

# Étude par LES avec TrioCFD des modifications des structures turbulentes thermiques induites par les variations des propriétés thermophysiques de l'eau

Elie ROUMET<sup>1,2,\*</sup>, Raksmy NOP<sup>1</sup>, Nicolas DORVILLE<sup>1</sup>, Marie-Christine DULUC<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Université Paris-Saclay, CEA, Service de Thermo-hydraulique et de Mécanique des Fluides  
91191, Gif-sur-Yvette, France.

<sup>2</sup> Conservatoire National des Arts et Métiers, Lafset  
75003, Paris, France

\*(auteur correspondant : elie.roumet@cea.fr)

**Résumé** - L'étude de l'accident de type BORAX est cruciale pour la sûreté des réacteurs nucléaires expérimentaux de type piscine. Ce scénario accidentel est caractérisé par un emballement des réactions nucléaires dans le coeur du réacteur qui engendre une augmentation exponentielle de la puissance thermique produite par le combustible avec un temps caractéristique de l'ordre de la dizaine de millisecondes. Cette communication présente l'étude des échanges thermiques turbulents durant la phase monophasique d'un tel transitoire par simulation numérique avec une approche LES utilisant le code TRUST/TrioCFD développé au Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives (CEA). Nous examinerons spécifiquement l'influence de la variation des propriétés thermophysiques avec la température sur les mécanismes de transfert thermique.

## Nomenclature

$c_p$	Capacité thermique isobare massique [ $J.K^{-1}.kg^{-1}$ ]	$z$	Coordonnée orthotransverse [m]
$e$	Demi entrefer du canal [m]	<i>Symboles grecs</i>	
$q_w''$	densité de flux thermique [ $W.m^{-2}$ ]	$a$	Diffusivité thermique [ $m^2.s^{-1}$ ]
$P$	Pression [Pa]	$k$	Conductivité thermique [ $W.m^{-1}.K^{-1}$ ]
$Pr$	Nombre de Prandtl [-]	$\mu$	Viscosité dynamique [ $Pa.s^{-1}$ ]
$r$	Constante universelle des gaz parfaits [ $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ]	$\nu$	Viscosité cinématique [ $m^2.s^{-1}$ ]
$Re$	Nombre de Reynolds [-]	$\rho$	Masse volumique [ $kg.m^{-3}$ ]
$t$	Temps [s]	$\tau$	Période d'excursion exponentielle [s]
$T$	Température [K]	<i>Indices et exposants</i>	
$\mathbf{v}$	vitesse [ $m.s^{-1}$ ]	$t$	Turbulent
$x$	Coordonnée axiale [m]	$+$	Adimensionnement turbulent
$y$	Coordonnée transverse [m]		

## 1. Introduction

L'étude du scénario accidentel de type BORAX est déterminante pour la sûreté des réacteurs nucléaires expérimentaux de type piscine. Ce scénario est initié par une insertion de réactivité, correspondant typiquement à l'éjection accidentelle d'une barre de contrôle dans le coeur. L'emballement des réactions nucléaires engendre une augmentation exponentielle de la puissance thermique produite par le combustible qui doit être évacuée par l'eau circulant dans le coeur du réacteur. Ce transitoire accidentel a un temps caractéristique  $\tau$  de l'ordre de la dizaine de millisecondes et peut mener à une possible perte du réacteur.

En régime nominal de fonctionnement, l'eau circulant dans le cœur des réacteurs expérimentaux est fortement sous-refroidie (75 K et au-delà). En conséquence, durant la majeure partie du scénario BORAX, les échanges thermiques sont réalisés alors que l'eau reste sous forme liquide. Pour les transitoires les plus rapides, le déclenchement de l'ébullition coïncide quasiment avec l'apparition de la crise d'ébullition, caractérisée par l'apparition de poches de vapeur irréversibles à la paroi.

