

Modélisation des interactions turbulence-diphasique par simulation des grandes échelles

E. Goncalves da Silva et P. Parnaudeau, Institut Pprime à Poitiers
eric.goncalves@ensma.fr, philippe.parnaudeau@cnrs.fr

1 Contexte et objectifs de l'étude

Les écoulements multiphasiques compressibles jouent un rôle clé dans un grand nombre d'applications d'ingénierie pour les secteurs de l'énergie et du transport : centrales nucléaires et sûreté, centrales hydroélectriques qui fonctionnent dans des conditions hors design pour étendre la portée opérationnelle, propulsion navale, capture et stockage du CO_2 pour les projets de neutralité carbone, technologie hydrogène pour l'aviation durable, systèmes de refroidissement basés sur des écoulements diphasiques, moteurs à détonation, injecteurs de carburant ainsi que des processus chimiques (traitement de l'eau), etc.

La modélisation physique de ces écoulements se heurte à de nombreux obstacles en raison de la difficulté de modéliser les 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 l'interaction complexe avec la turbulence, le tout en présence de fortes ondes de pression ou d'ondes de choc.

L'interaction turbulence-diphasique en présence d'un changement de phase et d'ondes de choc constitue un verrou pour la modélisation. La prédiction précise par simulation numérique est un véritable défi, même pour des géométries simples, en raison de la difficulté de modéliser les échanges interfaciaux, les processus thermodynamiques et la turbulence aux petites échelles interagissant avec les structures diphasiques. Ces interactions complexes conduisent à un large éventail de topologies d'écoulement que les modèles standards de turbulence et de transfert de masse formulés dans le cadre de l'approche RANS 1-fluide ne sont pas en mesure de prédire correctement.

Cette thèse vise à contribuer à la modélisation de problèmes multiphasiques compressibles liés aux systèmes énergétiques en réalisant des simulations de haute fidélité de configurations représentatives. Il s'agira de développer une approche numérique aux grandes échelles en présence d'une transition de phase. Différentes étapes sont proposées:

- Développer une approche aux grandes échelles à une vitesse. Implémenter et valider le modèle sous-maille WALE [1];
- Proposer une fermeture pour le terme sous-maille apparaissant dans l'équation pour la fraction volumique de gaz (basé sur un nombre de Schmidt turbulent [2]);
- Mettre en place une approche sous-maille implicite (ILES) [3];
- Effectuer des simulations de haute fidélité de configurations représentatives pour l'analyse et la meilleure compréhension des phénomènes physiques, 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 [4,5].

En raison des nombres de Reynolds élevés observés dans les applications industrielles, l'approche commune pour la modélisation de ces écoulements est basée sur un opérateur de moyenne (RANS). Cependant, les modèles de turbulence standard ne parviennent pas à prédire correctement la dynamique de l'écoulement, en particulier en régime diphasique. 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 explicite (modèle WALE) ainsi qu'une approche sous-maille implicite. Cette dernière 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 compressibles et diphasiques. 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 TENO).

D'autre part, nous proposerons une fermeture pour le terme sous-maille spécifique apparaissant dans l'équation pour la fraction de vapeur (modèle en gradient) en s'appuyant sur les données expérimentales générées au laboratoire LEGI à Grenoble. Cette activité sera menée en forte collaboration avec les travaux expérimentaux se déroulant à Grenoble.

Une première validation sera effectuée sur des configurations canoniques à faible nombre de Reynolds pour lesquelles des données sont disponibles dans la littérature (Taylor-Green Vortex, cylindre). Dans un deuxième temps, l'hydrofoil NACA0015 du LEGI sera étudié par comparaison avec les données expérimentales disponibles. Enfin, une analyse physique approfondie sera proposée pour mieux comprendre les mécanismes physiques et instabilités, les transitions de régime observé, les effets de compressibilité, les effets d'anisotropie et le rôle des ondes de pressions sur la dynamique.

Références

- [1] F. Nicoud & F. Ducros, "Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor", *Flow, Turbulence and Combustion*, 62(3), 183-200, 1999.
- [2] J. Anez, A. Ahmed, N. Hecht, B. Duret, J. Reveillon & FX. Demoulin, "Eulerian-Lagrangian spray atomization model coupled with interface capturing method for diesel injectors", *Int. J. Multiphase Flow*, 113, 325-342, 2019.
- [3] Vincente Cruz & Lamballais, "Physical/numerical duality of explicit/implicit subgrid-scale modelling", *Journal of Turbulence*, Vol.24(9), 2023.
- [4] Goncalves & Parnaudeau, "Comparison of multiphase models for computing shock-induced bubble collapse", *Int. J. Num. Meth. Heat Fluid Flow*, Vol.22, 2020.
- [5] Dubois, Goncalves & Parnaudeau, "High performance computing of stiff bubble collapse on CPU-GPU heterogeneous platform", *Comput. & Math. Appl.*, Vol.99, 2021.

