L'approche multi-échelle et la simulation numérique directe des écoulements diphasiques

D. Jamet

CEA/Grenoble, DEN/DER/SSTH

INSTN
Écoulements et transferts de chaleur diphasiques dans les réacteurs nucléaires
26-30 Nov. 2007

Des **caractéristiques** à une **échelle donnée** peuvent être des conséquences de **phénomènes** se produisant à une **échelle inférieure**

- Couleur des objets
  - Interactions complexes entre photons et atomes
- Consommation en carburant des véhicules
  - Frottement pariétal dépendant des fluctuations locales dues à la turbulence
- Température maximale des crayons de combustible
  - Taille des gouttes arrachées au front de trempe

Comprendre des phénomènes à une petite échelle pour **expliquer** des phénomènes à une échelle plus grande

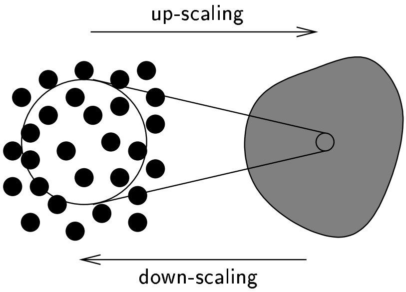
Niveaux de description d'un phénomène à une échelle donnée

1. Le caractériser
   - Plus je roule vite, plus je consomme du carburant
   - L'ébullition nucléée a une limite supérieure : le flux critique
2. Le prédire
   - $conso \propto \rho \, C_s \, V^2/2$
   - Corrélations expérimentales donnant le flux critique en sous-canal en fonction des paramètres de fonctionnement macroscopiques : pression, débit, etc.
3. Le comprendre
   - C_s est une manifestation du frottement pariétal
     - je sais quoi mesurer et sur quoi jouer pour modifier C_s
   - ???
     - Comment prédire l'occurence du flux critique pour de nouvelles géométries ?
     - Quelle est l'échelle du mécanisme de base ?

Généralités sur l'approche multi-échelle

Mythe ou réalité ?

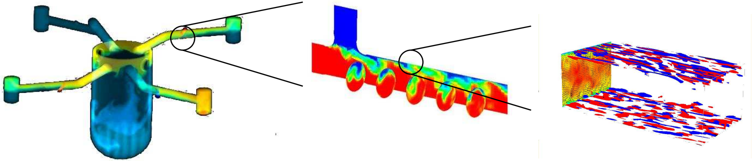
- **Down-scaling**
  - Pas toujours nécessaire
  - Une vraie question : où s'arrêter ?
  - Pas toujours suffisant, *e.g.* Navier-Stokes
- **Up-scaling**
  - De grands succès, *e.g.* physique statistiaque
  - Facile à dire, mais pas si facile à faire



L'approche multi-échelle en mécanique des fluides

Quelles échelles ?

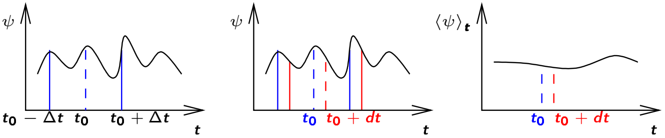
1. **Petite échelle**
   - Hypothèse de mécanique des milieux continus vérifiée
   - Toutes les échelles spatio-temporelles sont décrites
   - Equations locales instantanées, *e.g.* Navier-Stokes
2. **Échelle intermédiaire**
   - Les grandes échelles sont décrites et les petites sont modélisées
   - Approche Simulation des Grandes Echelles ou "LES"
3. **Grande échelle**
   - Seule les caractéristiques moyennes sont décrites
   - Modèles "RANS", *e.g.* $k - \epsilon$



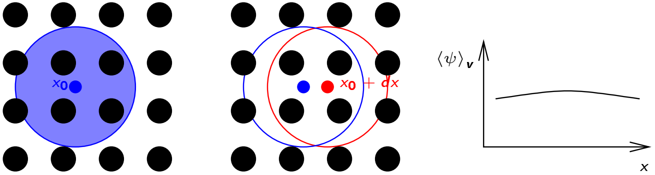
L'approche multi-échelle en mécanique des fluides

Quelles moyennes ?