La crise d'ébullition marque la transition de l'ébullition nucléée vers l'ébullition en film ; elle est caractérisée d'un point de vue thermique par une forte chute du transfert à l'interface paroi-fluide et d'un point de vue nucléaire par une diminution brusque des contres-réactions neutroniques. Ce phénomène physique tend à diminuer la puissance du réacteur lors de l'ébullition et son intensité est proportionnelle au volume de vapeur généré dans le coeur. Ainsi, une meilleure prédiction et une meilleure compréhension de la crise d'ébullition lors d'un transitoire rapide de puissance sont fondamentales pour la sûreté des réacteurs nucléaires de recherche.

Des expériences ont été réalisées pour étudier les régimes de transfert thermique lors d'un transitoire exponentiel de puissance (Chavagnat et al. [1]). Des observations ont alors été réalisées par ombroscopie et semblent indiquer une relation entre sillages turbulents proches de paroi chauffante et l'activation des sites de nucléations.

La figure 1 illustre les différents régimes d'échange thermique durant un transitoire. Les sillages turbulents y apparaissent en blanc et les bulles en noir. Nous pouvons alors clairement observer que la nucléation apparaît le long des sillages turbulents et au moment de la crise d'ébullition, les poches de vapeur prennent des formes similaires à ces sillages.

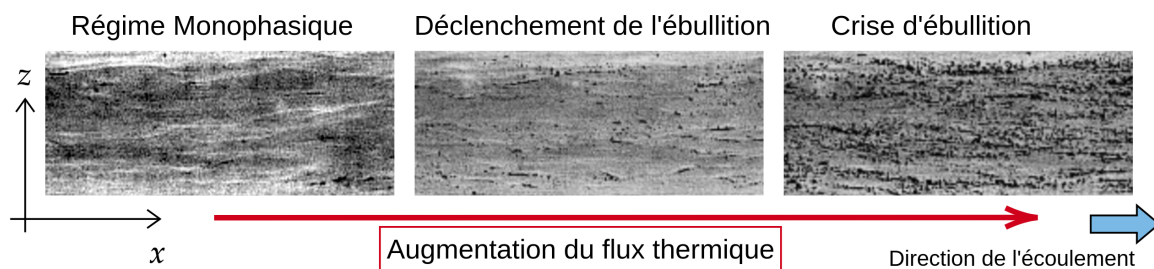


Figure 1. Ombroscopie d'un élément chauffant soumis à une excursion exponentielle de puissance avec  $\tau = 5 \text{ ms}$ . Les conditions thermohydrauliques sont : pression de 12 bars, sous-saturation d'entrée de 163 K et  $Re = 3.10^4$  (Adapté de Chavagnat et al. [1]).

Récemment, Nop et al. [2] ont proposé un modèle permettant de prédire l'apparition de la crise d'ébullition - le flux critique - en régime transitoire rapide pour les écoulements sous-saturés reposant sur une approche énergétique. Le modèle introduit le concept physique de "manteau" avec son épaisseur  $\delta$ , qui est un paramètre représentant une couche de fluide caractéristique atteignant la température de saturation durant le transitoire. Dans le cadre de ce modèle, il semble nécessaire de s'intéresser au comportement de la couche limite thermique se développant durant un transitoire de puissance.

Dans cette optique, cette communication présente l'utilisation du code TRUST/TrioCFD, code open-source de CFD développé au CEA, pour étudier le transfert thermique monophasique sous haut flux ( $2 \text{ MW}/\text{m}^2$ ) en régime permanent de chauffe. L'objectif, ici, est de valider la modélisation physique réalisée par comparaison à la littérature, avant de simuler des transitoires rapides. Notre étude se concentrera en particulier sur les structures thermiques proches de la

paroi, où se manifestent d'intenses gradients de température. Ces gradients sont susceptibles d'apparaître lors d'une augmentation exponentielle de la puissance.

