

Implicit LES of multiphase compressible flows with phase transition

E. Goncalves Da Silva and P. Parnaudeau

1 Context and objectives of the study

Compressible multiphase flows play a key role in a large number of applications in the energy and transport sectors: nuclear power plants and safety (fast depressurisation, loss of coolant, flash evaporation), hydraulic energy, naval propulsion, CO2 capture and storage for carbon neutrality (pipe depressurisation involving evaporative cooling and thermal stresses), hydrogen technology for low-carbon aviation (cryogenic pumps involving non-isothermal cavitation), etc.

Physical and numerical modelling faces a number of obstacles because of the heat and mass transfers between phases that can occur out of thermodynamic equilibrium, the large variation in thermodynamic properties (from near vacuum to the critical point), the presence of high-intensity pressure waves (shock waves emitted by the collapse of bubbles, evaporation and condensation fronts) and the complex interaction with turbulent structures. Accurate prediction by numerical simulation is a real challenge, even for simple geometries, due to the difficulty of modelling the interfacial exchanges and small-scale turbulence interacting with multiphase structures.

This project aims to contribute to the modelling of compressible multiphase problems related to energy systems by carrying out high-fidelity simulations. In particular, we will seek to develop a numerical approach able of taking small-scale effects into account in order to investigate realistic multiphase configurations. We propose to jointly address the following challenges:

- Develop well-posed two-phase models with regard to thermodynamic laws and complex interfacial exchanges;
- Build a large-scale numerical approach to study the complex interaction between turbulence and multiphase structures;
- Perform high-fidelity simulations of realistic configurations to analyse and gain a better understanding of physical phenomena and instability mechanisms, leading to improvements in the design and lifespan of these energy systems.

2 Program

The thesis focuses on the SCB diffuse interface compressible code, which contains a hierarchy of multiphase models: 4-equation, 5-equation and multicomponent models, integrated in a fully parallel environment capable of efficiently exploiting various architectures (CPU and GPU) [1,2].

Due to the high Reynolds numbers observed in applications, the standard approach is based on averaging operators (RANS). However, common turbulence models fail to predict the flow dynamics correctly, especially at small scales. To solve this problem, we plan to develop a large-scale formalism in the presence of a phase transition using an implicit sub-grid approach. This approach exploits the truncation error of the discretisation schemes to model the effect of the sub-grid scales on the resolved scales. We will extend this approach, currently developed for single-phase flows [3], to compressible two-phase flows. A centred fourth-order scheme will be used in combination with a regularisation technique to model the effect of unresolved scales. Comparisons will be made with another approach based on interface stiffening methods (such as the THINC method) combined with a high-order local reconstruction (of the WENO type or a robust monotonicity preservation method).

An initial validation will be carried out on a cavitating cylinder at low Reynolds number ($Re=3900$) for which data is available in the literature. Secondly, the simulation of a cavitating profile will be carried out to gain a better understanding of the physical mechanisms and the complex self-sustaining dynamics. Finally, we will carry out a simulation of the same profile considering liquid hydrogen (LH2) in cryogenic condition (20 K) as fluid to study the modification of the flow dynamics compared to water and define scaling laws for industrial applications.

References

- [1] Goncalves & Parnaudeau, "Comparison of multiphase models for computing shock-induced bubble collapse", *Int. J. Num. Meth. Heat Fluid Flow*, Vol.22, 2020.
- [2] Dubois, Goncalves & Parnaudeau, "High performance computing of stiff bubble collapse on cpu-gpu heterogeneous platform", *Comput. & Mathematics Appl.*, Vol.99, 2021.
- [3] Vincente Cruz & Lamballais, "Physical/numerical duality of explicit/implicit subgrid-scale modelling", *Journal of Turbulence*, Vol.24(9), 2023.

3 Application information

Laboratory: Institut Pprime in Poitiers.

Duration: 3 years from October 2024. Salary of approximately 2000 euros/month.

Profile: Master 2 or engineering degree in fluid mechanics. Knowledge on compressible numerical methods and thermodynamics as well as computer science (programming, processing of large volumes of data) will be appreciated.

Contacts: eric.goncalves@ensma.fr, philippe.parnaudeau@univ-poitiers.fr

LES implicite d'écoulements multiphasiques compressibles avec changement de phase

E. Goncalves Da Silva et P. Parnaudeau

1 Contexte et objectifs de l'étude

Les écoulements multiphasiques compressibles jouent un rôle clé dans un grand nombre d'applications des secteurs de l'énergie et des transports : centrales nucléaires et sûreté (dépressurisation rapide, perte de liquide de refroidissement, évaporation flash), énergie hydraulique, propulsion navale, capture et stockage du CO₂ pour la neutralité carbone (dépressurisation des pipelines impliquant un refroidissement par évaporation et des contraintes thermiques), technologie hydrogène pour l'aviation décarbonée (pompes cryogéniques soumises à une cavitation non isotherme), etc.

