



Université de Nantes

CEA/DES/ISAS/DM2S/STMF/LMSF

Projet de Fin d'Études M2MACS

Mise en place d'un Couplage SCORPIO/TrioCFD

Antonin Couvez

Du 01/04/2023 au 31/09/2023

Encadrants : Nikos Leterrier et Sandrine Gyuran

0.1 Remerciements

Je voudrais d'abord remercier Nikos Leterrier pour la confiance qu'il m'a accordé durant ce stage et pour la suite. Ses nombreuses connaissances et sa pédagogie m'ont permis de comprendre les problématiques du stage et de m'améliorer dans la rédaction des résultats. Je voudrais aussi remercier Sandrine Gyuran pour ses précieux conseils et pour ses explications sur les phénomènes physiques en jeux. Merci à Elie Saikali pour m'avoir appris à utiliser et modifier les différents outils numériques. J'aimerais remercier Adrien Bruneton et l'équipe TRUST pour l'aide qu'ils m'ont apporté dans mon utilisation de la plateforme. La patience et les explications des chercheurs du STMF, m'ont permis de progresser dans ce travail de stage et je les en remercie.

Ce stage en laboratoire a été une première expérience très enrichissante et agréable.

Table des matières

0.1	Remerciements	2
1	Contexte du Stage	4
1.1	Présentation du CEA	4
1.1.1	Mission du CEA	5
1.1.2	Environnement du stage	5
1.2	Problématique du stage	6
1.2.1	Générateur de Vapeur	6
1.2.2	Colmatage et encrassement des plaques entretoises	7
2	Modélisation du phénomène de colmatage	9
2.1	Équations modélisant les phénomènes physiques	9
2.1.1	Porosité	9
2.1.2	Équations de la thermoHydraulique	10
2.1.3	Équations du Transport Réactif	12
2.2	Schéma numérique du couplage	13
2.2.1	Méthodes numériques utilisées	13
2.3	Codes de calcul scientifique	16
2.3.1	Plateforme TRUST	16
2.3.2	SCORPIO	17
2.3.3	TrioCFD	18
2.3.4	ICoCo	18
2.4	Cas test utilisé durant le stage	18
3	Simulations numériques	22
3.1	Mise en place du couplage complet	22
3.1.1	Fonctionnement du couplage	22
3.1.2	Analyse des premiers résultats obtenues	23
3.2	Ajout d'un terme source aux équations de la thermohydraulique	25
3.2.1	Construction du terme source	25
3.2.2	Discretisation du terme source	27
3.2.3	Résultats numériques	28
3.2.4	Utilisation du terme de frottement singulier	31
3.3	Mise en place d'une condition d'échange	32
3.3.1	Temps de calcul CPU	32
3.4	Problème Thermique	34
3.4.1	Construction d'un second terme source	35
3.4.2	Résultat numérique	37
4	Conclusion	39

Chapitre 1

Contexte du Stage

1.1 Présentation du CEA

En 1945, le général De Gaulle est convaincu de la nécessité de fonder un organisme national consacré à l'énergie nucléaire. Il demande alors à Frédéric Joliot-Curie, physicien-chimiste nobélisé, et à Raoul Dautry, ingénieur et homme politique, de développer un centre de recherche. Le commissariat à l'énergie atomique, CEA, est fondé. En 2010, le nom du CEA est changé pour commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives mais garde la même anagramme. Initialement, les missions du CEA étaient la recherche dans les énergies et la défense nationale mais au fur et à mesure ses domaines de recherches se sont étendus, allant de la biologie à la physique théorique.

Le CEA entreprend de nombreux projets collaboratifs avec des acteurs de l'industrie énergétique, comme EDF ou Framatome, mais aussi avec d'autres centres de recherche internationaux. Ses innovations technologiques et ses partenariats lui ont valu la première place du classement des organismes de recherche en matière d'innovation selon l'agence Thomas Reuters.

Le CEA est constitué de 10 centres dans toutes la France. Ils sont indiqués sur la figure 1.1.

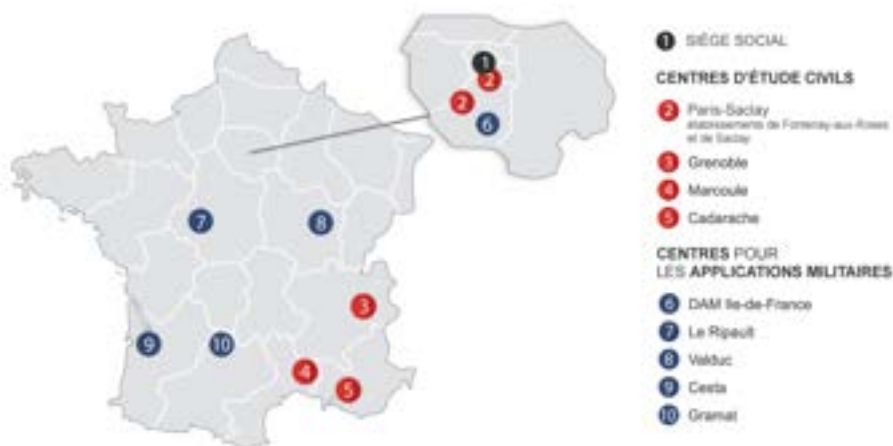


FIGURE 1.1 – Répartition géographique des centres

1.1.1 Mission du CEA

Défense Nationale

Le CEA conçoit le matériel nucléaire utilisé dans l'armement comme les missiles mais aussi les réacteurs de la marine. Il a pour mission d'entretenir ce matériel et d'aider lors du désassemblage. Grâce aux connaissances obtenues pendant le développement de ces technologies, il est sollicité en tant que conseiller dans la lutte contre l'armement nucléaire et le terrorisme.

Energie

La mission visant à développer les énergies bas carbone est menée par la Direction des Energies, DES. Cette mission a pour objectif d'accompagner les acteurs de la production énergétique dans la mise en oeuvre de moyens plus responsables. La DES développe et améliore des technologies utilisées dans la production d'énergie nucléaire et dans les énergies renouvelables comme l'éolien. Pour ce travail, il étudie les propriétés des sources de production grâce aux outils numériques mais aussi grâce à des parcs d'installations expérimentales. Le sujet de stage s'inscrit dans le cadre de la mission de la DES puisqu'il s'agit de la modélisation de phénomènes chimiques à l'intérieur des Générateurs de Vapeur (GV).

Recherche fondamentale pour les sciences de la matière et du vivant

Le CEA possède des centres de recherche dans d'autres domaines que les applications nucléaires. La recherche au sein de ces laboratoires est tournée vers la biologie, la médecine et la physique théorique. Les équipes de recherche du CEA développent des outils d'imageries médicales visant à étudier l'impact du rayonnement sur certaines maladies dégénératives. Les outils développés au sein de ces laboratoires permettent d'étudier les maladies à de nouvelles échelles (cellulaire, moléculaire).

1.1.2 Environnement du stage

Département et laboratoire

Le stage que j'effectue prend place dans le travail du Département de Modélisation des Systèmes et Structures (DM2S). Le DM2S développe des outils de simulation pour appuyer la conception des réacteurs et modéliser les différents aspects physiques de leur fonctionnement : thermohydraulique, thermomécanique et neutronique. La modélisation est validée par les expérimentations et les résultats numériques effectués au sein du CEA et par ses partenaires industriels.

Le Laboratoire de Modélisation et Simulation en mécanique des Fluides, LMSF, est chargé de la modélisation de la thermohydraulique. Différents logiciels de calculs ont été développés au LMSF comme le code TrioCFD qui est en open source. Les modèles implémentés dans ces logiciels sont d'abord confirmés par des données expérimentales et des cas connus de la communauté scientifique. Cette étape permet de comprendre le domaine de validité des modèles. Ils peuvent ensuite être appliqués à l'étude d'écoulements plus complexes comme ceux ayant lieu dans les générateurs de vapeur. Le code TrioCFD est utilisé par des chercheurs extérieurs au CEA qui développent des parties du code.

La conception des logiciels de CFD (Computational Fluid Dynamics) nécessite l'expertise de scientifiques de différentes disciplines. Le LMSF est ainsi composé de physiciens, numériciens et mathématiciens.

Encadrement

Nikos Leterrier, mon tuteur, est ingénieur de recherche en simulation au LMSF. Il a développé le code de calcul SCORPIO qui est un logiciel de transport réactif. SCORPIO permet de comprendre les processus chimiques à l'intérieur des réacteurs nucléaires et les couplages de SCORPIO avec des codes de thermohydraulique, ont donné lieu à 4 stages avant le mien. Nikos m'a appris à utiliser SCORPIO et m'a expliqué la construction du code. Il m'a expliqué les rudiments de chimie nécessaires au stage et m'a guidé dans la compréhension physique des phénomènes en jeu.

Sandrine Gyuran est co-encadrante de mon stage. Elle est ingénieur chercheur en thermohydraulique et responsable du code Génépi+. Génépi+ est un code développé au CEA sur un projet bi-partite avec Framatome.

Elle a proposé des modifications de la modélisation des milieux poreux grâce à son expertise en thermohydraulique. Ces modifications ont été le principal travail du stage.

Saïkali Elie travaille sur l'interface entre les codes développés sur la plateforme TRUST. Il m'a expliqué comment le couplage entre les codes de calculs fonctionnait et m'a appris à utiliser le code TrioCFD et l'API ICoCo.

1.2 Problématique du stage

Une centrale nucléaire produit de l'énergie en convertissant la chaleur, créée dans le circuit primaire, en électricité dans le circuit secondaire. La substance qui transporte la chaleur, appelée caloporteur, varie selon les types de réacteurs. L'eau et le gaz sont souvent utilisés comme caloporteur. Les centrales sont classées selon des critères comme le combustible ou le caloporteur en 5 grandes catégories. Il y a les réacteurs à eau pressurisée (REP), les réacteurs à eau bouillante (REB), les réacteurs à eau lourde, les réacteurs à neutron rapides (RNR), les réacteurs caloporteurs Gaz (RCG).

Le type de réacteur étudié durant ce stage est le réacteur à eau pressurisée. Il est composé de 3 circuits. Le circuit où la chaleur est produite est le circuit primaire. Le circuit primaire contient le réacteur nucléaire qui chauffe un premier passage d'eau. Cette eau va ensuite entrer dans le générateur de vapeur où elle va échanger sa chaleur avec l'eau du circuit secondaire. L'eau du circuit secondaire va entrer en ébullition et se diriger vers la turbine dans le circuit secondaire. L'énergie cinétique de l'eau sera alors transformée en énergie électrique par l'alternateur relié à la turbine. Dans le circuit secondaire l'eau se condensera en transférant sa chaleur à l'eau du circuit de refroidissement. Une fois l'eau du circuit secondaire refroidie, elle sera reinjectée dans le primaire pour recommencer ce parcours. La figure 1.2 montre la composition d'une centrale nucléaire de type REP.

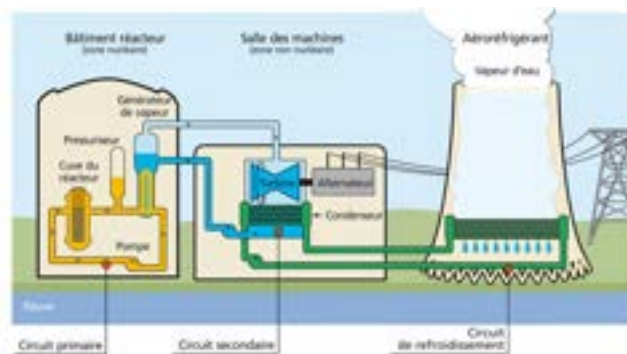


FIGURE 1.2 – Composition d'un réacteur à eau pressurisée

Chacun des circuits d'eau est séparé des autres. Cela permet d'éviter les contaminations de l'eau. Les centrales se situent souvent sur des points d'eau comme des rivières ou des fleuves pour pouvoir y puiser l'eau du circuit de refroidissement. Cette eau n'entre jamais en contact avec le circuit primaire, elle reste ainsi propre.

1.2.1 Générateur de Vapeur

Le générateur de vapeur est la partie qui permet l'échange de chaleur entre le primaire et le secondaire. Il pèse environ 500 tonnes pour une moyenne 20 mètres de haut. A l'intérieur, il y a entre 4000 et 6000 tubes en U par lesquels passe l'eau du circuit primaire. Chaque tube mesure environ 2 centimètres de diamètre. Plus le nombre de tubes est important, plus la surface d'échange avec l'eau du circuit secondaire augmente. Il y a, en général, 7000 mètres carrés de surface d'échange. Les tubes sont maintenus par les plaques entretoises. Ces plaques assurent la stabilité des tubes et servent de mélangeur pour l'eau du circuit secondaire. Le mélange améliore l'échange de la chaleur grâce à la convection. La figure 1.3 montre les différents composants du générateur de vapeur.

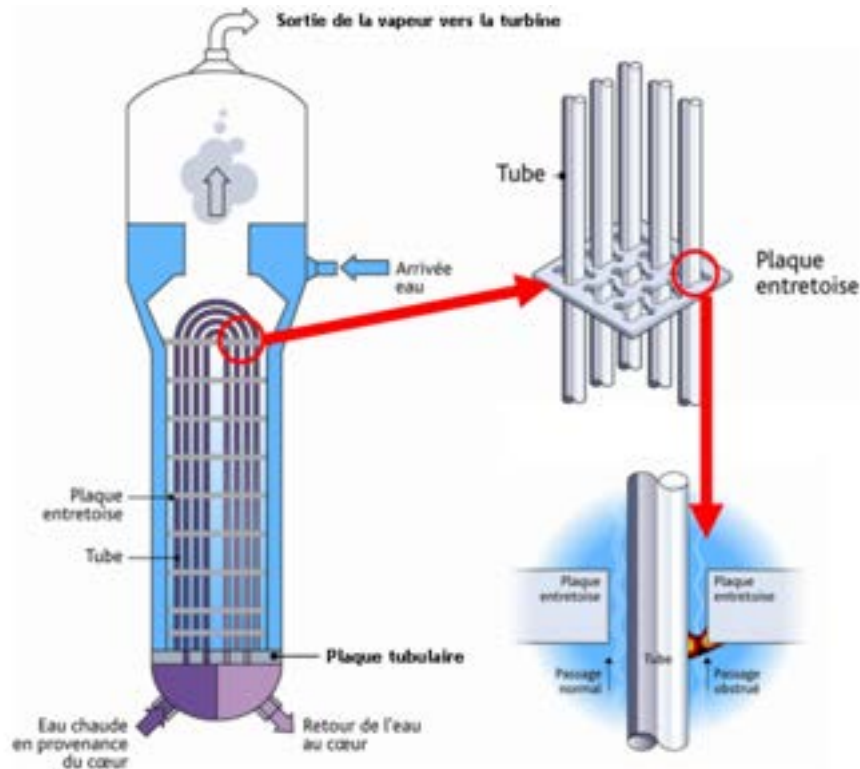
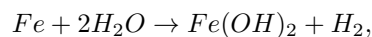


FIGURE 1.3 – Schéma de la composition d'un générateur de vapeur [11]

L'eau du circuit primaire dans les tubes est à une température d'environ 320 degrés et ressort à une température d'environ 280 degrés. L'eau du circuit secondaire entre par le haut du générateur de vapeur (GV), et s'échauffe sur les tubes. Ce chauffage provoque l'évaporation de l'eau qui remonte alors vers la sortie. Il y a toujours suffisamment d'eau dans le GV pour que les tubes soient presque immergés. La vapeur qui remonte est alors entre 57 et 73 bars selon le type de réacteur [4]. Dans le générateur de vapeur, des réactions chimiques non désirées apparaissent dû aux impuretés de l'eau. Elles sont responsables de 3 phénomènes : le colmatage, l'encrassement et le dépôt de boue.

1.2.2 Colmatage et encrassement des plaques entretoises

L'eau du circuit secondaire est de l'eau alimentaire. Cette eau n'est pas parfaitement pure et la présence de particules parasites fait apparaître des réactions chimiques indésirables à l'intérieur d'un générateur de vapeur. Lors des réactions, un solide se crée et se dépose sur les plaques entretoises ce qui bloque en partie le passage de l'eau et intervient dans l'échange thermique entre le circuit primaire et secondaire. Il s'agit du colmatage. Ce colmatage est schématisé dans la figure 1.3. De la même façon, un dépôt se forme sur les tubes, ce phénomène est l'encrassement. Dans le cadre du stage, il sera considéré que les réactions à l'origine de l'encrassement et du colmatage sont l'oxydation du Fer en Fe^{II} soluble et la formation de la magnétite à partir de l'hydroxyde ferreux (réaction de Schikorr[6]). L'oxydation du Fer a pour équation :



et la formation de la magnétite s'écrit :



Les deux phénomènes de précipitation de la magnétite seront confondus. La figure 1.4, ci-dessous, présente l'ensemble des réactions à l'oeuvre.

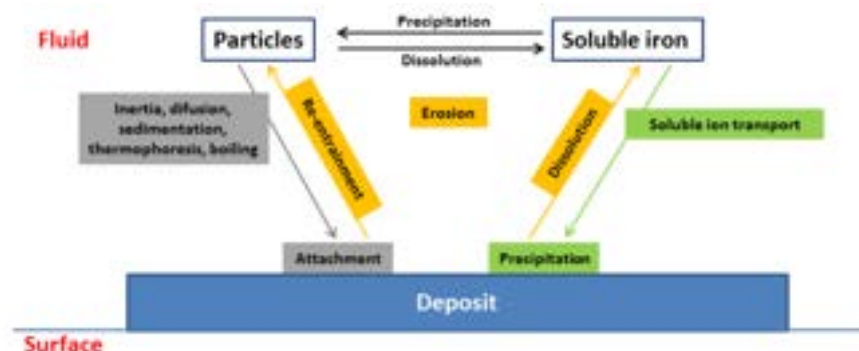


FIGURE 1.4 – Phénomènes physico-chimiques à l'origine du colmatage [16]

Le colmatage impacte négativement l'échange de chaleur, l'écoulement fluide mais aussi la sûreté du circuit. Les perturbations dans l'écoulement provoquent des vibrations qui entraînent des risques de fissures.

