

Simulation numérique directe de l'ébullition nucléée sur maillages non structurés

Savinien Pertant, Giovanni Ghigliotti, Guillaume Balarac
LEGI, Grenoble

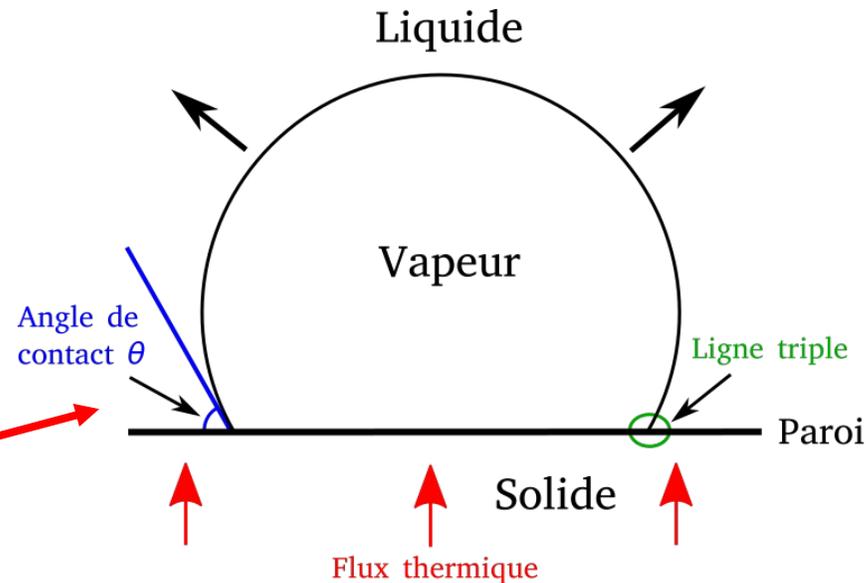


L'ébullition nucléée : un phénomène complexe

- Bulle caractérisée par sa ligne triple et son angle de contact



Régime d'ébullition nucléée [1]



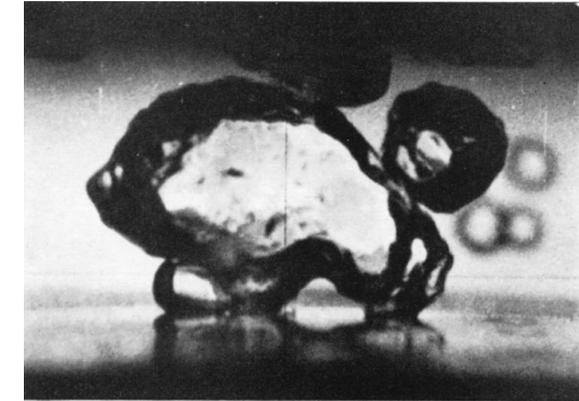
Formation d'une micro-couche sous la bulle [2]

Questions ouvertes/ne faisant pas consensus:

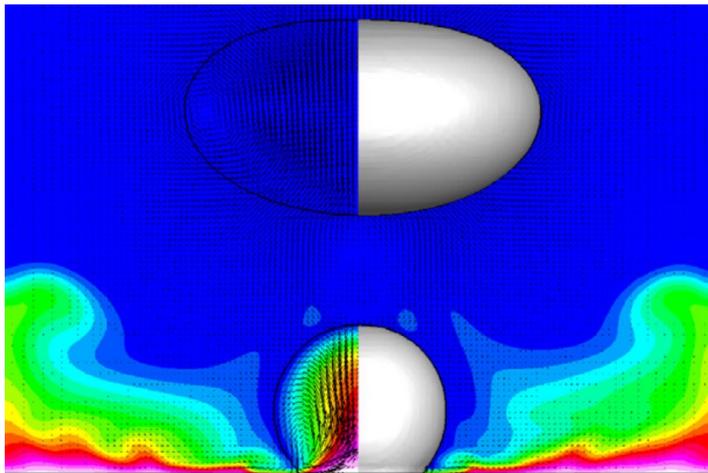
- Lien entre l'angle microscopique (équilibre thermodynamique) et l'angle macroscopique ?
- Lien entre le diamètre de détachement de la bulle et l'angle de contact [3, 4] ?
- Influence des propriétés de la surface solide (mouillabilité) sur le transfert thermique ?

Contexte numérique

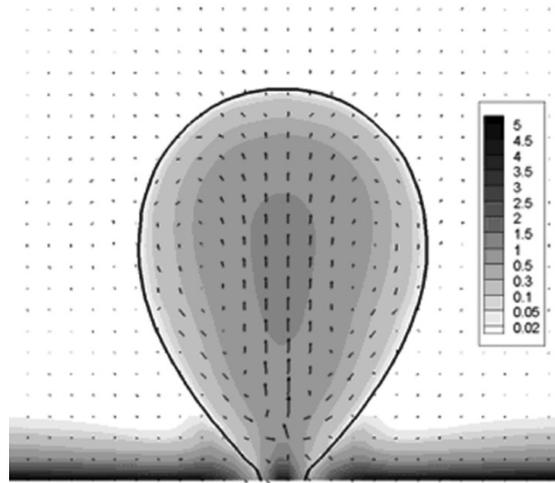
- Petites échelles spatiales et temporelles & interactions de bulles
Mesures expérimentales difficiles
→ alternative : simulation numérique
- Simulations directes (DNS) d'ébullition nucléée depuis ~ 10 ans



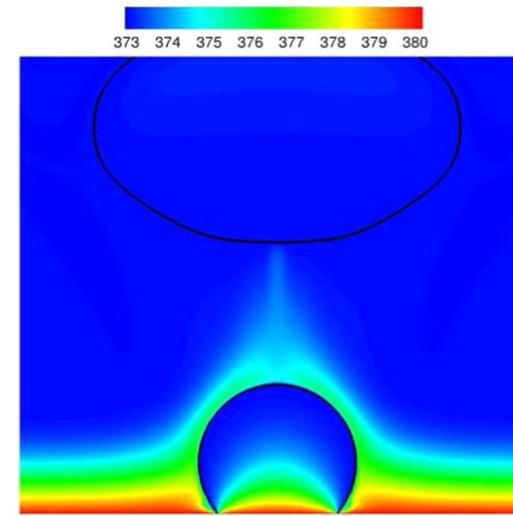
Coalescence de bulles sur une paroi [1]



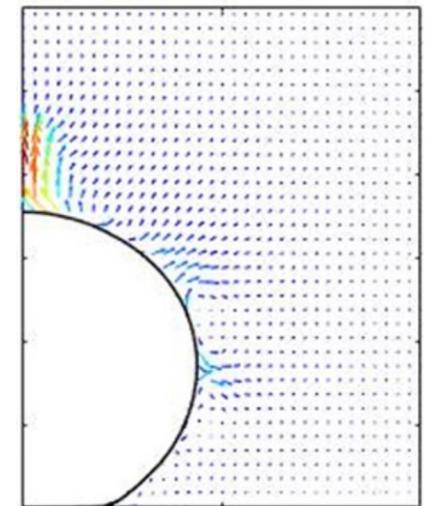
[2]



[3]



[4]

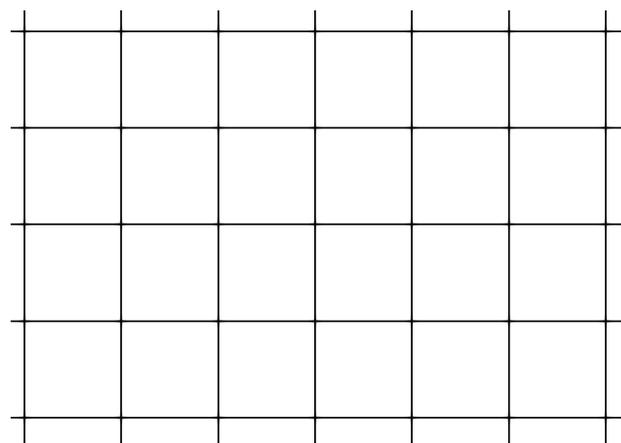


[5]

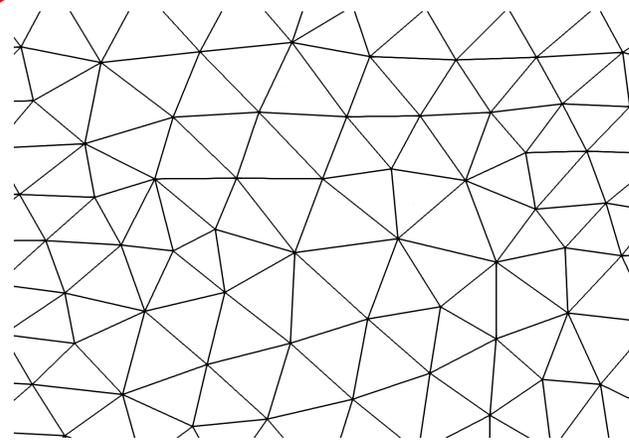
Contexte numérique

⚠ Pas de DNS d'ébullition nucléée sur maillage non structuré !

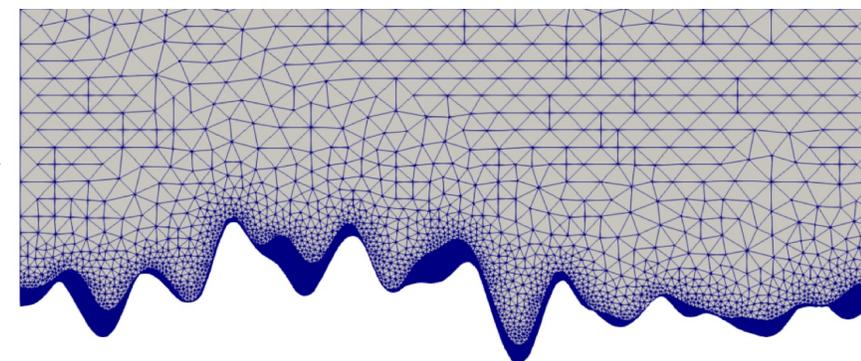
- Simulations limitées à des géométries simples
- Nombre de mailles élevé sur les grilles cartésiennes (souvent 2D axisymétrique)



Maillage structuré (cartésien)



Maillage non structuré



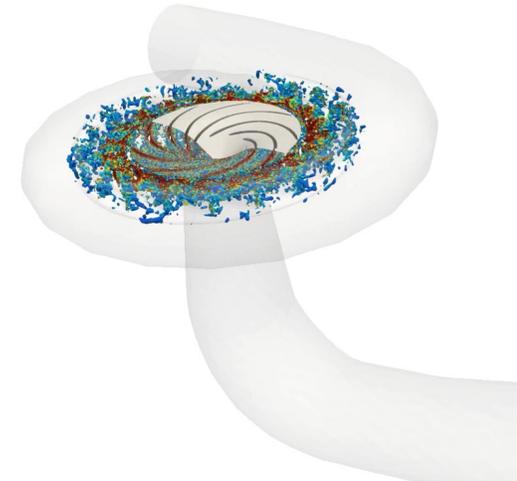
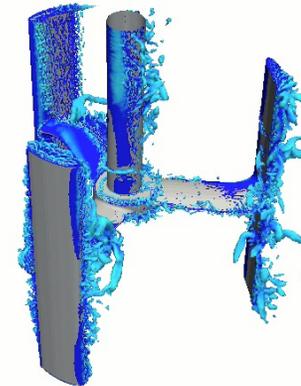
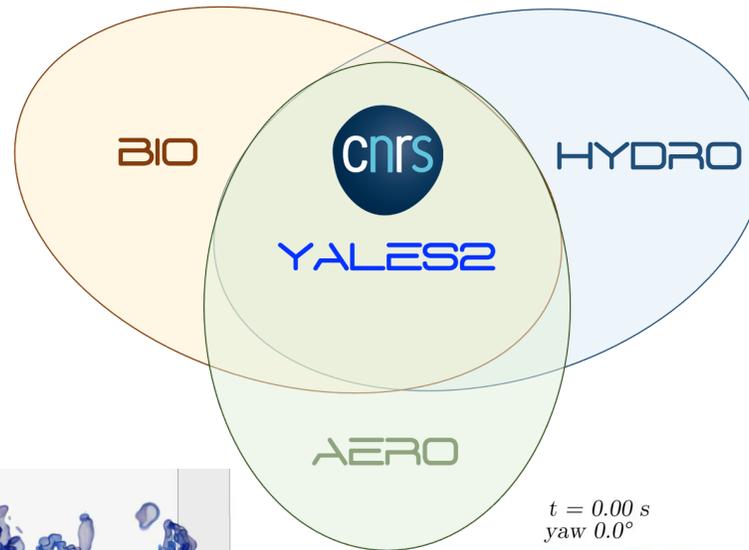
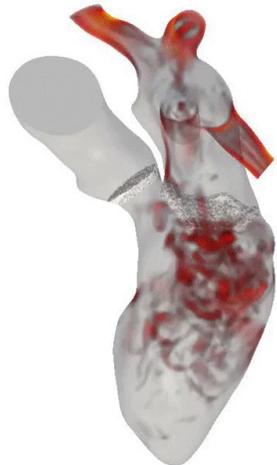
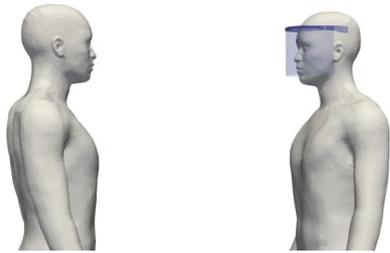
Maillage d'une paroi rugueuse [1]