- **Moyenne statistique**
  - Plusieurs réalisations d'un même écoulement
  - À une position et un temps, moyenne sur toutes les réalisations
  - Quelle est la variable aléatoire ?
- **Moyenne temporelle**

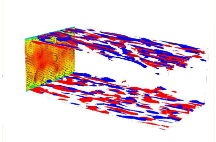


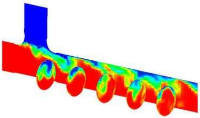
- **Moyenne spatiale**

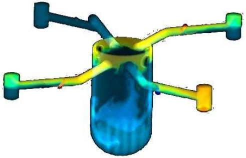


Écoulements monophasiques

1. Petite échelle : Simulation Numérique Directe
   - **Très cher** : $10^7 - 10^9$ points
   - **Reynolds limités** : $\simeq 4500$
   - **Solutions de référence** sur des configurations simples
2. Échelle intermédiaire : Simulation des Grandes Échelles
   - **Cher** : $10^5 - 10^7$ points
   - **Informations détaillées**
   - **Utilisation industrielle bientôt routinière**
3. Grande échelle : modèles statistiques
   - Coût **raisonnable** : $10^5 - 10^7$ points
   - Utilisation **industrielle**







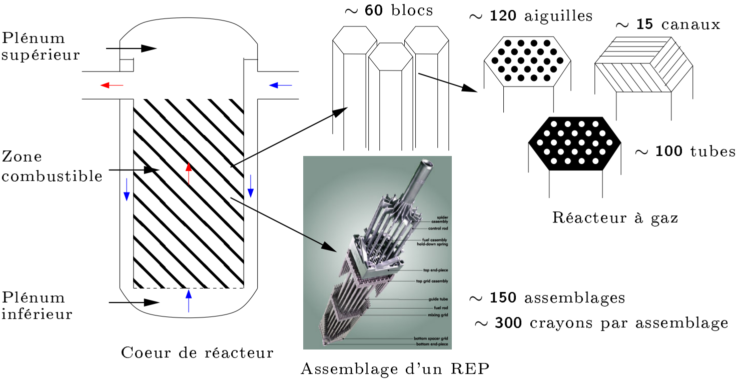
Un exemple d'approche multi-échelle

Un exemple presque monophasique

(M. Chandesris, 2006)

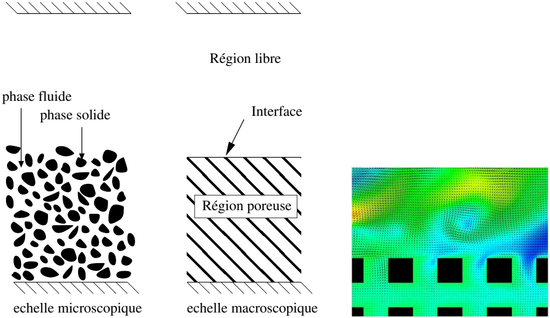
Conditions aux limites à l'interface libre-poreux

Position du problème



Un exemple d'approche multi-échelle

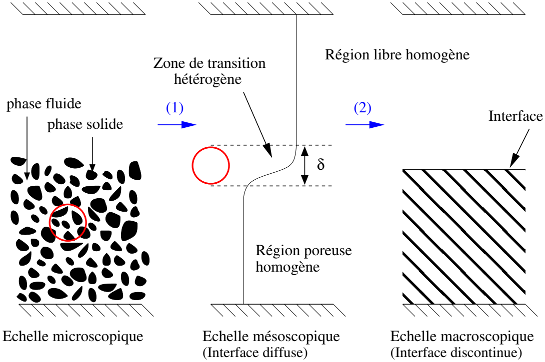
Un exemple presque monophasique



- Localisation?
- Transferts?
- Physique propre à l'interface?
- Modélisation mathématique? (Conditions de saut à l'interface?)