Différentes opérations existent pour réduire ce phénomène. Certains produits chimiques peuvent être ajoutés dans l'eau du circuit secondaire pour assurer des conditions réductrices et basiques. Cette méthode a un impact important sur la pression dans le générateur de vapeur, et elle présente des désavantages. Il est aussi possible de nettoyer ou de remplacer les générateurs de vapeur mais l'opération est très complexe [17], son coût est très élevé et il nécessite d'arrêter la centrale pendant une longue période. Par exemple, le chantier de Cruas-Meysses a duré deux ans et a coûté de 140 millions d'euros pour donner 30 ans de plus à la centrale nucléaire et améliorer la sûreté de l'installation [1]. Il est nécessaire de prédire l'encrassement. La modélisation de ce phénomène apporterait une meilleure compréhension et permettrait de tester des solutions.

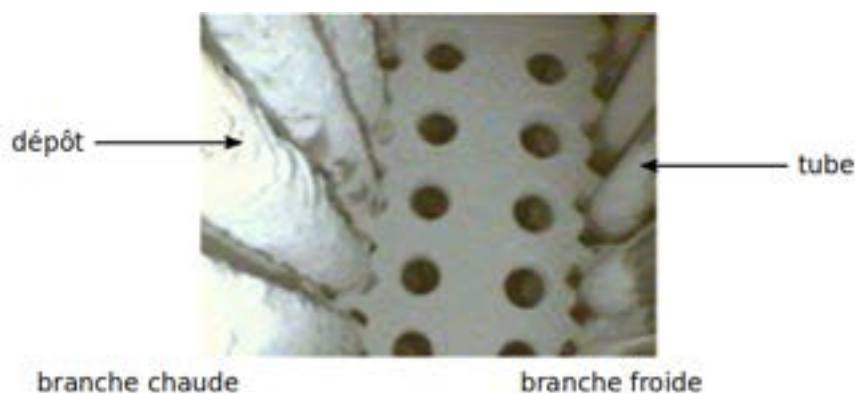


FIGURE 1.5 – Photographie de dépôts d'encrassement dans un GV [4]

Chapitre 2

Modélisation du phénomène de colmatage

Le colmatage des plaques entretoises est un phénomène chimique qui a des impacts sur l'écoulement thermohydraulique dans le circuit secondaire. Une modélisation de ce phénomène doit ainsi montrer l'évolution du colmatage, d'un point de vue chimique, et les modifications de l'écoulement qu'il provoque. Ce chapitre présentera dans un premier temps, les modèles qui décrivent les deux parties du colmatage, puis les méthodes numériques utilisées et le cas test utilisé pendant le stage.

2.1 Équations modélisant les phénomènes physiques

Pour décrire le phénomène de colmatage dans les plaques entretoises, il faut deux modèles. Dans un premier temps, il faut un modèle de thermohydraulique pour modéliser l'eau passant dans le GV. Le GV subissant un encrassement, ce modèle doit prendre en compte l'impact de l'encrassement sur les transferts thermiques et sur la vitesse du fluide. Il faut aussi un modèle chimique pour décrire le processus d'encrassement. La chimie de l'encrassement est décrite par les lois de conservation de la matière et par la loi de densité de la phase solide. La solution de ce système dépend de la vitesse de l'eau, par un terme de convection-diffusion, et des lois de précipitation pour fournir, en fonction du temps, la composition chimique de la zone considérée.

2.1.1 Porosité

Le code de calcul utilisé pour modéliser l'écoulement est TrioCFD. C'est un code à l'échelle CFD. A cette échelle, la méthode de modélisation de l'encrassement utilise la notion de porosité. La porosité est une valeur associée à chaque volume élémentaire qui indique la proportion de la cellule qui n'est pas occupée par de la matière solide. A l'échelle composant, les cellules sont suffisamment petites pour négliger le cas de bulle de liquide piégée dans les solides. L'introduire à l'échelle CFD permet de tester rapidement les effets du couplage sans pour autant devoir définir des frontières fluides/solides complexes. La porosité permet de moyenniser les équations et d'obtenir une modélisation des milieux colmatés qui ne prend en compte que les variations de taille des parties occupées.

Posons O un obstacle dans un domaine. Soit Ω un volume élémentaire représentatif, alors le volume obstrué du VER par l'obstacle O est égal à $\int_{\Omega} I_O d\mu$. La porosité, β , correspond à la proportion de volume non occupé. Elle est donnée par la formule :

$$\beta = 1 - \frac{\int_{\Omega} I_O d\mu}{\int_{\Omega} I_{\Omega} d\mu}$$

Cette quantité varie donc entre 0 et 1, 1 signifiant que la cellule n'a pas d'obstacle qui la traverse, et 0 que la cellule est complètement obstruée.

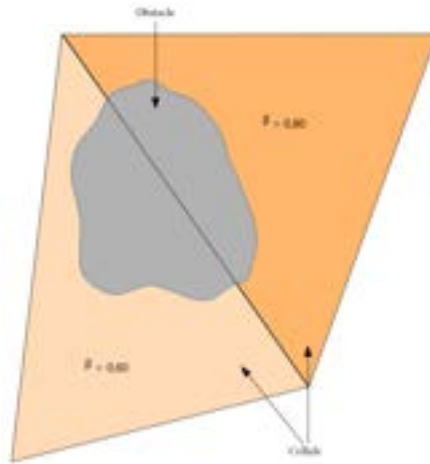


FIGURE 2.1 – Exemple de cellule obstruée

2.1.2 Équations de la thermoHydraulique

Équations de Navier-Stokes

Le flux d'eau qui traverse le générateur de vapeur est décrit par les équations de Navier-Stokes. Ces équations forment un système qui décrit la vitesse, la pression et la température d'un fluide dans le temps. L'eau est supposée incompressible pendant son passage dans le GV. Les différentes équations sont décrites ci-dessous.

Conservation de la masse

La première équation est l'équation de conservation de la masse, qui pour un fluide incompressible s'écrit :

$$\nabla \cdot u = 0,$$

où u est la vitesse du fluide. Cette équation s'obtient à partir de l'équation $\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \cdot u = -\rho \nabla \cdot u$ en utilisant le fait que le fluide est incompressible. Dans ce cas la masse volumique ρ est une constante. Cette équation décrit la variation de la masse volumique du fluide sur un volume élémentaire mobile.

Conservation de la quantité de mouvement

La seconde est l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u \right) - \nabla \cdot \tau + \nabla p = f$$

avec p la pression, f la somme des forces volumiques et $\tau = \eta[2\epsilon(u) - \frac{2}{3}(\nabla \cdot u)I]$ le tenseur des contraintes visqueuses, η est la viscosité dynamique. L'opérateur ϵ est l'opérateur qui calcule la partie symétrique de la jacobienne d'une fonction.

Conservation de l'énergie

La troisième équation est l'équation de conservation de l'énergie :

$$\rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (eu) \right) = -\nabla \cdot q - p \nabla \cdot u + \tau : \nabla u,$$

où e est l'énergie, $\nabla \cdot q$ est le flux de chaleur. Le membre de gauche de l'équation correspond au taux de variation de l'énergie interne par unité de volume. Le dernier terme à droite est la fonction de dissipation visqueuse qui a toujours une valeur supérieure à zéro. Les contraintes visqueuses entraînent toujours une augmentation

de l'énergie interne. En utilisant l'expression de la capacité calorifique qui relie les variations de l'énergie aux variations de température, à densité constante, $C_v \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial e}{\partial t}$, la température est obtenue par l'équation :

$$\rho \left(\frac{\partial C_v T}{\partial t} + \nabla \cdot (C_v T u) \right) = -\nabla \cdot q - \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \nabla \cdot u + \tau : \nabla u + \rho T \frac{\partial C_v}{\partial t},$$

avec C_v la chaleur spécifique à volume constant. Dans de nombreux cas, ces équations sont très difficiles à résoudre numériquement à cause du phénomène de turbulence.

Modèle RANS

La présence de turbulence est caractérisée par de grandes variations de la vitesse, de la pression et de l'énergie. Les écoulements turbulents impliquent la considération d'une large gamme d'échelles. L'énergie est produite à l'échelle macroscopique et elle est dissipée par la viscosité à l'échelle microscopique. Ces propriétés exigent l'utilisation d'un maillage très fin sur certaines zones du domaine et la méthode de résolution directe (DNS) est très coûteuse sur ce type de maillage.

Il est plus intéressant d'utiliser une simplification des équations pour réduire le temps de calcul. Une des simplifications possibles est celle obtenue par le modèle RANS, pour Reynolds Averaged Navier-Stokes. Selon le modèle RANS, la vitesse et la pression sont considérées en tant que des fonctions aléatoires du temps et de l'espace, et elles sont écrites de la façon suivante :

$$u(x, t) = \bar{U}(x, t) + \tilde{u}(x, t),$$

$$p(x, t) = \bar{P}(x, t) + \tilde{p}(x, t).$$

Les variables \bar{U} et \bar{P} sont les moyennes statistiques des fonctions et \tilde{u} , \tilde{p} , désignent leurs fluctuations. Avec l'introduction de ces nouvelles variables, l'équation de Reynolds s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + (\bar{U} \cdot \nabla) \bar{U} \right) = \nabla \cdot \bar{\Sigma} + \bar{F}, \\ \nabla \cdot \bar{U} = 0, \end{array} \right.$$

avec $\bar{\Sigma} = -\bar{P}I + 2\eta\epsilon(\bar{U}) - \rho \overline{\tilde{u} \otimes \tilde{u}}$. Le nouveau système, dépendant des variables moyennées, remplace l'équation de la conservation de la quantité de mouvement. Le terme $\overline{\tilde{u} \otimes \tilde{u}}$ s'appelle le tenseur de Reynold et a la dimension d'une contrainte. Il existe différentes méthodes pour obtenir le tenseur de Reynold comme le modèle bas-Reynolds, le modèle de Jones et Launder... [14]

La méthode la plus classique pour obtenir ce tenseur est celle du modèle k- ϵ dans lequel il est écrit :

$$\overline{\tilde{u} \otimes \tilde{u}} = -\nu_T \times \epsilon(\bar{U}) + \frac{2}{3} \bar{k} I,$$

où $\nu_T = C'_\eta \frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}}$. Les fonctions \bar{k} , $\bar{\epsilon}$ sont des nouvelles variables du système qui nécessitent l'ajout de deux relations de fermeture. Cette modélisation du tenseur de Reynolds est fondée sur l'hypothèse de Boussinesq qui suppose une faible variation de la masse volumique. Dans le cas où le fluide est considéré incompressible, cette hypothèse est vérifiée. Cette approche repose sur l'expérimentation et est peu fiable dans des conditions éloignées des cas expérimentaux.

2.1.3 Équations du Transport Réactif

La modélisation de la formation du colmatage est décrite par 4 équations qui définissent la quantité des espèces chimiques, présentes dans le domaine. Dans ce modèle, les différentes phases d'une même espèce sont considérées comme étant des espèces différentes. Dans le cas qui nous occupe, situé en bas du GV, les conditions physiques ne sont pas réunies pour la présence de phases gazeuses, il y a donc uniquement une phase solide et une phase liquide.

Loi de conservation de la matière

La loi qui régit l'évolution de la quantité de matière de chaque composant est la loi de conservation de la matière. Elle permet de calculer la variation de quantité de matière d'une espèce en fonction des réactions chimiques dans laquelle elle intervient. Elle s'écrit de la façon suivante :

$$\partial_t n_i = \sum_{j=1}^{N_c} \alpha_{i,j} k_j + \sum_{j=1}^{N_e} \beta_{i,j} \lambda_j - T_i + E_i - S_i$$

Dans cette équation, n_i est le nombre de moles de l'espèce chimique i considérée. N_e est le nombre de réactions chimiques à l'équilibre thermodynamique du système et N_c est le nombre de réactions sous-cinétiques. Les constantes $\alpha_{i,j}$ et $\beta_{i,j}$ sont des coefficients stœchiométriques. Ces coefficients sont associés à des lois d'équilibres ou cinétiques, leurs descriptions sont données plus bas. E_i et S_i sont respectivement les termes d'entrée et de sortie. Ce sont des termes ayant une expression locale assimilable à des conditions aux limites. Ils indiquent la quantité de matière ajoutée ou retirée dans le domaine sans l'intervention de réaction chimique ou de déplacement. T_i est le terme de transport. Il s'exprimera pour une fonction scalaire X_i de la façon suivante :

$$T_i = \nabla \cdot \left(X_i u_{\phi(i)} + \bar{D}_i \nabla X_i \right),$$

où $u_{\phi(i)}$ est la vitesse de la phase considérée et \bar{D}_i est le tenseur de diffusivité de l'espèce i . Le premier terme, $\nabla \cdot (X_i u_{\phi(i)})$, est le terme de convection. Il correspond au transport de la quantité X_i par le mouvement interne de la phase considérée. Le second terme, $\nabla \cdot (\bar{D}_i \nabla X_i)$ est le terme de diffusion fickienne. Il traduit le déplacement de la matière vers les zones moins concentrées.

Le nombre de moles est remplacé par l'expression $\beta V_{tot} \partial_t c_i + V_{tot} c_i \partial_t \beta$ si la phase considérée est liquide ou $(1 - \beta) V_{tot} \partial_t c_i - V_{tot} c_i \partial_t \beta$ si la phase est solide. Les variables β et c_i sont respectivement la porosité et la molarité rapportée au volume de la phase, $c_i = \frac{n_i}{(1-\beta)V_{tot}}$ pour une espèce solide et $c_i = \frac{n_i}{\beta V_{tot}}$ pour une espèce liquide.

Lois de densité de la phase solide

La seconde équation qui décrit la chimie est la loi de densité de la phase solide. Elle indique l'évolution de la densité des phases solides. Son expression mathématique est :

$$\rho_s (1 - \beta) V_{tot} - M_{NR} - \sum_{i=1}^{N_s} M_i c_i (1 - \beta) V_{tot} = 0,$$

où ρ_s est la densité de la phase solide, β est la porosité, M_{NR} est la masse non réactive dans le volume élémentaire de mesure V_{tot} et N_s est le nombre d'espèces solides.

Lois de transfert cinétique

Les lois de transfert cinétique permettent d'évaluer les coefficients k_j qui sont des vitesses de réaction en $mol.s^{-1}$. Dans les simulations effectuées durant le stage, ces lois seront fixées arbitrairement.

Lois de réaction à l'équilibre

Les lois de réaction à l'équilibre permettent d'indiquer les relations algébriques que doivent vérifier les variables du système à tout moment. À chaque loi de réaction à l'équilibre est associée un taux de réactions λ_j qui sera évalué positivement pour un produit et négativement pour un réactif. Les taux λ_j sont des inconnus du système. Les relations algébriques ferment le système suite à l'ajout des variables λ_j .

2.2 Schéma numérique du couplage

Le couplage entre ces deux modèles utilise deux codes de calcul basés sur la plateforme TRUST. TrioCFD calcule la partie thermohydraulique du système et SCORPIO permet d'obtenir la chimie. Le couplage de ces codes est piloté par l'API ICoCo et les interpolations de maillage sont gérées par la bibliothèque MEDCoupling.

Les deux systèmes d'équations présentés partagent les variables de la porosité, vitesse et température. Il est possible de considérer l'ensemble de ces équations comme un unique système et de le résoudre numériquement, mais le coût en temps de calcul serait très important. De plus les codes de calcul résolvant les deux systèmes existent déjà et sont vérifiés, cela demanderait beaucoup de temps de programmer un unique code pour résoudre le système complet. Dans la méthode de couplage utilisée, la vitesse et la température sont considérées comme des paramètres par les équations du Transport Réactif, et la porosité est un paramètre de la thermohydraulique. Les paramètres d'un problème sont alors approchés par la solution calculée par le second problème au pas de temps précédent. Par exemple, la vitesse et la température à un temps t_n seront utilisées pour le calcul de la porosité et des quantités de matières au temps t_{n+1} . De même, la porosité au temps t_n sera utilisée dans les équations de Navier-Stokes au temps t_{n+1} . Dans le cas d'un couplage dirigé par ICoCo, les deux codes calculent un pas de temps, s'échangent les champs qui sont considérés comme des paramètres par l'autre, et calculent le pas de temps suivant. Dans le cas de SCORPIO, les quantités de matières de chaque espèce sont calculées et on en déduit une porosité. SCORPIO envoie la porosité obtenue à TrioCFD et reçoit en retour la vitesse et la température. SCORPIO peut ensuite répéter cette étape en utilisant la vitesse et la température obtenues comme paramètre du système.

2.2.1 Méthodes numériques utilisées

Les calculs étant effectués par deux codes, plusieurs types de schémas sont utilisés lors de la résolution du système.

Schéma VEF pour la Thermohydraulique

La résolution de la thermohydraulique, dans le cas étudié, se fait à l'aide d'un schéma de type Volume Element Finis (VEF). L'application à la thermohydraulique de ces schémas a été développée par Phillippe Emonot [13] en 1992 pendant son travail de thèse. Les travaux de sa thèse avaient pour but une implémentation de la méthode dans TrioU, le prédécesseur de TRUST et de TrioCFD. Ces schémas utilisent l'idée des volumes de contrôle avec l'approximation des solutions dans les espaces usuels des éléments finis.