## 2. Méthodologie

Nous avons réalisé différentes simulations LES (Large Eddy Simulation) d'un écoulement turbulent en canal plan chauffé en paroi en l'absence de gravité. Celles-ci explorent différentes modélisations de l'interaction entre les dynamiques thermiques et fluides présentées ci dessous :

- Écoulement incompressible avec un fluide à propriétés thermophysiques constantes. Cette configuration considère la température comme un scalaire passif n'influençant pas la dynamique de l'écoulement.
- Écoulement incompressible avec viscosité variable ( $\mu$ ). Cette modélisation introduit un couplage entre le champ de température et celui de la vitesse par une viscosité variant en fonction de la température. Seule l'équation de Navier-Stokes est modifiée.
- Écoulement quasi-compressible avec viscosité ( $\mu$ ) et masse volumique ( $\rho$ ) variables. Dans ce modèle, l'interaction vitesse-température est prise dans les équations de continuité et de Navier-Stokes. Cette modélisation vise à capturer l'effet d'un champ de vitesse à divergence non nulle dû à la variation de masse volumique.

Le passage d'une configuration à la suivante conduit à une complexification graduelle du couplage température-vitesse, permettant de mettre en évidence l'impact de chaque propriété du fluide sur la thermo-hydraulique.

### 2.1. Définition numérique du problème

La présentation schématique de la configuration des simulations numériques est illustrée dans la figure 2, où l'axe  $x$  s'aligne avec la direction de l'écoulement et une boîte de recirculation est disposée en amont pour l'injection d'un profil de vitesse fluctuant et établi. L'équation de la chaleur est résolue uniquement dans la section d'essai, en supposant que l'écoulement provenant de la boîte de recirculation est isotherme. Les deux domaines sont périodiques selon la direction  $z$ . Les dimensions physiques correspondent à celles du dispositif expérimental décrit par Chavagnat et al. [1] et Nop et al. [3]. Elles assurent une modélisation de la turbulence précise et le développement adéquat de la couche limite thermique. Sur le plan numérique, les tailles des domaines ont été optimisées pour réduire l'impact du maillage sur les résultats, s'appuyant sur une analyse d'indépendance de maillage spécifique aux calculs thermo-hydrauliques menée par Lluesma-Rodriguez et al.[4].

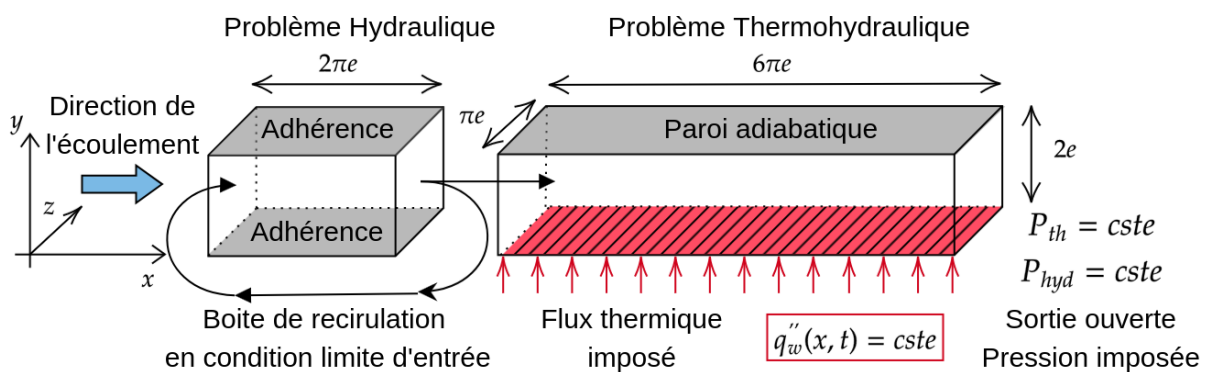


Figure 2. Schéma du problème numérique,  $e = 1$  mm est le demi-entrefer du canal

Pour les équations de Navier-Stokes, la condition en amont de la section d'essai numérique est l'injection du champ de vitesse instantané obtenu dans la boîte de recirculation. La section avale est ouverte avec une condition de pression arbitraire. Enfin, une condition d'adhérence est imposée aux parois haute et basse.