La modélisation physique et numérique se heurte à de nombreux obstacles en raison des transferts de chaleur et de masse entre les phases qui peuvent se produire hors équilibre thermodynamique, de la grande variation des propriétés thermodynamiques (proche du vide jusqu'au point critique), de la présence d'ondes de pression de forte intensité (ondes de choc émises par le collapse de bulles, fronts d'évaporation et de condensation) et de l'interaction complexe avec les structures turbulentes. La prédiction précise par simulation numérique constitue un véritable défi, même pour des géométries simples, en raison de la difficulté à modéliser les échanges interfaciaux et la turbulence aux petites échelles interagissant avec les structures multiphasiques.

Ce projet vise à contribuer à la modélisation de problèmes multiphasiques compressibles liés aux systèmes énergétiques en réalisant des simulations de haute fidélité. On cherchera notamment à développer une approche numérique capable de prendre en compte les effets des petites échelles pour investiguer numériquement des configurations multiphasiques réalistes. Nous proposons de relever conjointement les défis suivants :

- Développer des modèles diphasiques bien posés au regard des lois thermodynamiques et des échanges interfaciaux complexes;
- Construire une approche numérique aux grandes échelles afin d'étudier l'interaction complexe entre la turbulence et les structures multiphasiques;
- Effectuer des simulations de haute fidélité de configurations réalistes pour l'analyse et la meilleure compréhension des phénomènes physiques et des mécanismes d'instabilité, permettant d'améliorer la conception et la durée de vie de ces systèmes énergétiques.

2 Programme

La thèse est centrée sur le code compressible aux interfaces diffuses SCB, qui contient une hiérarchie de modèles multiphasiques : modèles à 4-équations, à 5-équations et multicomposants, intégrés dans un environnement entièrement parallèle capable d'exploiter efficacement diverses architectures (CPU et GPU) [1,2].

En raison des nombres de Reynolds élevés observés dans les applications réalistes, l'approche commune pour la modélisation de ces écoulements multiphasiques est basée sur des opérateurs de moyenne (RANS). Cependant, les modèles de turbulence standard ne parviennent pas à prédire correctement la dynamique de l'écoulement, en particulier aux petites échelles. Pour résoudre ce problème, nous prévoyons de développer un formalisme aux grandes échelles en présence d'une transition de phase en utilisant une approche sous-maille implicite. Cette approche exploite l'erreur de troncature des schémas de discrétisation pour modéliser l'effet des échelles sous-maille sur les échelles résolues. Nous étendrons cette approche actuellement développée en monophasique [3] aux écoulements diphasiques compressibles. Un schéma centré du quatrième ordre sera utilisé en combinaison avec une technique de régularisation pour modéliser l'effet des échelles non résolues. Des comparaisons seront effectuées avec une autre approche basée sur des méthodes de raidissement de l'interface (telles que la méthode THINC) combinée à une reconstruction locale d'ordre élevé (de type WENO ou méthode robuste de préservation de la monotonie).

Une première validation sera effectuée sur un cylindre en cavitation à faible nombre de Reynolds ($Re=3900$) pour lequel des données sont disponibles dans la littérature. Dans un second temps, la simulation d'un profil en régime cavitant sera effectuée pour mieux comprendre les mécanismes physiques et la dynamique complexe auto-entretenu. Enfin nous effectuerons une simulation du même profil en considérant de l'hydrogène liquide (LH2) en condition cryogénique (20 K) comme fluide pour étudier la modification de la dynamique d'écoulement par rapport à l'eau et définir des lois de dimensionnement.

Références

- [1] Goncalves & Parnaudeau, "Comparison of multiphase models for computing shock-induced bubble collapse", Int. J. Num. Meth. Heat Fluid Flow, Vol.22, 2020.
- [2] Dubois, Goncalves & Parnaudeau, "High performance computing of stiff bubble collapse on cpu-gpu heterogeneous platform", Comput. & Mathematics Appl., Vol.99, 2021.
- [3] Vincente Cruz & Lamballais, "Physical/numerical duality of explicit/implicit subgrid-scale modelling", Journal of Turbulence, Vol.24(9), 2023.

3 Information pour la candidature

Laboratoire d'accueil: Institut Pprime à Poitiers.

Durée: 3 ans à partir d'octobre 2024. Salaire d'environ 2000 euros(brut)/mois.

Profil: Master 2 ou diplôme d'ingénieur en mécanique des fluides. Des connaissances en méthodes numériques compressibles et thermodynamique ainsi qu'en informatique (programmation, traitement de grands volumes de données) seront appréciées.

Contacts: eric.goncalves@ensma.fr, philippe.parnaudeau@univ-poitiers.fr