ces intégrations par parties permettent de réécrire l'équation (B.23) sous la forme :

$$\int_\Omega (2\nu\varepsilon(\boldsymbol{U_a}):\varepsilon(\boldsymbol{U'}) - \nabla\boldsymbol{U_a}\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{U} + \nabla\boldsymbol{U'}\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U_a})\,dx$$
$$+\int_{\Gamma_{\text{out}}}((\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U_a})(\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{n}) - \sigma(\boldsymbol{U'},p')\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U_a})\,d\sigma = 0$$

Puis en prenant en compte la condition aux limites sur $\boldsymbol{U'}$ (2.33e) :

$$\int_\Omega (2\nu\varepsilon(\boldsymbol{U_a}):\varepsilon(\boldsymbol{U'}) - \nabla\boldsymbol{U_a}\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{U} + \nabla\boldsymbol{U'}\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U_a})\,dx$$
$$+\int_{\Gamma_{\text{out}}}(\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U_a})(\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma = 0 \tag{B.6}$$

La soustraction des équations (B.22) et (B.24) permet d'écrire :

$$-2\nu\int_\Omega \Delta\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U'}\,dx = -\int_{\Gamma\cup\Gamma_{\text{out}}}\sigma(\boldsymbol{U_a},p_a)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'}\,d\sigma - \int_{\Gamma_{\text{out}}}(\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{U_a})\,d\sigma \tag{B.7}$$

En remplaçant, le terme $-2\nu\int_\Omega \Delta\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U'}$ à l'aide de l'équation (B.25) dans le calcul de la dérivée du lagrangien $\mathcal{L}$ (B.2), il vient :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) &= 2\nu\int_{\partial\Omega}|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma - \int_{\Gamma\cup\Gamma_{\text{out}}}\sigma(\boldsymbol{U_a},p_a).n\cdot\boldsymbol{U'}\,d\sigma\\ &- \int_{\Gamma_{\text{out}}}(U\cdot\boldsymbol{n}).(\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{U_a})\,d\sigma + 4\nu\int_{\partial\Omega}\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'}\,d\sigma + \lambda_{\mathcal{V}}\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})d\sigma\end{aligned}$$

Les conditions aux frontières (2.38d), (2.33c), (2.33d) et (2.40b) permettent de réécrire la dérivée du lagrangien sous la forme :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) \underset{(2.40b)\text{ et }(2.33c)}{=} &\int_\Gamma (2\nu|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n}) - \sigma(\boldsymbol{U_a},p_a)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'} + 4\nu\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'})\,d\sigma\\ -&\int_{\Gamma_{\text{out}}}((\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{U_a}) - \sigma(\boldsymbol{U_a},p_a)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'} + 4\nu\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'})\,d\sigma\\ +&\lambda_{\mathcal{V}}\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})d\sigma\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) &\underset{(2.33d)}{=} \int_\Gamma (2\nu|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 + \sigma(\boldsymbol{U_a}, p_a)\boldsymbol{n} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial n} - 4\nu\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}.\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial n} + \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma \\ &- \int_{\Gamma_{\text{out}}} ((\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})\boldsymbol{U_a} - \sigma(\boldsymbol{U_a}, p_a)\boldsymbol{n} + 4\nu\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma\end{aligned}$$

$$\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) \underset{(2.38d)}{=} \int_\Gamma ((2\nu\varepsilon(\boldsymbol{U_a})\boldsymbol{n} - p_a n - 4\nu\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial n} + 2\nu|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 + \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma$$

En supposant que les vitesses ($\boldsymbol{U}$ et $\boldsymbol{U_a}$) sur la frontière Γ sont nulles (les gradients de vitesse sont donc perpendiculaire au bord) et que les divergences de ces vitesses sont également nulles, on peut montrer les propriétés suivantes (preuve fournie par Courtais et al. (2021a)) :

$$n \cdot \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial n} = 0 \tag{B.8}$$

$$\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial n} = |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 \tag{B.9}$$

$$(\varepsilon(\boldsymbol{U_a})\boldsymbol{n}) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial n} = \varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) \tag{B.10}$$

Pour finir, en utilisant les propriétés précédentes, il est possible de réécrire la dérivée du lagrangien sous la forme attendu :

$$\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) = 2\nu \int_\Omega (\varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) - \varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U}) + \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma$$

B.2 Démonstration des équations de diffusion du maillage

La norme H^1 modifiée introduite dans le paragraphe 2.4.2 s'exprime suivant la relation (B.11) pour tout champ de vecteur $\boldsymbol{\mathcal{X}} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ ($d = 2$ ou 3).

$$\gamma||\nabla \boldsymbol{\mathcal{X}}||^2 + ||\boldsymbol{\mathcal{X}}||^2 = \gamma \int_\Omega \nabla \boldsymbol{\mathcal{X}} : \nabla \boldsymbol{\mathcal{X}}\, dx + \int_\Omega \boldsymbol{\mathcal{X}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{X}}\, dx \tag{B.11}$$

L'équation (2.39) se réécrit alors comme suit :

$$\mathcal{L}'(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{V}) = \int_{\partial\Omega} G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma = \gamma \int_\Omega \nabla \boldsymbol{V} : \nabla \boldsymbol{V}\, dx + \int_\Omega \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{V}\, dx \tag{B.12}$$

Considérons la proposition suivante, qui est une généralisation de l'équation (B.12).

$$\forall \quad \boldsymbol{\phi} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d\,; \quad \int_{\partial\Omega} G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{\phi} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma = -\gamma \int_\Omega \nabla \boldsymbol{V} : \nabla \boldsymbol{\phi}\, dx - \int_\Omega \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{\phi}\, dx \tag{B.13}$$

En prenant, $\boldsymbol{\phi} = \boldsymbol{V}$ les équations (B.12) et (B.13) sont équivalentes. L'intégration par partie (A.5) du terme $\int_\Omega \nabla \boldsymbol{V} : \nabla \boldsymbol{\phi}\, dx$ donne

$$\int_{\partial\Omega} G(\Omega, \lambda_{\mathcal{V}})(\boldsymbol{\phi} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma = \gamma \int_\Omega \Delta \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{\phi}\, dx - \gamma \int_{\partial\Omega} \frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial \boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\phi}\, d\sigma - \int_\Omega \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{\phi}\, dx \tag{B.14}$$

Puis en séparant les variables il vient :

$$\int_{\partial\Omega}\left(G(\Omega,\lambda_{\mathcal{V}})\boldsymbol{n}+\gamma\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial \boldsymbol{n}}\right)\cdot\boldsymbol{\phi}\,d\sigma=\int_{\Omega}(\gamma\Delta\boldsymbol{V}-\boldsymbol{V})\cdot\boldsymbol{\phi}\,dx \tag{B.15}$$

L'équation (B.15) est donc valable quelque soit le champ de vecteur $\boldsymbol{\phi}$. Prenons les cas particuliers de champs de vecteur $\boldsymbol{\phi}$ non nuls dans le domaine mais nuls sur le bord $\partial\Omega$. Il vient alors

$$\gamma\Delta\boldsymbol{V}-\boldsymbol{V}=0\quad\text{dans}\quad\Omega \tag{B.16}$$

En considérant l'équation (B.16), l'équation (B.15) devient

$$\int_{\partial\Omega}\left(G(\Omega,\lambda_{\mathcal{V}})\boldsymbol{n}+\gamma\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial \boldsymbol{n}}\right)\cdot\boldsymbol{\phi}\,d\sigma=0 \tag{B.17}$$

Il vient alors la condition aux limites sur la frontière libre Γ,

$$\gamma\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial \boldsymbol{n}}=-G(\Omega,\lambda_{\mathcal{V}})\boldsymbol{n}\quad\text{sur}\quad\Gamma \tag{B.18}$$

Les frontières Γ_{in}, Γ_{out} et Γ_{lat} étant fixe, on a trivialement $\boldsymbol{V}=0$ sur $\Gamma_{\text{in}}\cup\Gamma_{\text{out}}\cup\Gamma_{\text{lat}}$.

B.3 Détails des calculs permettant la formulation du gradient de forme (3.21)

Les équations (3.14), (3.15) et (3.16) permettent de formuler la dérivée du lagrangien comme suit

$$\begin{aligned}\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V})=&K_{\text{crit}}\int_{\Gamma_{\text{out}}}C'\,d\sigma+\lambda_{\mathcal{V}}\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})d\sigma\\&+2\nu\lambda_{\mathcal{E}}\int_{\partial\Omega}|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma+4\nu\lambda_{\mathcal{E}}\int_{\Omega}\varepsilon(\boldsymbol{U}):\varepsilon(\boldsymbol{U'})\,dx\end{aligned} \tag{B.19}$$

qui se réécrit après application de la formule d'intégration par partie (A.9)

$$\begin{aligned}\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V})=&K_{\text{crit}}\int_{\Gamma_{\text{out}}}C'\,d\sigma+\lambda_{\mathcal{V}}\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})d\sigma\\&+2\nu\lambda_{\mathcal{E}}\left(\int_{\partial\Omega}|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma-\int_{\Omega}\Delta\boldsymbol{U}\boldsymbol{U'}\,dx+2\int_{\partial\Omega}\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'}\,d\sigma\right)\end{aligned} \tag{B.20}$$

L'idée générale pour réécrire la dérivée du lagrangien sous la forme (3.19) consiste à multiplier la première équation des états adjoints par $\boldsymbol{U'}$ ou C' et intégrer sur le volume Ω. Ensuite, la même manipulation est effectuée sur les premières équations des dérivées eulérienne des états que l'on multiplie par $\boldsymbol{U_a}$ ou C_a.