Objectif : développer une méthode numérique pour simuler l'ébullition nucléée sur maillages non structurés

Outil numérique : bibliothèque **YALES2** [1, 2]

Développée au CORIA et par les partenaires académiques/industriels

- ✓ Méthode volumes finis sur maillages non structurés → Géométries complexes
- ✓ Massivement parallèle → Milliards d'éléments



$t = 0.00 \text{ s}$
yaw 0.0°

YALES2
CORIA F. Houtin-Mongrolle,
P. Benard, V. Moureau, G. Lartigue

Plan de la présentation

I. Développement d'une méthode pour simuler les lignes triples

II. Simulations d'écoulements avec lignes triples

SANS
changement de
phase

III. Présentation du solveur d'ébullition

IV. Simulations d'ébullition

AVEC changement de phase

V. Conclusions et perspectives

Écoulements diphasiques incompressibles

SANS changement de phase

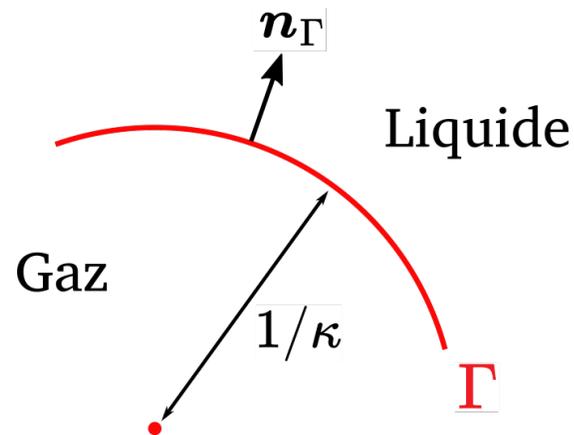
- Equations de Navier-Stokes incompressibles :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{Incompressibilité}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \left(\mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \right) + \rho \mathbf{g} \quad \text{Conservation quantité de mouvement}$$

- Conditions de « saut » à l'interface :

$$[\mathbf{u}]_{\Gamma} = \mathbf{0} \quad \text{Conservation masse à travers l'interface}$$



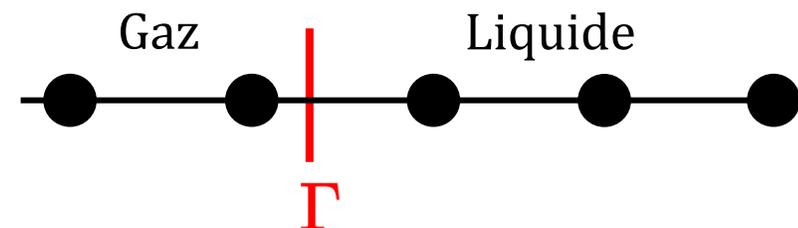
$$[A]_{\Gamma} = A_{liq} - A_{gaz}$$

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n}_{\Gamma}$$

$$[P]_{\Gamma} = \sigma \kappa + \left[\mu (\mathbf{n}_{\Gamma})^T \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \mathbf{n}_{\Gamma} \right]_{\Gamma} \quad \text{Conservation quantité de mouvement à travers l'interface}$$

Méthode numérique : suivi de l'interface (1)

⚠ Problématique : interface définie en sous-maille



→ Besoin d'une méthode pour localiser l'interface et suivre son déplacement

- Suivi eulérien de l'interface : Méthode *Level-Set* [1]

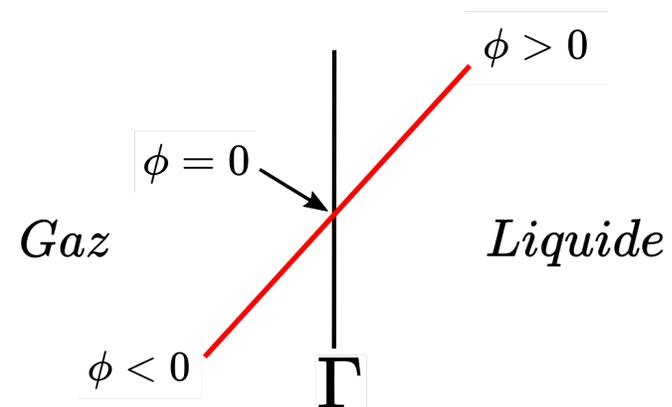
⊕ Description géométrique de Γ

⊖ Conservation de la masse

Level-set « classique » :

$\phi \equiv$ Distance signée à l'interface

➔ $\Gamma = \{ \mathbf{x} \mid \phi(\mathbf{x}, t) = 0 \}$



Méthode numérique : suivi de l'interface (2)

Level-set conservative (CLS) [1]

$$\psi = \frac{1}{2} \left(\tanh \left(\frac{\phi}{2\varepsilon} \right) + 1 \right) \quad \rightarrow \text{Profil} \equiv \text{Heaviside lissé}$$

➔ $\Gamma = \{ \mathbf{x} \mid \psi(\mathbf{x}, t) = 0.5 \}$

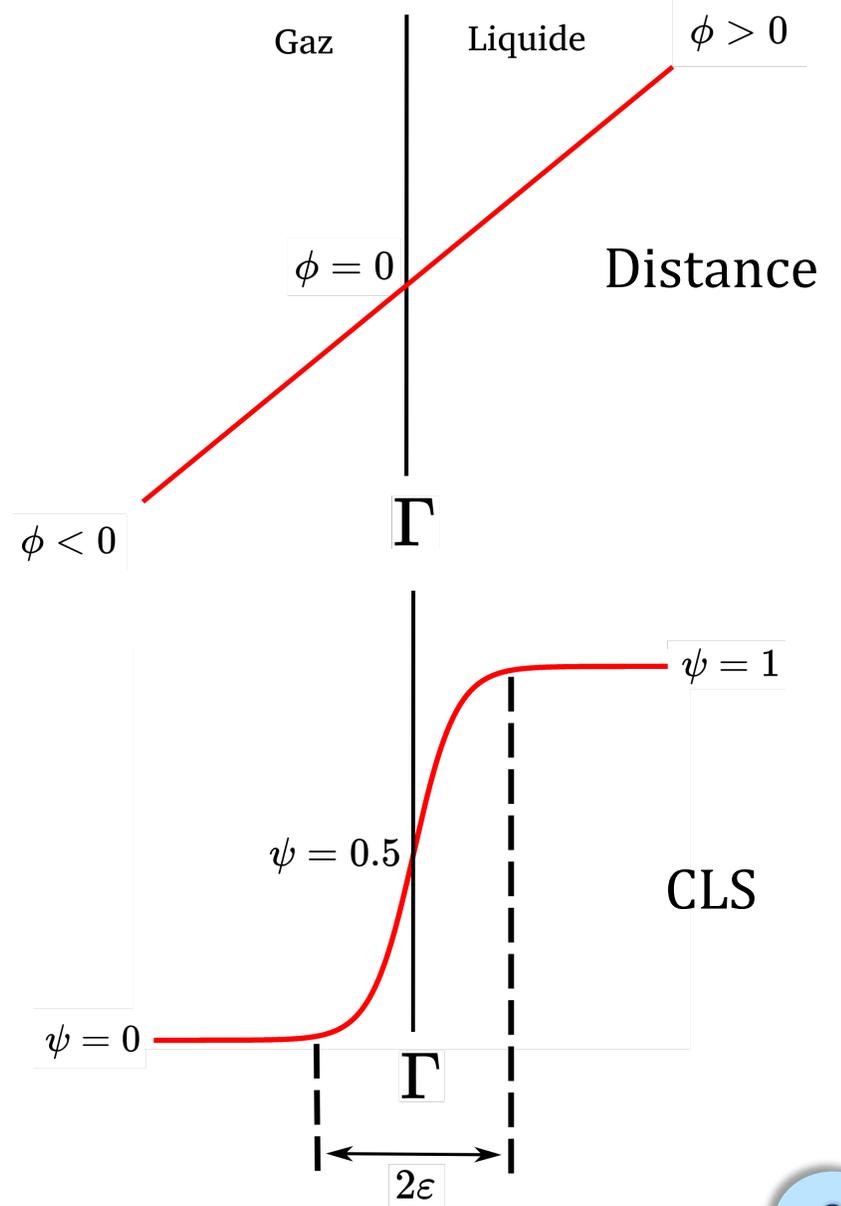
$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\psi) = 0 \quad \text{Advection}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \nabla \cdot \left(\frac{1}{4 \cosh^2 \left(\frac{\phi_{\text{map}}}{2\varepsilon} \right)} (\nabla \phi_{\text{map}} \cdot \mathbf{n}_{\Gamma} - 1) \mathbf{n}_{\Gamma} \right)$$

$$\phi_{\text{map}} = \varepsilon \ln \left(\frac{\psi}{1 - \psi} \right)$$

$$\mathbf{n}_{\Gamma} = \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|}$$

Réinitialisation du profil [2, 3]
 Besoin de la distance ϕ pour évaluer \mathbf{n}_{Γ} et κ



Méthode numérique : gestion des discontinuités

Méthode Ghost-Fluid [1, 2]

1) Calcul du saut à l'interface

$$[\zeta]_{\Gamma} = \zeta_{\Gamma,liq} - \zeta_{\Gamma,gaz}$$

2) Extension du saut dans le domaine

$$[\zeta](x) = [\zeta]_{\Gamma} + (x - x_{\Gamma}) \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{\Gamma}$$

3) Calcul des dérivées spatiales

$$\left. \frac{d\zeta}{dx} \right|_{gaz,i} = \frac{\zeta_{gaz,i+1} - \zeta_{gaz,i-1}}{2\Delta x} = \frac{\zeta_{liq,i+1} - [\zeta]_{i+1} - \zeta_{gaz,i-1}}{2\Delta x}$$

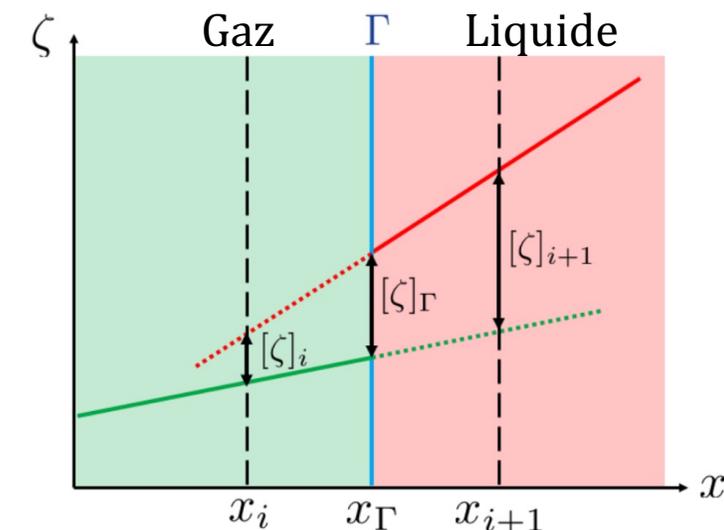


Illustration de la méthode Ghost-Fluid [3]

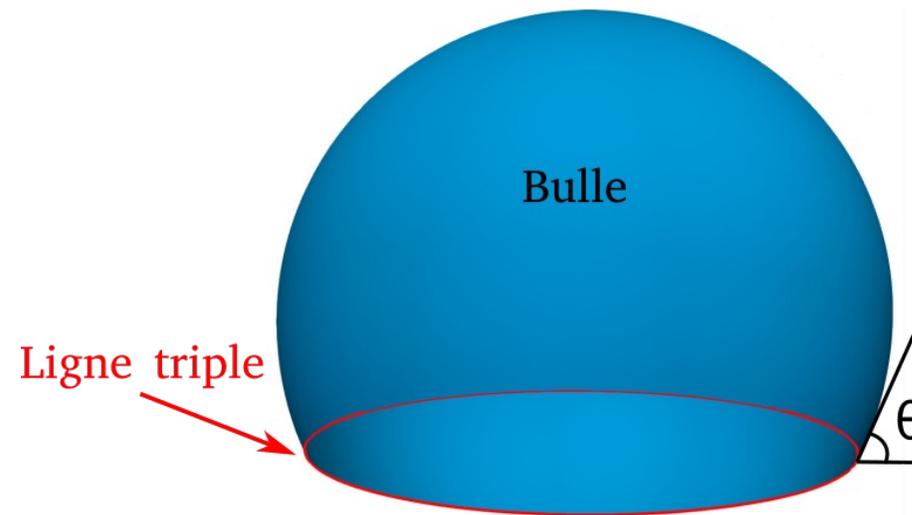
Pour la pression : $[P]_{\Gamma} = \sigma \kappa + \left[\mu (\mathbf{n}_{\Gamma})^T \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \mathbf{n}_{\Gamma} \right]_{\Gamma}$ avec $\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n}_{\Gamma}$

→ Traitement « raide » de la discontinuité de pression

Ligne triple : mouvement + imposition angle de contact

Imposition de :

- angle de contact
- vitesse de la ligne triple à la paroi



Condition de vitesse à la paroi

⚠ Condition de non glissement : ligne triple bloquée + divergence des contraintes visqueuses [1]

