



Modélisation et simulation des fronts de fusion / solidification avec TrioCFD par une méthode VOF/Front-Tracking/IBC

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Soutenance de thèse

17 décembre 2021

Adrien Drouillet, CEA, IMB

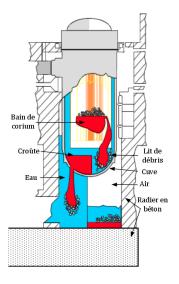


Contexte accident grave (AG)





Contexte accident grave (AG)



Définition AG

- Mauvaise évacuation de l'énergie thermique produite par le coeur.
- Formation de corium (liquide composé des éléments du coeur fondu) par dégradation du combustible.
- Propagation du corium en cuve, puis potentiellement dans le puits de cuve.

Stratégies de rétention en cuve (IVR)

Objectif: Contenir le corium en cuve.

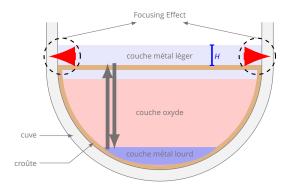
- ► Tenue mécanique de la cuve.
- Tenue thermique de la cuve.
- ⇒ Étude de la thermohydraulique du bain de corium et de la fonte de la cuve.



Physique du bain de corium

Principaux phénomènes

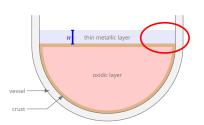
- Stratification du bain en plusieurs phases immiscibles et de propriétés différentes.
- Des phénomènes de convection dus aux forts gradients de température dans la partie oxyde.
- Des réactions chimiques, en particulier des réactions d'oxydation, qui jouent un rôle dans la stratification et le dégagement de chaleur.



Adrien Drouillet



Interface de fusion/solidification : la condition de Stefan



Condition de Stefan :

$$\mathbf{u}^{\Gamma} = u^{\Gamma} \mathbf{n}^{\Gamma} = \frac{1}{\rho^{\Gamma} \Delta \mathcal{H}^{\Gamma}} (\varphi_{l} - \varphi_{s}) \mathbf{n}^{\Gamma}.$$
 (1

Avec les flux thermiques :

$$\varphi_k = \varphi_k \cdot \mathbf{n}^{\Gamma}, \tag{2}$$

$$\varphi_{\mathbf{k}} = -\lambda_k \, \vec{\nabla T}_k, \tag{3}$$

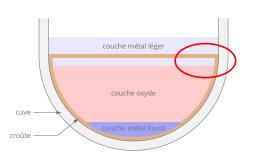
- ▶ Interface entre acier liquide et acier solide → interface entre matériaux homogène,
- ► Front de fusion/solidification considéré à l'équilibre thermodynamique → solide formé à température de solidification,
- ightharpoonup On ne considère pas de zone de mélange diffuse ightarrow interface raide.

Problème de fusion/solidification entre un liquide chaud (acier liquide) et un solide froid (cuve).





Identification des interfaces de fusion / solidification: états d'interface



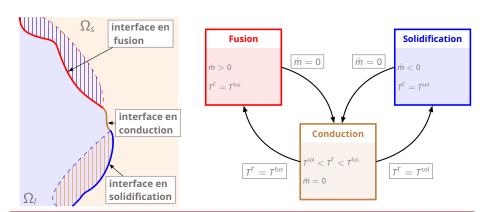
- 1. Front de fusion/solidification considéré à l'équilibre thermodynamique → solide formé à température de solidification,
- 2. On ne considère pas de zone de mélange diffuse \rightarrow interface raide,
- 3. Les variations de composition dues à la solidification sont négligées \rightarrow le solide qui se forme a la même composition que le liquide considéré comme homogène.

Ici, les propriétés physiques du liquide (acier fondu) et du solide (croûte oxyde) sont différentes. En particulier, la température de solidification du liquide peut être différente de la température de fusion du solide.

⇒ Notion d'états d'interface.



Notions d'états d'interface



Objectif de la thèse:

Proposer des outils numériques pour suivre ces interfaces de front de fusion/solidification.