La multiplication de la première équation de l'état adjoint associé à la vitesse (3.22a) par $\boldsymbol{U'}$ intégrée sur l'ensemble de domaine fournit l'équation suivante :

$$-\nu\int_{\Omega}\Delta\boldsymbol{U}_a\cdot\boldsymbol{U'}\,dx+\int_{\Omega}(\nabla\boldsymbol{U})^T\boldsymbol{U_a}\cdot\boldsymbol{U'}\,dx-\int_{\Omega}\nabla\boldsymbol{U_a}\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U'}\,dx$$

$$+\int_\Omega \nabla p_a \cdot \boldsymbol{U'}\, dx = -\lambda_{\mathcal{E}} 2\nu \int_\Omega \Delta \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U'}\, dx - \frac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}} \int_\Omega C_a \nabla C \cdot \boldsymbol{U'}\, dx. \tag{B.21}$$

L'intégration par parties de chacun des termes de l'expression (B.21) fournit successivement :

$$\begin{aligned} -\nu \int_\Omega \Delta \boldsymbol{U_a} \cdot \boldsymbol{U'}\, dx &\underset{(A.9)}{=} 2\nu \int_\Omega \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx - 2\nu \int_{\partial\Omega} \varepsilon(\boldsymbol{U_a})\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma \\ &\underset{(2.33c)}{=} 2\nu \int_\Omega \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx - 2\nu \int_{\Gamma_{\text{out}}\cup\Gamma} \varepsilon(\boldsymbol{U_a})\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_\Omega (\nabla \boldsymbol{U})^T \boldsymbol{U_a} \cdot \boldsymbol{U'}\, dx &\underset{(A.6)}{=} -\int_\Omega \nabla \boldsymbol{U_a} \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U}\, dx + \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma \\ &\underset{(2.22d)\text{ et }(2.33c)}{=} -\int_\Omega \nabla \boldsymbol{U_a} \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U}\, dx + \int_{\Gamma_{\text{out}}} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -\int_\Omega \nabla \boldsymbol{U_a} \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U'}\, dx &\underset{(A.6)}{=} \int_\Omega \nabla \boldsymbol{U'} \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx - \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a})\, d\sigma \\ &\underset{(2.22d)\text{ et }(2.33c)}{=} \int_\Omega \nabla \boldsymbol{U'} \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx - \int_{\Gamma_{\text{out}}} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a})\, d\sigma \end{aligned}$$

$$\int_\Omega \nabla p_a \cdot \boldsymbol{U'}\, dx \underset{(A.7)}{=} -\int_\Omega p_a \operatorname{div} \boldsymbol{U'}\, dx + \int_{\partial\Omega} p_a (\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma \underset{(2.33b)\text{ et }(2.33c)}{=} \int_{\Gamma_{\text{out}}\cup\Gamma} p_a (\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma.$$

Cela permet de réécrire l'équation (B.21) sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} &\int_\Omega 2\nu\varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx - \nabla \boldsymbol{U_a} \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U}\, dx + \nabla \boldsymbol{U'} \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx \\ &\quad + \int_{\Gamma_{\text{out}}} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n}) - (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a})\, d\sigma - \sigma(\boldsymbol{U_a}, p_a)\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma \\ &\qquad - \int_\Gamma \sigma(\boldsymbol{U_a}, p_a)\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma = -\lambda_{\mathcal{E}} 2\nu \int_\Omega \Delta \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U'}\, dx - \frac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}} \int_\Omega C_a \nabla C \cdot \boldsymbol{U'}\, dx. \end{aligned} \tag{B.22}$$

L'équation (2.33a) multipliée par $\boldsymbol{U_a}$ et intégrée sur tout le domaine Ω fournit :

$$-\nu \int_\Omega \Delta \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx + \int_\Omega \nabla \boldsymbol{U} \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx + \int_\Omega \nabla \boldsymbol{U'} \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx + \int_\Omega \nabla p' \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx = 0 \tag{B.23}$$

L'intégration par parties de chacun des termes est la suivante :

$$\begin{aligned} -\nu \int_\Omega \Delta \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx &\underset{(A.9)}{=} 2\nu \int_\Omega \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx - 2\nu \int_{\partial\Omega} \varepsilon(\boldsymbol{U'})\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U_a}\, d\sigma \\ &\underset{(3.22c)}{=} 2\nu \int_\Omega \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'})\, dx - 2\nu \int_{\Gamma_{\text{out}}} \varepsilon(\boldsymbol{U'})\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U_a}\, d\sigma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_\Omega \nabla \boldsymbol{U} \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx &\underset{(A.6)}{=} -\int_\Omega \nabla \boldsymbol{U_a} \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U}\, dx + \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U'})(\boldsymbol{U_a} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma \\ &\underset{(2.22d)\text{ et }(2.33c)}{=} -\int_\Omega \nabla \boldsymbol{U_a} \boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U}\, dx + \int_{\Gamma_{\text{out}}} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U'})(\boldsymbol{U_a} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma \end{aligned}$$

$$\int_\Omega \nabla p' \cdot \boldsymbol{U_a}\, dx \underset{(A.7)}{=} -\int_\Omega \operatorname{div}(\boldsymbol{U_a}) p'\, dx + \int_{\partial\Omega} p' (\boldsymbol{U_a} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma \underset{(3.22b)\text{ et }(3.22c)}{=} \int_{\Gamma_{\text{out}}} p' (\boldsymbol{U_a} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma$$

Ces intégrations par parties permettent de réécrire l'équation (B.23) comme suit :

$$\int_\Omega (2\nu\varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'}) - \nabla \boldsymbol{U_a}\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U} + \nabla \boldsymbol{U'}\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a})\, dx \\ + \int_{\Gamma_{\text{out}}} ((\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n}) - \sigma(\boldsymbol{U'}, p')\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U_a})\, d\sigma = 0$$

Puis en tenant compte de la condition aux limites de sortie sur $\boldsymbol{U'}$ (2.33e), il vient :

$$\int_\Omega (2\nu\varepsilon(\boldsymbol{U_a}) : \varepsilon(\boldsymbol{U'}) - \nabla \boldsymbol{U_a}\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U} + \nabla \boldsymbol{U'}\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a})\, dx + \int_{\Gamma_{\text{out}}} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U_a})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma = 0 \quad \text{(B.24)}$$

La soustraction des équations (B.22) et (B.24) donne

$$-\lambda_{\mathcal{E}} 2\nu \int_\Omega \Delta \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U'}\, dx = -\int_{\Gamma\cup\Gamma_{\text{out}}} \sigma(\boldsymbol{U_a}, p_a)\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma - \int_{\Gamma_{\text{out}}} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a})\, d\sigma \\ + \frac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}} \int_\Omega C_a \nabla C \cdot \boldsymbol{U'}\, dx. \quad \text{(B.25)}$$

En remplaçant, le terme $-\lambda_{\mathcal{E}} 2\nu \int_\Omega \Delta \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{U'}$ à l'aide de l'équation (B.25) dans le calcul de la dérivée du Lagrangien $\mathcal{L}$ (B.20), il vient :

$$\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) = K_{\text{crit}} \int_{\Gamma_{\text{out}}} C'\, d\sigma + \lambda_{\mathcal{V}} \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) d\sigma - \int_{\Gamma\cup\Gamma_{\text{out}}} \sigma(\boldsymbol{U_a}, p_a).n \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma \\ + 2\nu\lambda_{\mathcal{E}} \left(\int_{\partial\Omega} |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n})\, d\sigma + 2 \int_{\partial\Omega} \varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U'}\, d\sigma \right) \quad \text{(B.26)} \\ + \frac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}} \int_\Omega C_a \nabla C \cdot \boldsymbol{U'}\, dx - \int_{\Gamma_{\text{out}}} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a})\, d\sigma$$

Le même processus est effectué sur les systèmes (3.23) et (3.17). La multiplication de l'équation (3.23a) par C' et l'intégration sur Ω donne :

$$-\mathcal{D} \int_\Omega \Delta C_a C'\, dx - \int_\Omega (\boldsymbol{U} \cdot \nabla C_a) C'\, dx + k \int_\Omega C_a C'\, dx = 0 \quad \text{(B.27)}$$

L'intégration par parties de chacun des termes donne :

$$-\mathcal{D} \int_\Omega \Delta C_a C'\, dx = \mathcal{D} \int_\Omega (\nabla C_a \cdot \nabla C')\, dx - \mathcal{D} \int_{\partial\Omega} \frac{\partial C_a}{\partial n} C'\, d\sigma$$

$$\int_\Omega (\boldsymbol{U} \cdot \nabla C_a) C'\, dx \underset{\text{(A.6)}}{=} -\int_\Omega (\boldsymbol{U} \cdot \nabla C') C_a\, dx + \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})(C_a C')\, d\sigma$$

Ce qui permet de réécrire l'équation (B.27) comme suit :

$$\mathcal{D} \int_\Omega (\nabla C_a \cdot \nabla C')\, dx - \mathcal{D} \int_{\partial\Omega} \frac{\partial C_a}{\partial n} C'\, d\sigma + \int_\Omega (\boldsymbol{U} \cdot \nabla C') C_a\, dx \\ - \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})(C_a C')\, d\sigma + k \int_\Omega C_a C'\, dx = 0 \quad \text{(B.28)}$$

De même, l'intégration par partie de (3.17a) multipliée par C_a donne la relation suivante :

$$-\mathcal{D} \int_\Omega \Delta C' C_a\, dx + \int_\Omega (\boldsymbol{U} \cdot \nabla C') C_a\, dx + \int_\Omega (\boldsymbol{U'} \cdot \nabla C) C_a\, dx + k \int_\Omega C_a C'\, dx = 0 \quad \text{(B.29)}$$

Puis en utilisant la formule d'intégration par partie (A.4), l'équation (B.29) devient :

$$\begin{aligned}\mathcal{D}\int_\Omega(\nabla C_a\cdot\nabla C')\,dx-\mathcal{D}\int_{\partial\Omega}\frac{\partial C'}{\partial n}C_a\,d\sigma+\int_\Omega(\boldsymbol{U}\cdot\nabla C')C_a\,dx\\ +\int_\Omega(\boldsymbol{U'}\cdot\nabla C)C_a\,dx+k\int_\Omega C_aC'\,dx=0\end{aligned}\tag{B.30}$$

La soustraction des équations (B.28) et (B.30) permet d'écrire :

$$\int_\Omega(\boldsymbol{U'}\cdot\nabla C)C_a\,dx+\underbrace{\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{n})(C_aC')\,d\sigma+\mathcal{D}\int_{\partial\Omega}\frac{\partial C_a}{\partial n}C'\,d\sigma-\mathcal{D}\int_{\partial\Omega}\frac{\partial C'}{\partial n}C_a\,d\sigma}_{\boxed{\text{I}}}=0\tag{B.31}$$