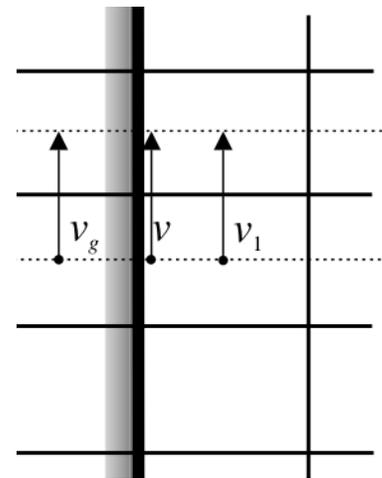
→ Nécessité d'autoriser le glissement de la ligne triple sur la paroi

✓ **Solution** : condition de glissement de Navier (glissement partiel) [2]



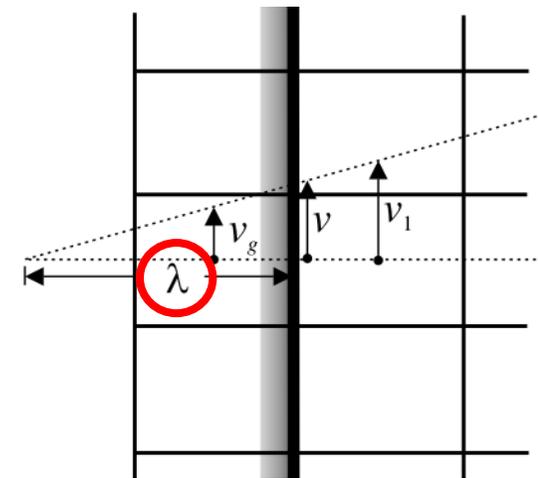
$$u_{\parallel} = \lambda \frac{\partial u_{\parallel}}{\partial n_w} \Big|_{wall}$$

Longueur de glissement : $\lambda = \Delta_{max}^{paroi}$

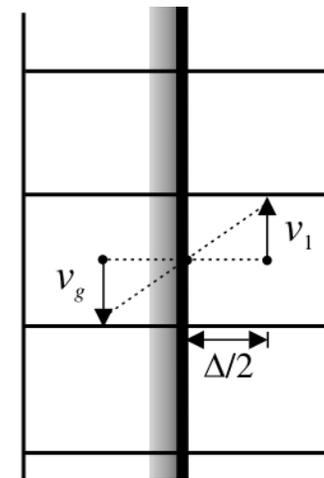


Glissement total

Conditions de vitesse en paroi [3]



Glissement partiel



Non-glissement

Imposition de l'angle de contact

⚠ Effets de mouillabilité non automatiquement inclus avec la méthode level-set

→ Besoin d'ajouter une contrainte pour imposer l'angle de contact désiré

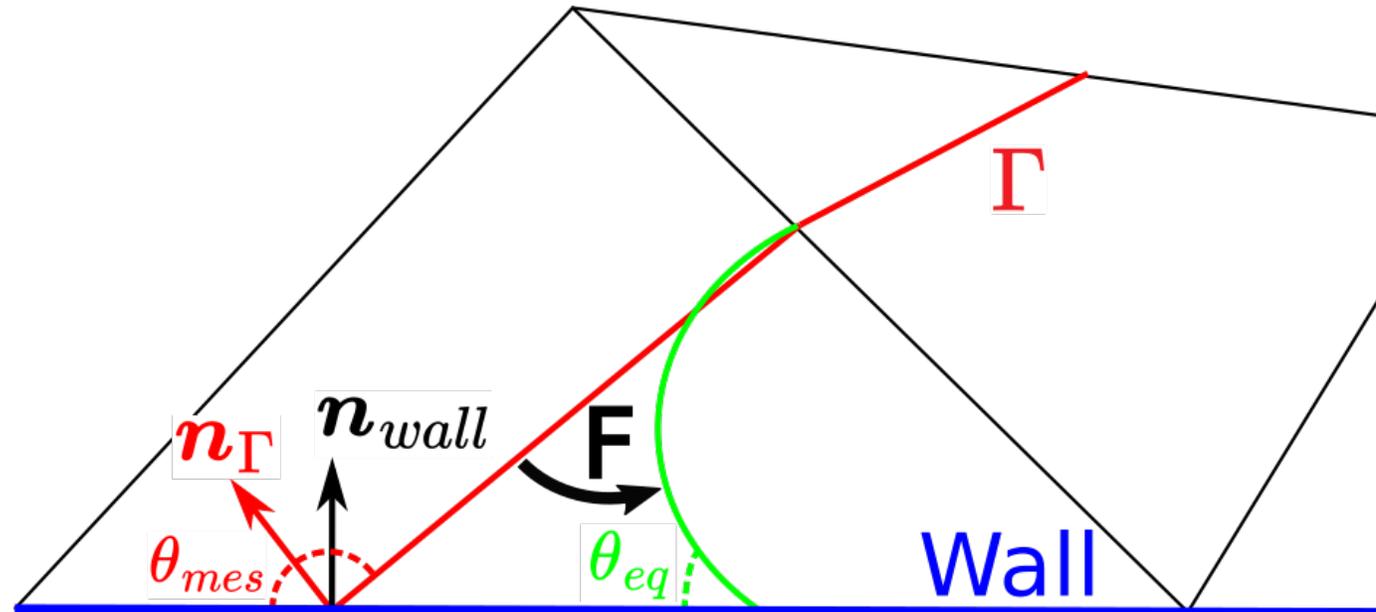
✓ **Solution** : Modification de la courbure à la ligne triple [1, 2]

$$\kappa_{LT} = \kappa + \kappa_{SGS}$$

$$\kappa_{SGS} = - \frac{\mathbf{n}_{\Gamma} \cdot \mathbf{n}_{wall} + \cos(\theta_{eq})}{\Delta/2}$$

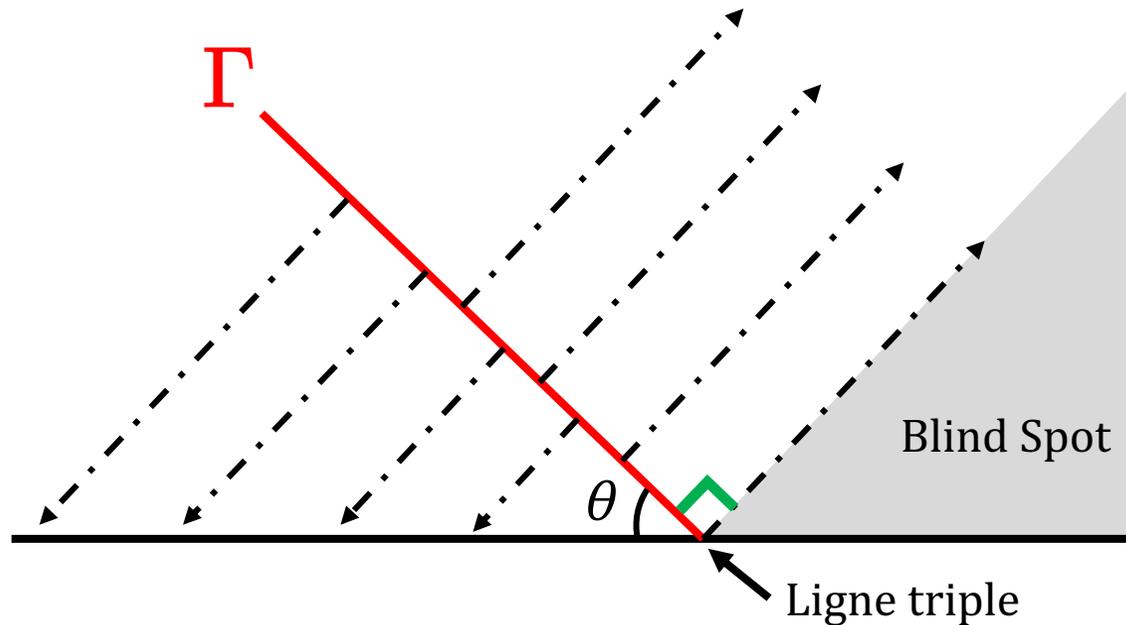
$$\kappa_{SGS} \rightarrow [P]_{\Gamma} \rightarrow \nabla P \rightarrow \mathbf{u}$$

$$\vec{\mathbf{F}} \sim \theta_{eq} - \theta_{mes}$$



Calcul de normale et courbure à la ligne triple (1)

⚠ \exists Zone où la distance orthogonale à l'interface n'est pas définie : *Blind Spot* [1]



$$\mathbf{n}_\Gamma = \frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|}$$

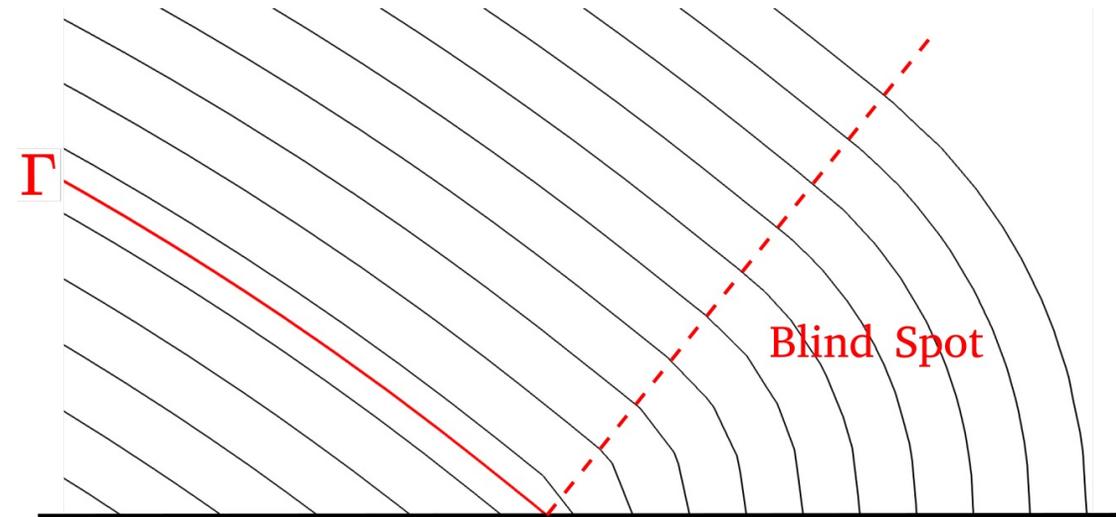
$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n}_\Gamma$$

Calcul géométrique de la distance dans YALES2 [2]

→ $\phi \equiv$ distance à la ligne triple dans le Blind Spot

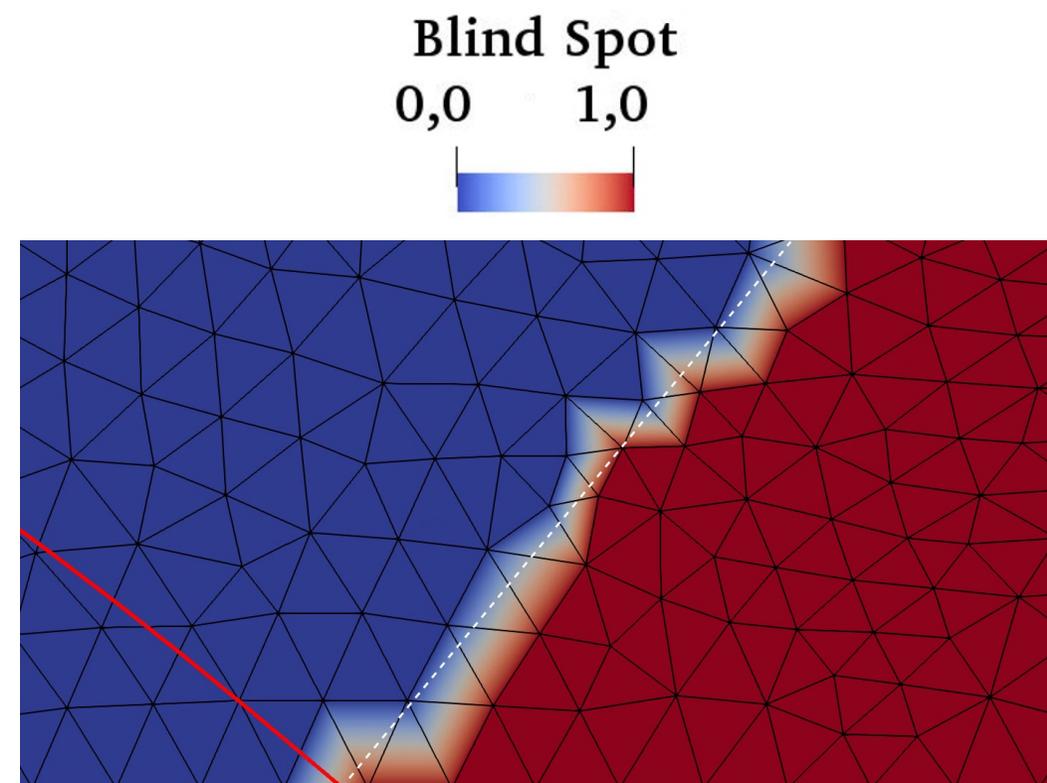
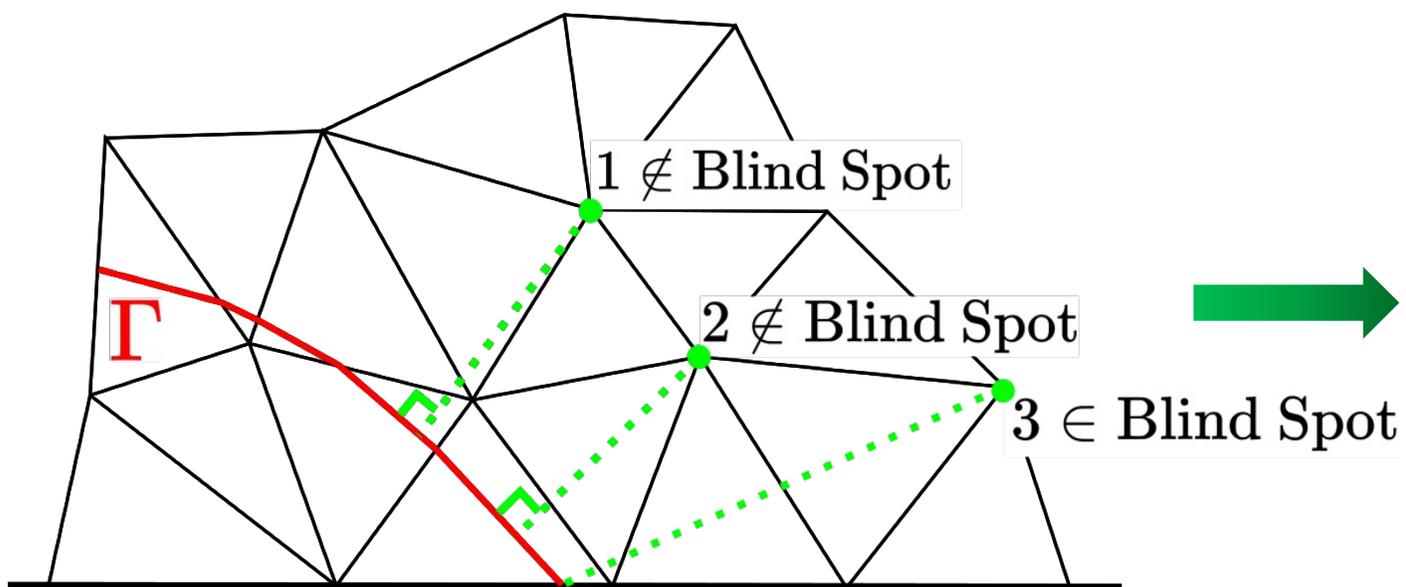
→ Normale et courbure à la ligne triple polluées