Concernant l'équation de la chaleur, la température à l'entrée de la section d'essai numérique est imposée et correspond à la valeur de sous-saturation dans les expériences. La sortie est considérée libre pour la température, en imposant un flux thermique diffusif nul. La paroi supérieure est considérée comme adiabatique. Sur la paroi inférieure, est imposé une densité de flux thermique  $q_w''$  uniforme dans l'espace et constante dans le temps.

Ainsi, le système d'équations résolu est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla (P_1^*) + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) \quad \text{avec} \quad P_1^* = P_1 + \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(\mathbf{v}) \\ \rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \frac{dP_0}{dt} \quad \text{avec} \quad P_0 = \rho(T) r T \end{array} \right. \begin{array}{l} \text{(pression hydrodynamique)} \\ \text{(pression thermodynamique)} \end{array}$$

Le code TRUST/TrioCFD utilise un schéma décalé de calcul pour les grandeurs vitesse et pression afin d'éviter les oscillations artificielles de pression (modes en échiquiers). La pression et la vitesse sont découplées grâce à une méthode de projection afin de garantir que le champ de vitesse résolu satisfasse à la fois les équations de continuité et de quantité de mouvement. Plus de détails concernant les spécificités et capacités du code TRUST/TrioCFD sont présentés dans Angeli et al.[5]. Le tableau 1 synthétise les méthodes et schémas numériques utilisés dans cette communication.

Tableau 1. Récapitulatif des méthodes et schémas numériques

Discrétisation	Volume Différences Finies
Solveur de pression	General Conjugate Gradient
Diffusion	Implicite (2 <sup>nd</sup> ordre)
Convection de quantité de mouvement	Centrée (2 <sup>nd</sup> ordre)
Convection scalaire	QUICK (3 <sup>eme</sup> ordre)
Schéma en temps	Runge Kutta (3 <sup>eme</sup> ordre)

## 2.2. Caractéristiques physiques et modèle de turbulence

Sous l'effet de la forte densité de flux thermique de  $2 \text{ MW}/\text{m}^2$  imposée en paroi, d'important gradients de température apparaissent. Dans ces conditions la viscosité  $\mu$  peut diminuer d'un facteur 2 au voisinage de la paroi chauffante. Concernant les autres propriétés physiques en jeu que sont la masse volumique  $\rho$ , la conductivité thermique  $k$  et la capacité thermique à pression constante  $c_p$ , elles varient de l'ordre de 10% en fonction de la température. Cela montre le besoin d'une modélisation qui prenne effectivement en compte ces variations pour capturer les interactions entre les champs de vitesse et de température.

Les effets gravitaires sont considérés négligeables car le nombre de Richardson ( $Ri = g\Delta\rho L/\rho U^2$ ) est très petit devant  $10^{-2}$ . L'équation d'état utilisée est celle d'un gaz parfait raidi, corrélée sur la base de donnée IWAPS97 pour l'eau liquide. Nous faisons l'hypothèse que les

propriétés de l'eau métastable au delà de la température de saturation à la pression considérée sont constantes et égales à leurs valeurs à la température de saturation.

Dans la conception du maillage à éléments hexaédriques, nous raffinons dans la direction normale à la paroi jusqu'à la taille de Batchelor ( $\eta_\theta = \eta/\sqrt{Pr}$  avec  $\eta$  la longueur de Kolmogorov) en vue de convenablement capturer les fluctuations thermiques ainsi que la dynamique de couche limite au voisinage de la paroi. Au cœur de l'écoulement, les hexaèdres sont étirés d'un facteur 4 dans la direction de l'écoulement  $x$  et d'un facteur 2 dans la direction transverse  $z$ . Les tailles locales des mailles retenues sont présentées dans le tableau 2. A l'échelle globale, les dimensions de la section d'essai numérique sont : 1.89 cm de long selon  $x$ , 3.15 mm de large selon  $z$  et un entrefer de 2 mm. Le maillage de la section d'essai comporte 30 millions d'éléments.