On peut remarquer que la contribution de $\boxed{\text{I}}$ est nulle sur les frontières Γ_{in} et Γ_{lat} (voir équations (3.23b), (3.17b), (3.23c) et (3.17d)). Ensuite, les équations (3.23d), (3.17d), (3.23c) et (3.17c) et (2.22d) permettent d'exprimer l'intégrale $\boxed{\text{I}}$ sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}\boxed{\text{I}} &= K_{\text{BC}}\int_{\Gamma_{\text{out}}}C'\,d\sigma-\mathcal{D}\int_\Gamma C_a\left(-\frac{\partial C^2}{\partial n^2}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})+\nabla C\cdot\nabla(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})-\nabla C\cdot(\nabla(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}\right)d\sigma\\
&= K_{\text{BC}}\int_{\Gamma_{\text{out}}}C'\,d\sigma-\mathcal{D}\int_\Gamma C_a\left(-\frac{\partial C^2}{\partial n^2}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})+\nabla C\cdot\nabla(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})-(\nabla(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\cdot\boldsymbol{n})(\nabla C\cdot\boldsymbol{n})\right)d\sigma\\
&= K_{\text{BC}}\int_{\Gamma_{\text{out}}}C'\,d\sigma-\mathcal{D}\int_\Gamma C_a\left(-\frac{\partial C^2}{\partial n^2}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})+\nabla C\cdot\nabla(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})-\frac{\partial(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})}{\partial n}\frac{\partial C}{\partial n}\right)d\sigma\\
&\underset{\text{(A.10)}}{=} K_{\text{BC}}\int_{\Gamma_{\text{out}}}C'\,d\sigma-\mathcal{D}\int_\Gamma C_a\left(\Delta C(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})-\mathcal{H}\frac{\partial C}{\partial n}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\right)\\
\boxed{\text{I}} &\underset{\text{(3.4c)}}{=} K_{\text{BC}}\int_{\Gamma_{\text{out}}}C'\,d\sigma-\mathcal{D}\int_\Gamma C_a\left(\Delta C(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})-\mathcal{H}\frac{\partial C}{\partial n}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\right)\end{aligned}\tag{B.32}$$

L'expression de $\boxed{\text{I}}$ ci-dessus permet de reformuler l'équation (B.31) sous la forme suivante :

$$K_{\text{BC}}\int_{\Gamma_{\text{out}}}C'\,d\sigma=-\int_\Omega(\boldsymbol{U'}\cdot\nabla C)C_a\,dx-\mathcal{D}\int_\Gamma C_a\Delta C(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\tag{B.33}$$

En remplaçant le terme $K_{\text{BC}}\int_{\Gamma_{\text{out}}}C'\,d\sigma$ à l'aide de (B.33), la dérivée du lagrangian $\mathcal{L}$ (B.26) se réécrit comme suit :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V})=&\lambda_{\mathcal{V}}\int_{\partial\Omega}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})d\sigma-\int_{\Gamma\cup\Gamma_{\text{out}}}\sigma(\boldsymbol{U_a},p_a).n\cdot\boldsymbol{U'}\,d\sigma\\
&+2\nu\lambda_{\mathcal{E}}\left(\int_{\partial\Omega}|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma+2\int_{\partial\Omega}\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'}\,d\sigma\right)\\
&-\frac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}}\mathcal{D}\int_\Gamma C_a\Delta C(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})-\int_{\Gamma_{\text{out}}}(\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{U_a})\,d\sigma\end{aligned}\tag{B.34}$$

Les conditions aux limites (3.22d), (2.33c), (2.33d) et (3.20b) permettent d'exprimer la dérivée

du Lagrangien $\mathcal{L}$ sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) \underset{\text{(3.20b) et (2.33c)}}{=} \int_\Gamma \Big(& 2\nu\lambda_{\mathcal{E}}|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n}) - \sigma(\boldsymbol{U_a},p_a)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'} + 4\nu\lambda_{\mathcal{E}}\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'} \\ & - \frac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}}\mathcal{D}C_a\Delta C(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n}) + \lambda_{\mathcal{V}}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\Big)\,d\sigma - \int_{\Gamma_{\text{out}}}((\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'}\cdot\boldsymbol{U_a}) \\ & - \sigma(\boldsymbol{U_a},p_a)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'} + 4\nu\lambda_{\mathcal{E}}\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U'})\,d\sigma\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) \underset{\text{(2.33d)}}{=} \int_\Gamma \Big(& 2\nu\lambda_{\mathcal{E}}|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 + \sigma(\boldsymbol{U_a},p_a)\boldsymbol{n}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{U}}{\partial n} - 4\nu\lambda_{\mathcal{E}}\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}.\frac{\partial\boldsymbol{U}}{\partial n} \\ & - \frac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}}\mathcal{D}C_a\Delta C + \lambda_{\mathcal{V}}\Big)(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma \\ & - \int_{\Gamma_{\text{out}}}\Big((\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{U_a} - \sigma(\boldsymbol{U_a},p_a)\boldsymbol{n} + 4\nu\lambda_{\mathcal{E}}\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n}\Big)\cdot\boldsymbol{U'}\,d\sigma\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) \underset{\text{(3.22d)}}{=} \int_\Gamma \Big(& (2\nu\varepsilon(\boldsymbol{U_a})\boldsymbol{n} - p_a n - 4\nu\lambda_{\mathcal{E}}\varepsilon(\boldsymbol{U})\boldsymbol{n})\cdot\frac{\partial\boldsymbol{U}}{\partial n} + 2\nu\lambda_{\mathcal{E}}|\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 \\ & - \frac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}}\mathcal{D}C_a\Delta C + \lambda_{\mathcal{V}}\Big)(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma\end{aligned} \tag{B.35}$$

Pour finir, les propriétés sur les vitesses $\boldsymbol{U}$ et $\boldsymbol{U_a}$ (B.8), (B.9) et (B.10) permettent de reformuler la dérivée du lagrangien selon :

$$\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) = \int_\Omega \Big(2\nu(\varepsilon(\boldsymbol{U}):\varepsilon(\boldsymbol{U_a}) - \lambda_{\mathcal{E}}\varepsilon(\boldsymbol{U}):\varepsilon(\boldsymbol{U})) - \frac{K_{\text{crit}}}{K_{\text{BC}}}\mathcal{D}C_a\Delta C + \lambda_{\mathcal{V}}\Big)(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n})\,d\sigma \tag{B.36}$$

L'expression du gradient de forme (3.21) découle de la relation ci-dessus.

B.4 Détails des calculs permettant la formulation du gradient de forme (3.24)

Le premier état adjoint et le système d'équation modélisant l'écoulement de fluide (i.e. les équations de Navier-Stokes) étant identiques dans les deux cas, la première partie des calculs est similaire au cas précédant. Dans la suite des calculs, l'unique partie qui diffère entre les deux cas est le terme de réaction $k\int_\Omega C_a C'\,dx$ qui se simplifiait lors de la soustraction (B.31). On peut donc redémarrer les calculs à partir des équations (B.26) et (B.31).

De même que dans le cas précédent, l'intégrale $\boxed{\text{I}}$ n'a pas de contribution sur Γ_{in} et Γ_{lat} (voir les équations (3.25b) et (3.18b)). D'après les équations (3.25c), (3.18d), (3.25b) et (3.18c), l'intégrale $\boxed{\text{I}}$ se réécrit ici comme suit.

$$\boxed{\text{I}} = \int_{\Gamma_{\text{out}}} C'\,d\sigma - \mathcal{D}\int_\Gamma \frac{\partial C_a}{\partial n}\frac{\partial C}{\partial n}(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n}) \tag{B.37}$$

Ce qui permet d'exprimer la relation (B.31) sous la forme suivante :

$$K_{\mathrm{BC}} \int_{\Gamma_{\mathrm{out}}} C' \, d\sigma = - \int_{\Omega} (\boldsymbol{U'} \cdot \nabla C) C_a \, dx + \mathcal{D} \int_{\Gamma} \frac{\partial C_a}{\partial n} \frac{\partial C}{\partial n} (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) \tag{B.38}$$

En remplaçant le terme $K_{\mathrm{BC}} \int_{\Gamma_{\mathrm{out}}} C' \, d\sigma$ à l'aide de (B.33), la dérivée du lagrangian $\mathcal{L}$ (B.26) se réécrit comme suit :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) =& \lambda_{\mathcal{V}} \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) d\sigma - \int_{\Gamma \cup \Gamma_{\mathrm{out}}} \sigma(\boldsymbol{U_a}, p_a).n \cdot \boldsymbol{U'} \, d\sigma \\ &+ 2\nu\lambda_{\mathcal{E}} \left(\int_{\partial\Omega} |\varepsilon(\boldsymbol{U})|^2 (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) \, d\sigma + 2 \int_{\partial\Omega} \varepsilon(\boldsymbol{U}) \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{U'} \, d\sigma \right) \\ &+ \frac{K_{\mathrm{crit}}}{K_{\mathrm{BC}}} \mathcal{D} \int_{\Gamma} \frac{\partial C_a}{\partial n} \frac{\partial C}{\partial n} (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) - \int_{\Gamma_{\mathrm{out}}} (\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{U'} \cdot \boldsymbol{U_a}) \, d\sigma \end{aligned} \tag{B.39}$$

Pour finir, les manipulations effectuées en fin d'annexe B.3 sont réalisées à nouveau sur l'équation (B.39) et permettent de reformuler la dérivée du lagrangien suivant la relation (B.40), ce qui permet de déterminer l'expression du gradient de forme (3.24).

$$\mathcal{L}'(\Omega)(\boldsymbol{V}) = \int_{\Omega} \left(2\nu(\varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U_a}) - \lambda_{\mathcal{E}} \varepsilon(\boldsymbol{U}) : \varepsilon(\boldsymbol{U})) + \frac{K_{\mathrm{crit}}}{K_{\mathrm{BC}}} \mathcal{D} \frac{\partial C_a}{\partial n} \frac{\partial C}{\partial n} + \lambda_{\mathcal{V}} \right) (\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n}) \, d\sigma \tag{B.40}$$

Annexe C

Principales étapes de l'algorithme SIMPLE

L'algorithme SIMPLE a été développé par Patankar et Spalding (1972). Celui-ci permet de traiter le couplage entre la pression et la vitesse présent dans les équations de Navier-Stokes. Le maillage associé à la résolution du couplage pression-vitesse est représenté par la figure C.2. Celui-ci montre un décalage d'une demie maille entre les volumes de contrôle où sont définis les champs scalaires (ici la pression en gris sur la figure) et ceux où sont définis les composantes de la vitesse (hachuré sur la figure). Ce décalage permet une meilleure stabilité lors de la résolution car il assure la concordance des opérateurs de divergence et de gradient. La résolution de l'algorithme SIMPLE s'effectue en sept étapes et est résumé par la figure C.1.

Étape 1 - Supposer un champ de pression p^* dans le domaine.

Étape 2 - Résoudre les équations de Navier-Stokes discrétisées (C.1) et (C.2) pour déterminer numériquement le champ de vitesse sur le maillage décalé.

$$a_w u_w^* = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb}^* - (p_{\boldsymbol{P}}^* - p_{\boldsymbol{W}}^*) A_w + b_w \tag{C.1}$$

$$a_s v_s^* = \sum_{nb} a_{nb} v_{nb}^* - (p_{\boldsymbol{P}}^* - p_{\boldsymbol{S}}^*) A_s + b_s \tag{C.2}$$

où A_w et A_s désigne respectivement l'aire de la face connectant les nœuds $\boldsymbol{P}$ et $\boldsymbol{W}$ ou $\boldsymbol{S}$. b_w et b_s représentent les termes sources dans les nœuds du maillage décalé w et s. Pour finir nb désigne les 4 voisins du nœud de travail (ici w ou s).