→ Courants parasites



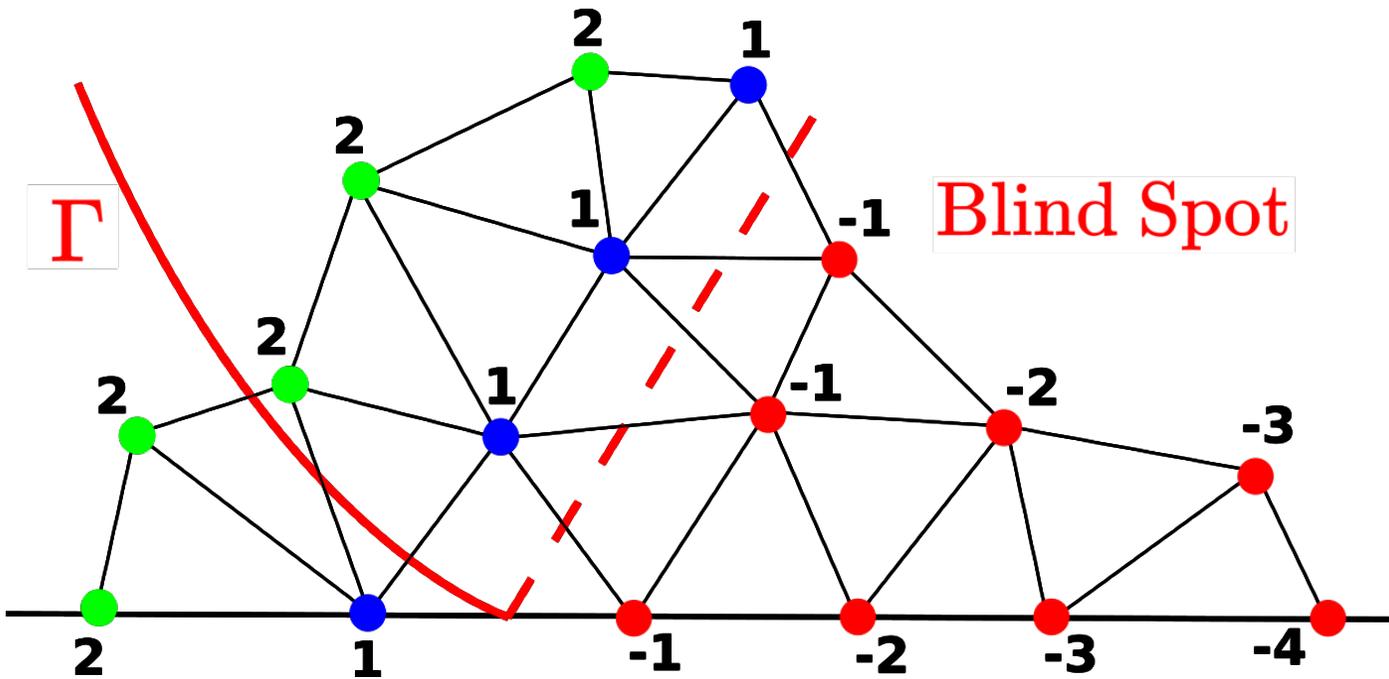
Calcul de normale et courbure à la ligne triple (2)

- 1) Identification des nœuds du Blind Spot
- 2) Classement des nœuds du Blind Spot
- 3) Extensions de distance dans le Blind Spot



Calcul de normale et courbure à la ligne triple (3)

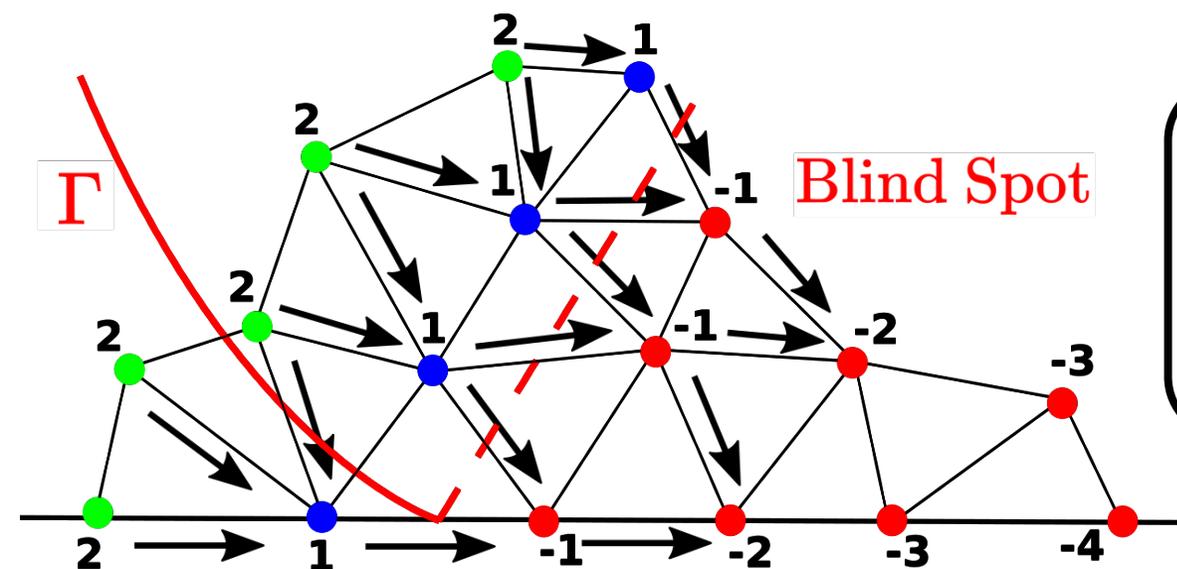
- 1) Identification des nœuds du Blind Spot
- 2) Classement des nœuds du Blind Spot
- 3) Extensions de distance dans le Blind Spot



- $\phi, \nabla\phi, \nabla\nabla\phi$ OK
- ϕ OK
 $\nabla\phi, \nabla\nabla\phi$ pas OK
- $\phi, \nabla\phi, \nabla\nabla\phi$ pas OK

Calcul de normale et courbure à la ligne triple (4)

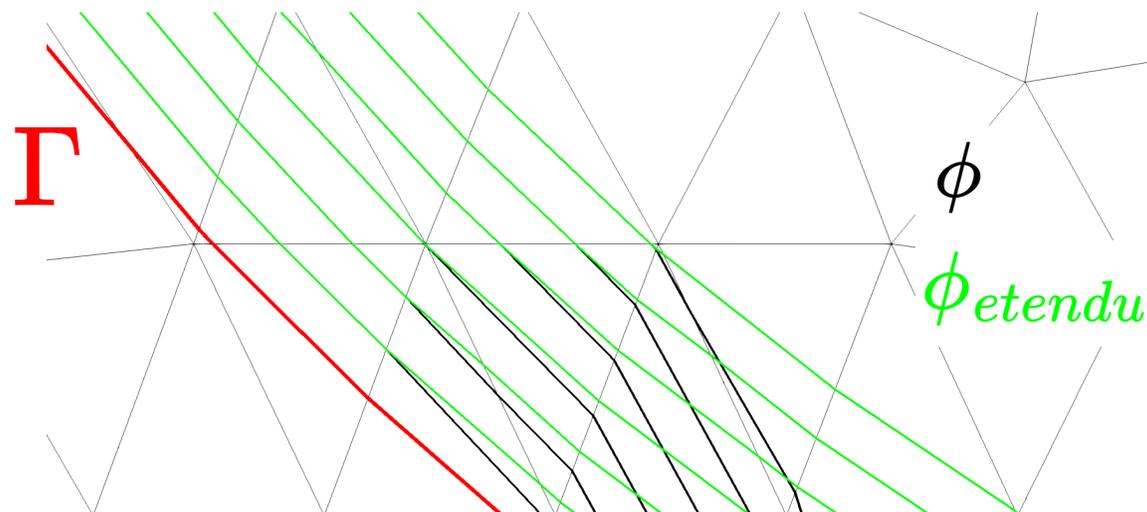
- 1) Identification des nœuds du Blind Spot
- 2) Classement des nœuds du Blind Spot
- 3) Extensions de distance dans le Blind Spot



$$\begin{aligned} \nabla \nabla \phi_{-1} &= \nabla \nabla \phi_1 \\ \nabla \nabla \phi_1 &= \nabla \nabla \phi_2 \\ \nabla \phi_{-1} &= \nabla \phi_1 + \nabla \nabla \phi_1 \Delta_{1,-1} \nabla \nabla \phi_2 \Lambda_{2,-1} \\ \phi_{-1} &= \phi_1 + \Delta_{1,-1} \nabla \phi_1 + \frac{1}{2} (\Delta_{1,-1} \otimes \Delta_{1,-1}) : \nabla \nabla \phi_1 \end{aligned}$$

Calcul de normale et courbure à la ligne triple (5)

Résultats des extensions dans le Blind Spot :



Courbure et normale interpolées à l'interface avec la méthode de [1]

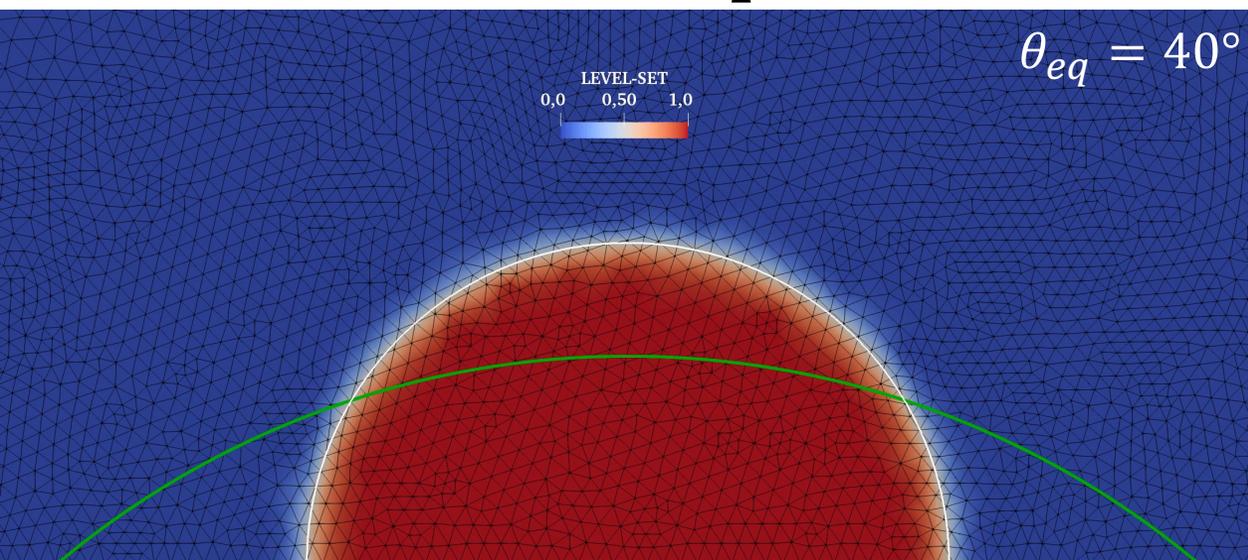
Erreur sur la courbure à la ligne triple en 2D pour $\theta=20^\circ$:

Δ (m)	4×10^{-3}	2×10^{-3}	1×10^{-3}	5×10^{-4}	2.5×10^{-4}
$L^\infty(\kappa_{LT})$, sans extensions	791%	2319%	3809%	5505%	10666%
$L^\infty(\kappa_{LT})$, avec extensions	1.7%	12.3%	0.6%	5.2%	1.8%

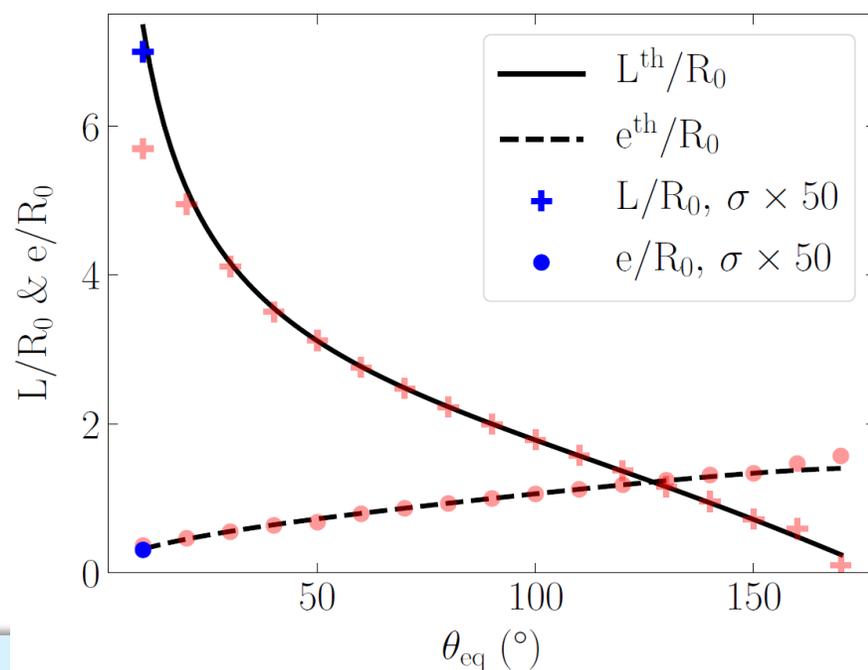
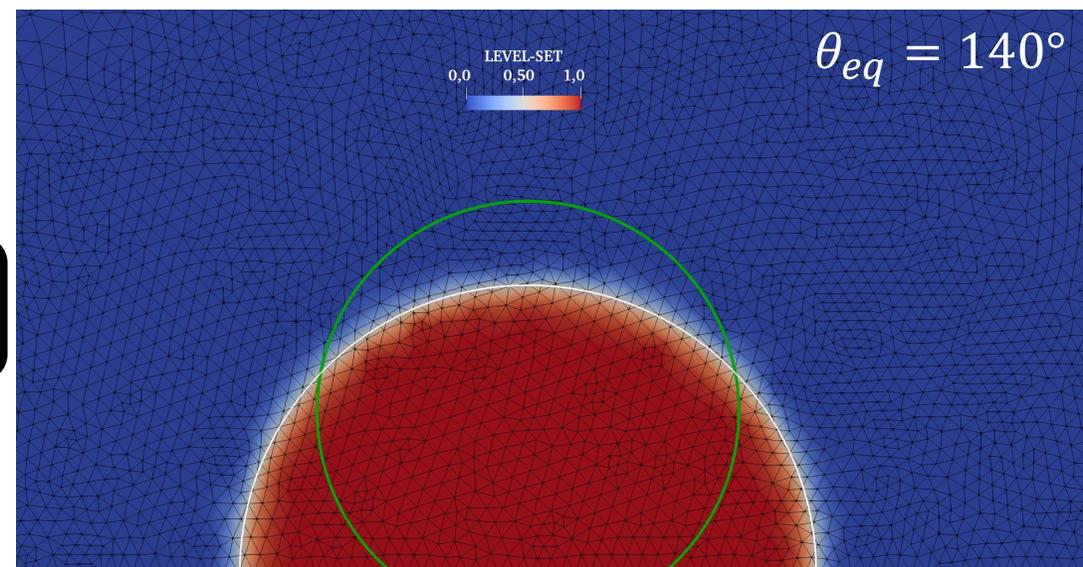
→ La courbure ne diverge plus grâce aux extensions

→ Magnitude de l'erreur fortement réduite

Validation de l'imposition de l'angle de contact



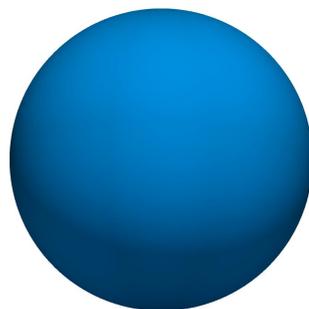
$$\Delta = \frac{R_0}{20}$$



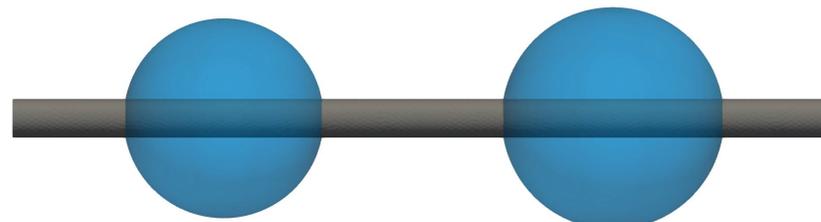
→ **Imposition de l'angle de contact précise**
pour une large plage d'angles

→ Angles faibles : meilleure imposition en augmentant la tension de surface

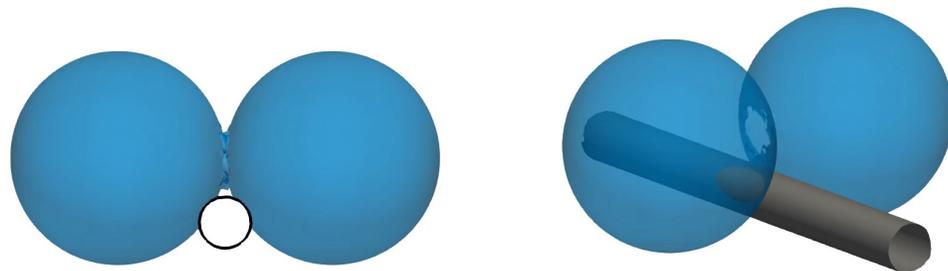
Exemples d'applications



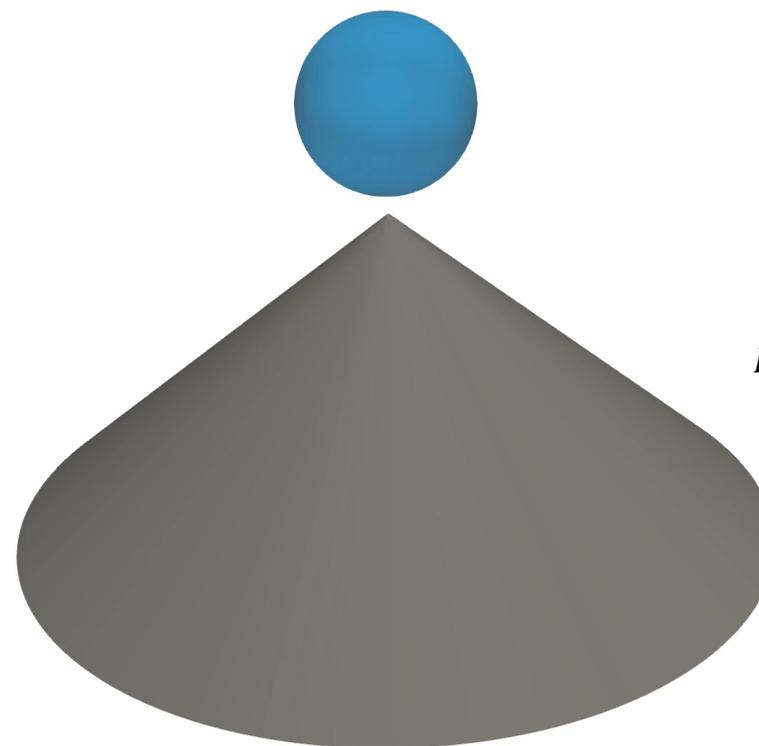
Etalement de goutte sur une plaque



Détachement par gravité d'une goutte suspendue à un fil



Coalescence et éjection de 2 gouttes sur un fil hydrophobe



Impact de goutte sur un cône superhydrophobe

→ Méthode numérique et résultats publiés dans **Pertant et al. JCP 2021** et [1, 2]

Synthèse de la méthode proposée pour la ligne triple

- ✓ Précision de l'imposition de l'angle de contact pour une large gamme d'angles
- ✓ Robustesse
- ✓ Géométries complexes
- ✓ Bonne conservation de la masse (CLS)

Plan de la présentation

I. Développement d'une méthode pour simuler la ligne triple

II. Simulations d'écoulements avec ligne triple

III. Présentation du solveur d'ébullition

IV. Simulations d'ébullition

V. Conclusions et perspectives

SANS
changement de
phase

AVEC changement de phase

Écoulements diphasiques incompressibles

AVEC changement de phase

- Equations de Navier-Stokes incompressibles :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{Incompressibilité}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \left(\mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \right) + \rho \mathbf{g} \quad \text{Conservation quantité de mouvement}$$

- Equation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \frac{1}{\rho C_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T)$$

Dynamique



\dot{m}

Taux de transfert de masse (kg.m⁻².s⁻¹)



Thermique

Conditions à l'interface

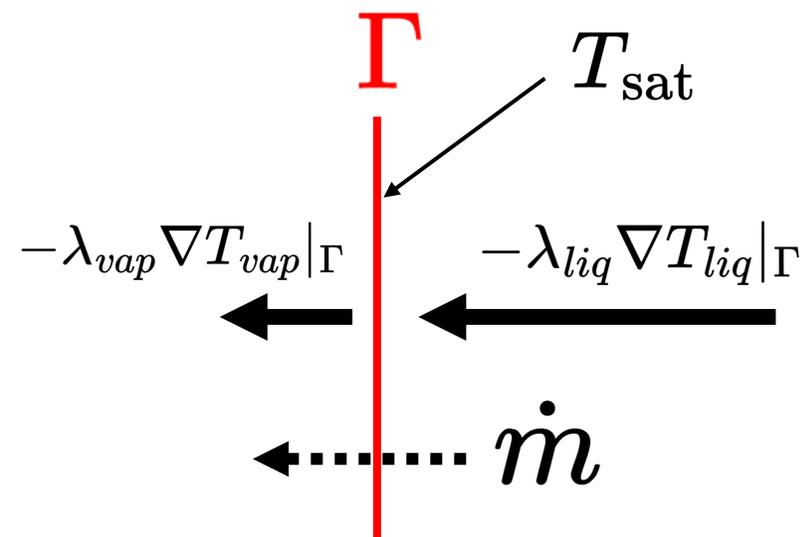
AVEC changement de phase

Thermique

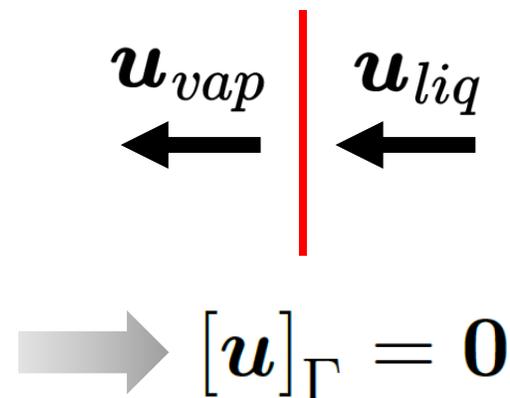
- $T_\Gamma = T_{\text{sat}}$
- $\frac{[-\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}_\Gamma]_\Gamma}{L_{\text{vap}}} = \dot{m}$

Dynamique

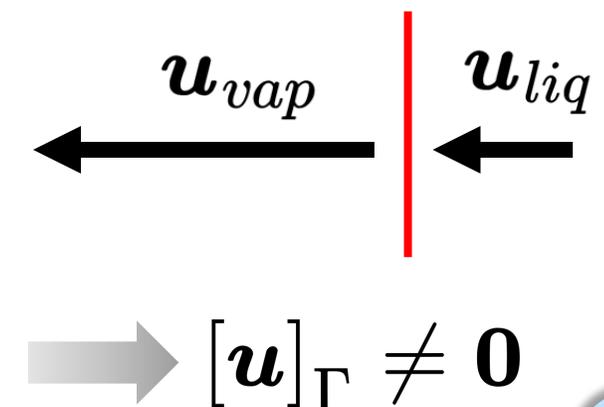
- $[\mathbf{u}]_\Gamma = \dot{m} \left[\frac{1}{\rho} \right]_\Gamma \mathbf{n}_\Gamma$
- $[P]_\Gamma = \sigma \kappa + \left[\mu (\mathbf{n}_\Gamma)^T \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \mathbf{n}_\Gamma \right]_\Gamma - \dot{m}^2 \left[\frac{1}{\rho} \right]_\Gamma$