Sommaire

- Contexte
- ▶ Modèle d'interface 2D lagrangien, couplage avec des modèles 0D
- ▶ Modèle d'interface VOF/FT dans un code de CFD
- ► Conclusions et perspectives
- ▶ Bibliographie



Modèle d'interface 2D lagrangien, couplage avec des modèles 0D



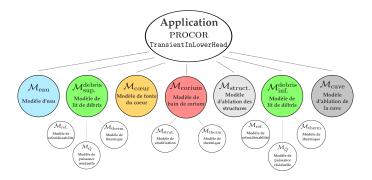
Présentation du code PROCOR

Contraintes imposées par le contexte AG

- Multi-physique et multi-échelle : neutronique, thermique, thermohydraulique, mécanique, chimique ...
- ▶ Très peu de données (Three Miles Island, Chernobyl, Fukushima Daiichi) et extraction de ces données compliquée.
- ▶ Expérimentation difficile : problème d'échelle, utilisation de produits radioactifs, très hautes températures ...

Conséquences sur PROCOR

- ▶ Programmation orientée objet, en Java : modularité, probabilité, évolution.
- ▶ Études statistiques de sensibilité : implémentation de modèles rapides (0D model)
- Architecture spécifique, pensée pour le couplage de modèles.





Équations considérées

Objectif : proposer un modèle de fusion/solidification selon la logique de partitionnement de la plateforme PROCOR.

Pour le solide (équation de la chaleur) :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + f,$$

Pour le liquide (Navier-Stokes + Boussinesq) :

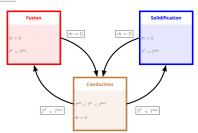
$$\begin{split} \nabla.\vec{v} &= 0, \\ \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v}.\nabla \vec{v} &= \frac{-1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \vec{v} - \mathcal{B}(T - T^{\text{ref}}) \vec{g}, \\ \rho C_{\rho} (\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla T) &= \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + f, \end{split}$$

Pour l'interface liquide-solide (condition de Stefan) :

$$\vec{u} = u \, \vec{n}^{\Gamma} = \frac{1}{\rho^{\Gamma} \Delta \mathcal{H}^{\Gamma}} (\varphi_{I} - \varphi_{s}) \, \vec{n}^{\Gamma}$$

Où Γ sert à différencier les paramètres de fusion et de solidification.

Paramètres de fusion/solidification déduit de la composition du liquide et du solide.





Modèle d'interface 0D

Condition d'interface OD :

$$\dot{m} = rac{mes(\Gamma)}{\Delta H_{fus}} (\overline{arphi}_{l}^{ls}(t) - \overline{arphi}_{s}^{ls}(t))$$

Équation 0D du solide :

$$\frac{\partial m_s}{\partial t} = -\dot{m} \text{ et } C_s(m_s \frac{d\overline{T}_s}{dt} + \dot{m}(T_{\Gamma} - \overline{T}_s)) = -\overline{\varphi}_s^i \times mes(\delta\Omega_s \setminus \Gamma) + \overline{\varphi}_s^{ls,i} \times mes(\Gamma)$$

Ce sont principalement des équations bilans. Deux variables suivies : la température moyenne du solide et la masse du solide. Deux hypothèses nécessaires pour fermer le modèle : une sur la géométrie du solide et l'autre sur le profil de température.

Première hypothèse : 1D slab solid

simplification. Le solide est considéré rectangulaire et les échanges thermiques et de masses ne se font qu'au travers des bords droite et gauche.

Deuxième hypothèse : Un profil de température quadratique est considéré. Ce profil est choisi d'après une étude sur plusieurs possibilités. Ce profil correspond à la solution stationnaire.





Modèle d'interface 2D

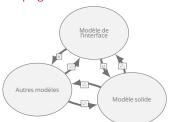
Équations considérés:

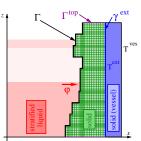
$$\rho_s C_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \lambda_s \Delta T_s + \mathcal{Q}_s \ \forall x \in \Omega_s \subset \mathbb{R}^2 \ \text{(équation de la chaleur 2D)}$$

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho^\Gamma \Delta \mathcal{H}^\Gamma} (\vec{\varphi_I} - \vec{\varphi_s}) \vec{n} \ \forall x \in \Gamma \ \text{(condition de Stefan 2D)}$$

+ Modèle 0D pour le liquide et la composition du solide

Couplage des sous-modèles :





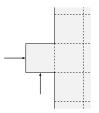
Ces sous-modèles sont couplés entre eux par un schéma explicite.