Si par exemple l'équation modélisée contient un terme de la forme $\nabla \cdot \vec{u}$, et que l'espace d'approximation choisi a pour base $(\vec{\phi}_i)_{i \leq k}$, l'intégration sur un volume Ω , de ce terme donne :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{u} d\mu = \int_{\partial\Omega} \vec{u} \cdot \vec{n} d\sigma \approx \sum_{i=1}^d u_i \int_{\partial\Omega} \vec{\phi}_i \cdot \vec{n} d\sigma,$$

avec \vec{n} le vecteur normal à la frontière et u_i les coefficients de l'approximation de \vec{u} dans l'espace considéré. Pour une équation aux dérivées partielles, le raisonnement est identique sur chacun des termes. La première étape est d'intégrer l'équation. Puis, il faut évaluer les termes grâce au théorème de Stokes et finalement décomposer les différentes variables dans les espaces d'approximation choisis.

La résolution des équations de Navier-Stokes incompressible par les schémas VEF utilise les éléments non-conformes de Crouzeix-Raviart pour l'approximation des fonctions. Les calculs décrits dans la thèse transforment le problème initial en la résolution du système algébro-différentiel suivant :

$$M \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + A \vec{U} + L(U)U + B^t P = F,$$

$$B \vec{U} = 0,$$

où \vec{U} est l'approximation de la vitesse, et P l'approximation de la pression, et $L(\vec{U})$, M , A et B sont des matrices. L'équation étant dépendante du temps, les coefficients de la vitesse et de la pression dans les bases choisies varient en fonction du temps. De cette façon, l'approximation de la vitesse s'écrit $\vec{U}(x, t) = \sum u_i(t) \vec{\phi}_i(x)$. Le schéma en temps choisi est le schéma d'Euler explicite. L'intervalle de temps est décomposé en N étapes, et pour $n \leq N$, la notation $\vec{U}(x, t_n) = \vec{U}_n(x)$ est adoptée. Pour résoudre le problème final, il faut trouver le couple (\vec{U}_{n+1}, P_{n+1}) solution de

$$\frac{M\vec{U}_{n+1}}{\delta t} + A\vec{U}_{n+1} + L(U_n)\vec{U}_{n+1} + B^t P_{n+1} = F_{n+1} + \frac{M\vec{U}_n}{\delta t},$$

$$B\vec{U}_{n+1} = 0,$$

La résolution de ce problème linéaire se fait en 3 étapes. Dans un premier temps, il y a une étape de prédiction dans laquelle il faut résoudre le système :

$$\frac{M\vec{U}^*}{\delta t} + A\vec{U}^* + L(U_n)U^* + B^t P_n = F_{n+1} + \frac{M\vec{U}_n}{\delta t},$$

Cette étape donne une solution pour U qui ne vérifie pas la seconde équation. Ensuite il faut calculer la pression qui est donnée par :

$$BM^{-1}B^t P' = \frac{B\vec{U}^*}{\delta t},$$

$$P_{n+1} = P_n + P'.$$

Finalement, la vitesse est corrigée en résolvant le système :

$$M\vec{U}_{n+1} = M\vec{U}^* - \delta t B^t P'$$

Quand le système contient l'équation de conservation de l'énergie, une méthode similaire est utilisée contenant des étapes supplémentaires de détermination de la température.

Schéma VF pour l'équation du transport réactif

Le code SCORPIO utilise actuellement des schémas volumes finis pour résoudre l'équation du transport réactif. Le terme de convection diffusion est approché par la formule suivante :

$$T_i = \sum_{f \in F} [c_i(f)\vec{U}_i + \vec{D}_i \times \nabla c_i(f)] \cdot \vec{\sigma}_f$$

où $\sum_{f \in F}$ signifie la somme sur toutes les faces de l'élément considéré. Le vecteur $\vec{\sigma}_f$ dépend de la surface d'échange entre deux phases sur la face et de la normale de la face. Après l'intégration de l'équation et l'approximation du terme de diffusion convection, le système obtenu est un système algébro-différentiel.

Les lois de transfert à l'équilibre dépendent de manière fortement non-linéaire des quantités de matière. Pour résoudre ces équations, le code SCORPIO appelle le module SIDES de TRUST qui est un module de résolution de systèmes d'équations algébro-différentielles contraints. La qualification «*contraint*» signifie que le système vérifie des conditions de minima et de maxima. Dans l'équation du transport réactif, la quantité de matière ne peut pas être négative et elle peut-être majorée. Le système qui régit ces variables est donc contraint.

Un système algébro-différentiel peut s'écrire sous la forme $F(t, y, \partial_t y) = 0$ où F est une fonction de $[0, \infty[\times R^{2N}$ dans R^N et y est une fonction de $[0, \infty[$ dans R^N qui est l'inconnue du système. Après approximation du système en temps, l'équation est ramenée à la recherche de $y_n \in R^N$ telle que $F(t_n, y_n, \alpha y_n + \beta) = 0$.

Par exemple, si on décide d'utiliser un schéma d'Euler pour l'approximation de la dérivée temporelle, α_n est égale à $\frac{1}{t_n - t_{n-1}}$ et β_n vaut $\frac{-y_{n-1}}{t_n - t_{n-1}}$.

En posant G_n la fonction définie par $G_n(x) = F(t_n, x, \alpha_n x + \beta_n)$, la recherche de la solution peut se ramener à la recherche des zéros de G_n . Pour résoudre ce problème, SIDES propose plusieurs méthodes, dont celle de Newton (avec ou sans projection). Dans le cadre de cette méthode, la solution est approchée par la suite $(z_k)_k$, qui est définie par la récurrence :

$$z_{k+1} = z_k - (DG_n(z_k))^{-1} \times G_n(z_k),$$

Cette suite converge en ordre quadratique vers la solution du problème à condition que z_0 se trouve à une distance suffisamment petite de la solution.

Pour résoudre cette équation, il est aussi possible de la transformer en un problème de minimisation. La résolution d'un problème de minimisation est assez rapide. L'inconvénient de ces méthodes est que la suite obtenue approche un minimum local, or ici la solution est un minimum global du problème de minimisation. Donc la solution calculée n'est pas nécessairement la solution du système initiale. Si y_n est solution de ce système alors y_n minimise la fonction $g_n : R^n \rightarrow R$ telle que

$$g_n(x) = \frac{1}{2} \|F(t_n, x, \alpha_n x + \beta_n)\|^2$$

La résolution du système initial se ramène à trouver y tel que $\min_{x \in R^n} g_n(x) = g_n(y)$. Ces différentes méthodes de résolution de systèmes algébro-différentiels sont utilisées par le module SIDES de TRUST, une plateforme présentée dans la section suivante.

2.3 Codes de calcul scientifique

2.3.1 Plateforme TRUST

En 1994, le code TrioU est développé au CEA. Il utilise des schémas volumes différences finis et volumes éléments finis pour résoudre les équations de la thermohydraulique. Le code est parallélisé en 2000 grâce à la bibliothèque MPI. En 2015, le code TrioU est scindé en TRUST et TrioCFD. Les deux codes sont écrits en C++ et sont parallélisés. Le langage C++ est un code orienté objet. Il offre un formalisme commun à tous les codes développés sur TRUST et facilite le développement de nouvelles fonctionnalités. De plus, cela permet la portabilité des portions de code entre les différents programmes afin d'avoir un support utilisateur commun.

TRUST est une plateforme qui peut effectuer des calculs de thermohydraulique mais qui offre aussi de nombreuses classes aux développeurs. La programmation orientée objet permet de spécialiser les classes fournies. Ces classes aident à développer des codes de calculs pour d'autres disciplines que la mécanique des fluides. SCORPIO, qui est un code de transport réactif, repose sur la plateforme TRUST. TRUST est en open source sur Github et des formations sont ouvertes aux utilisateurs et développeurs extérieurs au CEA.

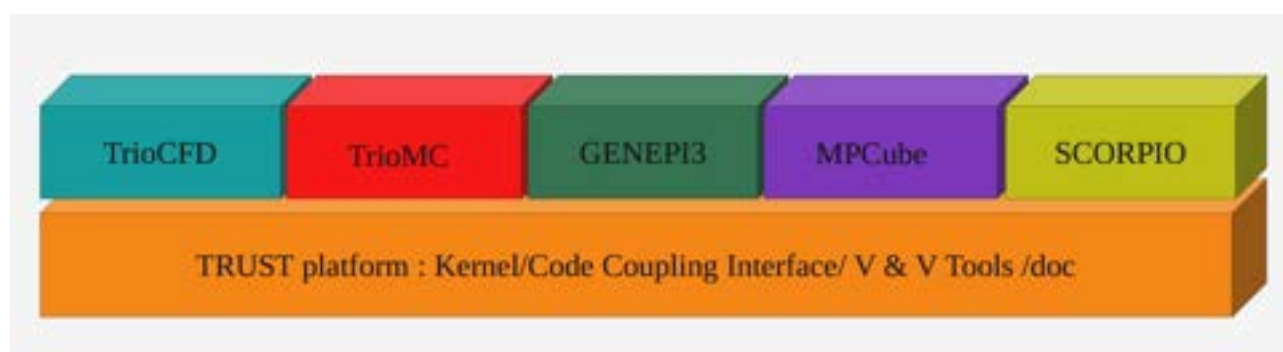


FIGURE 2.2 – TRUST plateforme et BALTIKs

Les codes de calculs développés sur TRUST utilisent un jeu de données pour la résolution des problèmes. Le jeu de données permet à l'utilisateur de spécifier les caractéristiques du problème et les méthodes de résolution. Toutes les interactions entre l'utilisateur et le code passent par le jeu de données. Dans le cadre du stage, la classe milieu a été fréquemment utilisée car elle contient toutes informations sur la porosité du domaine et sur les paramètres de la thermohydraulique. En modifiant la partie milieu du jeu de données, l'utilisateur peut changer les constantes du système. La figure 2.3 illustre les informations du jeu de données concernant le milieu.

```

72 Fluide_Incompressible
73 {
74     beta_th champ_uniforme 1 0.0002
75     nu champ_uniforme 1 9.5e-5
76     rho champ_uniforme 1 755.2
77     cp champ_uniforme 1 4185.0
78     lambda champ_uniforme 1 70
79     gravite champ_uniforme 2 0 -9.81
80     porosites_champ champ_input_P0_composite
81     {
82         initial_field champ_fonc_xyz don 1 i.
83         input_field { non POROSITY_IN nb_comp 1 probleme pb }
84     }
85 }
86 }
87

```

FIGURE 2.3 – Milieu dans le jeu de données

La figure 2.3 présente une partie du jeu de données. La lecture du mot-clef fluide incompressible par le code instancie un élément de la classe fluide incompressible qui hérite de milieu. Cette indication précise au code que le milieu sera un fluide incompressible et il peut ensuite lire les paramètres situés entre les accolades. Ces informations sont les caractéristiques du milieu. Par exemple, lambda est la conductivité de l'eau. La lecture

des informations sur la résolution du problème utilise la même structure. Dans la partie précédente, le schéma en temps utilisé est un schéma d'Euler explicite. La figure 2.4 montre la partie du jeu de données qui indique au code le schéma en temps choisi.

```

35 VEFPreP1b dls # Read dls { P0 } #
36
37 Scheme_euler_explicit sch
38 Read sch
39 {
40
41     tinit 0.1200003
42     tmax 0.1252
43     dt_min 1.e-20
44     dt_max 1.e-1
45     dt_inpr 1.e-2
46     dt_sauv 5.0
47     seuil_statio -1.e-8
48     facsec 1
49     diffusion_implicit 0
50 }
51

```

FIGURE 2.4 – Schéma en temps dans le jeu de données

Sur la ligne 35 du jeu de données, avant les caractéristiques du schéma d'Euler, il est écrit VEFPreP1b. Cette ligne indique au code que la méthode de résolution choisie est la méthode Volume Element Finis. Le jeu de données précise aussi les fichiers qui contiennent le maillage du domaine.

2.3.2 SCORPIO

Le code de calcul SCORPIO résout les équations du transport réactif pour décrire la composition chimique d'un milieu. Le code SCORPIO a été construit pour être une alternative basée sur TRUST aux codes de transport réactif industriels. Des codes de transport réactif sont déjà utilisés au sein du CEA mais aucun ne repose sur la plateforme TRUST, leur utilisation dans un couplage n'est pas possible. C'est un code récent qui est encore en développement mais sa construction sur la plateforme TRUST permet déjà son utilisation dans des couplages. Pour l'instant, il est développé pour utiliser des maillages cartésiens et n'est pas parallélisé.

Le jeu de données de SCORPIO permet à l'utilisateur de préciser les espèces chimiques présentes dans le domaine et les lois de transfert à l'équilibre ou cinétiques. Dans le cadre du stage, les 3 espèces considérées sont l'eau liquide, le fer solubilisé et la magnétite. Pour que SCORPIO puisse utiliser ces espèces, il suffit de reproduire la structure de la figure 2.5. Dans ce jeu de données, il y a 3 espèces déclarées dans SCORPIO. Elles sont écrites avec leur masse molaire et la phase dans laquelle elles sont présentes.

```

13 # CHEMICAL SPECIES DECLARATION #
14
15 SCORPIO_Chemical_Species H2O
16 Read H2O
17 {
18     molar_mass 18.01528
19     phase liquid
20 }
21
22 SCORPIO_Chemical_Species Fe
23 Read Fe
24 {
25     molar_mass 55.845
26     phase solid
27 }
28
29 SCORPIO_Chemical_Species Magnetite
30 Read Magnetite
31 {
32     molar_mass 214.10
33     phase solid
34 }
35
36 # CHEMICAL PHASES DECLARATION #
37
38 SCORPIO_Liquid_Chemical_Phase liq
39 Read liq
40 {
41     solvent H2O
42     solutes { Fe
43

```

FIGURE 2.5 – Déclaration des espèces chimiques dans le jeu de données SCORPIO

Le jeu de données permet ensuite de déclarer des lois chimiques entre les différentes espèces. La figure 2.6 donne un exemple de l'utilisation de cette fonctionnalité. Dans le cas étudié, le réactif est le fer et le produit est la magnétite. Il s'agit de la loi décrite dans la sous-section 1.2.2. La partie «`reaction_rate_analytic`» permet de spécifier de manière analytique la loi qui est donnée dans le paragraphe «`components`».

```

68 # KINETIC REACTIONS DECLARATION #
69
70 SCORPIO_Precipitation_Dissolution_Kinetic alphak
71 Read alphak
72 {
73   stoichiometry
74   {
75     chemical_species 2 Fer Magnetite
76     reactants Fer
77     products Magnetite
78   }
79
80   saturation_constant 1.e-9
81
82   reaction_rate analytic
83   {
84     arguments 1
85     {
86       variable a
87       quantity molarity@Fer
88     }
89
90     components 1
91     {
92       name reaction_rate@alphak
93
94       expression a*0.01
95
96       derivatives 1 0.01
97     }
98   }
99 }

```

FIGURE 2.6 – Déclaration des lois cinétiques dans le jeu de données SCORPIO

L'interface utilisateur fournie par SCORPIO facilite l'utilisation du code de calcul.

Les systèmes obtenus par les équations de la chimie sont des systèmes algèbro-différentiels fortement non-linéaires.

2.3.3 TrioCFD

TrioCFD est un code de thermohydraulique open-source héritant de TrioU. Il est découpé en différents modules qui utilisent des méthodes de résolution variées. Le module utilisé dans le cadre du stage est le module turbulence. Ce module contient toutes les méthodes de résolution indirecte de phénomènes turbulents. La méthode VEF de TrioCFD utilise un maillage triangulaire du domaine.

2.3.4 ICoCo

L'API ICoCo gère le couplage entre plusieurs codes développés sous base TRUST. Cette API permet de lancer séparément la résolution de plusieurs problèmes physiques. Chaque problème est traité par un groupe de processeurs. L'utilisateur peut décider des interactions entre ces problèmes. Les applications de cette API sont variées. ICoCo peut être utilisé pour traiter deux phénomènes physiques différents sur le même domaine. Il peut être utilisé pour décrire un phénomène physique réparti sur deux milieux différents possédant une interface. Dans le cadre du stage, ICoCo va coordonner les échanges entre les problèmes.

2.4 Cas test utilisé durant le stage

Le cas test utilisé durant ce stage a été mis en place par Bassirou Gueye [11].

Problème thermohydraulique

TrioCFD utilise deux processeurs pour résoudre les équations de la thermohydraulique. Le problème est en deux dimensions. Le domaine de la thermohydraulique est en contact avec deux parois solides. La paroi à gauche est celle du tube contenant l'eau du circuit primaire, et une partie du bord à droite du domaine est constituée par la plaque entretoise. Les figures 2.7 et 2.8 montrent la partie du générateur de vapeur simulée.

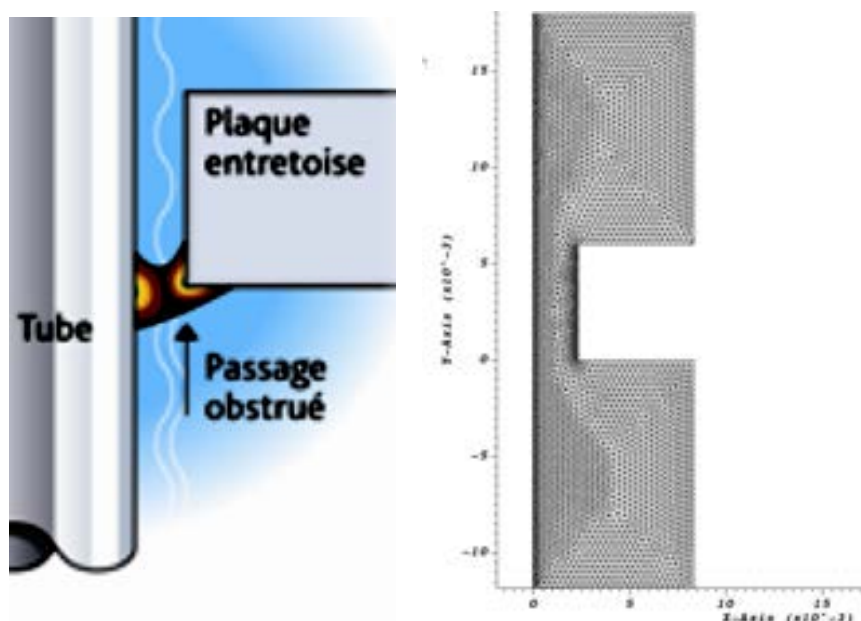


FIGURE 2.7 – Schéma du domaine du GV simulé à gauche et maillage de ce domaine à droite

L'eau se dirige du bas vers le haut. La paroi en contact avec le tube, à gauche, est chauffée par l'eau du circuit primaire. Ce transfert de chaleur est traduit par l'ajout d'une condition de Dirichlet sur la paroi, en imposant une température de 500K. La paroi, à droite, le long de la plaque entretoise est à une température de 450,35K. L'eau arrivant par le bas du domaine est à une vitesse de 2.7m.s^{-1} et à une pression de 61.5 bars. La température de l'eau à son arrivée dans le domaine est de 450K. Les conditions aux bords choisies ne sont pas celle présentes dans le générateur de vapeur. Avec les conditions du générateur de vapeur l'écoulement est diphasique, et ce type d'écoulement n'est pas encore implémenté dans le modèle $k-\epsilon$ de TrioCFD et dans SCORPIO.