Tableau 2. Caractéristiques du maillage

	Dimension des éléments hexaédriques du maillage	
	en unité $y^+ = y u_\tau/\nu$ [-]	$[\mu m]$
$\Delta y_w$ en proche paroi	0.5	2.13
$\Delta y_{fs}$ au centre du canal	1.86	7.95
$\Delta z$	4	16
$\Delta x$	8	32

Concernant la modélisation de la turbulence, le modèle sous-maille utilisé pour notre approche par LES est le modèle WALE (pour Wall-Adapting Local Eddy-viscosity). Pour la thermique, nous choisissons classiquement un modèle sous-maille de longueur de mélange avec un nombre de Prandtl turbulent  $Pr_t = \nu_t/\alpha_t = 0.9$  permettant de lier les dissipations cinétique et thermique à l'échelle sous-maille. Ce modèle a été retenu pour sa capacité à gérer la complexité des écoulements fortement cisailés [6].

### 3. Résultats de simulation

Sur la figure 3, nous présentons une coupe dans le plan  $(y, z)$ , des champs instantanés de température et de masse volumique pour la simulation quasi-compressible. Seule la région proche de la paroi chauffante ( $y^+ < 200$ ) est représentée. La coupe est prise loin de l'entrée de la section d'essai numérique, lorsque la couche limite thermique est pleinement développée en  $x = 1.8$  cm. On observe l'interaction entre la turbulence et le chauffage à la paroi. Les structures turbulentes apportent par alternance selon  $z$  de l'eau froide du coeur de l'écoulement vers la paroi chauffante et transportent la chaleur des régions chaudes vers le coeur de l'écoulement. Ce processus de transfert d'énergie est similaire au mécanisme proposé par Nop et al. [2] dans le cadre de la modélisation de la crise d'ébullition en régime transitoire. Ces zones chaudes forment des panaches thermiques caractéristiques où la masse volumique du fluide est localement plus faible.

#### 3.1. Comparaison et validation des profils moyens

Les simulations ont été réalisées avec un flux thermique imposé à la paroi de  $2MW/m^2$ . A cause du fort sous refroidissement de l'écoulement, le fluide est toujours à l'état liquide, bien que localement surchauffé à la paroi. Dans ces conditions, les forts gradients thermiques modifient significativement les propriétés thermophysiques du fluide.

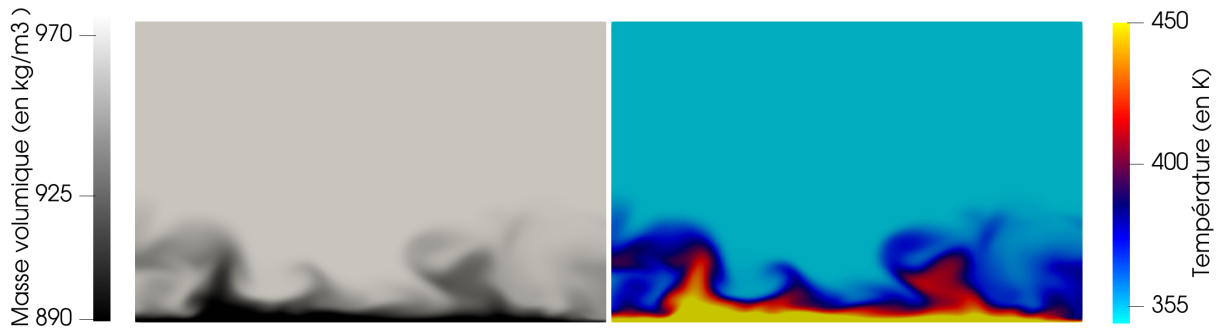


Figure 3. Coupe dans le plan  $(y, z)$  à  $x = 1.8\text{cm}$  de l'entrée de la section d'essai du champ instantané de masse volumique et de température durant une chauffe à  $2\text{MW}/\text{m}^2$  (simulation quasicompressible). Les régions saturées sont représentées en jaune.