Étape 3 - A ce stade la valeur supposée pour le champ de pression p^* et celles déterminées pour les composantes de la vitesse u^* et v^* doivent être corrigées comme suit

$$p = p^* + p' \qquad u = u^* + u' \qquad v = v^* + v' \tag{C.3}$$

où p', u' et v' représentent les corrections à la pression et à la vitesse introduit par l'algorithme SIMPLE. p, u et v désignent la solution des équations de Navier-Stokes,

qui à convergence, sont solutions des équations discrétisées suivantes :

$$a_w u_w = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb} - (p_{\boldsymbol{P}} - p_{\boldsymbol{W}}) A_w + b_w \tag{C.4}$$

$$a_s v_s = \sum_{nb} a_{nb} v_{nb} - (p_{\boldsymbol{P}} - p_{\boldsymbol{S}}) A_s + b_s \tag{C.5}$$

Étape 4 - La soustraction des équations (C.8) et (C.9) par les équations (C.1) et (C.2) combinée aux équations de correction (C.3) fournit ensuite :

$$a_w u'_w = \sum_{nb} a_{nb} u'_{nb} - (p'_{\boldsymbol{P}} - p'_{\boldsymbol{W}}) A_w \tag{C.6}$$

$$a_s v'_s = \sum_{nb} a_{nb} v'_{nb} - (p'_{\boldsymbol{P}} - p'_{\boldsymbol{S}}) A_s \tag{C.7}$$

À ce stade, une approximation est introduite. Les termes $\sum_{nb} a'_{nb} u_{nb}$ et $\sum_{nb} a_{nb} v'_{nb}$ sont négligés devant les autres termes. Cette approximation n'est pas critique car, à convergence, les corrections des vitesses sont nulles. Les corrections u' et v' sont donc solution des équations ci-dessous.

$$u'_w = -(p'_{\boldsymbol{P}} - p'_{\boldsymbol{W}}) d_w \tag{C.8}$$

$$v'_s = -(p'_{\boldsymbol{P}} - p'_{\boldsymbol{S}}) d_s \tag{C.9}$$

avec $d_w = \frac{A_w}{a_w}$ et $d_s = \frac{A_s}{a_s}$. Ce qui nous donne ensuite, en injectant les équations ci-dessus dans les équations de correction :

$$u_w = u^*_w - (p'_{\boldsymbol{P}} - p'_{\boldsymbol{W}}) d_w \tag{C.10}$$

$$v_s = v^*_s - (p'_{\boldsymbol{P}} - p'_{\boldsymbol{S}}) d_s \tag{C.11}$$

Des expressions similaires existent pour les nœuds e et n du maillage décalé.

$$u_e = u^*_e - (p'_{\boldsymbol{E}} - p'_{\boldsymbol{P}}) d_e \tag{C.12}$$

$$v_n = v^*_n - (p'_{\boldsymbol{N}} - p'_{\boldsymbol{P}}) d_n \tag{C.13}$$

où $d_e = \frac{A_e}{a_e}$ et $d_n = \frac{A_n}{a_n}$.

Étape 5 - À ce stade, il ne reste plus qu'à déterminer le champ de pression correctif p' pour résoudre ce couplage pression-vitesse. Il peut être résolu à partir de l'équation de continuité discrétisée (C.14)

$$(\rho u_e A_e - \rho u_w A_w) + (\rho v_n A_n - \rho v_s A_s) = 0 \tag{C.14}$$

En effet, en injectant les équations (C.10), (C.11), (C.12) et (C.13), il vient :

$$\begin{aligned} &\rho A_e (u^*_e - (p'_{\boldsymbol{E}} - p'_{\boldsymbol{P}}) d_e) - \rho A_w (u^*_w - (p'_{\boldsymbol{P}} - p'_{\boldsymbol{W}}) d_w) \\ &\quad + \rho A_n (v^*_n - (p'_{\boldsymbol{N}} - p'_{\boldsymbol{P}}) d_n) - \rho A_s v^*_s - (p'_{\boldsymbol{P}} - p'_{\boldsymbol{S}}) d_s) = 0 \end{aligned} \tag{C.15}$$

L'expression ci-dessus peut se réarranger de la manière suivante :

$$\begin{aligned} (\rho A_e d_e + \rho A_w d_w + \rho A_n d_n + \rho A_s d_s) p'_{\boldsymbol{P}} &= \rho A_e d_e p'_{\boldsymbol{E}} + \rho A_w d_w p'_{\boldsymbol{W}} \\ &\quad + \rho A_s d_s p'_{\boldsymbol{S}} + \rho A_n d_n p'_{\boldsymbol{N}} + \left(\rho A_w u^*_w - \rho A_e u^*_e + \rho A_s v^*_s - \rho A_n v^*_n\right) \end{aligned} \tag{C.16}$$

TABLEAU C.1 – Valeurs des coefficients associées aux cellules adjacentes.

Coefficients	Valeurs
$a_{\boldsymbol{E}}$	$\rho A_e d_e$
$a_{\boldsymbol{W}}$	$\rho A_w d_w$
$a_{\boldsymbol{N}}$	$\rho A_n d_n$
$a_{\boldsymbol{S}}$	$\rho A_s d_s$
$b_{\boldsymbol{P}}$	$\rho A_w u_w^* - \rho A_e u_e^* + \rho A_s v_s^* - \rho A_n v_n^*$

Finalement, la relation (C.16) peut se résumer par l'équation suivante :

$$a_{\boldsymbol{P}} p'_{\boldsymbol{P}} = a_{\boldsymbol{E}} p'_{\boldsymbol{E}} + a_{\boldsymbol{W}} p'_{\boldsymbol{W}} + a_{\boldsymbol{S}} p'_{\boldsymbol{S}} + a_{\boldsymbol{N}} p'_{\boldsymbol{N}} + b_{\boldsymbol{P}} \tag{C.17}$$

où $a_{\boldsymbol{P}} = a_{\boldsymbol{E}} + a_{\boldsymbol{W}} + a_{\boldsymbol{S}} + a_{\boldsymbol{N}}$, les autres coefficients sont regroupés dans le tableau C.1.

Étape 6 - Résoudre les équations discrétisées pour les autres champ tels que la température ou la concentration s'ils ont une influence sur l'écoulement. S'ils n'en ont pas, il est mieux de les calculer une fois les équations de Navier-Stokes résolues (Patankar, 1980).

Étape 7 - Avant de revenir à l'étape 2, les pressions et vitesses sont relaxées pour éviter une éventuelle divergence du processus itératif (Versteeg et Malalasekera, 2007). Cette relaxation s'exprime mathématiquement comme suit.

$$u^{\text{new}} = \alpha_u u + (1 - \alpha_u) u^{(n-1)} \tag{C.18}$$

$$v^{\text{new}} = \alpha_v v + (1 - \alpha_v) v^{(n-1)} \tag{C.19}$$

$$p^{\text{new}} = p^* + \alpha_p p' \tag{C.20}$$

où $u^{(n-1)}$ et $v^{(n-1)}$ sont les valeurs des vitesses au début de l'itération de algorithme SIMPLE, u et v les valeurs à la fin de l'itération et α_u, α_v et α_p les coefficients de relaxation tous trois compris entre 0 et 1 (Versteeg et Malalasekera, 2007).

Supposer un champ de pression p^*;
tant que convergence non atteinte **faire**
  Résoudre les équations de Navier-Stokes discrétisées (C.1) et (C.2) pour obtenir u^* et v^*;
  Résoudre l'équation (C.17) pour obtenir p';
  Calculer p à partir de p' et p^* (C.3);
  Calculer u et v avec les équations (C.10) et (C.11);
  Résoudre les autres champs tels que la température ou la concentration;
  Relaxer u, v et p avec les équations (C.18), (C.19) et (C.20);
  Définir $p^* = p$;
fin

FIGURE C.1 – Algorithme SIMPLE

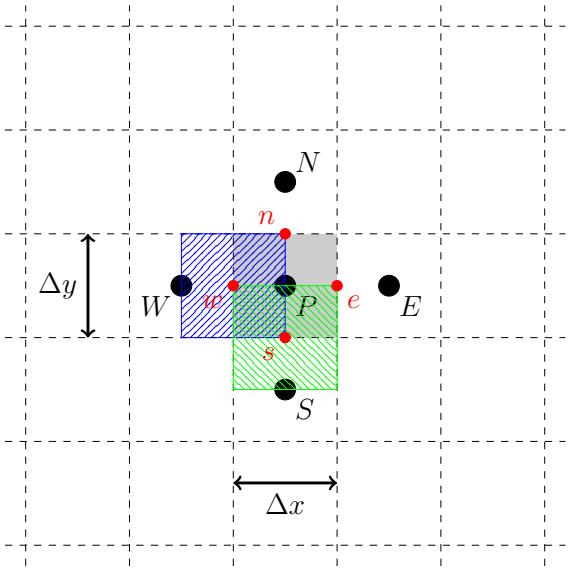


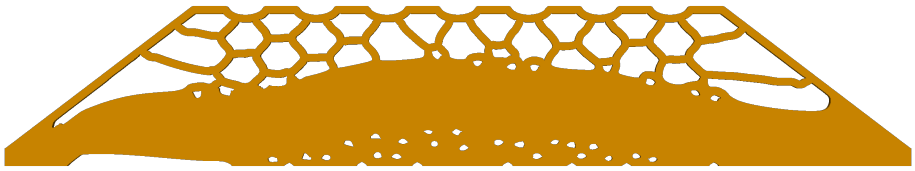
FIGURE C.2 – Maillage décalé de la forme, le carré grisé représente le volume de contrôle pour résoudre le champ de pression, le carré bleu hachuré la composante u de la vitesse et le carré hachuré vert la composante v de la vitesse.

Annexe D

Présentation des formes obtenues après le processus d'optimisation de forme

D.1 Comparaisons entre les formes déterminées par optimisation géométrique et la forme manufacturée

Cette annexe présente une comparaison entre les configurations du réacteurs déterminées par optimisation de forme et les réacteurs fabriqués par stratoconception® qui leurs sont associés. La figure D.1 présente une comparaison entre forme optimale déterminée et réacteur fabriqué pour la configuration optimale *R2* du réacteur, la figure D.2 présente la même comparaison pour le réacteur *R3* et la figure D.3 pour le réacteur *R4*.