Problème Chimique

SCORPIO utilise un processeur pour déterminer la chimie. SCORPIO est utilisé pour modéliser le colmatage. Il n'y a pas encore d'expérimentation pour déterminer les zones où un dépôt se forme. Pour l'instant elles seront fixées dans le passage entre les plaques entretoises et les tubes en U. Pour optimiser le temps de calculs, le maillage SCORPIO ne recouvre pas tout le domaine de la simulation mais uniquement la zone réduite entre le tube et la plaque entretoise. C'est la zone où le colmatage apparaît. La figure 2.8 présente le domaine de résolution de SCORPIO.

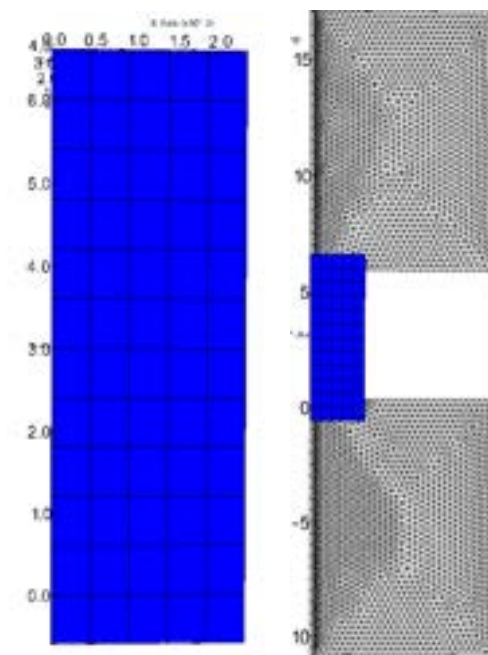


FIGURE 2.8 – A gauche le maillage de SCORPIO seul, à droite le maillage de SCORPIO dans le domaine de TrioCFD

Dans la résolution de la chimie, le précipité ne peut se former que sur les zones où la porosité est strictement inférieure à 1. Ce phénomène caractérise le fait que le colmatage n'a pas lieu sur tout le domaine et que le précipité a besoin d'un support pour se former. Le domaine de SCORPIO est plus large que le domaine de TrioCFD et dépasse sur le tube à gauche et sur la plaque entretoise à droite. Cet élargissement du domaine permet d'utiliser une porosité de 0,99, en condition initiale, sur les cellules à cheval sans impacter les calculs. La condition initiale sur la porosité permet de préciser que les cellules sont adjacentes à une paroi et que le précipité peut se déposer sur ces cellules. Selon cette méthode, le 1% de la cellule colmatée correspond à l'intersection entre les cellules et le tube ou les cellules et la plaque entretoise. La porosité donnant le taux de la cellule non solide, il est raisonnable de considérer cette intersection comme une partie solide et l'utiliser dans le calcul de la porosité.

Le maillage de SCORPIO est cartésien en trois dimensions. La troisième dimension n'a pas d'utilité puisqu'il n'y a qu'une maille dans la direction de cette dimension. SCORPIO est codé pour être utilisé en trois dimensions mais il est possible de se restreindre à deux dimensions comme dans le cas test du stage.

Il y a un flux de fer liquide qui arrive par le bas du domaine. L'eau allant du bas vers le haut, ce fer représente les impuretés de l'eau du circuit secondaire. Elles sont transportées par l'écoulement. Dans le cas test, la loi cinétique du Fer impose au fer de se précipiter directement en magnétite. La loi cinétique fictive s'écrit $2Fe \mapsto Fe_3O_4$ avec un taux de réaction qui a pour loi $k_j = 0,01n_{Fe}$ où n_{Fe} est la quantité de matière de fer.

Interpolation des variables entre les domaines

Les domaines des problèmes ne sont pas les mêmes et sont maillés de manière distincte. Les champs associés à ces problèmes auront un nombre d'éléments différents. Pour échanger la porosité, la vitesse et la température, il est nécessaire de convertir les champs associés à un domaine vers l'autre. ICoCo et la bibliothèque MEDCoupling proposent différents outils d'interpolation des variables dans cette situation. La méthode utilisée dans le cas test est la méthode P0 vers P0 qui interpole de manière linéaire des fonctions constantes par morceaux. Cette méthode effectue une moyenne pondérée par les volumes des intersections des cellules.

Si le domaine de la thermohydraulique est maillé par l'ensemble de triangles $(T_h)_{h \in H}$ et le domaine de la chimie par les rectangles $(R_i)_{i \in I}$, alors la valeur de la porosité β'_h sur le triangle T_h est donné par la formule :

$$\beta'_h = \frac{1}{\mu(T_h)} \sum_{i \in I} [\beta_i \times \mu(T_h \cap R_i)],$$

avec μ la mesure de volume, β_i est la porosité sur le rectangle R_i . Cette interpolation est linéaire, elle peut donc s'écrire comme un produit matriciel. En notant les vecteurs $\beta = (\beta_i)_{i \in I}$, $\beta' = (\beta'_h)_{h \in H}$ et la matrice M de coefficients $M_{h,i} = \frac{\mu(T_h \cap R_i)}{\mu(T_h)}$ alors l'interpolation s'écrit $\beta' = M\beta$.

L'interpolation des variables envoyées de TrioCFD vers SCORPIO se fait de la même façon en inversant le rôle des cellules de SCORPIO et de TrioCFD. Dans le cas de l'envoi de la porosité, la figure 2.9 illustre les résultats obtenus par l'interpolation.

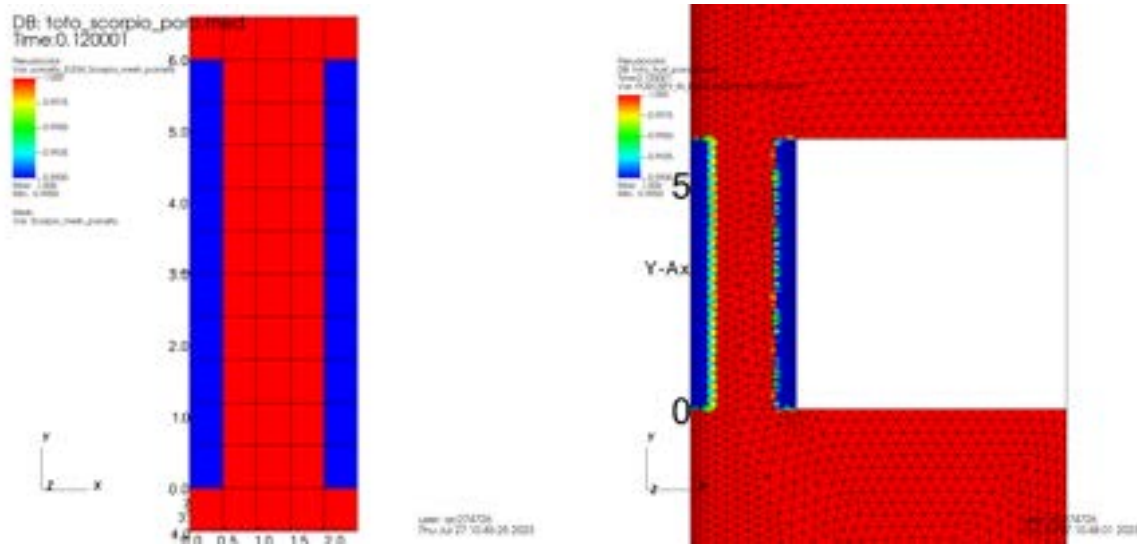


FIGURE 2.9 – À gauche la porosité de SCORPIO, à droite la porosité reçue par TrioCFD

Résultat préexistant

En 2022, le champ de porosité de TrioCFD était rentré en paramètre et n'était pas modifiable pendant le calcul. L'envoi de la température et de la vitesse de TrioCFD à SCORPIO a pu être mis en place mais l'échange était incomplet. La solution qui a été proposée est de lancer le calcul en plusieurs temps. Les codes de calcul reposant sur TRUST ont une option reprise qui permet d'arrêter un calcul, de sauvegarder l'état du système dans le but de le relancer plus tard. Grâce à cette fonctionnalité, la porosité était modifiée à la main à un intervalle de temps régulier. La simulation se lançait jusqu'à un temps final relativement proche du temps initial, le calcul s'arrêtait, la porosité était relevée dans SCORPIO et écrite dans le jeu de données TrioCFD. Le calcul était ensuite lancé en reprise.

Le champ de porosité a été reprogrammé avant le début de mon stage pour qu'il puisse être modifié au cours de la simulation. L'objectif de ce stage est de réaliser le couplage complet et de corriger les potentielles erreurs qui surviendraient.

Chapitre 3

Simulations numériques

3.1 Mise en place du couplage complet

3.1.1 Fonctionnement du couplage

Les premiers mois du stage m'ont permis de comprendre le fonctionnement du couplage et de mettre en place l'envoi de la porosité de SCORPIO à TrioCFD. Dans TRUST, l'ensemble des informations concernant un système d'équations et les fonctions utiles à sa résolution s'appelle un problème. La principale difficulté du couplage est de convertir les champs entre les deux problèmes puisqu'ils n'utilisent ni le même maillage, ni le même domaine. Pour effectuer la conversion des champs, ICoCo utilise la librairie MEDCoupling de Salomé, un logiciel développé en partenariat avec EDF.

Les conversions effectuées par ICoCo reposent sur l'utilisation de deux classes : MEDDoubleField et TrioDEC. Les champs MEDDoubleField sont des champs ayant une structure commune à tous les problèmes, l'objectif est de copier les valeurs des champs qui vont être échangés pour les écrire dans des champs MEDDoubleField. De cette manière, les informations à échanger seront dans un format commun. Les éléments de TrioDEC servent à échanger et convertir les champs entre des problèmes. Pour cela, ils contiennent les informations nécessaires sur les maillages des deux problèmes, ce qui permet notamment de calculer la matrice de conversion. Les méthodes de cette classe sont optimisées pour effectuer des communications performantes entre les groupes de processeurs. Chaque champ MEDDoubleField est associé à un TrioDEC, c'est le champ qui sera échangé. Pour illustrer l'échange, la liste d'étapes suivantes va expliquer le fonctionnement de l'envoi du champ de porosité de SCORPIO à TrioCFD :

1. Création d'un TrioDEC pour la porosité sur chaque processeur
2. Création d'un champ MEDDoubleField sur chacun des processeurs pour recevoir et envoyer la porosité
3. Copie de la structure et des valeurs du champ de porosité dans le champ MEDDoubleField de SCORPIO
4. Copie de la structure du champ porosité dans le champ MEDDoubleField de TrioCFD
5. Association du champ MEDDoubleField avec le TrioDEC sur chaque processeur
6. Synchronisation des TrioDEC
7. Calcul de la matrice $P0 \rightarrow P0$ de SCORPIO vers TrioCFD dans le TrioDEC
8. Envoi et conversion du champ MEDDoubleField grâce aux méthodes de TrioDEC
9. Copie des valeurs du champ MEDDoubleField dans le champ porosité de TrioCFD

(3.1)

Après ces étapes, le problème de TrioCFD a reçu le champ de porosité de SCORPIO. Les étapes 6 et 7 ne s'effectuent qu'une fois pendant l'intégralité du calcul puisque la matrice de conversion "P0" ne dépend que du maillage et la synchronisation n'a pas à être répétée.

Une des étapes du couplage est de mettre en place la conversion des champs des problèmes en champ MEDDoubleField. Dans le cadre du stage, les fonctions associées à ces conversions étaient déjà écrites.

Les fonctions de conversions de champs TrioCFD en champs MEDDoubleField étaient fonctionnelles et testées sur le couplage partiel effectué l'année précédente. Mais il y avait des erreurs d'indices dans les fonctions de SCORPIO. Ces erreurs n'avaient pas été trouvées puisque cette partie du code n'avaient pas pu être testée. J'ai commencé par modifier cette partie du code.

Après cette étape, le code s'est lancé correctement. La loi cinétique associée au dépôt de magnétite est très rapide et la porosité chute sur un temps très court. Le temps physique maximal des simulations est d'environ 0,0048 secondes et il est atteint en moins 15000 itérations. Il y a une raison à l'arrêt de la simulation après ce temps. TrioCFD n'est pas programmé pour des porosités très basses et avec la loi cinétique donnée, la porosité arrive à environ 0,2 à 0,0048 secondes. A partir de cette porosité, les variables calculées par les équations de la thermohydraulique ne sont plus stables. Le pas de temps qui était à l'origine d'environ 3×10^{-7} , diminue jusqu'à 10^{-14} . La simulation continue de calculer des itérations mais le pas de temps est bien trop faible pour observer une évolution.

3.1.2 Analyse des premiers résultats obtenues

Les résultats du premier cas test ne correspondaient pas physiquement à ce que l'on attendrait d'un colmatage. La pression, la température et la vitesse ne sont pas impactées correctement par le précipité. Dans les zones où la porosité descend à 0,3, on s'attend à ce que l'eau ne passe presque plus et donc que la vitesse soit presque nulle. Les équations sont moyennées par le volume non bloqué, la vitesse devrait chuter en même temps que la porosité. Dans les résultats obtenus, l'inverse se produit. La vitesse croit proportionnellement à la baisse de porosité. La vitesse diminue entre les zones colmatées. Ces résultats sont visibles sur la figure 3.1.

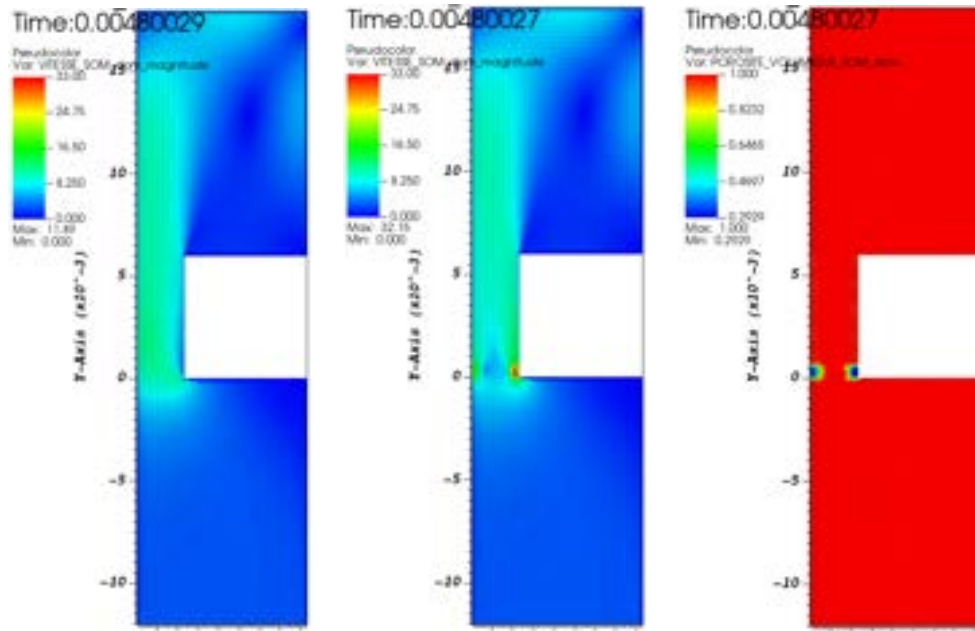


FIGURE 3.1 – Vitesse de l'écoulement, à $t = 0.0048s$, sans couplage, avec couplage et porosité calculée pendant le couplage

La pression calculée lors de la simulation ne correspond pas à ce que l'on attend. Le colmatage devrait provoquer une perte de charge du liquide entre la partie basse et la partie haute, dû au frottement sur les parois et au rétrécissement du passage. Le phénomène de perte de charge est visible dans le cas sans colmatage, il devrait être accentué avec la diminution de la porosité. Ces résultats sont présentés sur la figure 3.2.