Les données ont été recueillies loin de l'entrée de la section d'essai numérique,  $x > 1\text{cm}$  ( $3\pi e$ ), pour exclure l'effet du développement spatial de la couche limite thermique. Afin d'assurer la convergence des statistiques, les champs ont été moyennés sur 30 temps de passage du fluide, après stabilisation des résidus de calcul.

La figure 4 présente le profil de vitesse moyenne  $\langle U \rangle$  selon  $x$ , le profil de température moyen et la variation des propriétés thermophysiques en fonction de la distance à la paroi adimensionnée  $y^+$ . On observe que l'on retrouve le profil de vitesse universel ainsi que la loi de paroi de Kader [7] dans le cas de la simulation incompressible à propriétés constantes.

En revanche, les profils moyens de vitesse et de température sont modifiés par la chauffe dans les simulations où les propriétés thermophysiques du fluide dépendent de la température. Si la simulation incompressible à viscosité variable montre une augmentation de la vitesse  $\langle U \rangle$  dans la globalité de la couche limite, la simulation quasi-compressible prédit en revanche une légère diminution de la vitesse dans la sous-couche tampon.

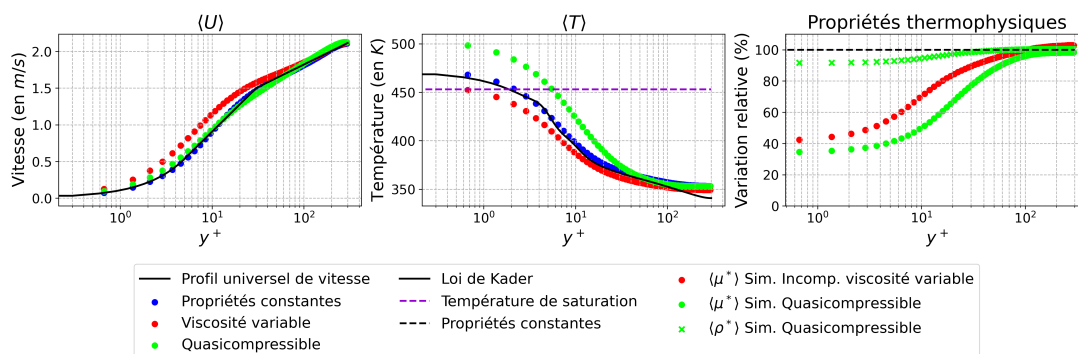


Figure 4. Profils moyen de vitesse longitudinale, température et des propriétés thermophysiques dans un écoulement à  $Re_\tau = 300$  chauffé par un flux uniforme à la paroi de  $2\text{MW}/\text{m}^2$

Les propriétés thermophysiques varient significativement jusqu'à  $y^+ = 100$ . Au delà, la température du fluide est égale à la température d'entrée dans la section d'essai à cause du cisaillement de l'écoulement. Il est intéressant de remarquer que, si la simulation incompressible à viscosité variable prédit une diminution de la température en proche paroi, la simulation quasicompressible prédit au contraire une augmentation de la température en proche paroi.

### 3.2. Mesures statistiques de la turbulence thermique

Afin de mieux comprendre l'interaction entre les champs de vitesse et de température au voisinage de la paroi, on s'intéresse à la modification des profils de fluctuations turbulentes dans l'écoulement. La figure 5 présente les corrélations de turbulence  $\langle T'T' \rangle$ ,  $\langle u'T' \rangle$  et  $\langle v'T' \rangle$  en fonction de la distance à la paroi adimensionnée  $y^+$ .