Résolution des modèles d'interface 2D et de thermique 2D

Discrétisation et déplacement de l'interface

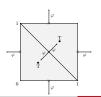
- ▶ Interface maillée par des segments verticaux et horizontaux.
- On associe à chaque segments des paramètres (T_{fus}, ΔH_{fus}, ...)
- Déplacements verticaux et horizontaux.
- ▶ Déplacements 2D, par splitting directionnel.
- ▶ Reconstruction du maillage de l'interface à chaque pas de temps.
- Donc projection de certains paramètres (température et état du segment) d'une interface à l'autre.



 $arphi_I$ est donné par le modèle liquide et $arphi_{\mathbf{5}}$ est obtenu par le modèle solide.

Résolution du solide par éléments finis mixtes

- 1. Remaillage: adaptation du maillage à la nouvelle interface,
- Projection de la température température sur le nouveau maillage (utilisation des fonctions éléments finis).
- 3. **Résolution** de l'équation de la chaleur avec l'élément mixte de Raviart-Thomas.
- Flux thermique déjà calculé sur le bord de l'élément fini de Raviart-Thomas → identification directe des flux thermiques à l'interface.





Algorithme final

Algorithme final, en utilisant un schéma semi-explicite :

1. Résolution de l'équation de la chaleur par méthode élément finis

$$\left((\Omega_s)_h^n, (T_j^n)_{j=1,\dots,N_j^n}, \; \mathsf{BCs}, \right) \longrightarrow \quad (T_j^{n+1}, (\vec{\varphi}_j^{n+1})_{j=1,\dots,N_j^n})$$

2. Déplacement de l'interface

$$\left(\Gamma^n, (\vec{\varphi_j})_{j=1,...,N_j^n}, \text{ BCs}, \right) \longrightarrow \Gamma^{n+1}$$

3. Remaillage du solide avec la nouvelle interface

$$\left(\Omega_{s}^{n},(\Omega_{s})_{h}^{n},\Gamma^{n+1}\right)\longrightarrow \quad \left(\Omega_{s}^{n+1},(\Omega_{s})_{h}^{n+1}\right)$$

4. Projection de l'ancienne température sur le nouveau domaine

$$\left((\Omega_s)_h^{n+1},(\Omega_s)_h^n,(T_j^{n+1})_{j=1,\ldots,N_j^n}\right)\longrightarrow (T_k^{n+1})_{k=1,\ldots,N_k^{n+1}}$$



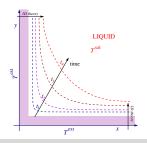
Résultats: validation cas test de Stefan, angle 2D

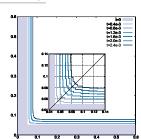
Problème de Stefan 1D :



Λ <i>t</i>	L ₁ error	L₂ error	L _∞ error	Δx	L ₁ error	L ₂ error	L_{∞} error
		2	00	0.6	1 30 × 10 ⁻¹	1 31 \ 10-1	2 nn × 1n-1
1.0	2.87×10^{-1}	3.11×10^{-1}	8.33×10^{-1}				
0.5	9.70×10^{-2}	1.04×10^{-1}	2.92×10^{-1}	0.3	7.85×10^{-2}	7.93×10^{-2}	1.24×10^{-1}
		1101710	2.52 / 10	0.2	8.89×10^{-2}	5.81×10^{-2}	1.03×10^{-1}
0.3	4.75×10^{-2}	4.90×10^{-2}	1.03×10^{-1}				
0.1	1.18×10^{-2}	1 20 1 10-2	0.40 - 4.0-2	0.1	4.75×10^{-2}	4.90×10^{-2}	1.03×10^{-1}
0.1	1.18 × 10 -	1.28 × 10 -	8.48 × 10 -	0.05	3.97×10^{-2}	1.13×10^{-2}	9.26×10^{-2}
				0.05	3.57 \ 10	4.15 \ 10	J.20 A 10

Cas test de l'angle 2D (Schéma à gauche, résultat à droite) :