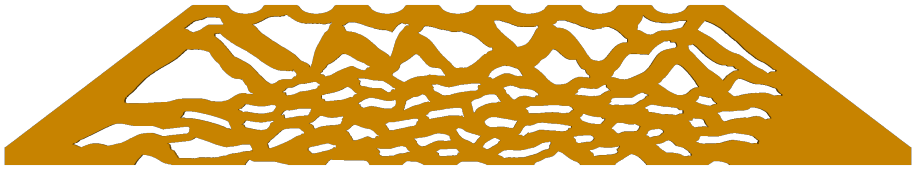


(a) Configuration optimale *R2* du réacteur.

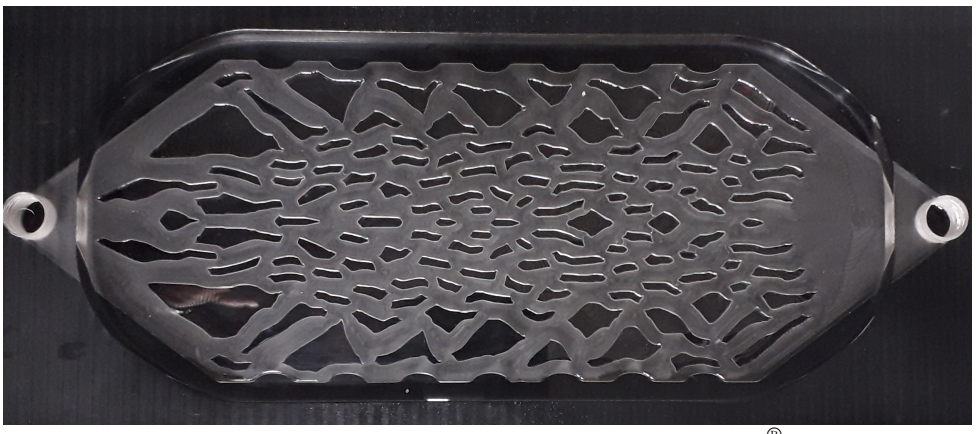


(b) Réacteur optimal *R2* fabriqué par stratoconception®.

FIGURE D.1 – Comparaison entre le réacteur optimal *R2* fabriqué par stratoconception® et la forme permettant de minimiser la perte d'énergie déterminée par optimisation géométrique.

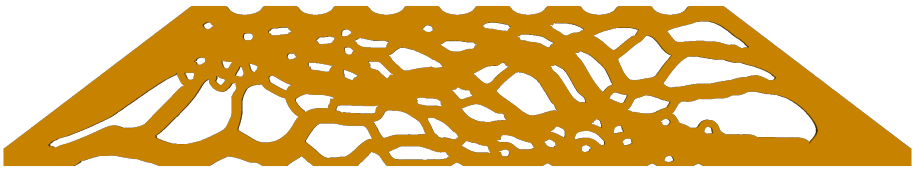


(a) Configuration optimale *R3* du réacteur.

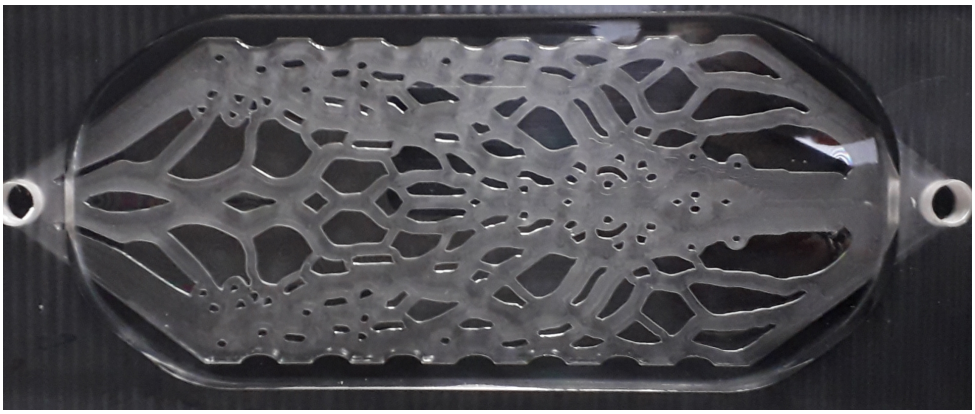


(b) Réacteur optimal *R3* fabriqué par stratoconception®.

FIGURE D.2 – Comparaison entre le réacteur optimal *R3* fabriqué par stratoconception® et la forme permettant de maximiser la conversion déterminée par optimisation géométrique.



(a) Configuration optimale *R4* du réacteur.



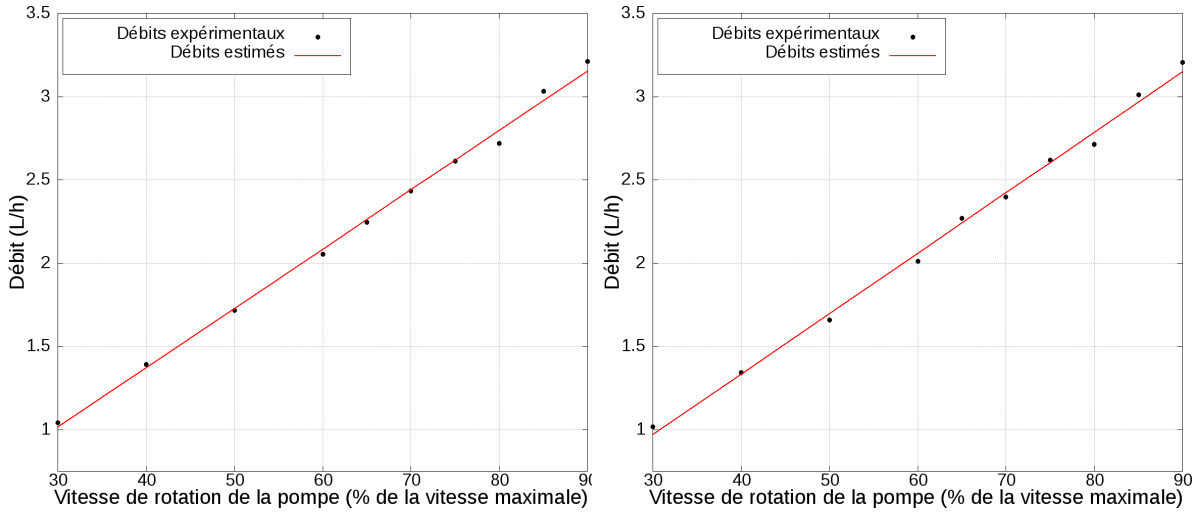
(b) Réacteur optimal *R4* fabriqué par stratoconception®.

FIGURE D.3 – Comparaison entre le réacteur optimal *R4* fabriqué par stratoconception® et la forme retenue à l'aide de la méthode MAUT.

Annexe E

Étalonnage de la pompe péristaltique

L'étalonnage de la pompe péristaltique a été effectué par empotage. Le fluide porteur utilisé est de l'eau dont la masse volumique est de 998 kg/L sous pression atmosphérique et à 21°C. La pompe péristaltique possède 5 voies et 2 de celles-ci ont été étalonnées, les étalonnages correspondants sont représentés par la figure E.1 et exprimés par les relations (E.1) et (E.2).



(a) Voie 1 de la pompe.

(b) Voie 2 de la pompe.

Figure E.1 – Droites d'étalonnage de la pompe péristaltique.

$$\text{Voie 1 :} \quad Q = 3{,}484 \cdot 10^{-2} V_\text{r} \tag{E.1}$$

$$\text{Voie 2 :} \quad Q = 3{,}458 \cdot 10^{-2} V_\text{r} \tag{E.2}$$

où V_r désigne le rapport de la vitesse de rotation de la pompe sur la vitesse maximale de rotation. Pour déterminer l'incertitude sur la pente de la courbe, on définit les écarts types suivant (Rouaud, 2014) :

$$\text{Sur le résidu : } s_r = \sqrt{\frac{\sum_i (Q_i - \hat{Q}_i)^2}{n-2}} \tag{E.3}$$

$$\text{Sur la pente : } s_p = \frac{s_r}{\sqrt{\sum_i (V_{\mathrm{r}_i} - \bar{V}_{\mathrm{r}})^2}} \tag{E.4}$$

où Q_i et $\hat{Q}_i$ désignent respectivement les valeurs expérimentales et estimées (à l'aide de la corrélation) du débit et $\bar{V}_{\mathrm{r}}$ représente la moyenne des vitesses de rotation imposées à la pompe pour l'étalonnage. Ainsi, l'intervalle de confiance à $(1-\alpha)\%$ se calcule par la relation suivante (Rouaud, 2014) :

$$\delta p = t_{\alpha/2;n-2} s_p \tag{E.5}$$

où $t_{\alpha/2;n-2}$ est le coefficient de Student de degré de liberté $n-2$ et de probabilité $\alpha/2$. Le degré de liberté est de 9 et pour un intervalle de confiance à 95%, on a $t_{\alpha/2;n-2} = 2{,}262$. Il vient ensuite les intervalles de confiance sur les pentes des équations (E.1) et (E.2) suivantes :