Modelling turbulence-multiphase interactions using large-eddy simulation

E. Goncalves da Silva and P. Parnaudeau, Institut Pprime in Poitiers
eric.goncalves@ensma.fr, philippe.parnaudeau@cnrs.fr

1 Context and objectives

Compressible multiphase flows play a key role in a large number of engineering applications for the energy and transport sectors: nuclear power plants and safety, hydroelectric plants that operate in off-design conditions to extend operational range, naval propulsion, CO_2 capture and storage for carbon neutrality projects, hydrogen technology for sustainable aviation, cooling systems based on two-phase flows, detonation engines, fuel injectors as well as chemical processes (water treatment), etc.

The physical modeling of these flows faces numerous obstacles, due to the difficulty of modeling heat and mass transfers between phases, which can occur out of thermodynamic equilibrium, the wide variation in thermodynamic properties (from near vacuum to the critical point), and the complex interaction with turbulence, all in the presence of strong pressure waves or shock waves.

Multiphase-turbulence interaction in the presence of phase transition and shock waves is a key modelling challenge. Accurate prediction by numerical simulation is a real challenge, even for simple geometries, due to the difficulty of modeling the interfacial exchanges, thermodynamic processes and small-scale turbulence interacting with two-phase structures. These complex interactions lead to a wide range of flow topologies that standard turbulence and mass transfer models formulated within the RANS one-fluid approach are unable to predict correctly.

This thesis aims to contribute to the modeling of compressible multiphase problems related to energy systems by carrying out high-fidelity simulations of representative configurations. The goal is to develop a large-scale numerical approach in the presence of a phase transition. Different stages are proposed:

- Develop a one-velocity large-scale approach. Implement and validate the WALE subgrid model [1];
- Propose a closure for the subgrid term appearing in the equation for the gas volume fraction (based on a turbulent Schmidt number [2]);
- Implement an implicit approach (ILES) [3];
- Carry out high-fidelity simulations of representative configurations to analyze and better understand physical phenomena, enabling us to improve the design and lifetime of 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 CPU and GPU architectures [4,5].

Due to the high Reynolds numbers observed in industrial applications, the common approach to modeling these flows is based on the RANS equations. However, standard turbulence models fail to correctly predict flow dynamics, particularly in the two-phase regime. To solve this problem, we plan to develop a large-scale formalism in the presence of a phase transition, using an explicit subgrid approach (WALE model) as well as an implicit subgrid approach. The latter exploits the truncation error of discretization schemes to model the effect of subgrid scales on resolved scales. We will extend this approach, currently developed in single-phase [3], to compressible and two-phase flows. A centered fourth-order scheme will be used in combination with a regularization 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 high-order local reconstruction (of the WENO or TENO type).

On the other hand, we will propose a closure for the specific subgrid term appearing in the equation for the vapor fraction (gradient model) based on experimental data generated at the LEGI laboratory in Grenoble. This activity will be carried out in close collaboration with experimental work taking place in Grenoble.

A first validation will be carried out on canonical low Reynolds number configurations for which data are available in the literature (Taylor-Green Vortex, cylinder). Secondly, the NACA0015 hydrofoil from LEGI will be studied by comparison with available experimental data. Finally, an in-depth physical analysis will be proposed to better understand the physical mechanisms and instabilities, the observed regime transitions, compressibility effects, anisotropy effects and the role of pressure waves on the flow dynamics.

References

- [1] F. Nicoud & F. Ducros, "Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor", *Flow, Turbulence and Combustion*, 62(3), 183-200, 1999.
- [2] J. Anez, A. Ahmed, N. Hecht, B. Duret, J. Reveillon & FX. Demoulin, "Eulerian-Lagrangian spray atomization model coupled with interface capturing method for diesel injectors", *Int. J. Multiphase Flow*, 113, 325-342, 2019.
- [3] Vincente Cruz & Lamballais, "Physical/numerical duality of explicit/implicit subgrid-scale modelling", *Journal of Turbulence*, Vol.24(9), 2023.
- [4] Goncalves & Parnaudeau, "Comparison of multiphase models for computing shock-induced bubble collapse", *Int. J. Num. Meth. Heat Fluid Flow*, Vol.22, 2020.
- [5] Dubois, Goncalves & Parnaudeau, "High performance computing of stiff bubble collapse on CPU-GPU heterogeneous platform", *Comput. & Math. Appl.*, Vol.99, 2021.

Application information

Duration: 3 years from November 2025.

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