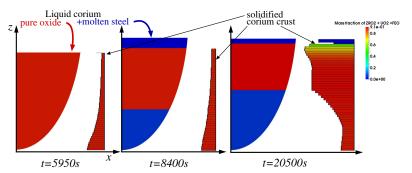




Présentation du cas test de croûte

Objectif : utilisation du modèle 0D/2D dans une simulation plus complexe (avec un couplage d'autre modèle). Simulation de la formation de la croûte pendant une stratégie IVR. Trois étapes :

- $lackbox{ }$ Bain de corium tout oxyde ightarrow Formation d'une croûte tout oxyde.
- ▶ Ajout d'élément métallique dans le corium liquide → Stratification du bain de corium et discontinuités des flux thermiques provenant du liquide.
- ▶ Décroissance artificielle de la chaleur résiduelle dans le corium liquide → Solidification massive du corium.



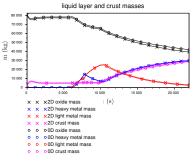
Restriction sur le modèle 2D/0D

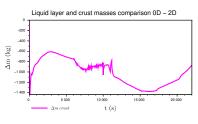
En raison du couplage avec les autres modèles 0D, les déplacements verticaux de l'interface sont supprimés.



Cas test de formation de la croûte

Plusieurs comparaisons ont été réalisés entre le modèle d'interface 0D et le nouveau modèle d'interface 2D.





Première figure : évolution de la masses pour les différentes couches de liquide et pour la croûte.

Seconde figure : Différence de la masse de croûte totale entre les deux modèles.

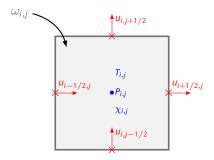


Modèle d'interface VOF/FT dans un code de CFD



Présentation du code TrioCFD

- ▶ **Résolution de Navier-Stokes** par méthode de projection
- Discrétisations spatiales :
 - Volumes Différences finies (VDF) : rectangle en 2D, hexaèdre en 3D.
 - Volumes Élements Finis (VEF) : triangle en 2D, tétraèdre/hexahèdre en en 3D .
- ► Schémas en espace d'ordre 2
- ► Schémas en temps explicite ou (semi-)implicite





Équations considérées

$$(\mathcal{P}): \begin{cases} \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \rho \mathbf{g} + \mathcal{D}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = -\dot{m} \left(\frac{1}{\rho_{I}} - \frac{1}{\rho_{S}} \right) \delta^{\Gamma}, \\ \frac{\partial \rho C_{\rho} \delta T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} C_{\rho} \delta T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \dot{m} \mathcal{H}^{\Gamma} \delta^{\Gamma}, \\ \frac{\partial \chi}{\partial t} + \mathbf{u}^{\Gamma} \cdot \nabla \chi = 0, \end{cases}$$

$$(4)$$

avec pour tout (\mathbf{x}, t) dans $\Gamma \times \mathcal{T}$:

$$\mathbf{u}^{\Gamma} = -\frac{\dot{m}}{\rho_{s}} \mathbf{n}^{\Gamma},\tag{5}$$

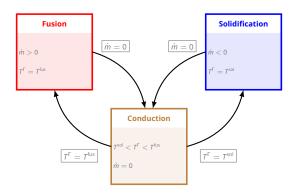
et pour tout (\mathbf{x}, t) dans $\Gamma \times \mathcal{T}$:

$$\dot{m} = \frac{\varphi_l - \varphi_s}{\mathcal{H}^{\Gamma}}.\tag{6}$$

Dans ce système les inconnues sont la vitesse u, la pression P, la température T et la fonction χ .



Équations considérées : fermeture à l'interface



Définition de trois lois de fermetures thermiques à l'interface, fonction de l'état d'interface :

$$(\mathcal{F}): \begin{cases} T = T^{\text{sol}}, & \text{si } \dot{m} \leq 0, \\ \varphi_{s} \cdot \mathbf{n}^{\Gamma} = \varphi_{l} \cdot \mathbf{n}^{\Gamma}, & \text{si } T^{\text{sol}} < T^{\Gamma} < T^{\text{fus}}, \\ T = T^{\text{fus}}, & \text{si } \dot{m} > 0. \end{cases}$$
(7)