Si $\rho_{\text{liq}} = \rho_{\text{vap}}$



Mais $\rho_{\text{liq}} \neq \rho_{\text{vap}}$



Solveur d'ébullition

(Solveur développé par G. Sahut dans YALES2 [1] , présentation GDR TRANSINTER 2019)

⚠ Vitesse discontinue à l'interface : $[\mathbf{u}]_{\Gamma} = \dot{m} \begin{bmatrix} 1 \\ -\rho \end{bmatrix}_{\Gamma} \mathbf{n}_{\Gamma}$

→ **Formalisme à 2 vitesses** définies dans tout le domaine

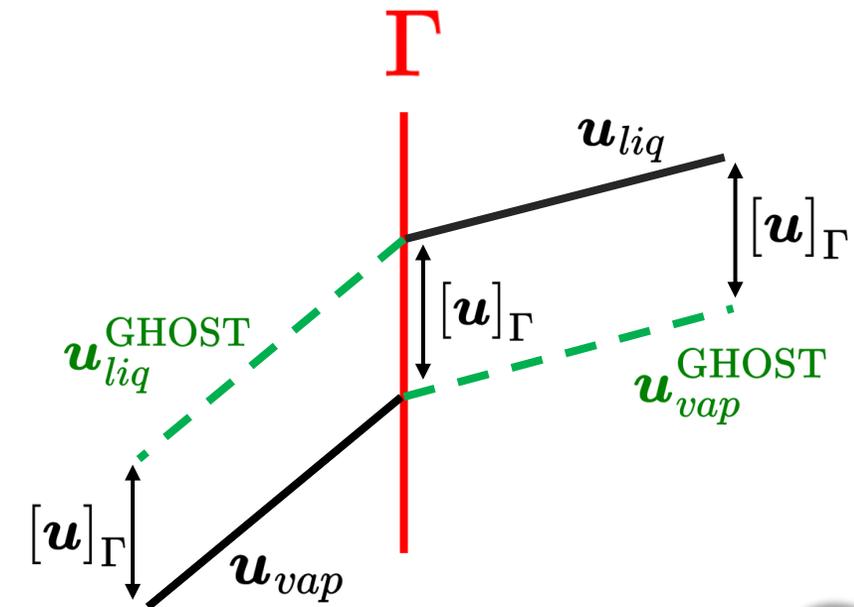
$$\frac{\partial \mathbf{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) = -\frac{\nabla P}{\rho_k} + \frac{1}{\rho_k} \nabla \cdot \left(\mu_k \left(\nabla \mathbf{u}_k + (\nabla \mathbf{u}_k)^T \right) \right) + \mathbf{g} \quad \text{avec } k = \{\text{liq, vap}\}$$

→ Extensions de vitesses dans les phases *ghost* [2]

$$\mathbf{u}_{liq}^{\text{GHOST}} = \mathbf{u}_{vap} + \dot{m} \begin{bmatrix} 1 \\ \rho \end{bmatrix}_{\Gamma} \mathbf{n}_{\Gamma}$$

$$\mathbf{u}_{vap}^{\text{GHOST}} = \mathbf{u}_{liq} - \dot{m} \begin{bmatrix} 1 \\ \rho \end{bmatrix}_{\Gamma} \mathbf{n}_{\Gamma}$$

→ Discontinuité de vitesse prise en compte de manière raide



Solveur d'ébullition

(Solveur développé par G. Sahut dans YALES2 [1], présentation GDR 2019)

⚠ Flux conductifs discontinus à l'interface : $\frac{[-\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}_\Gamma]_\Gamma}{L_{vap}} = \dot{m}$

→ **Formalisme à 2 températures** définies dans tout le domaine

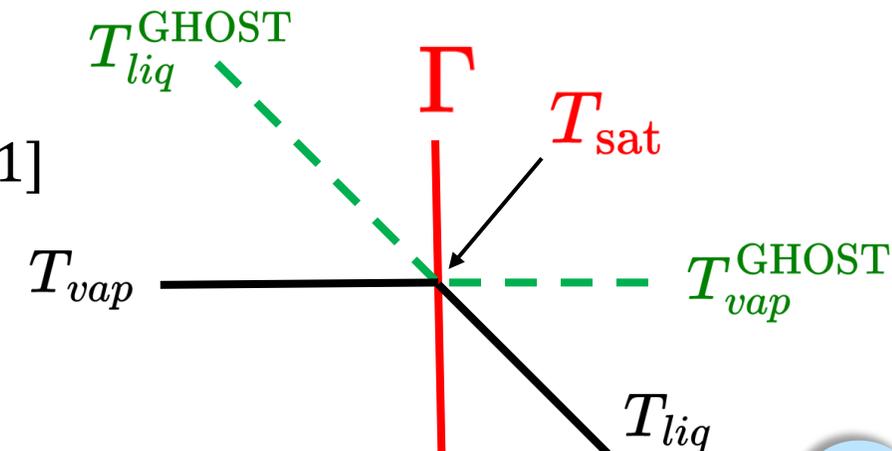
$$\frac{\partial T_k}{\partial t} + \mathbf{u}_k \cdot \nabla T_k = \frac{1}{\rho_k c_{p,k}} \nabla \cdot (\lambda_k \nabla T_k) \quad \rightarrow \text{Résolution indépendante dans les deux phases}$$

→ **Condition de Dirichlet immergée** $T_{\Gamma,k} = T_{sat}$ imposée dans le terme diffusif

→ Implicitation du terme diffusif (+ stable)

→ Extensions de température avec développements de Taylor [1]

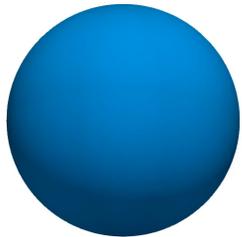
$$\dot{m} = \frac{-\lambda_{liq} \nabla T_{liq}|_\Gamma + \lambda_{vap} \nabla T_{vap}|_\Gamma}{L_{vap}} \cdot \mathbf{n}_\Gamma$$



Depuis la dernière rencontre GDR...

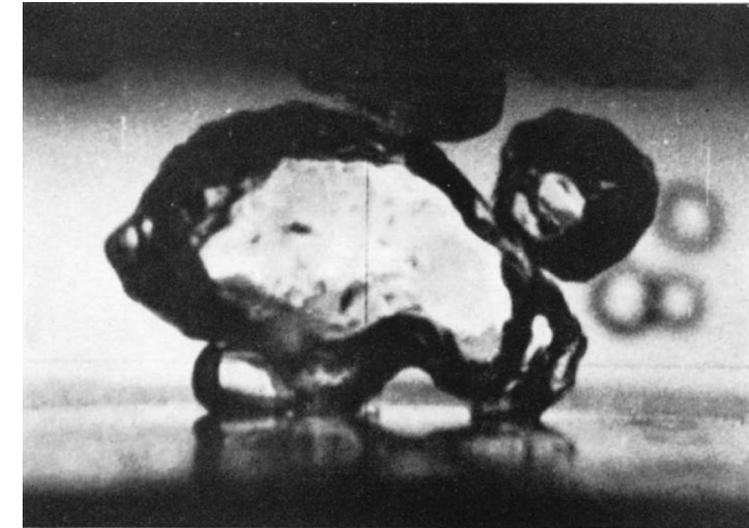
(Thèse G. Sahut, 2019) :

- ✓ Transport de l'interface : level-set distance (SDF) → maintenant CLS
- ✓ Maillages statiques → maintenant adaptation dynamique (AMR)
- ✓ Croissance de bulle sans gravité → ébullition nucléée



Thèse S. Pertant (2022)

- + Gravité
- + Paroi chauffée
- + Ligne triple

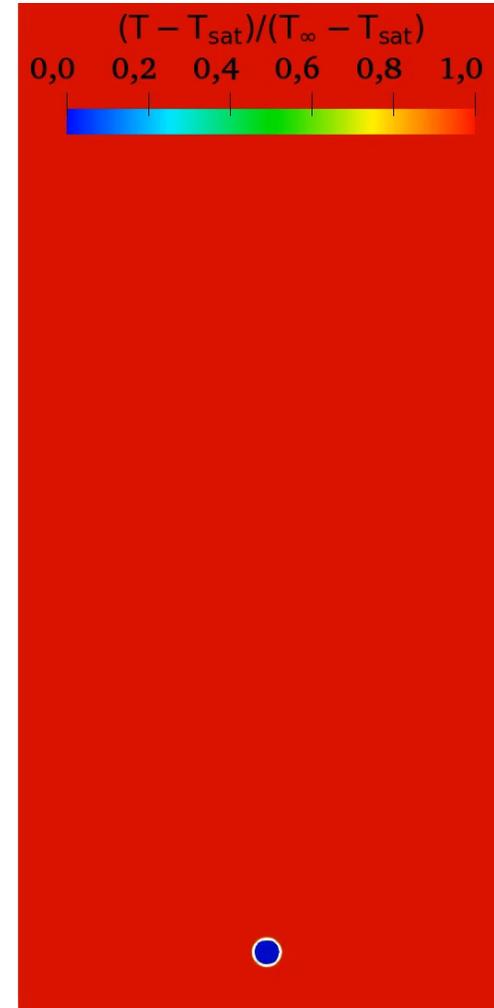
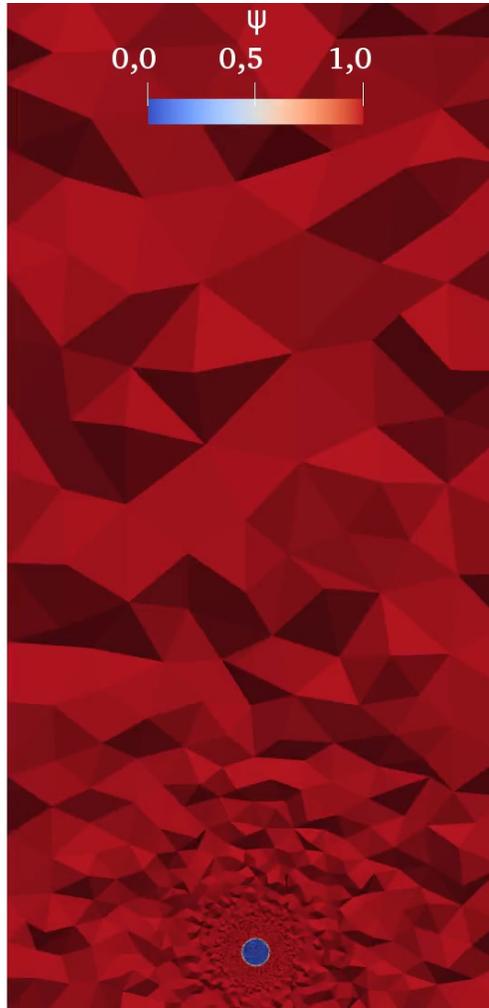


Objectif n°1 : gestion de la ligne triple dans YALES2 

Objectif n°2 : poursuite du développement du solveur d'ébullition → ébullition nucléée

Ascension de bulle avec changement de phase

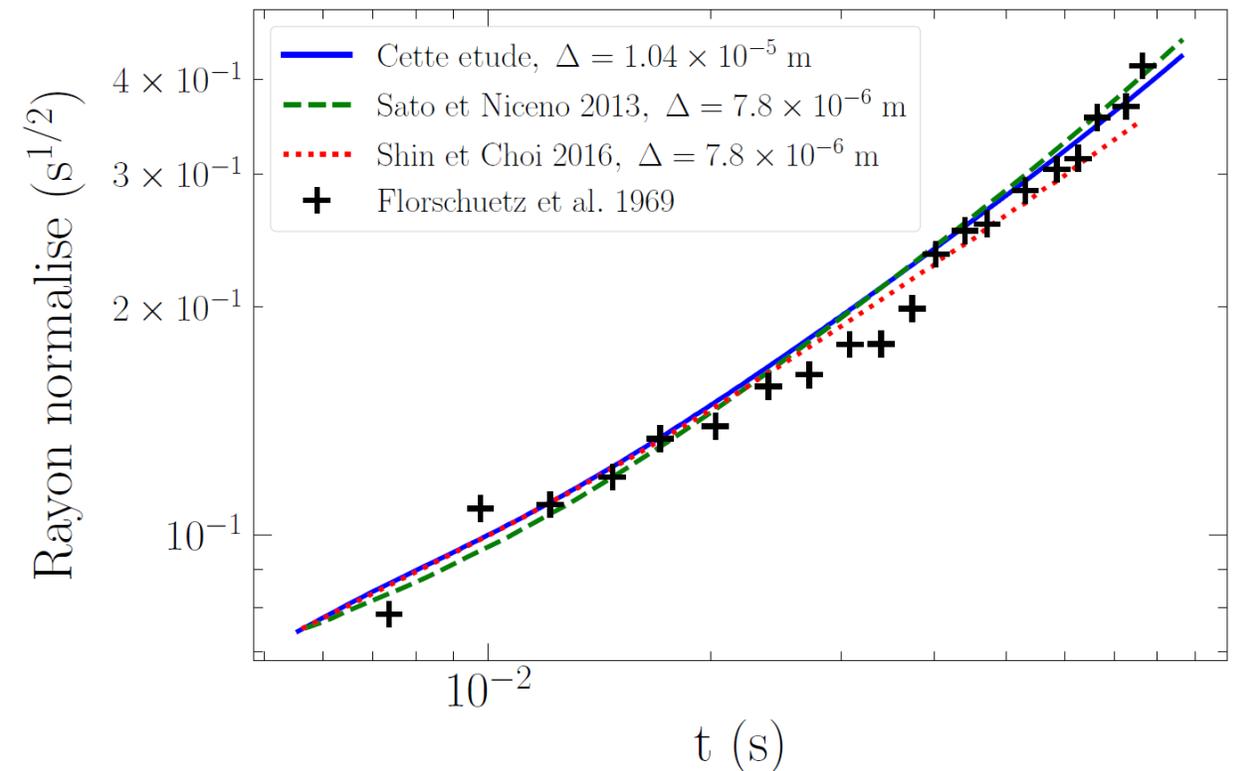
- Expérience de [1] : croissance et ascension par flottabilité d'une bulle de vapeur d'éthanol
- Bulle sphérique de rayon $R_0=0,21$ mm initialisée dans du liquide à $T_\infty = T_{\text{sat}} + 3,1$ K (Jakob ≈ 5)