Un exemple d'approche multi-échelle

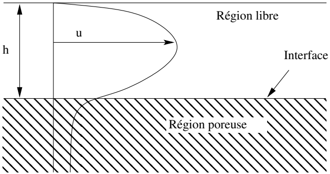
L'approche choisie



- Modélisation par prise de moyenne volumique
- Interface discontinue équivalente à la zone de transition interfaciale

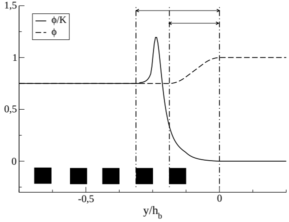
Un exemple d'approche multi-échelle

Un cas académique



$$\mu \frac{d^2 u}{dy^2} = \mu \frac{\phi(y)}{K(y)} u + \phi(y) \frac{dp}{dy}$$

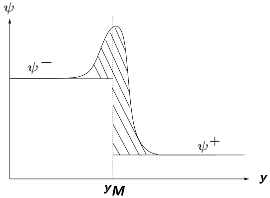
Simulation numérique de l'écoulement à l'échelle microscopique



- Porosité $\phi(y)$
- Coefficients de frottement : perméabilité $K(y)$

Un exemple d'approche multi-échelle

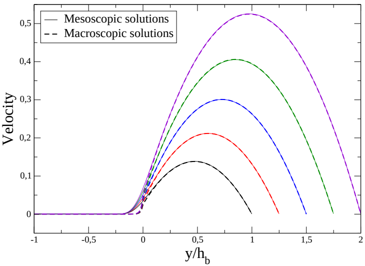
Grandeur en excès



- Grandeur interfaciale = Grandeur non vues à l'échelle macroscopique dont l'interface doit être dotée
- Conservation de la force = condition de saut à l'interface

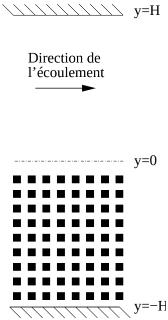
$$\mu \left.\frac{d\langle u\rangle}{dy}\right|_{y_M^+} - \mu \left.\frac{d\langle u\rangle}{dy}\right|_{y_M^-} = \left(\mu \frac{\phi}{K} u\right)^{ex} + \left(\phi \frac{dp}{dy}\right)^{ex}$$