Méthode VOF-Front-Tracking

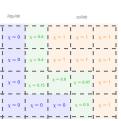
La méthode Front-Tracking

- Utilisation d'un maillage eulerien pour résoudre les équations de Navier-Stokes
- Construction d'un deuxième maillage, lagrangien, pour modéliser l'interface.
- Nécessite des méthodes d'interpolation pour communiquer des informations d'un maillage à l'autre.
- Besoin de méthodes spécifiques sur le maillage eulerien pour utiliser l'information du maillage lagrangien.
- ▶ Pas naturellement conservatif.
- Certains phénomènes difficiles à prendre en compte (coalescence, séparation de phase ...)
- ► Suivi précis de l'interface, accepte de grandes déformations

La méthode VOF

- Méthode eulerienne, utilisant une fonction de fraction de présence.
- Conservative par construction.
- Pas de tracking de l'interface, besoin d'algorithme de reconstruction d'interface.







Couplage des équations

Schéma en temps explicite:

- résolution de la vitesse du fluide,
- déplacement des marqueurs et mise à jour de la fonction χ_{ν} ,
- résolution de la température.



Résolution de la vitesse : méthode de prédictionprojection

Résolution de la vitesse sur tout le domaine par une méthode de prédiction-projection.

Prédiction:

$$\boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{u}^n - \Delta t \nabla_h \cdot (\boldsymbol{u}^n \boldsymbol{u}^n) + \frac{\Delta t}{\rho_f^n} \nabla_h \cdot (\mu^n (\nabla_h \boldsymbol{u}^n + \nabla_h^T \boldsymbol{u}^n)), \tag{8}$$

où \pmb{u}^* est la prédiction de la vitesse, μ^n la viscosité discrète, ρ^n_f la densité discrète aux faces et où \pmb{g} est le vecteur gravité.

Projection : Rajout de la contribution de la pression P^{n+1} , de tel sorte à obtenir une vitesse à divergence nulle.

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* + \frac{\Delta t}{\rho_f^n} \nabla_h P^{n+1}, \tag{9}$$

où, P^{n+1} est obtenue en résolvant :

$$\nabla_h \cdot \left(\frac{1}{\rho_f^n} \nabla_h P^{n+1} \right) = -\frac{1}{\Delta t} \nabla_h \cdot \boldsymbol{u}^*. \tag{10}$$



Résolution de la vitesse : la méthode de pénalisation

Modification de l'algorithme initial pour imposer une vitesse nulle sur le solide

Utilisation de la méthode de pénalisation, déjà présente dans TrioCFD (voir M. Belliard et al.)

$$I^{n} = \nabla_{h} \cdot (\boldsymbol{u}^{n} \boldsymbol{u}^{n}) + \frac{1}{\rho^{n}} \nabla_{h} \cdot (\mu^{n} (\nabla_{h} \boldsymbol{u}^{n} + \nabla_{h}^{T} \boldsymbol{u}^{n})). \tag{11}$$

Prédiction:

$$(1 + \frac{\chi}{n}) \boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{u}^n + \Delta t \boldsymbol{I}^n, \tag{12}$$

$$u^* = \frac{u^n + \Delta t I^n}{\left(1 + \frac{\chi}{\pi}\right)}. (13)$$

où η est le facteur de pénalisation très proche de 0.

Projection:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* + \frac{\Delta t}{\rho_f^n} \nabla_h P^{n+1} + \frac{\chi}{\eta} (\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{n+1}), \tag{14}$$

$$-\nabla_h \cdot \boldsymbol{u}^* = \Delta t \, \frac{\eta}{\eta + \chi} \nabla_h \cdot \left(\frac{1}{\rho_f^n} \nabla_h P^{n+1} \right) \underset{\eta \to 0}{\longrightarrow} \boldsymbol{0}. \tag{15}$$



Résolution de la vitesse : discrétisation de la divergence

Il faut prendre en compte la divergence non-nulle due au changement de volume.