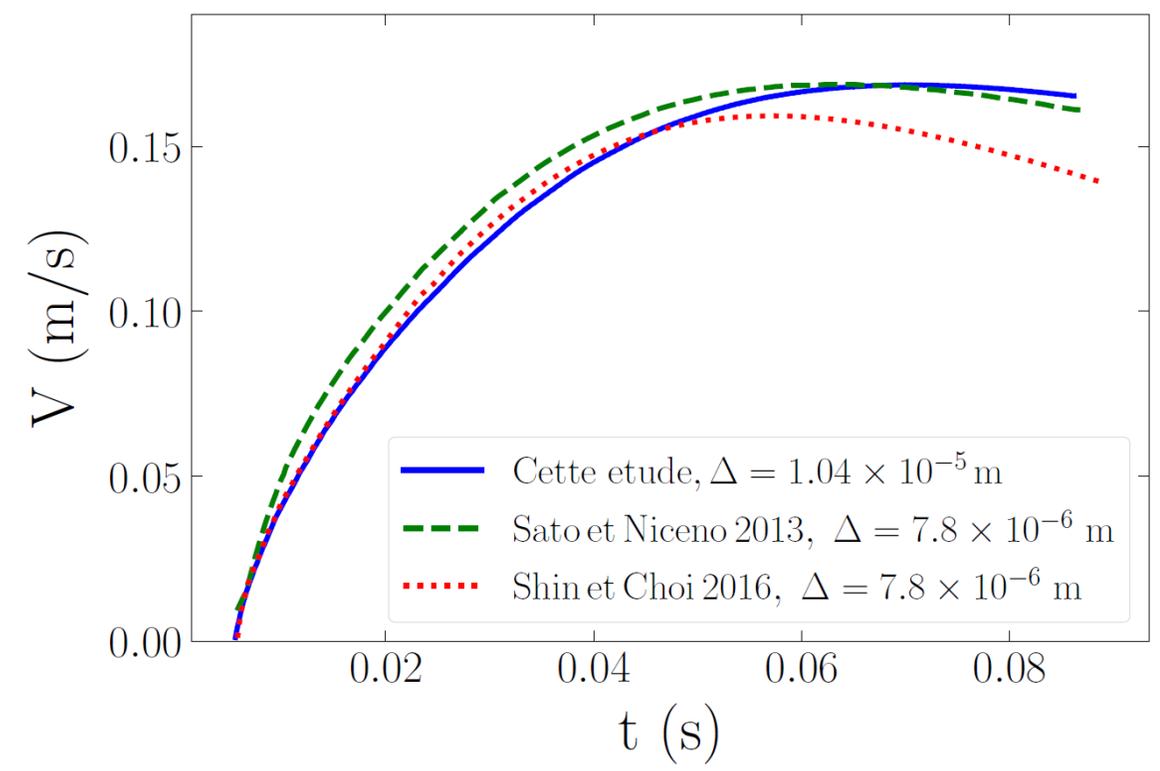
2M \rightarrow 117M cellules
168 \rightarrow 2128 cœurs
 $\Delta_{\text{min}} = 10,4 \mu\text{m}$
OCCIGEN @ CINES
230 khCPU
Coût remaillage $\sim 8\%$

- Adaptation de maillage dynamique
 - \rightarrow Nombre de cellules $1/10^{\text{ème}}$ par rapport à un maillage statique
 - \rightarrow Permet de faire du 3D

Ascension de bulle avec changement de phase



→ Prédiction du rayon en bon accord avec les expériences [1] et simulations [2, 3] de la littérature

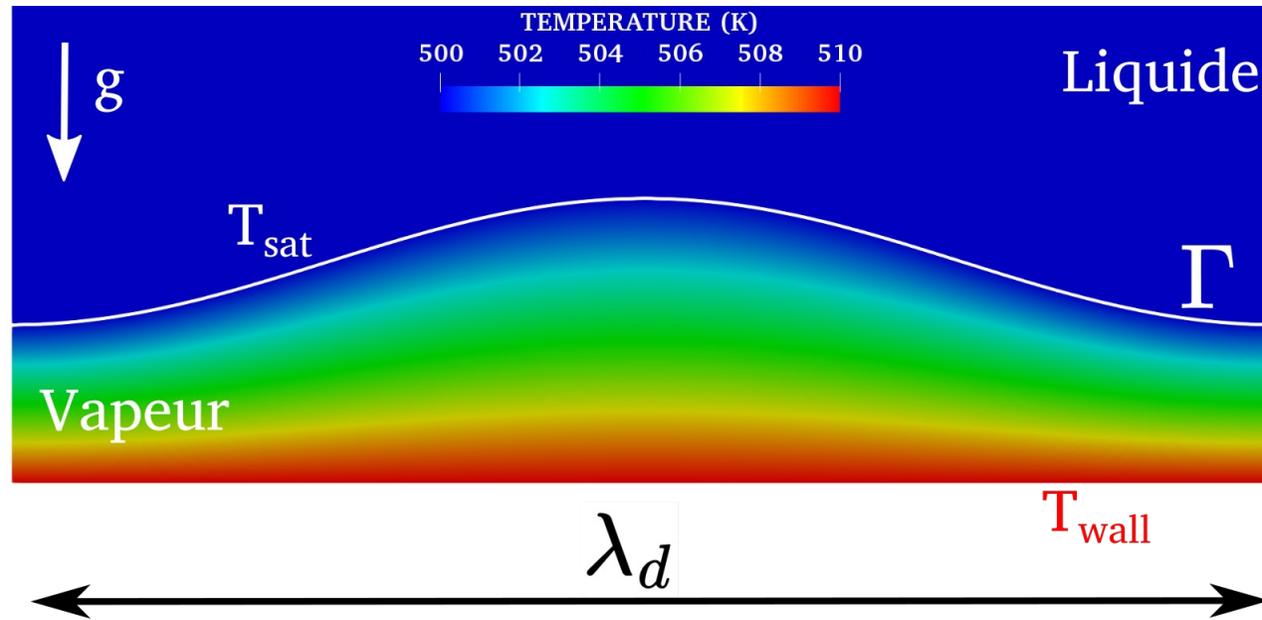


→ Légère baisse de la vitesse d'ascension en fin de simulation due à l'augmentation de la force de traînée (étalement de la bulle)

Solveur prédictif pour des simulations 3D avec changement de phase

Ebullition en film en 3D

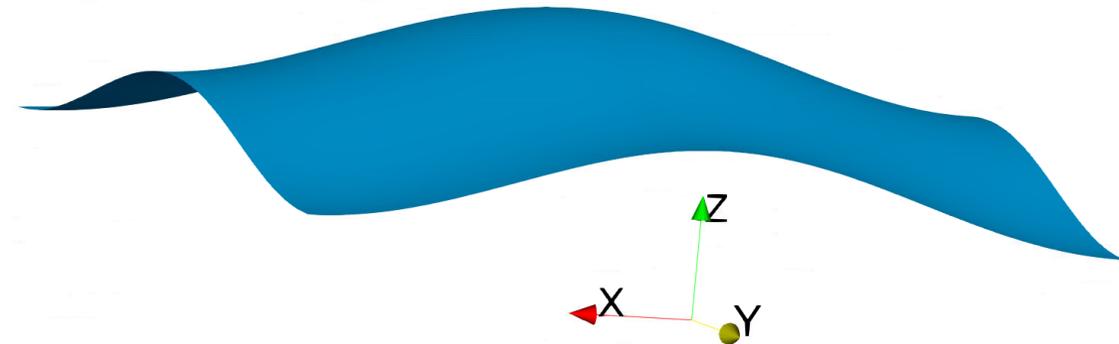
- Proche de l'ébullition nucléée (paroi chauffée) mais pas de ligne triple
- Numériquement plus simple
- Mais déformations de l'interface plus complexes que pour l'ascension de bulle



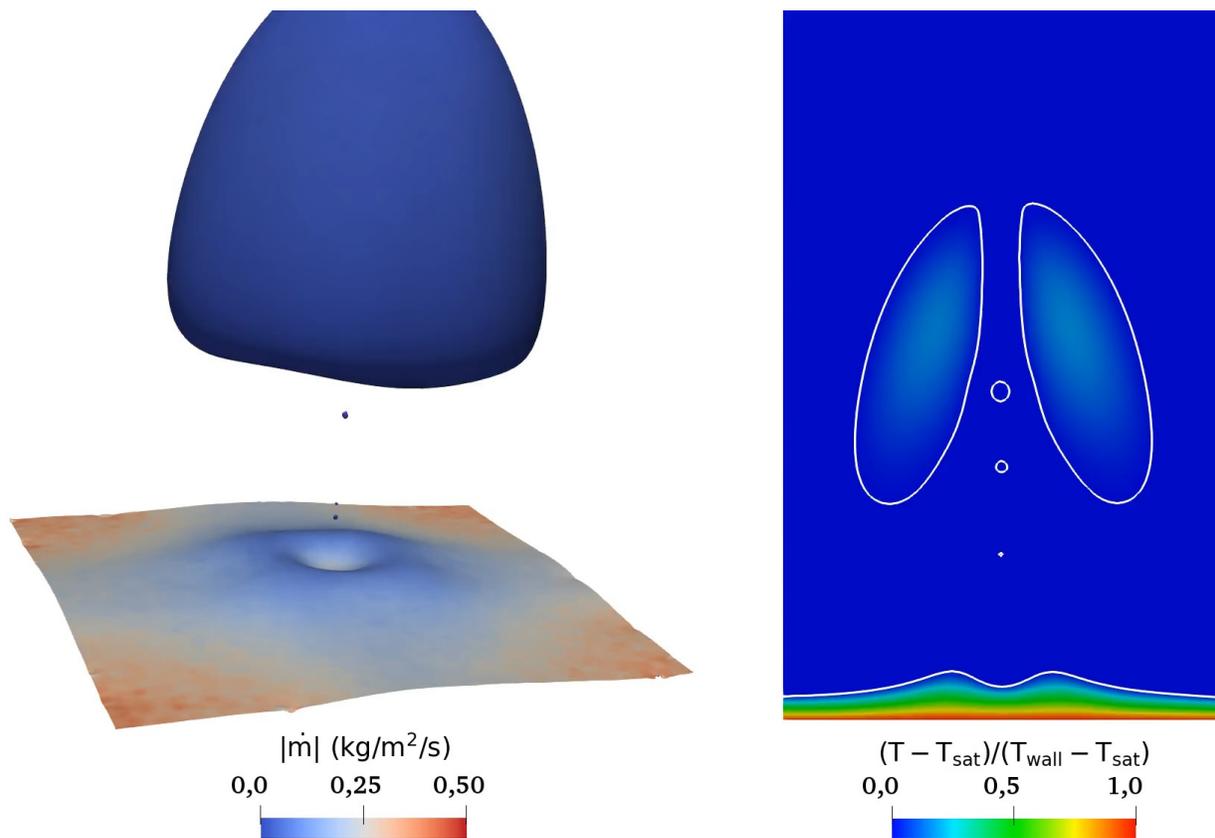
Interface sinusoïdale afin d'initier une instabilité de Rayleigh-Taylor

$$z_{\Gamma}^0(x, y) = \frac{\lambda_d}{20} \left(2.5 + \cos \left(\frac{2\pi x}{\lambda_d} \right) + \cos \left(\frac{2\pi y}{\lambda_d} \right) \right)$$