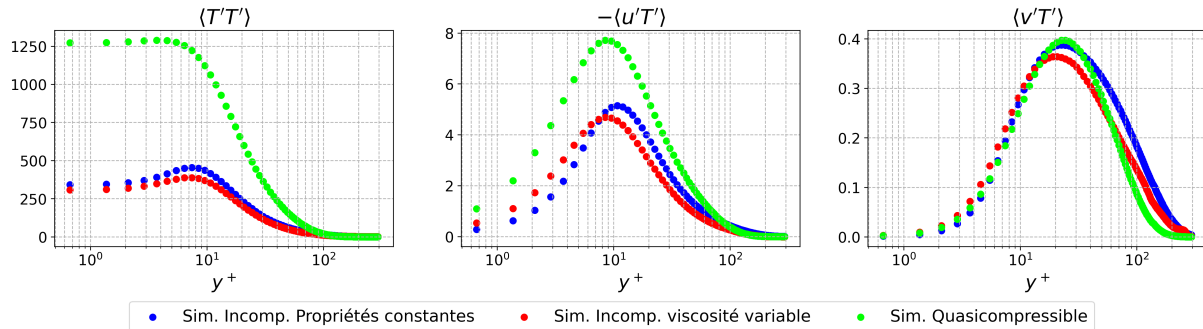


Figure 5. Profils de fluctuations turbulentes dans un écoulement à  $Re_\tau = 300$  chauffé par un flux uniforme à la paroi de  $2MW/m^2$

Pour l'ensemble des simulations, les fluctuations de température  $\langle T'T' \rangle$  sont non nulles à la paroi, en raison de la condition limite de flux imposé sur la paroi chauffante. Pour les simulations incompressibles, ces fluctuations atteignent un maximum à la limite des sous-couches visqueuse et tampon tandis que la simulation quasi-compressible prédit une valeur inchangée de fluctuations dans la sous couche visqueuse. De plus on remarque que la simulation quasi-compressible prédit une augmentation de 250% de l'intensité des fluctuations thermiques.

Par ailleurs, les fluctuations  $\langle u'T' \rangle$  dans la direction de l'écoulement sont décalées vers la paroi chauffante pour les simulations prenant en compte un couplage des champs de vitesse et de température. Cet effet semble donc lié à la diminution de la viscosité au voisinage de la paroi. Cependant, l'intensité de ces fluctuations augmente de 50% dans le cas quasi-compressible alors que celle-ci diminue de 10% dans le cas de la simulation incompressible à viscosité variable. Ainsi il apparaît que la prise en compte de la variation de masse volumique dans la modélisation physique est responsable de l'augmentation de l'intensité des fluctuations turbulentes  $\langle u'T' \rangle$ .

Enfin les fluctuations transverses  $\langle v'T' \rangle$  paraissent faiblement modifiées par l'introduction du couplage vitesse-température, tant dans le cas incompressible à viscosité variable que dans le cas quasi-compressible.

On observe une nette différence de comportement des fluctuations turbulentes entre les simulations incompressible à viscosité variable et quasi-compressible pour l'ensemble des statistiques présentées. Cela souligne l'intérêt de prendre en compte dans la modélisation les effets de compressibilité.

## 4. Conclusion

Dans cette communication, nous avons présenté différentes simulations d'un écoulement turbulent dans un canal plan chauffé uniformément sur l'une de ses parois par un flux de  $2MW/m^2$ . Une étude comparative des différentes hypothèses de couplage vitesse-température a été réalisée dans le but d'évaluer l'impact des choix de modélisation.