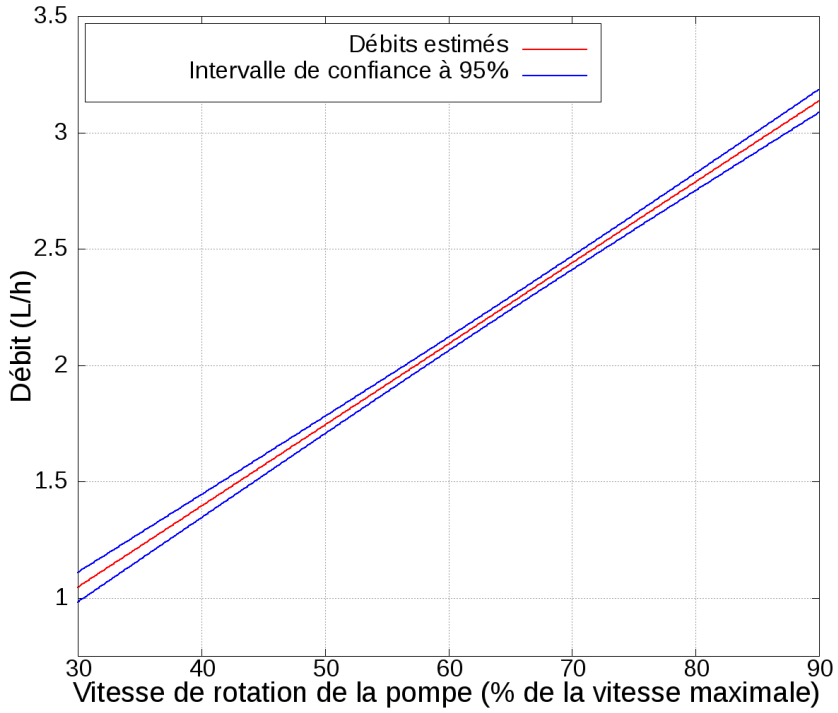
$$\text{Voie 1 : } \quad \delta p = 1{,}6 \cdot 10^{-3} L/h \tag{E.6}$$

$$\text{Voie 2 : } \quad \delta p = 2{,}1 \cdot 10^{-3} L/h \tag{E.7}$$

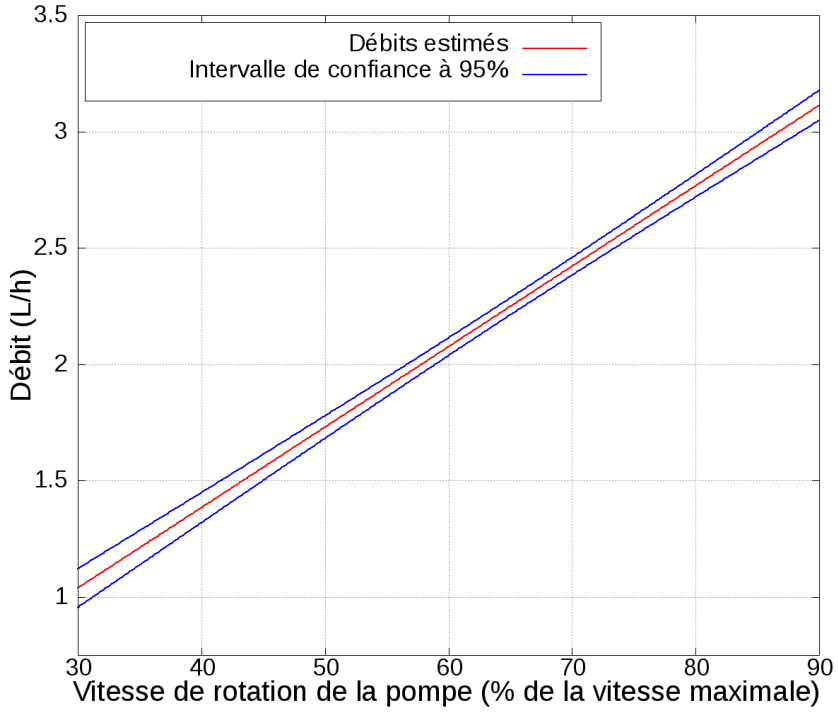
Une fois le débit déterminé, il faut quantifier l'erreur sur la prédiction de Q pour les deux voies. Cette erreur se quantifier par la relation suivante (Rouaud, 2014) :

$$\delta Q_0 = t_{\alpha/2;n-2} s_r \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(V_{\mathrm{r}_0} - \bar{V}_{\mathrm{r}})^2}{\sum_i (V_{\mathrm{r}_i} - \bar{V}_{\mathrm{r}})^2}} \tag{E.8}$$

On remarque ici que l'erreur sur la prédiction dépend de la valeur de V_{r_0}. Plus V_{r_0} est proche de la valeur moyenne des vitesses de rotation imposées à la pompe pour l'étalonnage, plus l'erreur sur la prédiction sera faible. Ces intervalles de confiance ont été estimés, ceux-ci sont montrés sur la figure E.2 et varient entre 0,03 et 0,08 L/h.



(a) Voie 1 de la pompe.



(b) Voie 2 de la pompe.

FIGURE E.2 – Droites d'étalonnage de la pompe péristaltique et intervalles de confiance sur la prédiction.

Annexe F

Supports supplémentaires pour la validation expérimentale des simulations CFD

F.1 Comparaison des DTS expérimentales aux DTS simulées

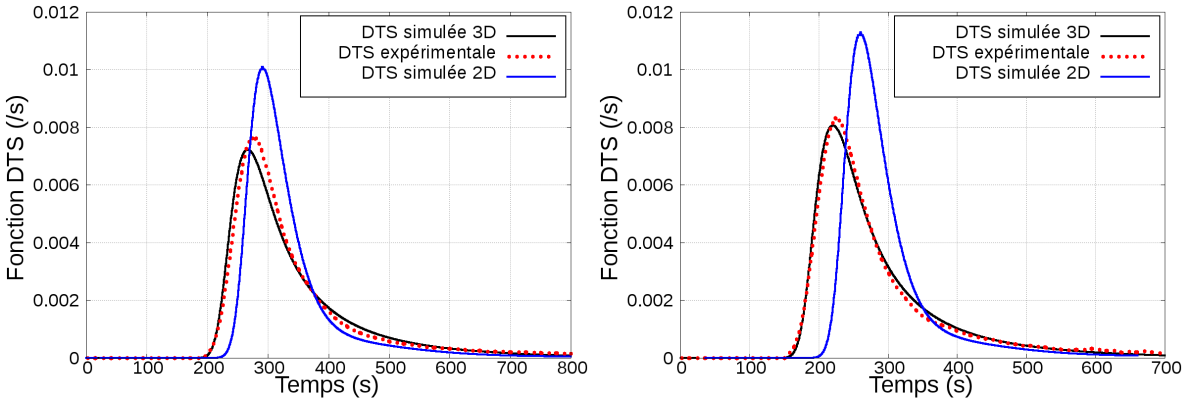
Cette annexe présente les DTS simulées et expérimentales des réacteurs :

— *R1* à des débits compris entre 1,35 et 2,60 L/h (figure F.1).

— *R2* à des débits de 1,75 et de 2,70 L/h (figure F.2).

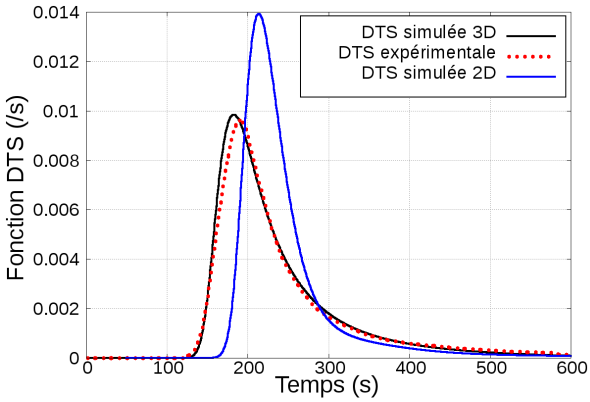
— *R3* à des débits de 2,07 et 2,77 L/h (figure F.3).

— *R4* à des débits de 2,37 et de 2,97 L/h (figure F.4).