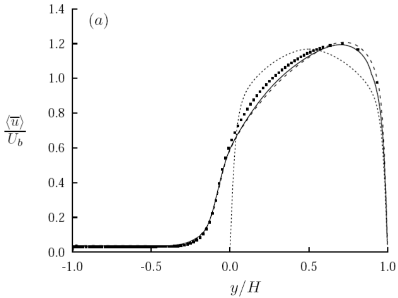
La clé du problème



Un exemple d'approche multi-échelle
Le cas turbulent

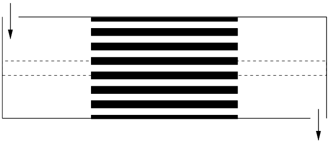
Modèle $k - \epsilon$ de la turbulence

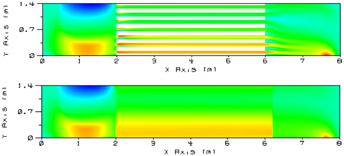




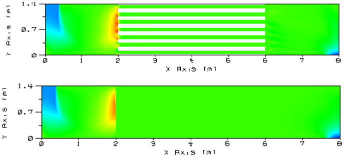
Un exemple d'approche multi-échelle

Modèle simplifié de réacteur

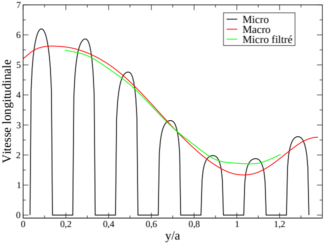




Vitesse horizontale

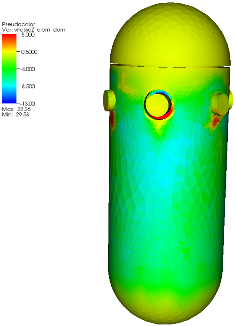


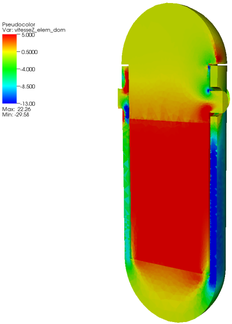
Vitesse verticale



Un exemple d'approche multi-échelle

Vers le cas réacteur





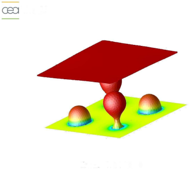
Quelques enseignements

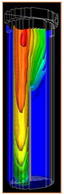
- L'approche multi-échelle permet de déterminer des lois de fermeture
  - Nécessité d'une analyse théorique : que représente une relation de fermeture ?
  - Nécessité de méthodes et de logiciels numériques performants
- La compréhension de cas simples représentatifs permet de développer des cas plus complexes et d'intérêt
  - Extraction des ingrédients fondamentaux
  - Vérification sur des cas plus complexes

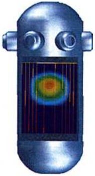
L'approche multi-échelle pour les écoulements diphasiques

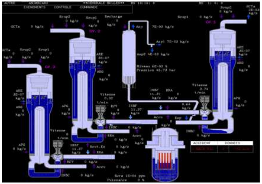
Les échelles considérées

locale instantanée | 3D locale | composant | système







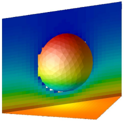


mm | dm | m | 10 m | L

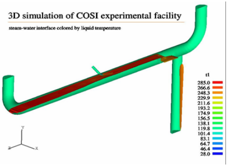
Écoulements diphasiques

Des besoins de modélisation multi-échelle

- Température de gaine $\leftrightarrow$ Évaporation de gouttes



- Choc froid $\leftrightarrow$ Transfert de masse aux interfaces



- Crise d'ébullition $\leftrightarrow$ Instabilité de l'ébullition nucléée

Où en est-on ?

- Approche similaire aux écoulements monophasiques
- Mais plus "en retard"
  - **Utilisation industrielle** : système et composant
  - **Recherche** : 3D locale et locale instantanée

Pourquoi pas au même niveau que le monophasique ?

Spécificités des écoulements diphasiques

- Équations locales instantanées connues depuis moins longtemps
- Beaucoup de **parois**
- Et en plus, **elles bougent** !
- Pas de théorie aussi aboutie que la turbulence : à quelle "vérité" se raccrocher ?

2ph_bubble_0gs

Simulation Numérique Directe des écoulements diphasiques

Pour quoi faire ?

Fermeture des modèles 3D locaux

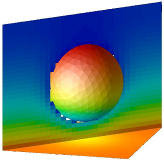
Transfert de masse

1. Echelle locale instantanée

$$\rho_v \left(\boldsymbol{v}_v^i - \boldsymbol{v}^i\right) \cdot \boldsymbol{n}_v = \rho_l \left(\boldsymbol{v}_l^i - \boldsymbol{v}^i\right) \cdot \boldsymbol{n}_l \text{ sur } S_{lv}$$

$$\rho_v \left(\boldsymbol{v}_v^i - \boldsymbol{v}^i\right) \cdot \boldsymbol{n}_v = \frac{\left(k_v \nabla T_v - k_l \nabla T_l\right) \cdot \boldsymbol{n}_v}{\mathcal{L}} \text{ sur } S_{lv}$$

2. Prise de moyenne volumique



$$\frac{\partial(\alpha_v \rho_v)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha_v \rho_v \langle \boldsymbol{v} \rangle_v\right) = \Gamma$$

$$\Gamma = \frac{1}{V} \int_S -\rho_v \left(\boldsymbol{v}_v^i - \boldsymbol{v}^i\right) \cdot \boldsymbol{n}_v \, dS$$

3. Fermeture

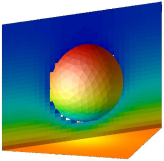
$$\Gamma = C_1 \left(\langle T_v \rangle - T^{sat}\right) + C_2 \left(\langle T_l \rangle - T^{sat}\right)$$

4. Domaine de validité ?

Simulation Numérique Directe des écoulements diphasiques

Pour quoi faire ?