La simulation incompressible à propriétés constantes a permis de retrouver les lois universelles de vitesse et de température afin de valider notre approche. Si les profils moyens semblent

faiblement dévier des lois universelles, l'analyse des statistiques de la turbulence a permis de mettre en évidence des différences notables de comportement selon l'approche de modélisation choisie. Les écarts observés entre les simulations ont été partiellement explicités mais certaines variations demeurent mal comprises. Plusieurs pistes de développement sont envisagées.

Des travaux futurs introduiront un raffinement de maillage tétraédrique isotrope jusqu'à la longueur de Batchelor dans les sous-couches visqueuse et tampon afin de désactiver les modélisations LES sous mailles dans les régions d'intérêt. De plus, nous envisageons d'utiliser une équation d'état valable pour l'eau métastable surchauffée dans un calcul quasi-compressible avec l'ensemble des propriétés physiques dépendantes de la température. Cela permettrait de déterminer l'existence d'éventuels phénomènes de compensation d'erreur dans l'approche présentée ici.

Dans le cadre de l'étude des transitoires d'insertion de réactivité BORAX, la modélisation des fluctuations thermiques turbulentes revêt un intérêt capital afin de prédire l'état de la couche limite thermique à l'instant du déclenchement de l'ébullition nucléée et, dans le cas des transitoires les plus rapides, de la crise d'ébullition. C'est pourquoi, nous réaliserons une étude paramétrique en régime transitoire afin de mieux comprendre la formation et la déstabilisation des structures turbulentes en faisant varier différents paramètres thermohydrauliques : débit, pression, sous-saturation, temps caractéristique d'excursion exponentielle ainsi que la géométrie du canal.

## Références

- [1] F. Chavagnat, R. Nop, B. Phillips, N. Dorville, M.-C. Duluc, M. Bucci, *Investigation of transient subcooled flow boiling and critical heat flux in a narrow rectangular channel*. 19th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-19), Brussels, Belgium, March 6-11, 2022.
- [2] R. Nop, M.-C. Duluc, N. Dorville, A. Kossolapov, F. Chavagnat, M. Bucci, *An energy model for the transient flow boiling crisis under highly subcooled conditions at atmospheric pressure*. International Journal of Thermal Sciences, 168, 107042, 2021.
- [3] R. Nop, F. Chavagnat, M.-C. Duluc, N. Dorville, A. Kossolapov, M. Bucci, *Physical quantities relevant to characterize the flow in transient subcooled flow boiling crisis investigations*. 19th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-19), Brussels, Belgium, March 6-11, 2022.
- [4] F. Lluesma-Rodriguez, S. Hoyas, M. J. Perez-Quiles. *Influence of the computational domain on DNS of turbulent heat transfer up to  $Re_\tau = 2000$  for  $Pr = 0.71$* . International Journal of Heat and Mass Transfer, 122 :983-992, 2018.
- [5] P.-E. Angeli, U. Bieder, G. Fauchet. *Overview of the TrioCFD code : Main features, V & V procedures and typical applications to nuclear engineering.*, 16th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermalhydraulics (NURETH-16), Chicago, USA, August 30 September 4, 2015
- [6] F. Nicoud, F. Ducros, *Subgrid-Scale Stress Modelling Based on the Square of the Velocity Gradient Tensor*, Flow, Turbulence and Combustion, 62 :183-200, 1999.
- [7] B.A. Kader *Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 24 :1541-1544, 1981.
- [8] A. Richenderfer, A. Kossolapov, J. H. Seong, G. Saccone, E. Demarly, R. Kommajosyula, E. Baglietto, J. Buongiorno, M. Bucci, *Investigation of subcooled flow boiling and CHF using high-resolution diagnostics*, Experimental Thermal and Fluid Science, 99, 35-58, 2018.

## Remerciements

Nous remercions Christophe Bourcier et Elie Saikali pour les échanges informels et leurs conseils avisés.

Les calculs ont été rendus possibles grâce à l'accès aux ressources HPC du TGCC sous l'allocation A0152A13031 du GENCI.