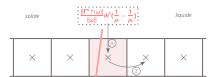
$$\int_{\omega} \zeta(t) dx = \int_{\Gamma(t) \cap \omega} \dot{m}(t) \left(\frac{1}{\rho_{l}} - \frac{1}{\rho_{s}} \right) d\sigma dt. \tag{16}$$

Discrétisation

$$\zeta^n = \frac{\|\Gamma^n \cap \omega\|}{\|\omega\|} \dot{m}^n \left(\frac{1}{\rho_I} - \frac{1}{\rho_S}\right). \tag{17}$$

Modification de l'espace de projection

$$\frac{\eta}{\eta + \chi} \nabla_h \cdot \left(\frac{1}{\rho_f^n} \nabla_h P^{n+1} \right) = -\frac{1}{\Delta t} \nabla_h \cdot \boldsymbol{u}^* + \frac{1}{\Delta t} \zeta^n. \tag{18}$$





Résolution de l'interface

Calcul de u^{Γ} :

$$\mathbf{u}^{\Gamma,n} = -\nabla \cdot \left(\frac{\dot{m}^n}{\rho_s} d^n\right),\tag{19}$$

- 1. Déplacement théorique de la fonction couleur χ ,
- 2. déplacements des marqueurs m_k ,
- 3. algorithme de remaillage, lissage, barycentrage,
- 4. correction du déplacement des marqueurs à l'aide de la fonction χ ,
- 5. mise à jour de la fonction χ en fonction des marqueurs,
- 6. mise à jour de la fonction Level-Set *d*, représentant la distance signée à l'interface.



Résolution de la température : méthode Ghost-Fluid

Séparation de l'équation de température en deux équations, une pour chaque phase :

$$(\delta \mathcal{T}_k^{n+1}) = (\delta \mathcal{T}^n) + \frac{\lambda_s \Delta t}{\rho_s c_{\rho,s}} \Delta_h \mathcal{T}_s^n - \Delta t \nabla_h \cdot (\mathbf{u}^{\mathsf{T},n} \delta \mathcal{T}_s^n). \tag{20}$$

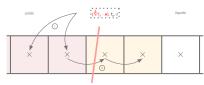
définie sur tout le domaine. On se concentre, dans la suite, sur l'équation thermique du solide.

Température d'interface définie par méthode Ghost-Fluid

1/ Calcul d'un gradient thermique normal à l'interface sur le centre des mailles solides.

$$(\overset{g}{\nabla} T_{\mathsf{S}} \cdot \mathbf{n}) = \frac{T^{\mathsf{\Gamma}} - T_{\mathsf{S}}}{d}.$$
 (21)

2/ Extrapolation du gradient aux mailles mixtes et liquides proches de l'interface.



3/ Calcul d'une température fantôme $\overset{g}{T_{S}}$ sur les mailles liquides.

$$\overset{g}{T}_{S} = T^{\Gamma} + (\overset{g}{\nabla}T_{S} \cdot \mathbf{n}) d. \tag{22}$$



Résolution de la température : états d'interface

1. Suivi de l'état d'interface par un nouveau champ sur les mailles eulériennes :

$$E_{i,j}^{n+1} = \begin{cases} \text{conduction si } T_{\text{sol}} < T_{i,j}^{\Gamma,n} < T_{\text{fus}}, \\ \text{conduction si } E_{i,j}^n = \text{fusion et } \dot{m}_{i,j} < 0, \\ \text{conduction si } E_{i,j}^n = \text{solidification et } \dot{m}_{i,j} > 0, \\ \text{fusion si } T_{i,j}^{\Gamma,n} \ge T_{\text{fus}} \text{ et } \dot{m}_{i,j} \ge 0, \\ \text{solidification si } T_{i,j}^{\Gamma,n} \le T_{\text{sol}} \text{ et } \dot{m}_{i,j} \le 0. \end{cases}$$
 (23)

Puis extrapolation de ce nouveau champ d'état aux mailles pures proches.

2. Calcul d'une nouvelle température d'interface, dépendante de l'état de la maille :

$$T^{\Gamma} = \begin{cases} T^{\text{fus}} & \text{si la maille mixte est en fusion,} \\ T^{\text{cond}} & \text{si la maille mixte est en conduction,} \\ T^{\text{sol}} & \text{Si la maille mixte est en solidification.} \end{cases}$$
 (24)

où $T_{i,j}^{\operatorname{cond},n+1}$ est calculée le cas échéant.