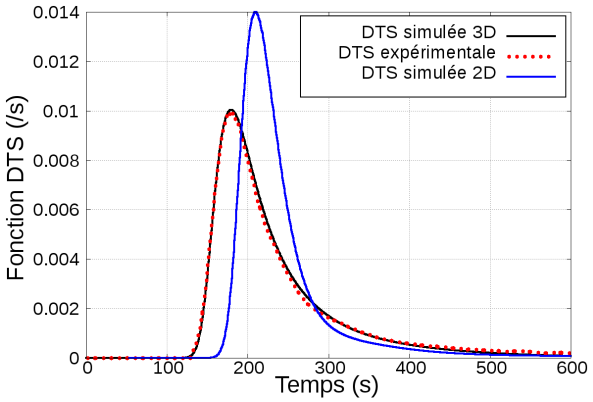


(a) $Q = 1{,}35$ L/h

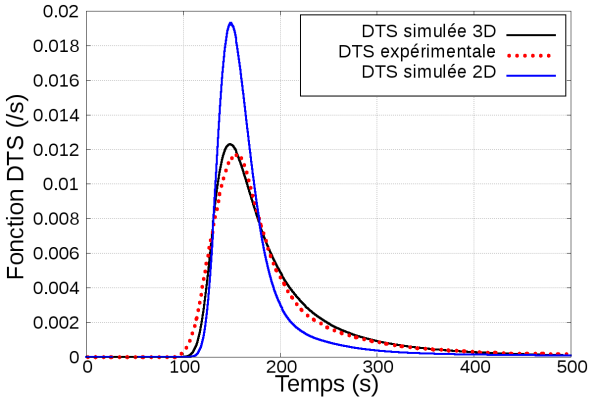
(b) $Q = 1{,}51$ L/h



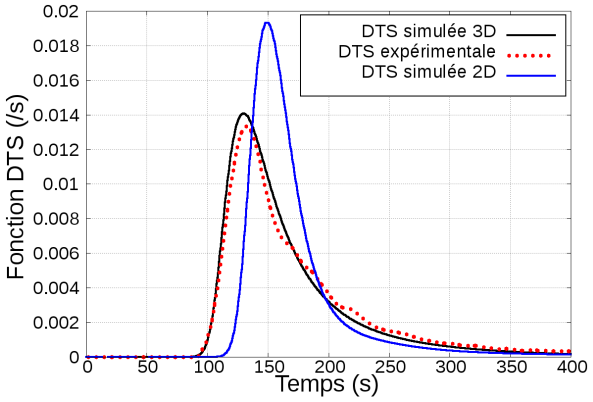
(c) $Q = 1{,}83$ L/h



(d) $Q = 1{,}86$ L/h

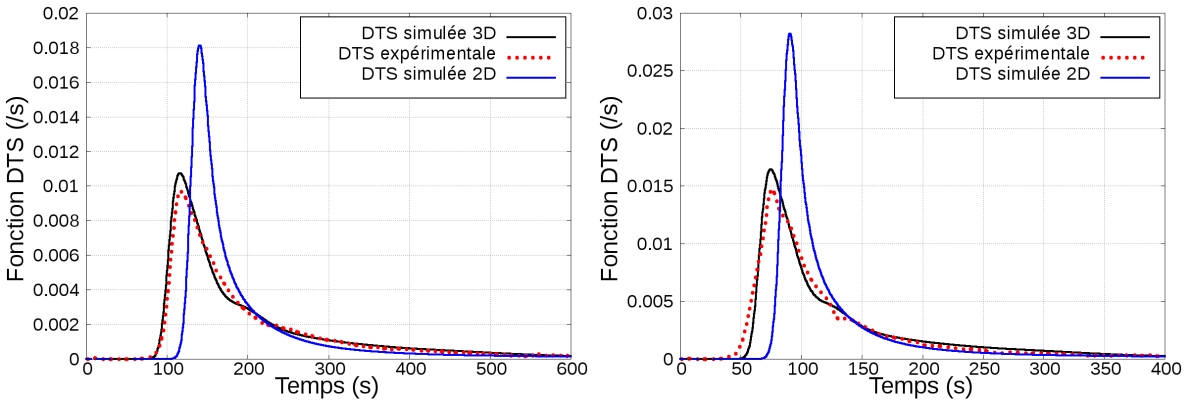


(e) $Q = 2{,}27$ L/h



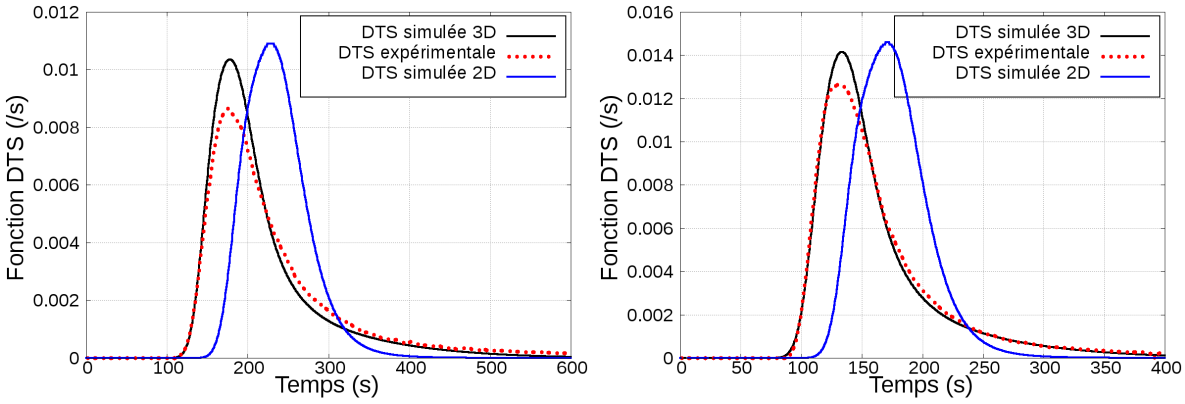
(f) $Q = 2{,}60$ L/h

FIGURE F.1 – DTS du réacteur *R1* pour des débits Q égalent à, (a) 1,35 L/h, (b) 1,51 L/h, (c) 1,83 L/h, (d) 1,86 L/h, (e) 2,27 L/h et (f) 2,60 L/h.



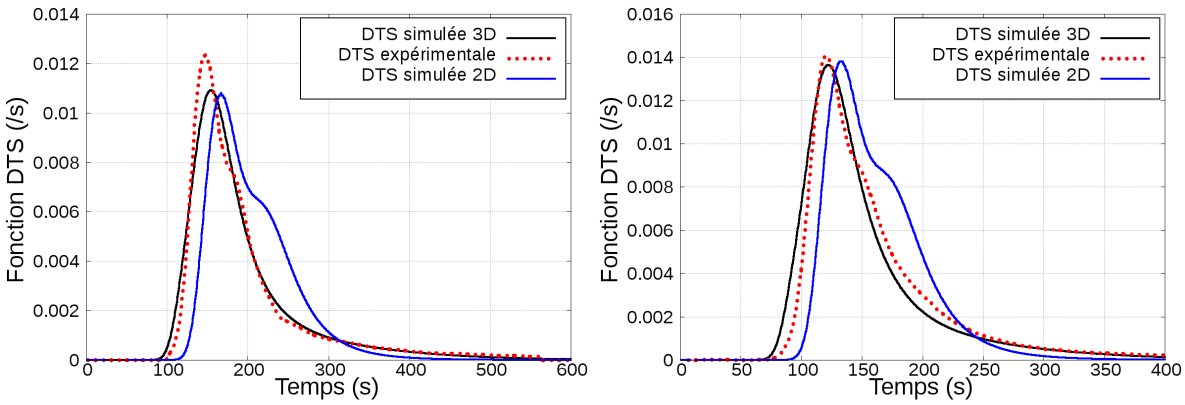
(a) $Q = 1{,}75$ L/h (b) $Q = 2{,}70$ L/h

FIGURE F.2 – DTS du réacteur *R2* pour des débits Q égalent à, (a) 1,75 L/h et (b) 2,70 L/h.



(a) $Q = 2{,}07$ L/h (b) $Q = 2{,}77$ L/h

FIGURE F.3 – DTS du réacteur *R3* pour des débits Q égalent à, (a) 2,07 L/h et (b) 2,77 L/h.



(a) $Q = 2{,}37$ L/h (b) $Q = 2{,}97$ L/h

FIGURE F.4 – DTS du réacteur *R4* pour des débits Q égalent à, (a) 2,37 L/h et (b) 2,97 L/h.

F.2 Comparaison des mesures PIV aux simulations

Cette annexe présente la comparaison qualitative de la mesure PIV au débit de 5,19 L/h avec les simulations CFD correspondantes (figure F.5) ainsi que les comparaisons des profils de vitesse suivant les droites Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 et Ψ_4 pour les débits $Q = 4{,}94$ L/h (figure F.6) et $Q = 5{,}19$ L/h (figure F.7).

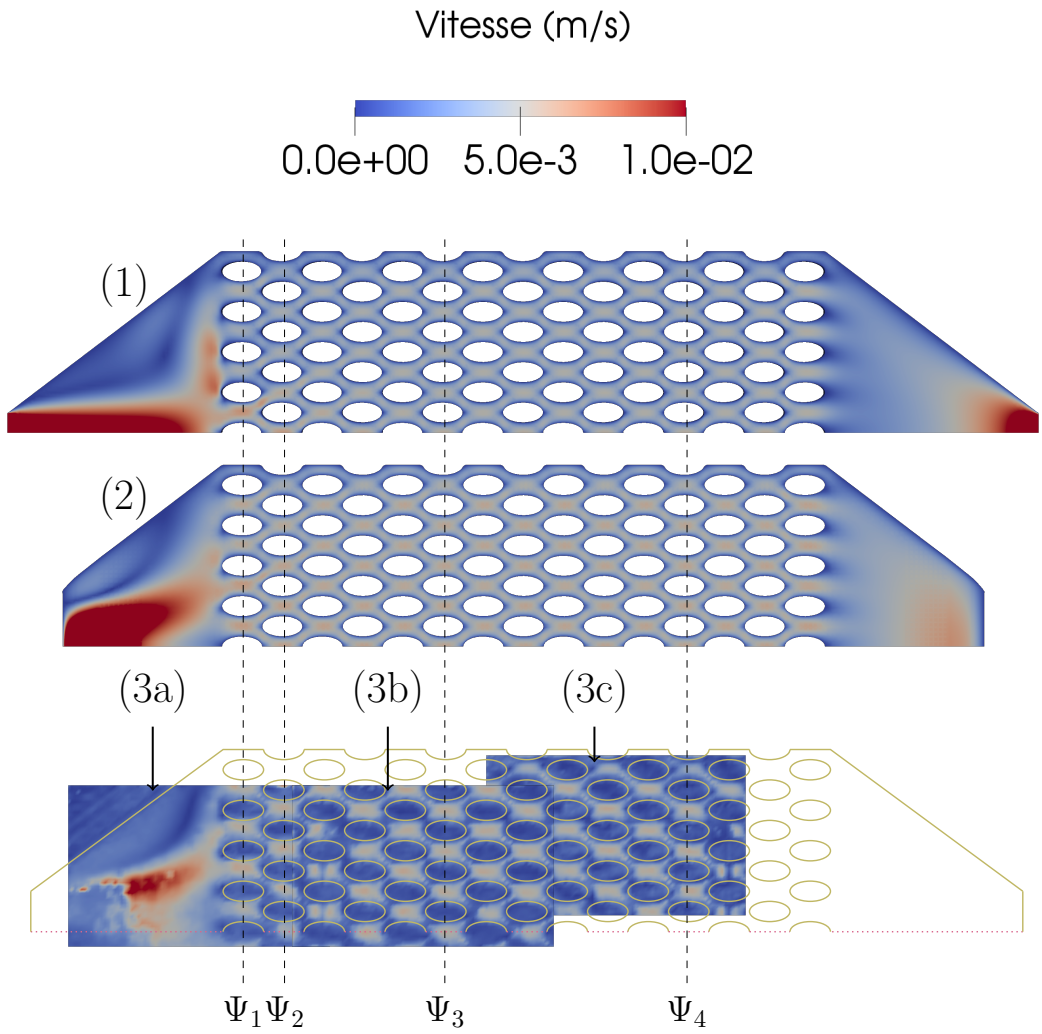
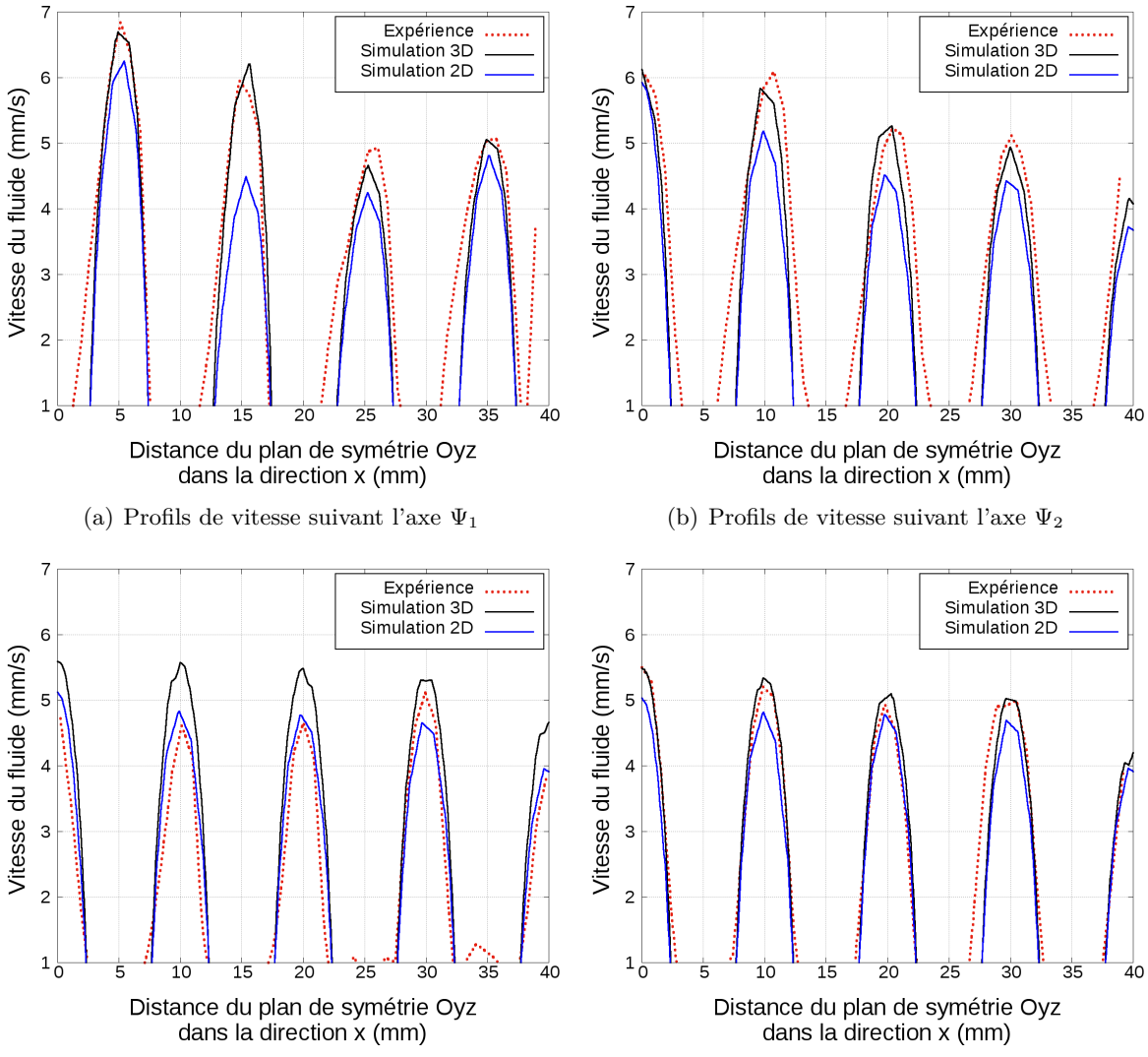