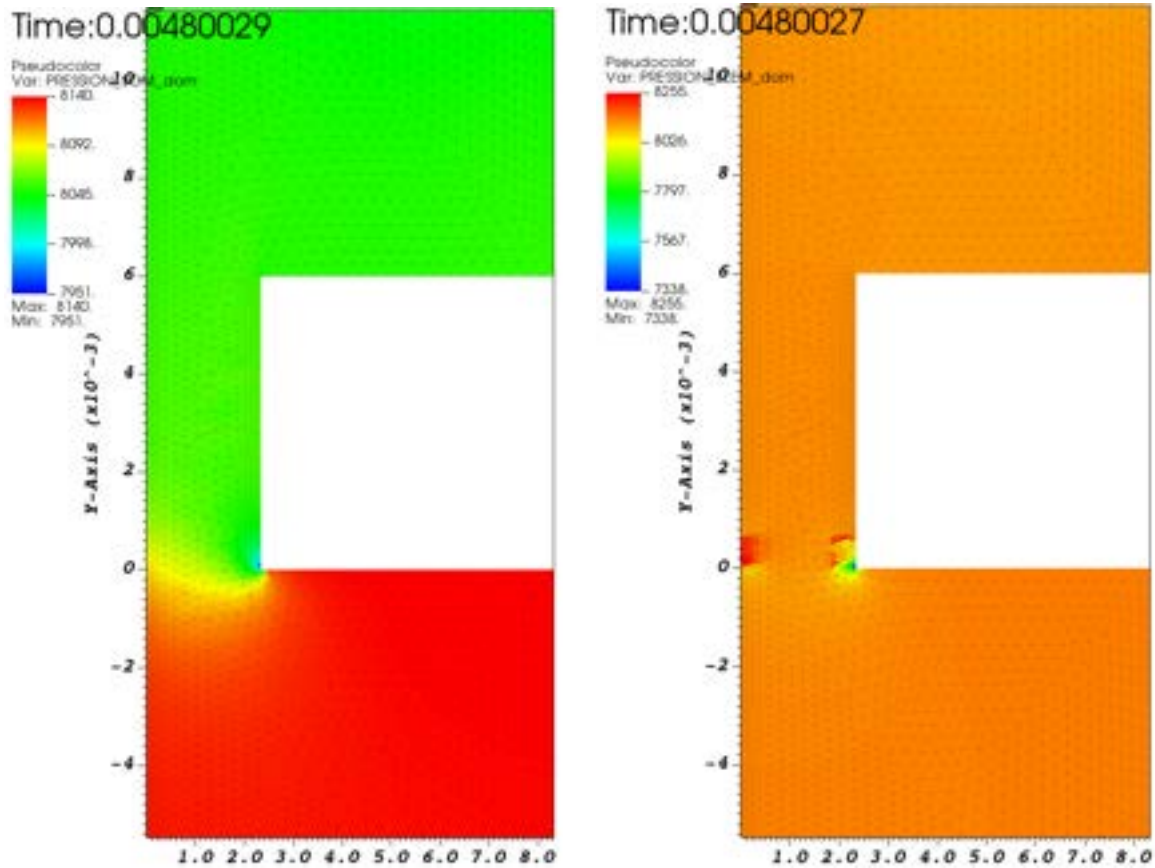


FIGURE 3.2 – Pression de l'écoulement, à $t = 0.0048s$ sans colmatage à gauche et avec colmatage à droite

Les valeurs de température sont aussi absurdes, mais la partie thermique sera présentée par la suite.

Les résultats du couplage montrent des incohérences physiques et numériques et il a fallu en trouver la raison. La première étape est de vérifier si le problème vient d'une erreur du couplage ou si le modèle physique utilisé est adapté à un changement rapide du milieu. Pour tester la première possibilité, j'ai dû trouver un moyen de reproduire le cas sans utiliser de couplage. Pour cela, j'ai essayé de lancer TrioCFD seul en donnant une porosité suivant une loi analytique. TrioCFD permet de définir les paramètres du milieu par des lois renseignées dans le jeu de données. J'ai utilisé une loi de la porosité approchant celle calculée par SCORPIO. Les résultats étaient très différents entre le couplage et cette simulation. A partir de ces résultats, il fallait déterminer si les calculs de TrioCFD seul étaient correctes. Avec l'aide de l'ingénieur chercheur travaillant sur TrioCFD, j'ai lancé un certains nombres de tests dont le but était de détecter une erreur dans le code pour comprendre la raison du problème. Les cas test étaient lancés avec des porosités suivant exactement la même loi mais définies par des fonctionnalités différentes de TrioCFD. Il fallait vérifier si toutes les façons de fixer une loi de porosité donnaient le même résultat. Après avoir lancé les cas, les résultats mettaient en évidence un problème dans la prise en compte de la porosité par TrioCFD. La source du problème a été trouvée et le problème a été corrigé.

Le problème ne venait pas du couplage mais du modèle utilisé. La programmation de ce modèle dans TrioCFD n'est pas adaptée à une chute si rapide de la porosité et au colmatage des cellules. L'étape suivante du stage était de trouver comment corriger la prise en compte de la porosité dans le modèle.

3.2 Ajout d'un terme source aux équations de la thermohydraulique

Pour corriger ce problème, on se propose d'ajouter un terme de frottement dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement. C'est un terme de frottement singulier qui modélise le frottement du liquide sur un obstacle et son passage à travers la paroi de l'obstacle. Le terme de frottement singulier devrait imposer une perte de charge singulière à l'écoulement et réduire la vitesse du fluide le long des cellules colmatées. Ce terme de frottement s'exprime sur une cellule et s'écrit :

$$-\rho\beta \left[\frac{\lambda(\sigma)}{\mu(\Omega)} \bar{\bar{T}} \right] \vec{V},$$

où ρ est la masse volumique, β est la porosité volumique, σ est la surface de l'obstacle dans la cellule Ω , $\frac{\lambda(\sigma)}{\mu(\Omega)} \bar{\bar{T}}$ est le tenseur diagonal de frottement singulier et \vec{V} est la vitesse du fluide. On notera dans toute la suite λ la mesure de surface et μ la mesure de volume.

Ce terme de frottement est déjà implémenté dans d'autres codes de thermohydraulique reposant sur la plateforme TRUST. Dans ces codes, le terme est considéré comme un terme source et a pour expression :

$$S_{f,\Omega}^{\vec{}} = \frac{\rho_{\Omega}}{k_a} \beta_{\Omega} \frac{\mu(\Omega)}{k_a} \left[\bar{\bar{F}}_{\Omega} \times (\Sigma_{i \in a} \vec{V}_i) \right],$$

où l'indice Ω désigne les valeurs sur les cellules, k_a est le nombre d'arêtes de la cellule et $\Sigma_{i \in a}$ est la somme des valeurs de la fonction sur les arêtes. $\bar{\bar{F}} = \frac{\lambda(\sigma)}{\mu(\Omega)} \bar{\bar{T}}$ est le tenseur diagonal de frottement. On obtient ainsi une expression du terme source sur les éléments. On pourra utiliser la construction de ce terme comme exemple dans la construction du terme source de frottement singulier pour la porosité.

3.2.1 Construction du terme source

Porosité surfacique

Comme on l'a vu, le terme de frottement singulier s'applique sur un obstacle. Dans TrioCFD, nos obstacles sont dans les cellules et s'expriment à travers la notion de porosité. Il serait possible de simuler la présence d'un obstacle dans les cellules de TrioCFD et de modéliser son évolution dans le temps mais cette méthode est trop coûteuse en temps de calcul. De plus comme le maillage de SCORPIO est plus grossier, la position de cette obstacle serait arbitraire. On va donc partir d'un frottement sur un obstacle et réécrire ce terme. On suppose l'existence d'obstacles précis dans le VER pour calculer le terme source de frottement puis obtenir une expression indépendante des obstacles considérés. L'expression obtenue devra finalement dépendre uniquement de la porosité. Pour rappel, la porosité volumique sur un ensemble Ω est donnée par l'expression :

$$\beta_{\Omega} = 1 - \frac{\int_{\Omega} 1_O d\mu}{\mu(\Omega)},$$

avec O l'union des obstacles dans la cellule.

On va commencer par fixer les calculs sur les arêtes de nos éléments. Dans le cas test, le maillage de TrioCFD est constitué de triangles. Le terme de frottement singulier prend en compte la mesure de la surface de l'obstacle dans la cellule. Il faut trouver comment exprimer cette quantité en fonction de la porosité.

Soit σ une surface qui est en partie obstruée par un objet O . La mesure de la partie obstruée dans la surface, σ , est donc $\lambda(O \cap \sigma)$. On définit alors la porosité surfacique de σ par l'expression :

$$\beta_{\sigma} = 1 - \frac{\int_{\sigma} 1_O d\sigma}{\lambda(\sigma)} = 1 - \frac{\lambda(O \cap \sigma)}{\lambda(\sigma)}$$

Fixons un repère orthonormé tel que le vecteur unitaire dirigé par l'arête σ soit l'axe e_2 de notre repère et que l'un des sommets de l'arête soit l'origine. On pose Ω_1 et Ω_2 , les triangles adjacents à l'arête et $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$. On considère un rectangle $R = [a, b] \times [c, d]$, quelconque, qui contient la réunion des deux triangles.

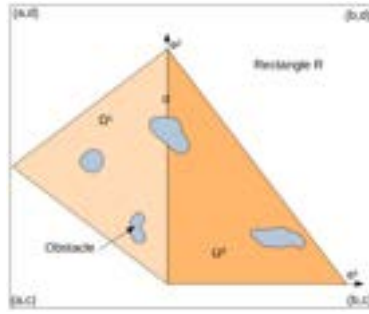


FIGURE 3.3 – Exemple de réunion de triangles dans un repère adapté

Dans ce repère, on peut ré-exprimer la porosité volumique comme l'intégrale de 1_O dans le rectangle R . On obtient ainsi :

$$1 - \beta_\Omega = \int_a^b \int_c^d 1_{O \cap \Omega}(x, y) dy dx / \mu(\Omega),$$

où $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$. Avec cette notation, la porosité surfacique, pour la tranche parallèle à l'axe e_2 passant par le point $(x, 0)$ dans Ω , est donnée par la formule :

$$\beta_\sigma(x) = 1 - \frac{\int_c^d 1_{O \cap \Omega}(x, y) dy}{\int_c^d 1_\Omega(x, y) dy}$$

On suppose que la fonction $\beta_\sigma(\cdot)$ est régulière. On choisit alors d'approcher la porosité surfacique en la supposant constante le long de l'axe e_1 sur Ω . En notant $\beta_\sigma = \beta_\sigma(0)$, il vient :

$$\begin{aligned} 1 - \beta_\Omega &= \int_a^b \int_c^d 1_{O \cap \Omega}(x, y) dy dx / \mu(\Omega) \\ &= \int_a^b (1 - \beta_\sigma(x)) \int_c^d 1_\Omega(x, y) dy dx / \mu(\Omega) \approx 1 - \beta_\sigma. \end{aligned}$$

Ce qui est équivalent à dire que $\beta_{\Omega_1 \cup \Omega_2} \approx \beta_\sigma$. La porosité volumique sur $\Omega_1 \cup \Omega_2$ est donnée par la formule $\frac{\mu(\Omega_1)\beta_{\Omega_1} + \mu(\Omega_2)\beta_{\Omega_2}}{\mu(\Omega_1) + \mu(\Omega_2)}$. On obtient ainsi que la porosité surfacique sur l'arête σ entre deux triangles, Ω_1 et Ω_2 , de porosités volumiques respectives β_1 et β_2 est donnée par l'approximation :

$$\beta_\sigma = \frac{\mu(\Omega_1)\beta_1 + \mu(\Omega_2)\beta_2}{\mu(\Omega_1) + \mu(\Omega_2)}.$$

Calcul du terme source

On suppose que la partie obstruée de l'arête est composée d'un ensemble d'obstacles Θ . On doit alors retrouver que la porosité surfacique s'exprime en fonction de la somme des mesures de surfaces des obstacles considérés sur l'arête en question, c'est-à-dire selon la formule suivante :

$$\beta_\sigma = 1 - \frac{\lambda(O)}{\lambda(\sigma)} = 1 - \sum_{o \in \Theta} \frac{\lambda(o)}{\lambda(\sigma)}$$

De cette formule, on obtient l'expression $\sum_{o \in \Theta} \lambda(o) = (1 - \beta_\sigma)\lambda(\sigma)$. Cette expression va nous intéresser car on obtient alors la somme des mesures de surface de manière indépendante des obstacles considérés. On peut désormais calculer notre frottement singulier dû aux obstacles découlant de la porosité. Le fluide doit frotter sur chacun des obstacles donc on peut écrire que notre tenseur de frottement, sur l'arête, s'écrit comme la somme des tenseurs de frottement singulier de chacun des obstacles. Le calcul de ce tenseur de frottement est :

$$-\sum_{o \in \Theta} \frac{\lambda(o)}{\mu(\Omega)} \bar{T}_\sigma \vec{V}_\sigma = -(1 - \beta_\sigma) \frac{\lambda(\sigma)}{\mu(\Omega)} \bar{T}_\sigma \vec{V}_\sigma$$

Dans cette formule, on voit que le tenseur de frottement obtenu est indépendant des obstacles et ne dépend finalement que de la porosité surfacique. On a donc obtenu une formulation qui convient à nos attentes.

3.2.2 Discrétisation du terme source

Ici notre tenseur de frottement est donné par $\vec{F}_\sigma = -(1 - \beta_\sigma) \frac{\lambda(\sigma)}{\mu(\Omega)} \vec{T}_\sigma$, on peut le remplacer dans la formulation du terme de frottement codé, en utilisant cette fois la vitesse sur les arêtes. On obtient la formulation de notre terme source de frottement :

$$\vec{S}_{f,\sigma} = -\rho\beta_\Omega(1 - \beta_\sigma)\lambda(\sigma)\vec{T}_\sigma\vec{V}_\sigma,$$

avec β_Ω , la porosité volumique sur l'union des triangles adjacents à l'arête. En utilisant l'hypothèse de régularité sur la porosité surfacique, cette expression ne dépend que de la porosité surfacique et s'écrit :

$$\vec{S}_{f,\sigma} = -\rho\beta_\sigma(1 - \beta_\sigma)\lambda(\sigma)\vec{T}_\sigma\vec{V}_\sigma,$$

Ce terme présente une propriété que l'on attendrait d'un terme source de correction pour la porosité. Il s'annule quand la porosité vaut 1, ce qui signifie que l'équation de conservation de la quantité de mouvement et sa résolution numérique ne sont pas modifiées quand il n'y a pas de phase solide dans la cellule. Il nous reste à préciser \vec{T}_σ . On va utiliser une simplification des modèles existants. Pour cette simplification, on pose :

$$\vec{T}_\sigma = \begin{pmatrix} K\|\vec{V}_N\| & 0 \\ 0 & K\|\vec{V}_N\| \end{pmatrix}$$

où \vec{V}_N est le vecteur normal à l'arête, et K est un coefficient qui peut être fixé constant ou dépendant de la porosité. Dans le cadre du stage, on posera $K = \frac{c_n}{\beta^2}$ pour que la correction apportée par le terme de frottement singulier augmente quand la porosité diminue. c_n est un paramètre saisi par l'utilisateur. On étudiera par la suite l'impact du coefficient c_n .

Implémentation dans TrioCFD

Les macro-instructions de TRUST permettent d'instancier les classes depuis le jeu de données. Cette fonctionnalité facilite l'ajout de termes à une équation. Dans le cas du terme source de frottement singulier, la classe est définie dans deux fichiers, .cpp et .h. Elle hérite de la classe «Source_base» qui est la classe mère de tous les termes sources. En ajoutant la macro «Declare_instanciable» dans l'en-tête du fichier et «Implement_instanciable» dans le fichier .cpp, la lecture du nom de la classe dans la partie source du jeu de données va créer un élément de la classe et l'associer à l'équation. Dans le cas des équations de Navier-Stokes, la prise en compte du terme source dans le jeu de données est faite à la ligne 98 dans la figure 3.4.

```

87
88     Navier_Stokes_Turbulent
89     {
90         solveur_pression GCP {
91             precondition ssor { omega 1.5 }
92             seuil 1e-10
93             impr
94         }
95         # solveur_bar petsc cholesky { impr } #
96         convection { amont }
97         diffusion { }
98         sources { Frottement_Singulier { masse_volumique 755.2 K_n 36. } }
```

FIGURE 3.4 – Terme source dans le jeu de données

La déclaration «overwrite» à la fin des méthodes de la classe mère «Source_base» permet d'appeler par le même nom les méthodes de calcul de tous les termes sources. Le problème possède une liste de termes sources et somme les valeurs de ces termes en appelant une unique méthode sur chaque élément de cette liste. Après l'implémentation du terme de frottement singulier et l'écriture de son nom dans le jeu de données, TrioCFD prend en compte le terme source dans les prochains calculs.

3.2.3 Résultats numériques

Trois aspects des modifications provoquées par l'ajout du terme source seront présentés. Dans un premier temps, on verra l'impact du terme source sur la mécanique des fluides pour des valeurs de c_n fixées, puis il y aura un descriptif plus complet des modifications induites par les changements de ce paramètre sur la vitesse et la porosité sur les cellules colmatées. Finalement on observera l'impact du coefficient c_n sur le temps final de la simulation.

Dans la suite, TrioCFD sera lancé seul jusqu'à atteindre un état stationnaire à $t = 0, 12$, le calcul sera arrêté et le couplage sera lancé à partir de l'option reprise de TRUST, à ce temps. Les variables de TrioCFD agissant sur celles de Scorpio et celles de Scorpio sur TrioCFD, les effets d'instabilités sont amplifiés par l'échange. Attendre l'état stationnaire de la thermohydraulique limite ainsi la divergence des deux systèmes. Si l'état stationnaire n'est pas atteint et que les variables sont échangées, les fortes variations de vitesses vont impacter la chimie qui a son tour va produire une porosité inadaptée à la situation. Cette porosité va affecter la vitesse de TrioCFD et ce mécanisme va continuer de s'amplifier. Cette méthodologie permet de corriger les effets causés par la différence entre les temps caractéristiques de la thermohydraulique et du transport réactif.

Impact du terme de frottement singulier sur la thermohydraulique

Dans les résultats présentés le coefficient c_n prendra trois valeurs distinctes, $c_n = 0$, $c_n = 36$, et $c_n = 70$. Le cas $c_n = 0$ impose un frottement singulier nul, c'est le cas initial sans frottement. Le temps final des simulations sera fixé à 0,1248s qui est le temps maximal du cas sans terme source.