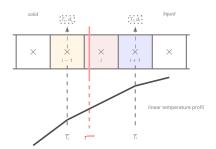


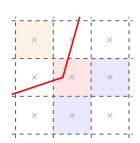
Calcul de T^{cond}

Pour approcher T^{cond} , on utilise une **interpolation linéaire**.

$$T^{\text{cond}} = \frac{\lambda_s \overline{T_s} \overline{d_l} - \lambda_l \overline{T_l} \overline{d_s}}{\lambda_s \overline{d_l} - \lambda_l \overline{d_s}}.$$
 (25)

Où $\overline{T_k}$ est une température moyenne du coté de la phase k et $\overline{d_k}$ une distance moyenne du coté de la phase k.







Calcul de \dot{m}

On définit \dot{m}^n par :

$$\dot{m}^{n+1} = \frac{\dot{m}_l^{n+1} - \dot{m}_s^{n+1}}{\mathcal{H}^*},\tag{26}$$

où:

$$\dot{m}_k = \lambda_k \left(\overset{g}{\nabla} T_k \cdot \boldsymbol{n} \right), \tag{27}$$

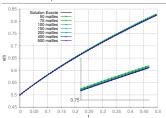
Pour assurer le respect de l'état de l'interface, si l'état est en conduction, alors, le taux \dot{m}^n est imposé à 0.

$$\dot{m}_{i,j}^{n} = \begin{cases} 0 & \text{si } E_{i,j}^{n+1} = \text{conduction} \\ \frac{\dot{m}_{i}^{n+1} - \dot{m}_{s}^{n+1}}{\mathcal{H}^{\Gamma}} & \text{sinon} \end{cases}$$
(28)



Cas test de validation : cas test de Stefan

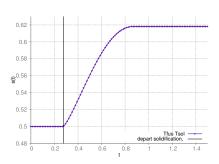
Solide et liquide de même nature, densité différente



			2
N _X	Δx	L ² error	L ² order
50	0.08	4.072E - 3	-
75	0.053	2.752E - 3	0.95
100	0.04	2.068E - 3	1.02
150	0.027	1.368E — 3	1.05
200	0.02	1.011E — 3	1.01
400	0.01	5.137E — 4	0.98
500	0.008	4.172E — 4	0.93
-	-	L ² average →	0.99



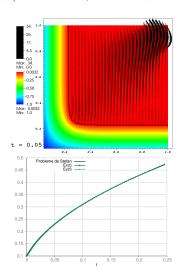
Solide et liquide de nature différente

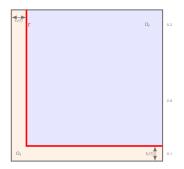


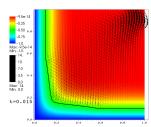


Cas test de validation : cas test de l'angle 2D

Solide et liquide de même nature, densité différente

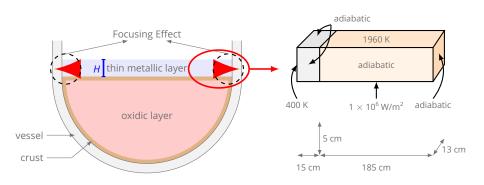








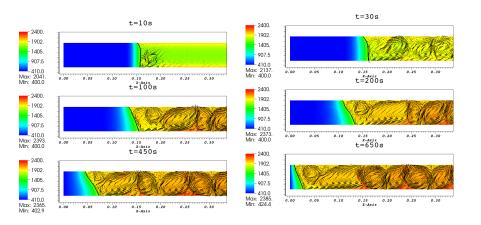
Cas test de la couche mince : présentation du cas test



Parameter	Value
Density $ ho$	6720 kg/m ³
Coefficient of thermal expansion, β	3 × 10 ⁻⁵
Thermal conductivity, λ	20 W/mK
Fusion temperature, T ^{fus}	1658 K
Enthalpy of fusion, △ffl/H ^{fus}	$2.76 \times 10^{5} \text{ J/kg}$
Heat capacity, Cp	674 J/kg K
Kinematic viscosity, μ	$4.5696 \times 10^{-3} \text{m}^2/\text{s}$

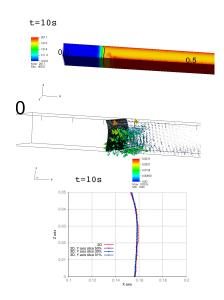


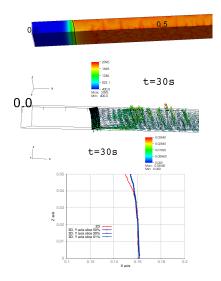
Résultat 2D





Résultat 3D





Conclusion et perspectives



Conclusions

Modèle 2D du code PROCOR

- Un nouveau modèle 2D/0D a été développé. L'équation de la chaleur est résolue en 2D et l'interface liquide-solide évolue en 2D.
- Pas besoin de schéma implicite.
- ▶ Méthode éléments finis mixtes, remaillage, projection, couplage de modèle.
- ▶ Plusieurs validation on été réalisées ainsi que des comparaisons avec un modèle 0D préexistant.
- Un cas test plus industriel (formation de la croûte) a été proposé, avec comparaison au modèle 0D.