Démarche similaire au monophasique



1. Choix d'une configuration de référence, *e.g.* écoulement en canal sous-refroidi
2. Simulation numérique directe
3. "Mesure" du taux de transfert de masse

$$\Gamma = \frac{1}{V} \int_{S} -\rho_v \left(\mathbf{v}_v^i - \mathbf{v}^i\right) \cdot \mathbf{n}_v \, dS$$

4. "Mesure" de la corrélation

$$\Gamma_{correl} = C_1 \left(\langle T_v \rangle - T^{sat}\right) + C_2 \left(\langle T_l \rangle - T^{sat}\right)$$

5. Comparaison et modifications éventuelles

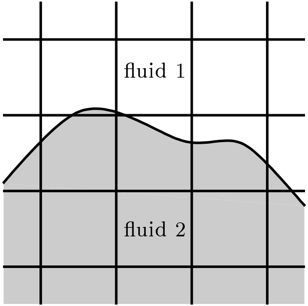
C'est en cours. . .

Difficultés liées à la simulation numérique directe

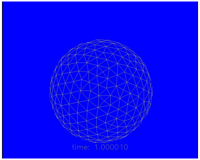
- Toutes celles liées aux écoulements monophasiques
- **Interfaces mobiles**
  - Comment suivre une interface numériquement ?
  - Comment gérer des équations dans des domaines différents qui varient dans le temps ?
  - Comment imposer des conditions aux limites à des interfaces mobiles ?

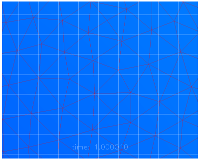
Simulation Numérique Directe des écoulements diphasiques

Suivi d'interface

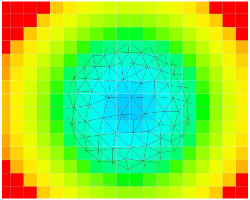


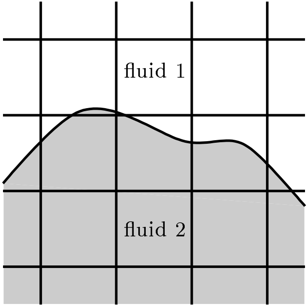
- Représentation explicite :
  $\boldsymbol{x}^i = \boldsymbol{f}(t) \Rightarrow \frac{d\boldsymbol{x}^i}{dt} = \boldsymbol{v}^i$





- Représentation implicite :
  $F(\boldsymbol{x}, t) = 0 \Rightarrow \frac{\partial F}{\partial t} + \boldsymbol{v}^i \cdot \nabla F = 0$





Définition d'un champ sur tout le domaine

$$\psi = \begin{cases} \psi_1 & \text{dans } \Omega_1 \\ \psi_2 & \text{dans } \Omega_2 \\ \psi^i & \text{sur } \Gamma_{12} \end{cases}$$

$$\psi = \chi\,\psi_1 + (1-\chi)\,\psi_2 + \psi^i\,\delta^i$$

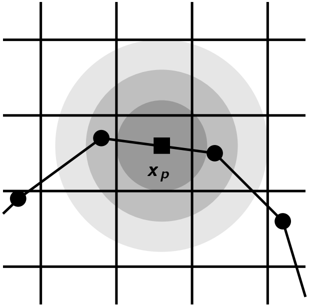
Equations "monofluide"

$$\rho\, Cp\, \frac{dT}{dt} = \nabla\cdot(k\,\nabla T) - \dot{m}\,\mathcal{L}\,\delta^i$$

$$\Rightarrow$$

$$(k_2\,\nabla T_2 - k_1\,\nabla T_1)\cdot \boldsymbol{n}_1 = \dot{m}\,\mathcal{L}$$