Lorsque le terme source n'est pas ajouté, la vitesse augmente avec la porosité jusqu'à atteindre $37m.s^{-1}$ sur les zones colmatées. Avec l'ajout du frottement singulier, la vitesse diminue sur les parties colmatées et finit par être nulle. La taille de la zone où la vitesse diminue croît quand la valeur du paramètre c_n augmente. En même temps, la vitesse évaluée à l'embouchure des deux parties solides augmente. Ces résultats correspondent aux attentes que l'on a de l'impact du colmatage sur la vélocité. Quand la porosité diminue, la proportion de solide dans la cellule augmente et le passage de l'eau se fait plus difficile. L'eau traversant les zones colmatées est déviée vers le centre et le débit augmente sur cette zone. Dans les simulations, l'augmentation du débit se lit sur les valeurs de vitesses. La norme de la vitesse à $t = 0.1248$ pour les différents K_n est illustrée sur la figure 3.5. La couleur noire sur le premier graphique indique que les valeurs dépassent l'échelle fixée.

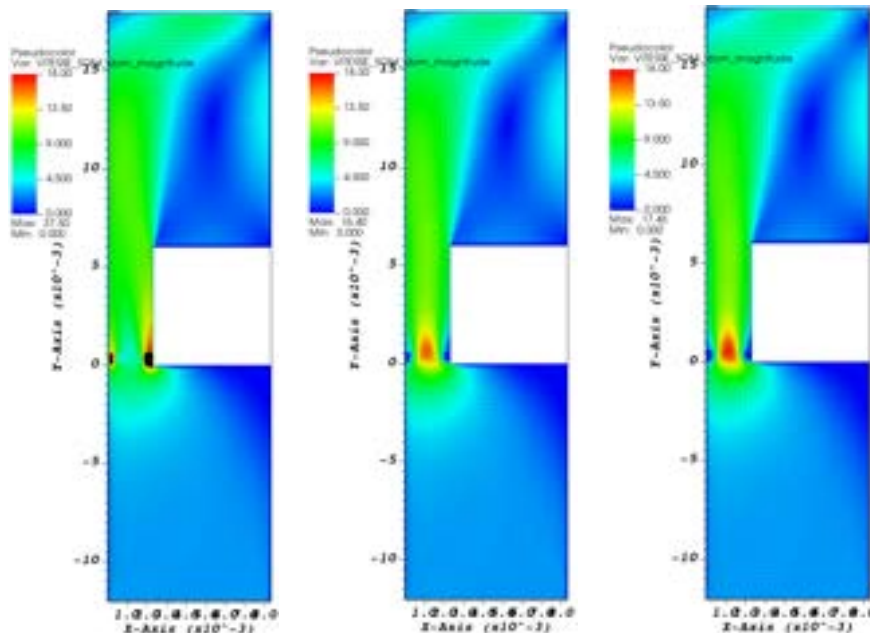


FIGURE 3.5 – Vitesse à $t = 0, 1248$ pour $c_n = 0, 36, 70$ (croissant de gauche à droite)

La simulation initiale montre que la pression obtenue lors de la simulation sans terme source n'est pas stable. Les valeurs oscillent sur la zone colmatée et les sauts de pression entre deux cellules voisines peuvent atteindre 2 bars. Le phénomène de perte de charge n'est pas visible et la pression est relativement constante hors des parties poreuses. Après l'ajout du terme de frottement singulier, la pression sur la zone poreuse devient stable et le phénomène de perte de charge est visible. Le domaine se découpe en deux parties avec une zone de transition. La pression est bien plus élevée sur la partie basse car le fluide présent sur le haut du domaine a perdu de l'énergie par frottement sur les parois et sur le dépôt.

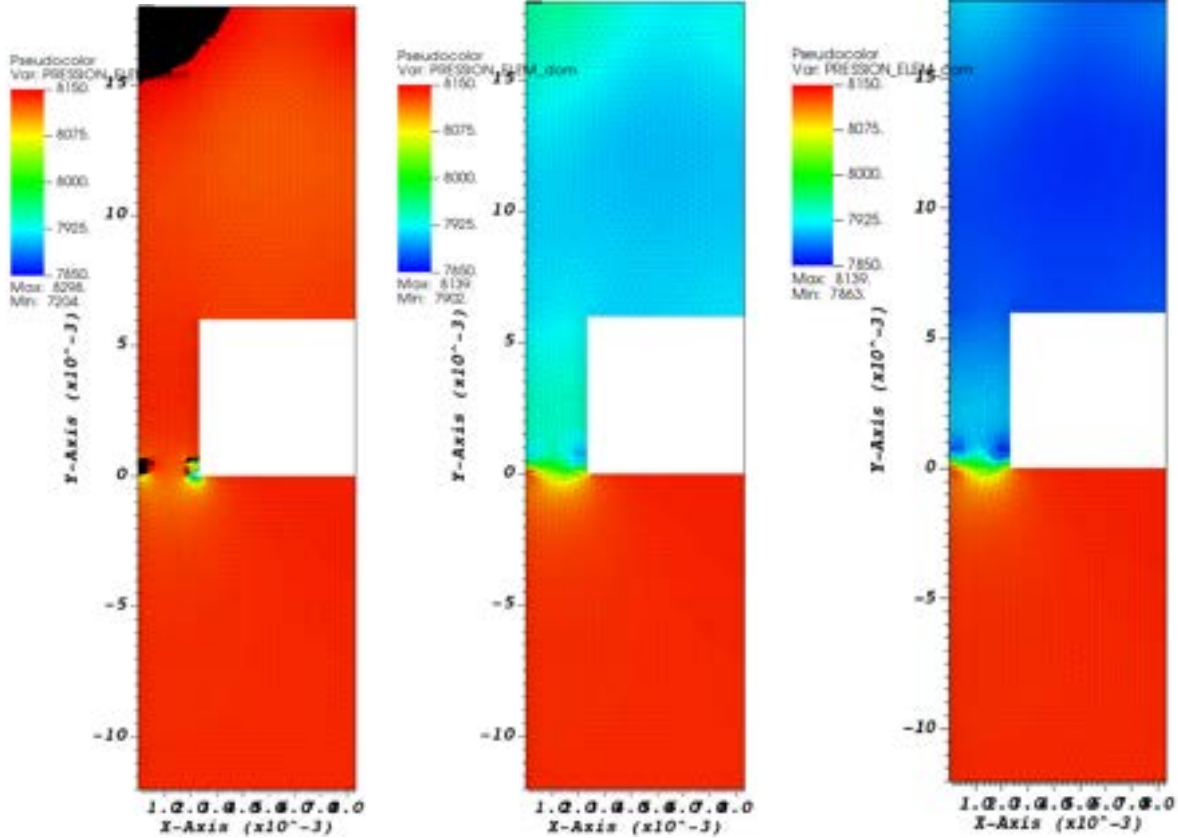


FIGURE 3.6 – Pression à $t = 0.1248$ pour $c_n = 0, 36, 70$ (c_n croissant de gauche à droite)

L'ajout du terme de frottement singulier corrige les instabilités numériques et les phénomènes physiques attendus sont observables. La valeur du paramètre c_n impacte fortement les variables du système. Pour l'instant c_n est un paramètre utilisateur.

Changement dû au coefficient c_n

On va maintenant observer l'impact du coefficient c_n sur la porosité et la vitesse prises au centre des cellules SCORPIO où la porosité est minimale. Dans la figure 2.9, les deux cellules sur la deuxième ligne, sont les cellules où la magnétite se dépose le plus. Elles sont à l'entrée du passage d'eau dans les plaques entretoises. Les variables seront mesurées sur le centre de ces cellules. Les deux variables qui nous intéressent sont la porosité et la vitesse du fluide.

La porosité est quasiment linéaire en fonction du temps et dépend du coefficient c_n , les résultats sont illustrés dans la figure 3.7. Une augmentation du paramètre c_n augmente le coefficient directeur de la courbe de porosité.

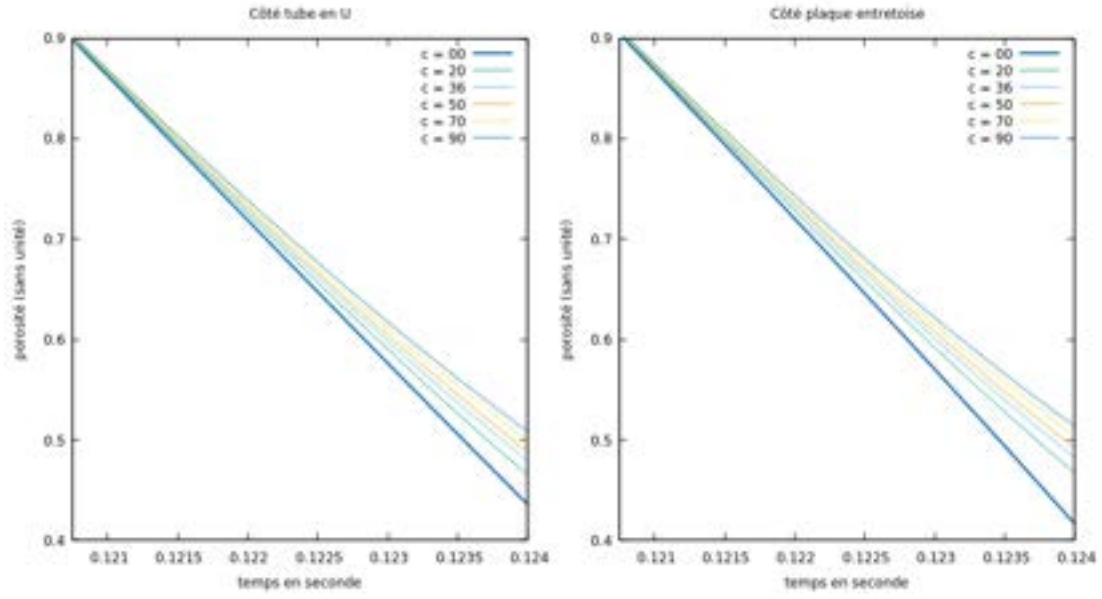
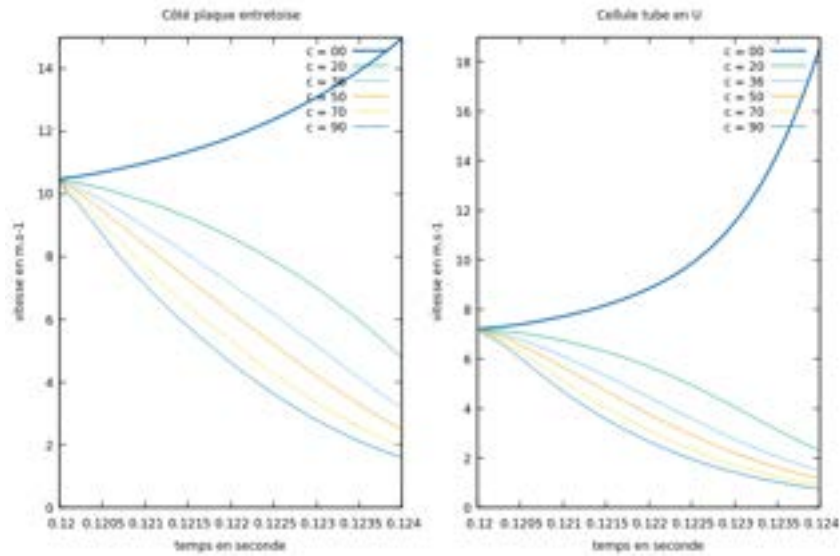


FIGURE 3.7 – Porosité en fonction du temps au centre des deux premières cellules colmatées

La vitesse vérifie le même rapport au paramètre c_n que la porosité. Plus ce paramètre augmente plus la vitesse diminue rapidement sur les cellules colmatées. Ces résultats sont visibles sur la figure 3.8. L'ajout du terme de frottement singulier modifie la croissance de la vitesse. Sur la figure, pour $c_n = 0$, la vitesse est croissante mais après l'ajout du terme source, elle perd cette propriété et devient décroissante.

Les courbes de vitesse en y présentent une symétrie par rapport à la courbe définie pour $c_n = 50$. Pour une valeur de ce paramètre inférieur à 50, la dérivée seconde de la vitesse est négative, et la dérivée première est décroissante tandis que pour $c_n > 50$, la dérivée seconde est positive et la dérivée de la vitesse est croissante. Un prolongement de ces courbes aurait probablement une intersection pour un temps plus grand. On peut s'attendre à ce que cette intersection ait lieu quand la vitesse en y vaut 0 puisque sur les figures 3.5 les vitesses s'annulent sur une partie de la zone colmatée. Cependant les simulations s'arrêtent avant d'atteindre un temps suffisamment grand pour l'observer.


 FIGURE 3.8 – Vitesse selon y en fonction du temps au centre des deux premières cellules colmatées

Le paramètre c_n agit de manière continue et croissante, dans le sens où l'augmentation de ce paramètre amplifie l'effet attendu. Cependant ces changements peuvent modifier le comportement de la dérivée première et seconde d'une fonction non linéaire, comme ici la vitesse. Le nombre d'itérations pour atteindre le temps final est très petit, environ 12000 pas, il n'est pas possible d'affirmer que ces propriétés soient vraies dans des temps plus longs, mais on verra dans le paragraphe suivant que la valeur de c_n impacte le temps final atteignable.

Temps maximal de la simulation

Les temps finaux des simulations sont fixés à 0,13 secondes. Le temps final fixé est trop élevé pour être atteint par un des essais, il permettra d'observer le temps d'arrêt de chaque simulation. L'arrêt est provoqué par un pas de temps inférieur à $10^{-12}s$.

La valeur du paramètre c_n modifie le temps maximal du calcul. Lorsque le paramètre augmente, le temps maximal aussi. L'hypothèse initiale sur l'arrêt des simulations était une mauvaise gestion de la porosité par le modèle. Les résultats obtenus permettent d'écarter cette hypothèse car la valeur de la porosité au temps final n'est pas constante et l'écart de porosité entre le cas initial, $c_n = 0$, et le cas $c_n = 20$, est trop importante pour que la porosité soit la raison de l'arrêt sur les deux simulations. Sur la figure 3.9, la porosité minimale atteinte au temps maximal en fonction de c_n augmente avec le paramètre. Une porosité trop faible n'est donc pas la raison directe de la chute des valeurs de pas de temps. Sur le graphique de droite, la porosité est relevée sur les deux premières cellules colmatées.

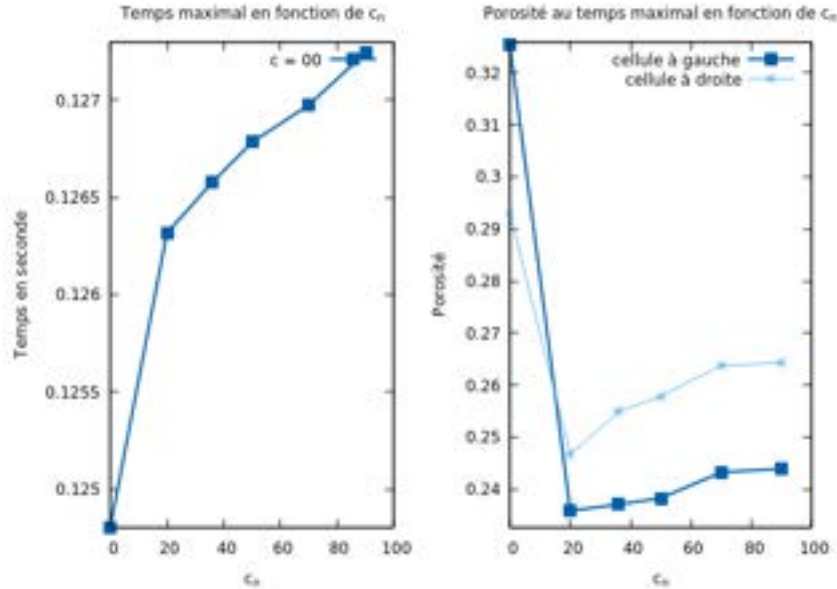


FIGURE 3.9 – Temps maximal de TrioCFD et porosité au temps maximal en fonction de c_n

3.2.4 Utilisation du terme de frottement singulier

Le terme de frottement singulier corrige les erreurs obtenues pendant la résolution des équations de la mécanique des fluides. L'utilisation du paramètre c_n permet d'amplifier l'effet obtenu tout en augmentant le temps maximal de la simulation. Cependant son utilisation ralentit la chimie. Les lois cinétiques utilisées dans ce cas test sont fictives mais la modification de la chimie par le terme de frottement singulier sera à prendre compte dans un cas test plus complexe s'il est possible d'évaluer les quantités de matière au cours du temps. Un paramètre c_n trop élevé pourrait modifier les résultats des simulations. Dans la suite, on utilisera $c_n = 50$ pour avoir l'effet recherché sur la mécanique des fluides, sans avoir un ralentissement trop important de la formation de magnétite.

3.3 Mise en place d'une condition d'échange

Dans le couplage initial, l'échange des champs de SCORPIO et TrioCFD se faisait à chaque itération. Pour effectuer ces échanges, les pas de temps sont synchronisés. Ils sont communiqués entre les problèmes et le pas de temps conservé, pour le calcul de l'itération suivante, est le minimum des deux. Après la synchronisation des pas de temps, les 9 étapes, détaillées au début du chapitre, sont effectuées. Durant ces étapes, les champs échangés sont copiés (depuis le champ classique dans le champ MEDDoubleField) puis échangés et enfin interpolés. L'échange impose donc à chaque itération une copie, une communication et un produit matriciel en plus de la résolution des équations sur chaque problème. L'échange représente 20% du temps de calcul total. Le coût de l'échange à chaque itération est important.

Les fortes variations de vitesse et de température modifient la chimie du milieu et le calcul de la formation du dépôt. Les changements obtenus sur le colmatage impactent à leur tour l'écoulement du fluide. Les variations de vitesse vont alors s'amplifier à travers la chimie. C'est pour cette raison que les simulations précédentes, illustrant l'impact du terme de frottement singulier, étaient lancées depuis un état stationnaire de la thermohydraulique.