Modèle VOF/FT du code TrioCFD

- ▶ Définition de la notion d'état d'interface et écriture d'un modèle CFD les prenants en compte.
- ▶ Adaptation d'une méthode VOF-FT à notre problématique liquide solide.
- ▶ Méthode de pénalisation utilisée pour supprimer la vitesse sur le solide.
- ► Adaptation de la méthode Ghost-Fluid pour prendre en compte les différentes fermetures thermique de l'interface.
- ▶ Validation des développements réalisés sur des cas tests de validation 1D et 2D.
- Un cas test plus industriel (simulation de la couche métallique légère) a été réalisé, une illustration 3D est proposée.



Perspectives

- Poursuivre la validation du modèle 2D développé dans PROCOR, notamment avec une comparaison entre code.
- Complexifier la physique à l'interface, par exemple en prenant en compte un changement de phase non congruent et en introduisant des modèles de thermochimie.
- Utilisation du modèle dans d'autre modélisation, par exemple dans un cadre d'interaction corium-béton.
- ▶ Introduire le suivi des espèces dans le modèle de CFD.
- ▶ Validation 3D de la méthode Ghost-Fluid adaptée. Plus largement, des benchmarks entre codes et méthodes numériques pour valider les développements réalisés sur la méthode VOF-FT.
- Amélioration de la méthode d'interpolation utilisée dans la méthode Ghost-Fluid. Éventuellement remplacement de la méthode Ghost-Fluid pour une méthode plus adaptée.
- ▶ Benchmark avec d'autre code liée à une campagne d'essais LIVE à venir.
- ▶ Poursuite de l'étude de la couche mince avec ajout de méthodes LES (Large Eddy Simulation) pour la modélisation de la turbulence.
- ▶ Possible collaboration avec des équipes canadiennes sur un benchmark portant sur une configuration 3D.



Bibliographie



Bibliographie PROCOR

- Viot, L., 2018. Couplage et synchronisation de modèles dans un code scénario d'accidents graves dans les réacteurs nucléaires. ENS Paris-Saclay.
- Viot, L., Saas, L., De Vuyst, F., 2018. Solving coupled problems of lumped parameter models in a platform for severe accidents in nuclear reactors. International Journal for Multiscale Computational Engineering.
- Le Tellier, R., Skrzypek, E., Saas, L., 2017. On the treatment of plane fusion front in lumped parameter thermal models with convection. Applied Thermal Engineering 120, 314–326.
- ▶ Viot, L., Le Tellier, R., Peybernes, M., 2020. Modeling of the corium crust of a stratified corium pool during severe accidents in light water reactors. Nuclear Engineering and Design.
- ▶ Drouillet, A., Le Tellier, R., Loubère, R., Peybernes, M., Viot, L., Multi-dimensional simulation of phase change by a 0D-2D model coupling via Stefan condition. Communications on Applied Mathematics and Computation.



Bibliographie TrioCFD

- Mathieu, B., n.d. Études physique, expérimentale et numérique des mécanismes de base intervenant dans les écoulements diphasiques en micro-fluidique. Polytech Marseille.
- Bois, G., 2011. Transferts de masse et d'énergie aux interfaces liquide / vapeur avec changement de phase: proposition de modélisation aux grandes échelles des interfaces. Université de Grenoble.
- Bois, G., 2021. A comprehensive description of the mixed
 Front-Tracking/Volume-of-Fluid/Level-set algorithm of TrioCFD. (preprint)
- ▶ Belliard, M., Fournier, C., 2010. **Penalized direct forcing and projection schemes for Navier–Stokes.** Comptes Rendus Mathematique 348, 1133–1136.

Merci pour votre attention