Grandeurs surfaciques $\longrightarrow$ grandeurs volumiques équivalentes

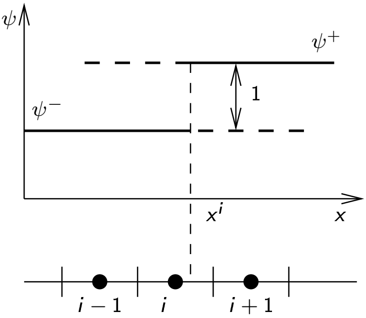


$$\psi_{ijk} = \sum_{l} \psi_l \, w_{ijk}^l \, \frac{\Delta s_l}{\Delta x^3}$$

ψ_{ijk}	approximation de ψ en ijk
ψ_l	valeur de ψ sur élém. surf. l
Δx	pas maillage fixe
Δs_l	aire de l'élément de surface l
w_{ijk}^l	poids de $ijk \leftrightarrow l$

Méthode "Ghost-fluid"

Améliorer l'approximation numérique des sauts et gradients à l'interface



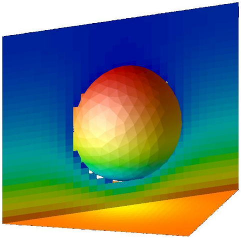
Définir ψ^- et ψ^+ dans tout le domaine

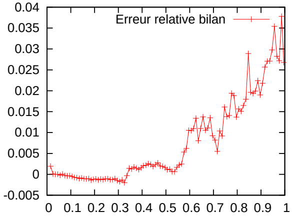
$$\frac{\psi_{\boldsymbol{i}} - \psi_{\boldsymbol{i-1}}}{\Delta x} \rightarrow \frac{\psi^-_{\boldsymbol{i}} - \psi^-_{\boldsymbol{i-1}}}{\Delta x}$$

$$\frac{\psi_{\boldsymbol{i+1}} - \psi_{\boldsymbol{i}}}{\Delta x} \rightarrow \frac{\psi^+_{\boldsymbol{i+1}} - \psi^+_{\boldsymbol{i}}}{\Delta x} = \frac{\psi^+_{\boldsymbol{i+1}} - (\psi^-_{\boldsymbol{i}} + 1)}{\Delta x}$$

Solution analytique avec peu de points

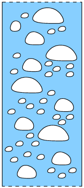
Bilan d'énergie sur une bulle en évaporation



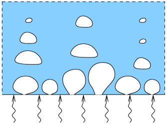


Des cas en lien les besoins prioritaires

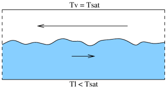
1. Ecoulement ascendant à bulles



2. Ebullition pariétale



3. Interface cisaillée



D'autres échelles de modélisation
Transferts interface-turbulence

(O. Lebaigue & A. Toutant, 2006)

Echelle intermédiaire entre SND et 3D local

- Echelle de Kolmogorov : $\simeq \mu$m
- Taille des bulles : $\simeq$ mm

Simulation directe turbulente **très chère** : $\simeq 10^9$ mailles pour une bulle

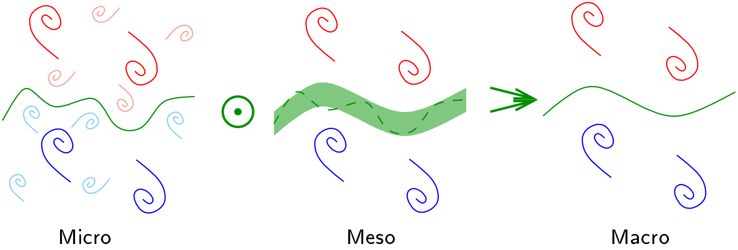
Idée principale

- Capturer les grandes structures : interfaces et turbulence
- Modéliser les transferts aux échelles les plus petites : interaction interface-turbulence