La solution proposée, pour réduire le temps de calcul, est d'imposer une condition d'échange. Pour cela, j'ai implémenté durant le stage une classe, «Condition envoi», qui contrôle l'état des champs et vérifie si les conditions d'envoi sont vérifiées. Elle possède comme donnée membre deux tableaux, une norme $\| \cdot \|$ sur les tableaux et un ϵ pour la norme. La condition d'envoi est validée si pour deux tableaux, T_1 et T_2 , $\|T_1 - T_2\| \leq \epsilon$. Une fois que toutes les conditions d'échange sont validées, l'échange est lancé. Dans notre cas, la norme choisie est la norme ∞ . Les tableaux contiennent les valeurs des champs de vitesse à deux temps différents. Il n'y a qu'une seule condition d'envoi, donc l'échange se fait dès que la vitesse à un temps t_n , V_n , et la vitesse à un temps t_{n+k} , V_{n+k} , vérifie $\|V_n - V_{n+k}\|_\infty \leq \epsilon$. Le paragraphe suivant va expliquer comment se déroule le couplage avec la condition d'envoi.

A chaque itération, les problèmes sont lancés séparément avec un pas de temps propre. L'élément de la classe «Condition envoi» effectue une copie des valeurs du champ de vitesse dans un des deux tableaux. Après un nombre d'itérations choisie, le nouveau champ de vitesse est copié dans le second tableau. L'élément de la classe «Condition envoi» calcule alors la distance entre les deux tableaux à partir de la norme infini. Si la condition sur la vitesse est vérifiée, une fonction lance les problèmes individuellement jusqu'à ce que leurs temps propres soient égaux. Après que les problèmes sont resynchronisés, l'échange des champs peut avoir lieu.

Cette solution a pour avantage de réduire le nombre d'échanges. L'échange se produira au minimum toutes les deux itérations (une itération pour vérifier la condition d'envoi puis une itération pour synchroniser les problèmes). L'utilisation d'une condition d'envoi permet d'attendre un état presque stationnaire des systèmes de chaque problème avant l'échange. La copie des valeurs des champs dans des tableaux réduit la taille des éléments à copier à chaque itération mais augmente le coût en mémoire. Les deux tableaux sont alloués jusqu'à la fin de la simulation.

Pour illustrer l'intérêt de la condition d'envoi, deux aspects des résultats seront présentés. La première présentera les temps de calcul obtenus et le nombre d'échanges effectué en fonction de ϵ . La seconde partie présentera l'écart obtenu entre les résultats des différentes simulations en modifiant ϵ . L'échange sera lancé après que les variables de la thermohydraulique ait atteint un état stationnaire. L'état stationnaire est atteint à 0.12s. Le temps final de la simulation est 0.125, le paramètre c_n sera fixé à 50. Les résultats obtenus concernant le temps de calcul et l'écart entre les simulations nous permettront d'estimer une valeur de ϵ optimale.

L'échange s'effectue si la distance en norme infinie entre la vitesse au temps t_n et t_{n+1} est inférieure à ϵ . La première norme calculée, après que l'état stationnaire soit atteint, est de l'ordre de 10^{-9} . Le paramètre ϵ sera fixée au minimum à 10^{-5} , la première itération initiera donc toujours un échange. Cela permet de nous assurer que la porosité n'est plus à 1 sur les cellules colmatées au début du couplage. La distance entre les deux vitesses à deux pas de temps consécutifs, après le second échange, est d'environ 5×10^{-3} . Cette distance diminue au cours du temps jusqu'au prochain échange.

3.3.1 Temps de calcul CPU

Les résultats obtenus montrent que le temps de calcul diminue quand ϵ diminue. Cette diminution s'explique par la chute du nombre d'échanges. Le nombre d'itérations est compris dans l'intervalle [15100, 15500]. Il dépend de ϵ mais les variations de cette quantité sont trop faibles pour être notable. La distance entre deux itérations après un échange étant de 5×10^{-3} , il n'y a pas différence entre deux simulations pour des valeurs de ϵ plus

grands que 5×10^{-3} . En dessous de cette valeur, le nombre d'itération diminue très rapidement jusqu'à atteindre deux échanges pour $\epsilon = 1 \times 10^{-4}$. Le temps de calcul est de 20 minutes pour $\epsilon \geq 5 \times 10^{-3}$ et descend à 18 minutes quand il n'y a que deux échanges. Un nombre d'échanges trop faible diminue la précision des calculs. Ici deux échanges sur une simulation complète semble trop peu pour que les résultats restent cohérents. L'augmentation du temps de calcul dû à l'échange est au maximum de 18% du temps total. Le temps initial du calcul avec un échange à chaque itération est de 22 minutes. Ce temps est le temps de référence dans le graphique 3.10.

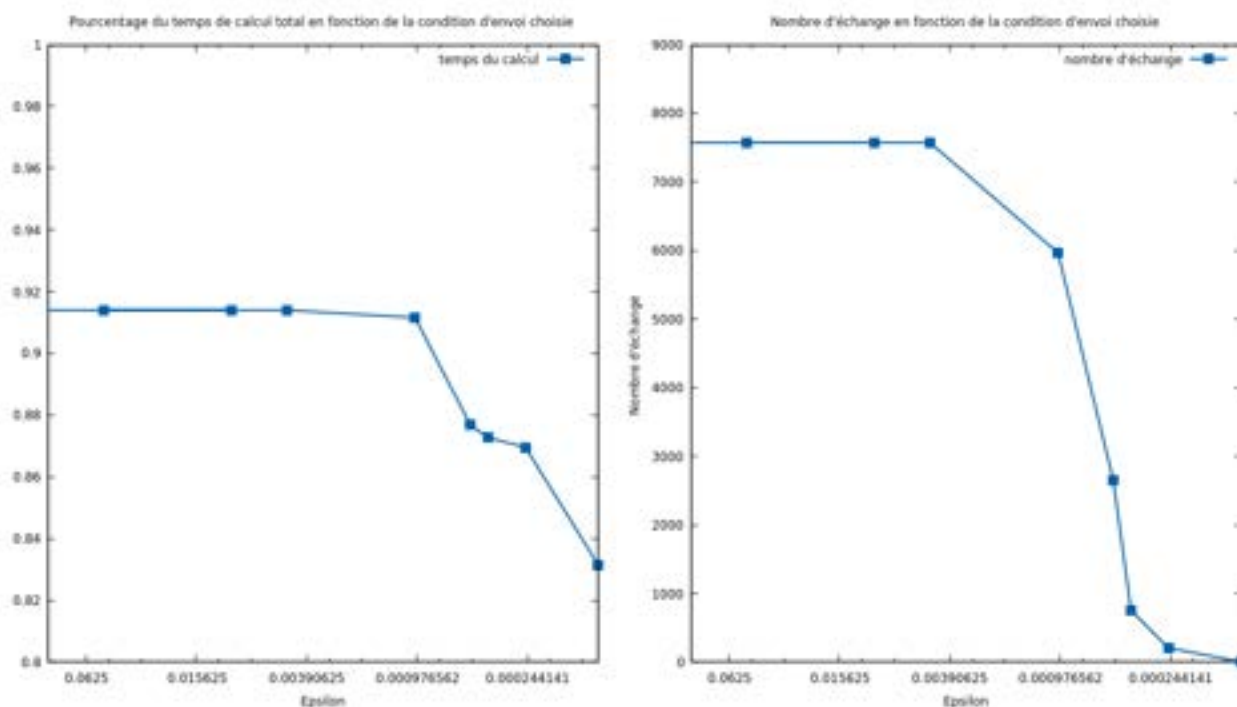


FIGURE 3.10 – Pourcentage du temps de calcul total et nombre d'itérations en fonction de ϵ

3.4 Problème Thermique

Le générateur de vapeur est le lieu de transmission de la chaleur du circuit primaire au circuit secondaire. Le colmatage des plaques entretoises modifie cet échange. La modélisation de la thermohydraulique doit donc prendre en compte les variations de température dues au précipité. Dans le cas test étudié durant le stage, la paroi à droite en contact avec le tube est chauffée à 500K et la partie à gauche en contact avec la plaque entretoise est à 450,35K. On devrait observer, sur les simulations, des températures de l'ordre de ces valeurs. Dans les tests effectués, la température descend à des valeurs très faibles sur les cellules à l'arrière de la zone colmatée. De plus la température, où le dépôt se forme, croît rapidement et la chaleur s'échange avec les cellules voisines. Il y a un problème sur l'échelle de la température qui peut dépasser les 1000 degrés sur le dépôt. Dans ces conditions, les tables de l'eau permettent d'affirmer que l'écoulement est diphasique tandis que les modèles sont prévus pour un écoulement monophasique.

La chute de température est diminuée par le coefficient terme de frottement singulier. Les résultats sont illustrés sur la figure 3.12. Cette diminution est plus importante quand les simulations utilisent le terme de frottement singulier et dépend du coefficient c_n .

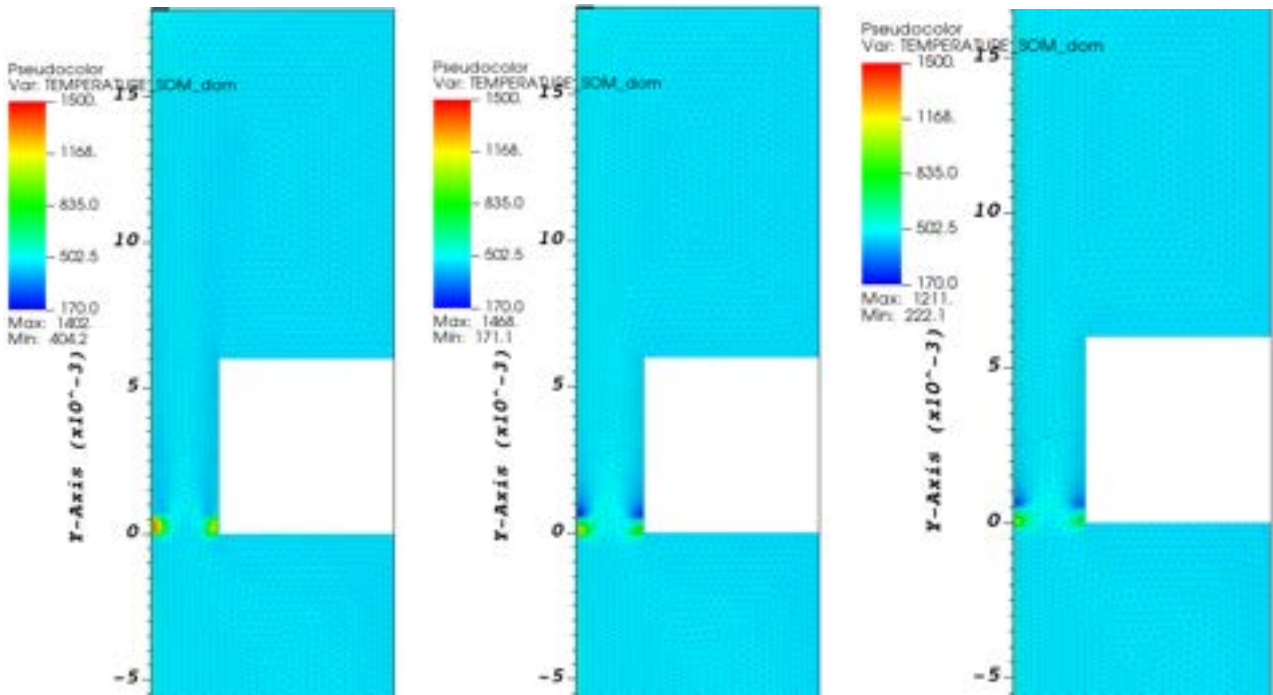


FIGURE 3.11 – Température à $t = 0.1248$ pour $c_n = 0, 36, 70$ (c_n croissant de gauche à droite)

Quand le paramètre c_n est positif, la vitesse du fluide devient très faible derrière la zone colmatée. Les termes dépendant de la vitesse, dans l'équation de conservation de l'énergie, prennent des valeurs proches de zéro. Dans le cas initial, la vitesse augmente sur ces zones, l'impact de ces termes sur le calcul de la température est donc à l'opposé du cas avec le terme de frottement. C'est une des raisons qui explique les différences de valeurs de la température entre les cas.

L'équation de conservation de l'énergie est moyennée sur le domaine en fonction de la porosité. Le transfert de chaleur est calculé pour représenter les échanges dans le fluide. Dans notre cas test, les conditions imposées sur les parois sont de type Dirichlet. Ce type de condition évite l'utilisation d'une loi de transfert thermique du circuit primaire au circuit secondaire. Cette représentation de la thermodynamique ne prend pas en compte les transferts de chaleur à travers le dépôt et la résistance totale des matériaux sur les parois.

3.4.1 Construction d'un second terme source

Construction du terme source

Pour que le modèle puisse prendre en compte le dépôt dans les échanges de chaleur, on se propose d'ajouter une résistance d'encrassement dans le calcul du flux thermique. La prise en compte de la résistance d'encrassement est faite par le terme de flux de chaleur, q , de l'équation de conservation de l'énergie. Ce coefficient permet de renseigner les échanges de chaleur à travers la magnétite. Dans TrioCFD, le flux de chaleur est calculé grâce à l'équation de la chaleur. Il s'écrit :

$$q = -\lambda \nabla T,$$

où λ est la conductivité du fluide, et T est la température. À travers un solide cette expression est modifiée pour prendre en compte la résistance thermique du matériau. Si R_s est la résistance thermique du solide, alors le terme q s'écrit en fonction de la température des deux côtés du solide :

$$q = -\frac{\Delta T}{R_s},$$

avec ΔT , la différence de températures entre les deux cotés du solide et e son épaisseur. Cette loi s'applique à des solides isothermes. On fait l'hypothèse que la température du dépôt de magnétite dans une cellule est homogène.

La résistance thermique et la conductivité thermique peuvent être reliées par la loi $R_s = \frac{e}{\lambda}$, où e est l'épaisseur du matériau. Cette relation permet d'utiliser une unique expression pour écrire le transfert thermique, qu'il soit solide ou liquide.

La résistance thermique d'un milieu composite s'écrit comme la somme des résistances thermiques des matériaux qui constituent ce milieu. Dans une cellule composée d'eau et de magnétite, on peut écrire la résistance thermique de la cellule $R_{cellule} = R_{eau} + R_{magnetite}$. Si la cellule est contre une paroi alors la résistance thermique de la cellule doit prendre en compte un terme de plus qui est la résistance de la paroi. Dans une cellule de porosité β et d'épaisseur e , on peut supposer que l'épaisseur de magnétite dans la cellule s'écrit $(1 - \beta)e$ et donc que la résistance thermique de la magnétite est $R_m = \frac{(1 - \beta)e}{\lambda_m}$.

On souhaiterait obtenir une modification du transfert de chaleur sous la forme d'un terme source pour ne pas modifier l'équation initiale. Ce terme source devra s'annuler quand la porosité est à 1 pour ne pas modifier le comportement des écoulements dans des milieux non poreux. Pour obtenir ce terme, q va être réexprimé comme la somme du terme calculé par TrioCFD et d'un second terme qui sera le terme source. Dans TrioCFD, le calcul du flux de chaleur se fait comme si le milieu était homogène, composé uniquement d'eau, et vaut $-\lambda_e \nabla T$, où λ_e est la conductivité thermique de l'eau.

On calcule ici le transfert thermique à travers une cellule d'épaisseur e qui n'est pas contre une paroi. En considérant que la résistance thermique sur la cellule est la somme des résistances et en utilisant la relation reliant la résistance thermique et la conductivité des matériaux, on peut écrire la résistance thermique moyenne sur la cellule :

$$R_{cell} = R_m + R_e = \frac{e(1-\beta)}{\lambda_m} + \frac{e\beta}{\lambda_e},$$

où R_{cell} est la résistance thermique de la cellule. Si on cherche à exprimer la conductivité moyenne dans un milieu composite, plusieurs lois existent. Ici on utilisera la loi en parallèle pour que la résistance thermique de la cellule et la conductivité thermique moyenne de la cellule vérifient la relation décrite précédemment. La loi reliant la conductivité et la résistance thermique permet d'écrire :

$$\lambda_{cell} = \frac{e}{R_{cell}} = \frac{1}{\frac{1-\beta}{\lambda_m} + \frac{\beta}{\lambda_e}}$$

La loi en parallèle permet de calculer le terme source en utilisant indépendamment les conductivités ou les résistances thermiques. On obtient ainsi le calcul suivant :

$$q = -\lambda_{cell} \nabla T \quad (3.2)$$

$$= -\frac{e \nabla T}{R_e + R_m} \quad (3.3)$$

$$= -\frac{e \nabla T}{R_e} + \frac{e R_m \nabla T}{R_e (R_e + R_m)} \quad (3.4)$$

$$= -\frac{\lambda_e \nabla T}{\beta} + \frac{e R_m \nabla T}{R_e (R_e + R_m)} \quad (3.5)$$

$$= -\lambda_e \nabla T - \lambda_e \frac{1 - \beta}{\beta} \nabla T + \frac{e R_m \nabla T}{R_e (R_e + R_m)} \quad (3.6)$$

où R_e et R_m sont respectivement les résistances thermiques de l'eau et de la magnétite. Le premier terme du calcul correspond au flux de chaleur calculé dans la résolution des équations de TrioCFD. La somme des deux autres termes que l'on va noter q_{encr} correspond au terme source qui va être utilisé.