FIGURE F.5 – Comparaison des champs de vitesse pour un débit de 5,19 L/h, (1) représente le champ de vitesse pour une simulation 2D, (2) le champ de vitesse dans le plan parallèle à (Oxy) et centré suivant l'axe Oz dans le réacteur pour une simulation 3D et (3a), (3b) et (3c) les mesures expérimentales par PIV. Les axes Ψ représentent les droites selon lesquelles la comparaison quantitative des profils de vitesse sera effectuée.



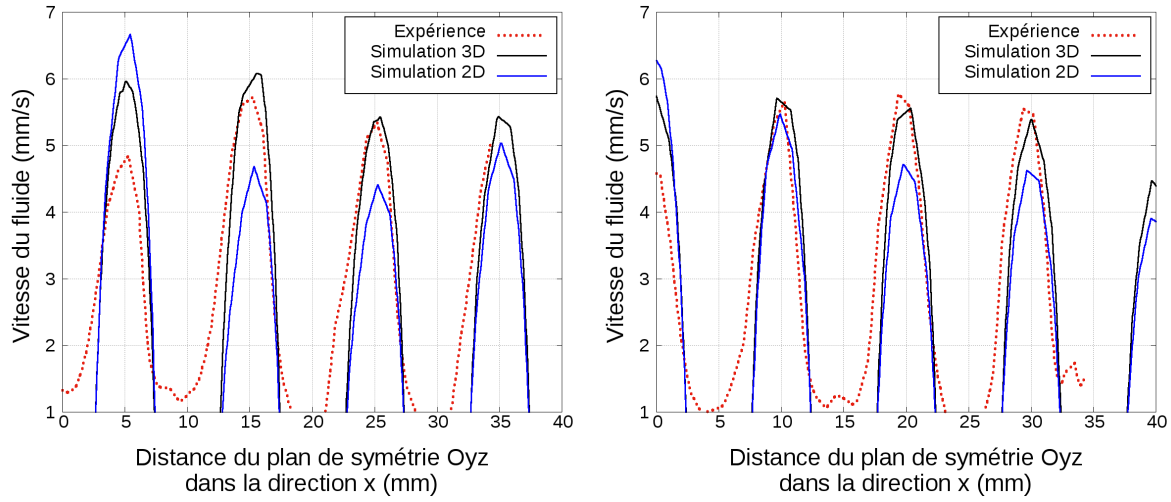
(a) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_1

(b) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_2

(c) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_3

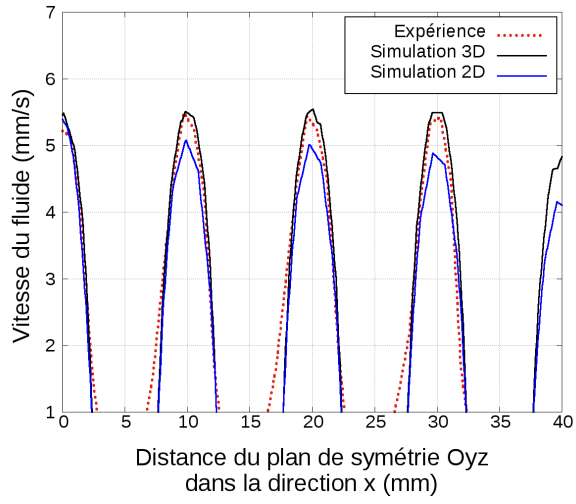
(d) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_4

FIGURE F.6 – Comparaison des profils de vitesse issus des simulations 2D et 3D avec les mesures expérimentales pour le débit $Q = 4{,}94$ L/h suivant les axes, (a) Ψ_1, (b) Ψ_2, (c) Ψ_3 et (d) Ψ_4 (débit de 4,94 L/h).

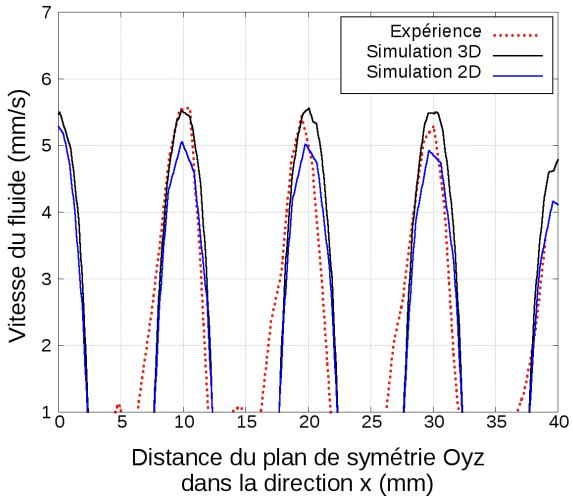


(a) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_1

(b) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_2



(c) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_3



(d) Profils de vitesse suivant l'axe Ψ_4

FIGURE F.7 – Comparaison des profils de vitesse issus des simulations 2D et 3D avec les mesures expérimentales pour le débit Q = 5,19 L/h suivant les axes, (a) Ψ_1, (b) Ψ_2,(c) Ψ_3 et (d) Ψ_4 (débit de 5,19 L/h).

Résumé

Cette thèse est un travail prospectif qui vise à appliquer en Génie des Procédés des méthodes d'optimisation de forme développées dans d'autres domaines d'ingénierie

La première partie de ce travail est dédiée au développement d'une méthodologie d'optimisation de forme et à son implantation dans le logiciel libre OpenFOAM. Elle a ensuite été appliquée afin de déterminer la configuration optimale du garnissage d'un réacteur à lit fixe en deux dimensions en écoulement monophasique de liquide. La méthodologie développée est ensuite testée pour déterminer la forme du garnissage qui minimise la dissipation d'énergie dans le fluide due aux frottements visqueux, la concentration moyenne de réactif en sortie, ou les deux simultanément à l'aide de l'optimisation multicritère. Les configurations optimales déterminées sont satisfaisantes et permettent une amélioration significative de la conversion du réacteur ou de la perte d'énergie dans le fluide.

Dans une seconde partie, une campagne expérimentale a été réalisée dans l'objectif de valider la modélisation CFD effectuée par le logiciel OpenFOAM, nécessaire à l'optimisation de forme et simulant l'écoulement et les réactions mises en jeu dans le réacteur. Pour cela, des maquettes à l'échelle 1 du réacteur initial et des réacteurs optimaux ont été fabriquées par impression 3D dans le but de les expérimenter. Les expériences s'articulent autour de 3 techniques de mesure, la PIV (Vélocimétrie par Image de Particules), la mesure de DTS (Distribution des Temps de Séjour) et la mesure de la conversion à la sortie du réacteur.

Finalement, il a été montré que l'optimisation du réacteur sous sa forme 2D permet une amélioration significative de ses performances même si la configuration déterminée est sûrement sous-optimale. En effet, après avoir comparé les mesures expérimentales aux simulations en deux et trois dimensions, il a été constaté que la simulation 3D est plus représentative de la réalité que la simulation 2D. Ainsi, optimiser le réacteur sous sa forme 3D serait une perspective intéressante pour la suite à condition d'améliorer le traitement des contraintes liées à l'étape de fabrication additive des réacteurs.

Mots-clés : Optimisation de forme, Réacteurs à lit fixe, Fabrication additive, Mécanique des fluides numériques (CFD), OpenFOAM, Optimisation multicritère

Abstract

This thesis is a prospective work which aims to apply in Chemical Engineering shape optimization methods developed in other areas of engineering.

The first part of this work is dedicated to the development of a shape optimization method to determine the optimal configuration of a two-dimensional packed reactor with a single phase liquid flow. The developed method is then applied to determine the shape of the reactor packing that minimizes the energy dissipation in the fluid due to viscous friction, the average outlet concentration of reactant, or both simultaneously using multi-objective optimization. The optimal configurations determined are satisfactory and allow a significant improvement of the conversion rate or the energy losses in the reactor.

In a second part, an experimental campaign was carried out in order to validate the CFD simulation performed by OpenFOAM software, required by the developed shape optimization approach and modeling the fluid flow and reactions involved in the reactor. For this purpose, scale 1 prototypes of the initial and optimal reactors have been manufactured by 3D printing in order to experiment them. The experimental campaign is based on 3 measurement techniques, the PIV (Particle Image Velocimetry), the measurement of RTD (Residence Time Distribution) and the measurement of the conversion rate at the reactor outlet.

Finally, it has been shown that the optimization of the reactor in its 2D form allows a significant improvement of its performance even if the determined configuration is probably sub-optimal. Indeed, after comparing the experimental measurements with 2D and 3D simulations, it has been found that the 3D simulation is more representative of reality than the 2D simulation. Thus, optimizing the reactor in its 3D form would be an interesting perspective for the future works, provided the problem of constraints related to the reactor additive manufacturing step is fixed.

Keywords : Shape optimization, Fixed-bed reactor, Additive manufacturing, Computational fluid dynamics (CFD), OpenFOAM, Multi-objective optimization