D'autres échelles de modélisation

Transferts interface-turbulence

La démarche poursuivie



Les défis

1. Déterminer le modèle filtré
2. Déterminer le modèle discontinu équivalent

Le modèle déterminé

$$\nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{u}} = 0$$

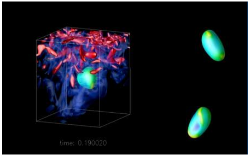
$$\frac{\partial \tilde{\rho}\, \tilde{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}\, \tilde{\boldsymbol{u}} \otimes \tilde{\boldsymbol{u}}) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{S}} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}\, \tilde{\boldsymbol{\mathcal{L}}}) - [\![\rho]\!]\, \tilde{\boldsymbol{u}}\, \frac{\partial \tilde{\chi}_k}{\partial t} - (\sigma\, \tilde{\kappa}\, \tilde{\boldsymbol{n}} + \boldsymbol{\tau}_t^{ex})\, \delta_{\tilde{\sigma}}$$

$$\frac{\partial \tilde{\chi}_k}{\partial t} = \left[\tilde{\boldsymbol{u}} \cdot \tilde{\boldsymbol{n}} + \left(\overline{\tilde{\boldsymbol{u}} \cdot \tilde{\boldsymbol{n}}}^{\sigma} - \overline{\tilde{\boldsymbol{u}}}^{\sigma} \cdot \overline{\tilde{\boldsymbol{n}}}^{\sigma} \right) + \frac{\Delta^2}{10} \left(\Delta_s(\boldsymbol{v}^0) \cdot \tilde{\boldsymbol{n}} - 2 \nabla_s(\boldsymbol{v}^0) : \nabla_s \tilde{\boldsymbol{n}} \right) \right] \delta_{\tilde{\sigma}}$$

$$\boldsymbol{v}^0 = \frac{\partial \tilde{\chi}_k}{\partial t}\, \tilde{\boldsymbol{n}}$$

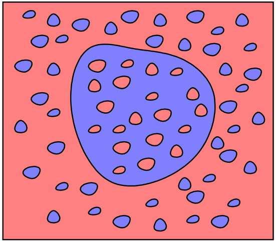
$$\boldsymbol{\tau}_t^{ex} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \left(\overline{\tilde{\rho}\, \tilde{\boldsymbol{u}}} - \overline{\tilde{\rho}}\, \overline{\tilde{\boldsymbol{u}}} \right)}{\partial t}\, d\xi_3$$

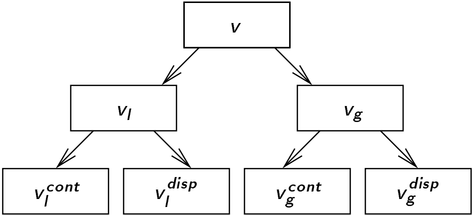
- OUF !!!
- Idée validée : tests *a priori*
- Modèle en cours de validation : tests *a posteriori*
- Généralisation au cas avec transfert de masse. . .



D'autres échelles de modélisation

Multi-champ





Pour quoi faire ?

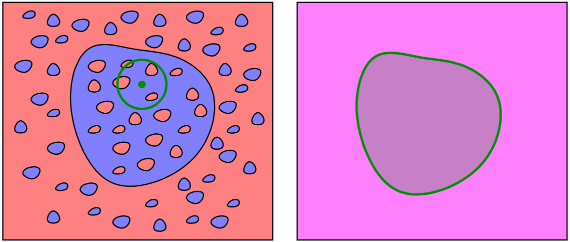
- Amélioration des modèles physiques
  - Taux de vide insuffisant
  - Transferts dépendant de la topologie
- Mieux répondre aux besoins industrielles
  - Cisaillement dans les écoulements stratifiés
  - Renoyage du cœur

Pas vraiment multi-échelles

D'autres échelles de modélisation

Grandes interfaces

(P. Coste & A. Henriques, 2006)



Pour quoi faire ?

- Amélioration du traitement numérique des grandes interfaces
- Amélioration des modèles physiques
  - Transferts aux interfaces
  - Distinction bulles / gouttes

Le chemin reste long. . .

Conclusions

Et perspectives...

- **Pourquoi une approche multi-échelle ?**
  - Améliorer les modèles
  - Améliorer la précision
  - Optimisation des systèmes
- **Comment fait-on ?**
  - Développement d'un cadre théorique
  - Développement d'outils numériques dédiés
  - Analyse de la pertinence des études menées
- **Et demain ?**
  - Des modèles en cours de gestation
  - Des logiciels plus versatiles
  - Et le "down-scaling" ?