Le terme source d'encrassement en milieu composite a finalement pour expression :

$$q_{encr} = \left[\frac{1}{\lambda_m \left(\frac{\beta}{\lambda_e} + \frac{1-\beta}{\lambda_m} \right)} - 1 \right] \times \frac{(1-\beta)\lambda_e}{\beta} \times \nabla T.$$

Si la cellule est contre une paroi, la résistance thermique de la paroi est à prendre en compte et le terme source s'écrit :

$$q_{encr} = \left[\frac{(1-\beta)}{\lambda_m} \times \frac{1}{\frac{\beta}{\lambda_e} + \frac{R_p}{e}} \times \frac{1}{\left(\frac{R_p}{e} + \frac{\beta}{\lambda_e} + \frac{1-\beta}{\lambda_m} \right)} - \lambda_e \frac{1-\beta}{\beta} \right] \nabla T,$$

avec R_p la résistance thermique de paroi. Dans ces expressions du terme source, le terme s'annule quand la porosité est de 1. Il n'y a donc aucune modification du transfert de chaleur pour un milieu non poreux. Ce calcul montre que le transfert de chaleur est modifié seulement sur les cellules contre les parois si les différentes conductivités sont égales.

Discretisation du terme source

Selon le schéma VEF de TrioCFD, la température est calculée sur les arêtes mais le gradient de température est calculé sur les cellules. L'équation de conservation de l'énergie a pour terme la divergence du flux de chaleur. Après intégration sur la cellule Ω , le théorème de Stokes permet de réécrire le terme dépendant du flux de chaleur de la façon suivante :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \nabla T d\mu = \int_{\partial\Omega} n \cdot \nabla T d\lambda,$$

avec n le vecteur normal à la surface. Il existe, dans TrioCFD, une fonction qui permet de calculer une approximation de l'intégrale du produit scalaire du gradient d'un champ, sur les bords d'une cellule, avec la normale. A partir de cette fonction, la formulation numérique du terme source sur les cellules est :

$$\int_{\Omega} q_{encr} d\mu \approx \left[\frac{1}{\lambda_m \left(\frac{\beta}{\lambda_e} + \frac{1-\beta}{\lambda_m} \right)} - 1 \right] \times \frac{(1-\beta)\lambda_e}{\beta} \times \nabla T_{Trio}.$$

où ∇_{Trio} est l'opérateur dans TrioCFD qui calcul l'intégrale du gradient.

Le scalaire obtenu est évalué sur une cellule et la température est définie sur les arêtes. Pour interpoler le terme source d'encrassement sur les arêtes, il faut calculer la moyenne des termes sources d'encrassement sur les cellules adjacentes. Si l'arête est sur le bord, elle n'a qu'une seule cellule adjacente et donc la moyenne est égale à la valeur du terme source sur cette cellule.

3.4.2 Résultat numérique

Le terme source d'encrassement peut être utilisé dans deux situations. Premièrement la conductivité du dépôt est inférieure à celle de l'eau. Dans ce cas les échanges thermiques dans les cellules colmatées doivent être réduits. Ainsi les cellules en contact avec la paroi recevront un flux de chaleur réduit par rapport au cas initial et les pics de température seront moins importants que si la conductivité est supérieure à celle de l'eau. Cependant la température n'augmentera pas sur la zone à l'arrière des cellules colmatées. Si la conductivité du dépôt est supérieure à celle de l'eau, alors les flux de chaleur auront des valeurs importantes et les cellules colmatées échangeront plus de chaleur avec les cellules adjacentes. L'effet principal attendu est l'augmentation de la température moyenne sur l'arrière des zones colmatées. Dans le cas test, le dépôt est composé de magnétite solide. La magnétite a une conductivité plus importante que l'eau.

Deux cas tests seront étudiés. Le premier aura un dépôt avec une conductivité plus élevée. Le second permettra de tester le cas où la conductivité est plus faible et où le dépôt est résistant aux échanges de chaleur. Certaines cellules du maillage sont contre les parois. Pour illustrer l'impact de la résistance de paroi sur le transfert de chaleur, on imposera une résistance thermique de $120 \text{ mK.m}^2.\text{W}^{-1}$ sur les deux parois du domaines. La conductivité de l'eau est de $72 \text{ W.mK}^{-1}.\text{m}^{-1}$ et la conductivité du dépôt sera fixé à $5 \text{ W.mK}^{-1}.\text{m}^{-1}$, cas d'un dépôt résistant, puis $200 \text{ W.mK}^{-1}.\text{m}^{-1}$, cas d'un dépôt laissant passer la chaleur. Ces valeurs sont arbitraires et servent ici à illustrer l'utilisation du terme source d'encrassement.

Les résultats obtenus avec l'utilisation du terme source sont cohérents physiquement. Dans la figure 3.13, la température des 3 cas est illustrée à $t = 0,1248$. On peut voir que la température moyenne augmente quand la conductivité du dépôt est plus élevée que celle de l'eau. A l'inverse la température diminue avec la conductivité. La température maximale sur la zone colmatée augmente ce qui pourrait expliquer l'augmentation de la température moyenne. Le transfert d'énergie étant modifié par la vitesse de l'écoulement, l'augmentation de la température sur la partie du domaine où la vitesse est maximale améliore l'échange de chaleur entre les cellules.

Cependant le cas où le dépôt est résistant montre que pour la même vitesse et une température du dépôt presque identique, la température sur les parois est bien moins élevée (environ 30 Kelvin). Puisque la principale source de température du domaine est l'échange de chaleur avec le circuit primaire, cela implique que le terme source influe sur l'échange de chaleur qui s'effectue sur les parois où la porosité est de 0.99. Ce serait donc la raison de la chute de température moyenne dans le cas où le dépôt a une conductivité plus faible que l'eau.

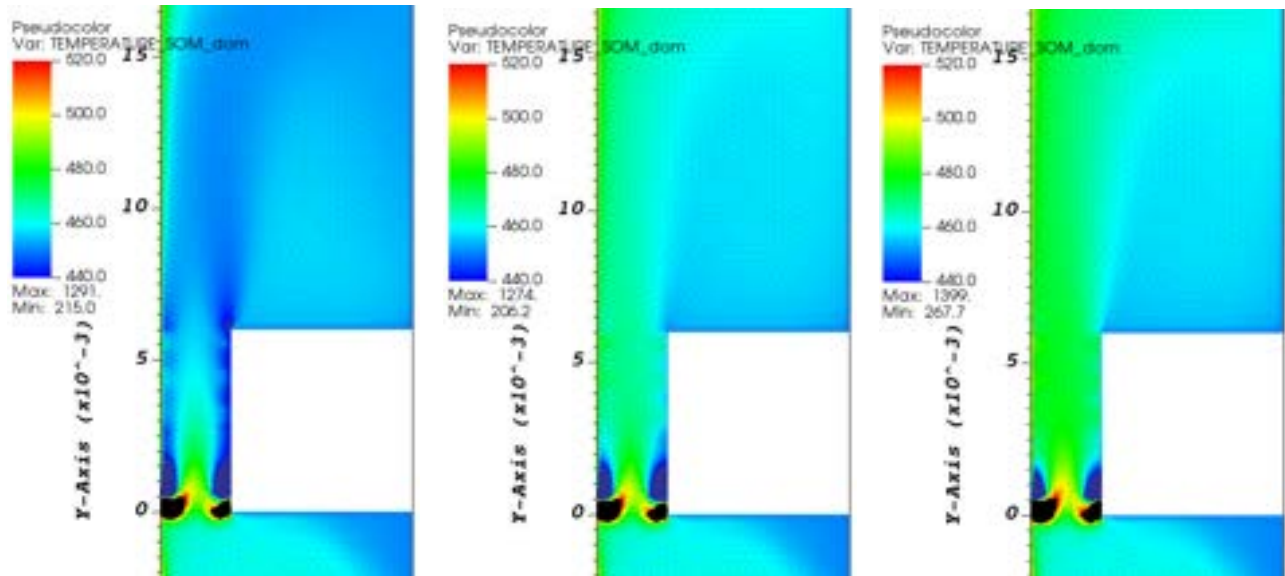


FIGURE 3.12 – Température à $t = 0.1248$ pour le cas d'un dépôt résistant, le cas sans terme source et le cas d'un dépôt ayant une plus grande conductivité

Le terme source modifie l'échange de chaleur sur les zones où la porosité n'est pas de 1. L'échange de chaleur est diminué quand la résistance thermique du dépôt augmente. Ces résultats correspondent aux attentes sur l'effet de ce terme. Mais ce terme ne corrige pas les fortes fluctuations de température. La température du dépôt augmente par rapport au cas initial quelque soit la résistance thermique. Le minimum, atteint sur les zones où la vitesse est nulle, est aussi supérieur à celui du cas sans terme source.

Sur la figure 3.14, les résultats présentent la température sur les deux cellules SCORPIO à l'arrière des zones colmatées. La température diminue continûment sur ces cellules. La vitesse chute sur les mêmes cellules, le terme convection a des valeurs très faibles et la chaleur ne peut pas être échangée.

Sur la cellule de droite, la température, pour $\lambda_m = 5.0$, est supérieure à la température calculée pour le cas sans terme source. Sur des temps plus longs, elle devient croissante à partir de $t = 0,1264$, juste avant l'arrêt de la simulation.

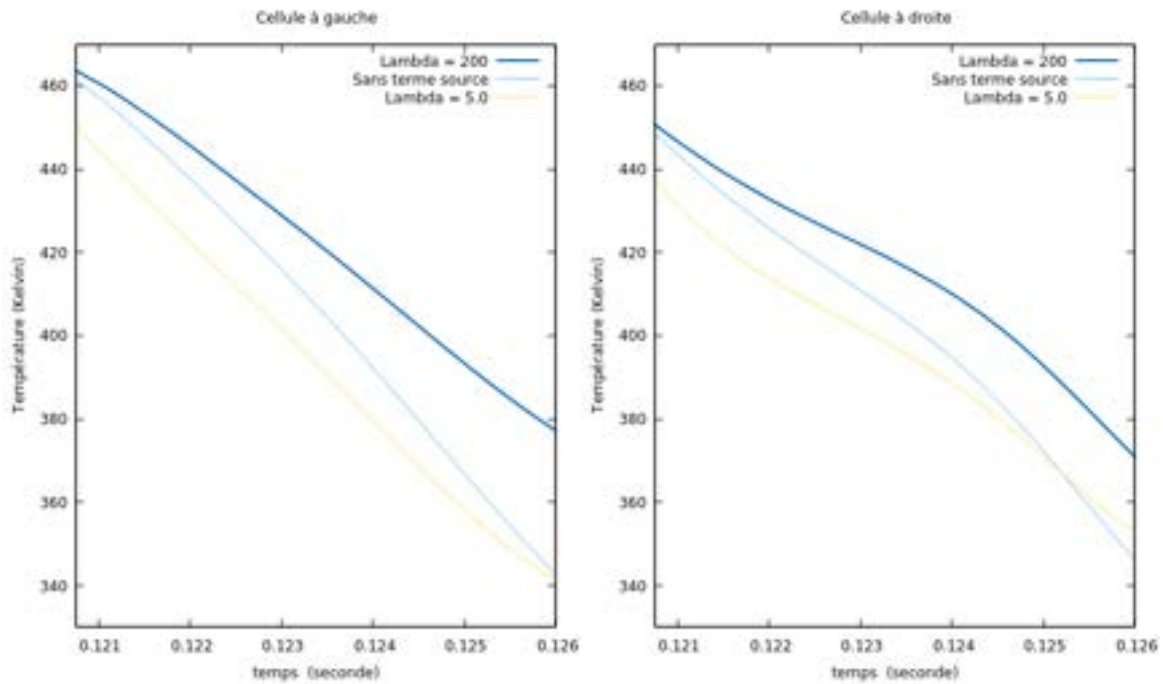


FIGURE 3.13 – Température en fonction du temps sur les deux premières cellules colmatées

Le terme source d'encrassement codé ne corrige pas les pics de températures et au contraire les augmente. Cependant, le terme permet de réajuster la température minimale et modifie la température en fonction des propriétés thermiques du précipité. Le comportement global de la température, illustré par la figure 3.13, est intéressant dans le cas du couplage. Il varie en fonction de la nature du colmatage et en utilisant les données adaptées à notre cas, il sera proche des attentes de l'impact du colmatage sur la thermodynamique dans le générateur de vapeur.

Chapitre 4

Conclusion

Ce stage a permis de mettre en place un échange complet et automatisé entre un code de thermohydraulique et un code de transport réactif. Le couplage des deux codes a présenté de nombreuses difficultés puisqu'il a fallu interpréter les résultats obtenus et dire s'ils pouvaient correspondre aux phénomènes physiques observés dans un générateur de vapeur. Les variables calculées par la thermohydraulique ne correspondaient pas à nos attentes. En ajoutant un terme de frottement poreux à l'équation de conservation de la quantité de mouvement, la vitesse et la pression ont pu être corrigées. L'ajout d'une résistance d'encrassement a permis de prendre en compte la résistance thermique du précipité dans les simulations, mais n'a pas corrigé les pics de températures présents sur le dépôt. Une condition d'envoi a été ajoutée pour limiter le nombre de communication et réduire le temps des calculs.

En conclusion, ce stage a permis de montrer la faisabilité d'un couplage automatisé et a aussi montré les problèmes qui pouvaient survenir. Une suite du travail de ce stage serait de réussir à avoir une température cohérente dans les parties colmatées. Pour cela, l'étude d'un cas d'écoulement dans un tube avec marche permettrait d'étudier le comportement de la température dans ce type de géométrie. Il sera alors possible d'utiliser ce couplage pour des conditions initiales plus proches de celle d'un générateur de vapeur et des réactions chimiques non fictives.

Table des figures

1.1	Répartition géographique des centres	4
1.2	Composition d'un réacteur à eau pressurisée	6
1.3	Schéma de la composition d'un générateur de vapeur [11]	7
1.4	Phénomènes physico-chimiques à l'origine du colmatage [16]	8
1.5	Photographie de dépôts d'encrassement dans un GV [4]	8
2.1	Exemple de cellule obstruée	10
2.2	TRUST plateforme et BALTIKs	16
2.3	Milieu dans le jeu de données	16
2.4	Schéma en temps dans le jeu de données	17
2.5	Déclaration des espèces chimiques dans le jeu de données SCORPIO	17
2.6	Déclaration des lois cinétiques dans le jeu de données SCORPIO	18
2.7	Schéma du domaine du GV simulé à gauche et maillage de ce domaine à droite	19
2.8	A gauche le maillage de SCORPIO seul, à droite le maillage de SCORPIO dans le domaine de TrioCFD	20
2.9	A gauche la porosité de SCORPIO, à droite la porosité reçue par TrioCFD	21
3.1	Vitesse de l'écoulement, à $t = 0.0048s$, sans couplage, avec couplage et porosité calculée pendant le couplage	23
3.2	Pression de l'écoulement, à $t = 0.0048s$ sans colmatage à gauche et avec colmatage à droite	24
3.3	Exemple de réunion de triangles dans un repère adapté	26
3.4	Terme source dans le jeu de données	27
3.5	Vitesse à $t = 0,1248$ pour $c_n = 0, 36, 70$ (croissant de gauche à droite)	28
3.6	Pression à $t = 0.1248$ pour $c_n = 0, 36, 70$ (c_n croissant de gauche à droite)	29
3.7	Porosité en fonction du temps au centre des deux premières cellules colmatées	30
3.8	Vitesse selon y en fonction du temps au centre des deux premières cellules colmatées	30
3.9	Temps maximal de TrioCFD et porosité au temps maximal en fonction de c_n	31
3.10	Pourcentage du temps de calcul total et nombre d'itérations en fonction de ϵ	33
3.11	Température à $t = 0.1248$ pour $c_n = 0, 36, 70$ (c_n croissant de gauche à droite)	34
3.12	Température à $t = 0.1248$ pour le cas d'un dépôt résistant, le cas sans terme source et le cas d'un dépôt ayant une plus grande conductivité	37
3.13	Température en fonction du temps sur les deux premières cellules colmatées	38

Bibliographie

- [1] Thomas Prusek, *Modélisation et simulation numérique du colmatage à l'échelle du sous-canal dans les générateurs de vapeur.*
- [2] Michel Laurent, Pierre-Louis Vuillermoz, *Conductivité thermique des solides.*
- [3] P.-Y. Lagrée, *Equation de la Chaleur.*
- [4] Thibaut Dupuy, *Modélisation des transferts thermiques dans les dépôts d'encrassement des générateurs de vapeur.*
- [5] G. Cohen De Lara, *Coefficient de perte de charge en milieu poreux basé sur l'équilibre hydrodynamique d'un massif.*
- [6] Sylvain Girard, *Diagnostic du colmatage des générateurs de vapeur à l'aide de modèles physiques et statistiques.*
- [7] M. Stéphane Veys, *Extension dans TRIO_U de la méthode des éléments joints aux problèmes thermohydrauliques et à différentes discrétisations.*
- [8] Elliott Tixier, *Modélisation par une approche milieu poreux de l'instabilité fluidélastique dans un faisceau de tubes soumis à un écoulement diphasique transverse*
- [9] Mathieu Niezgoda, *Approche composant pour le générateur de vapeur et description des modèles de fermeture et des corrélations de GENEPI +*
- [10] Antoine Cordoba, *Rapport de stage de fin d'études Mise en place d'un Couplage SCORPIO/GENEPI+*
- [11] Bassirou Gueye, *Automatisation du couplage thermohydraulique-transport réactif Scorpio-TrioCFD Application au colmatage du générateur de vapeur*
- [12] Nikos Leterrier, *Le module de résolution SCORPIO pour le transport réactif*
- [12] Dr Faïçal Nait Bouda, *Modélisation des écoulements turbulents*
- [13] Philippe Emonot, *Methodes de volumes éléments finis : application aux équations de Navier-Stokes et résultats de convergence*
- [14] TrioCFD Team, *USER DOCUMENTATION : Models Documentation TrioCFD*
- [15] Jean-Pierre Dedieu, *Points Fixes, Zéros et la méthode de Newton*
- [16] Guangze Yang *Investigations of the Tube Support Plate (TSP) clogging phenomenon in PWR steam generators - understanding and prioritization of its formation mechanisms*
- [17] <https://www.asn.fr/l-asn-informe/actualites/chute-d-un-generateur-de-vapeur-l-asn-a-diligente-une-inspection-immediate-a-paluel-76> *Chute d'un générateur de vapeur*