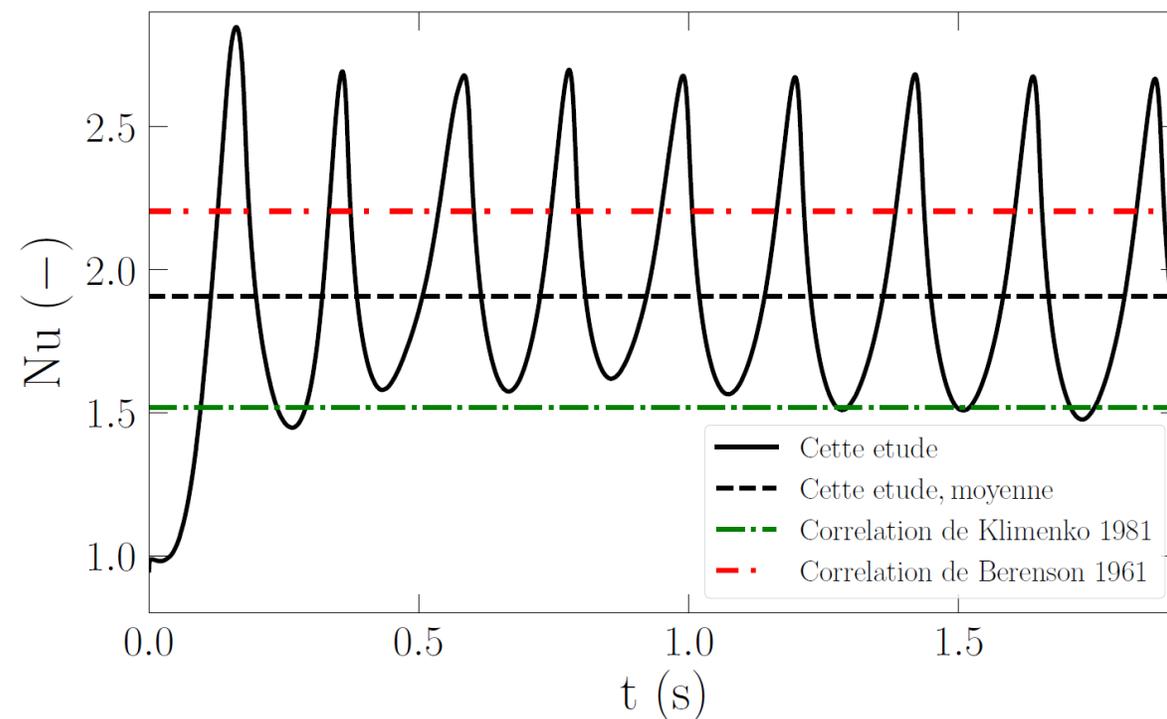
$$\lambda_d = 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma}{g(\rho_{liq} - \rho_{vap})}}$$



Ebullition en film en 3D



$$Nu = - \frac{1}{S_{wall}} \int_{S_{wall}} \frac{\lambda_d}{2\sqrt{3}\pi} \frac{1}{T_{wall} - T_{sat}} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{wall} dS$$



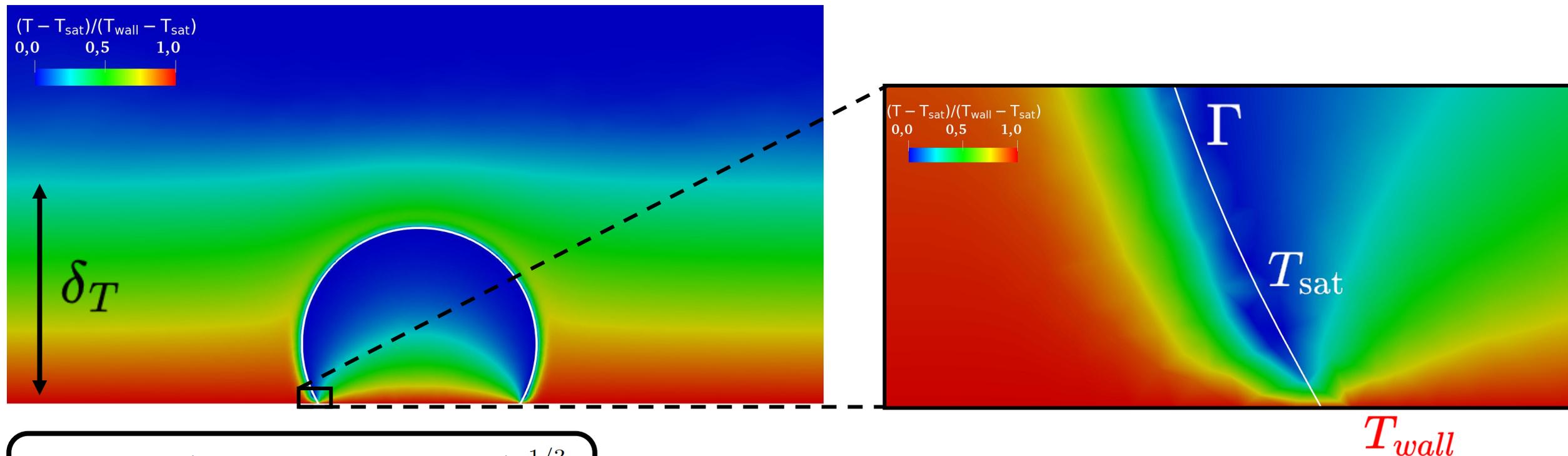
- Régime périodique de relachement de bulles
- Oscillations du Nusselt correspondantes
- Bon accord avec les corrélations de la littérature

$$[1] \quad Nu_B = 0.425 \left(Gr Pr \frac{L_{vap}}{c_{p,vap} (T_{wall} - T_{sat})} \right)^{1/4}$$

$$[2] \quad Nu_K = 0.19 (Gr Pr)^{1/3} f_1 \left(\frac{L_{vap}}{c_{p,vap} (T_{wall} - T_{sat})} \right)$$

Ebullition nucléée

- Croissance d'une bulle de vapeur d'eau sur une plaque plane à pression atmosphérique [1, 2]
- Paroi chauffée à $T_{wall} = T_{sat} + 7$ K (Jakob = 21)
- Angle de contact $\theta_{eq} = 50^\circ$

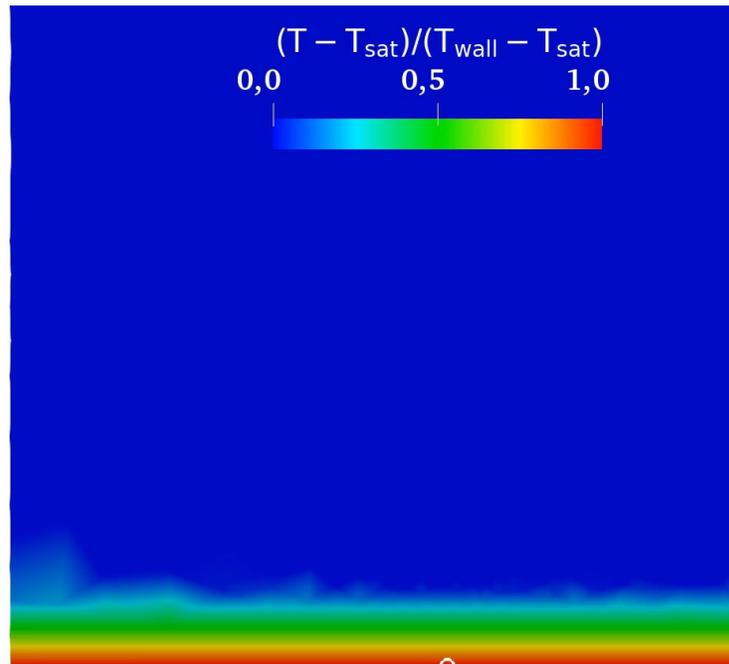


$$\delta_T = 7.14 \left(\frac{\mu_{liq} \alpha_{liq}}{\rho_{liq} g \beta_T (T_{wall} - T_{sat})} \right)^{1/3}$$

- Singularité thermique à la ligne triple
- Gradients de température très élevés

T_{wall}

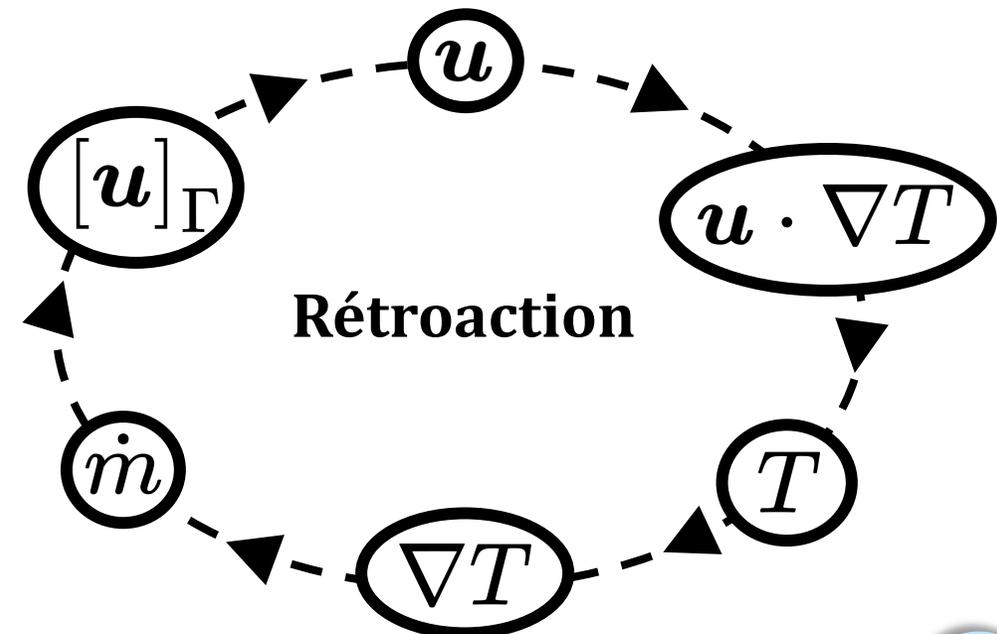
Ebullition nucléée



- Imposition de l'angle de contact
- Réinitialisation de la level-set à la ligne triple
- Calcul de \dot{m} à la ligne triple



Courants parasites à la ligne triple

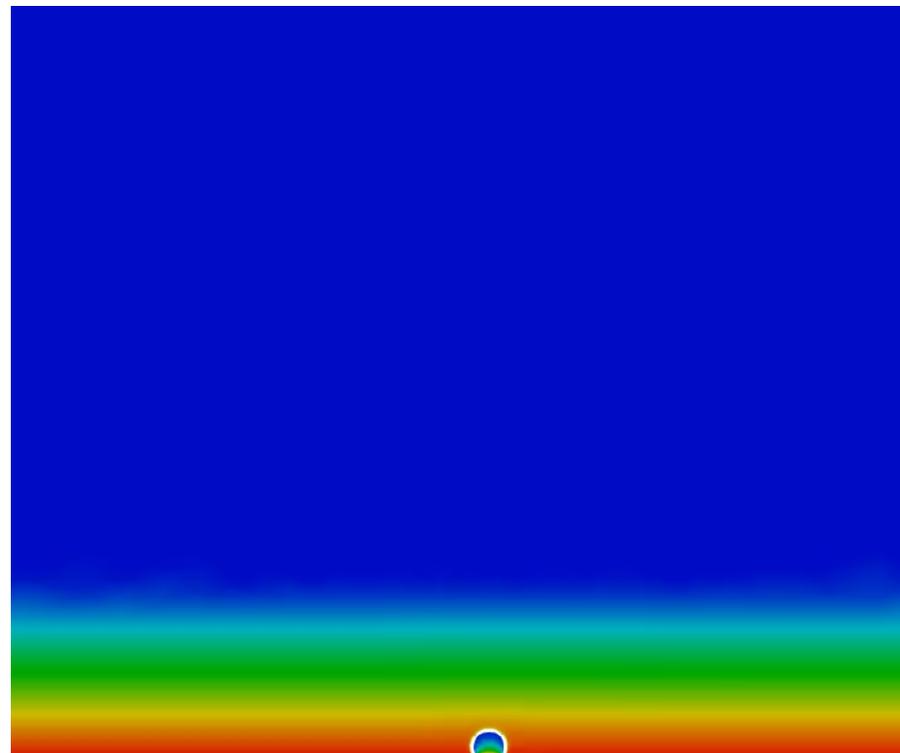
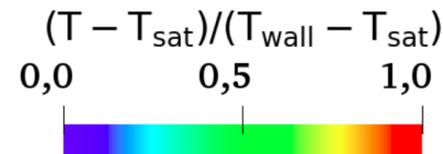


✓ Bon comportement qualitatif de croissance de bulle

⚠ Pas robuste : n'atteint pas le détachement de la bulle

Ebullition nucléée

→ **Solution testée :** $\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T)$
= 0 à la ligne triple



Application :

- 2 dimensions
 - Gravité x 5
- Plus robuste

Simulations avec changement de phase & ligne triple

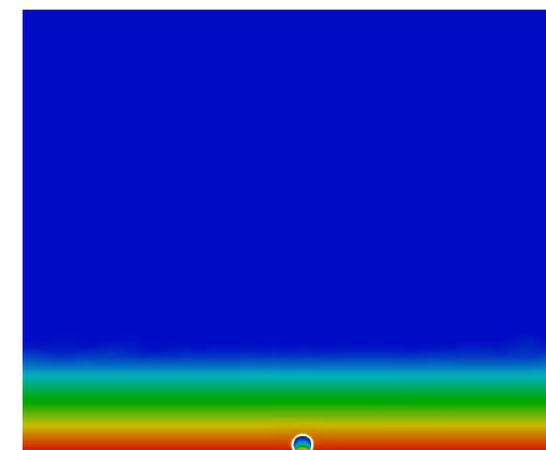
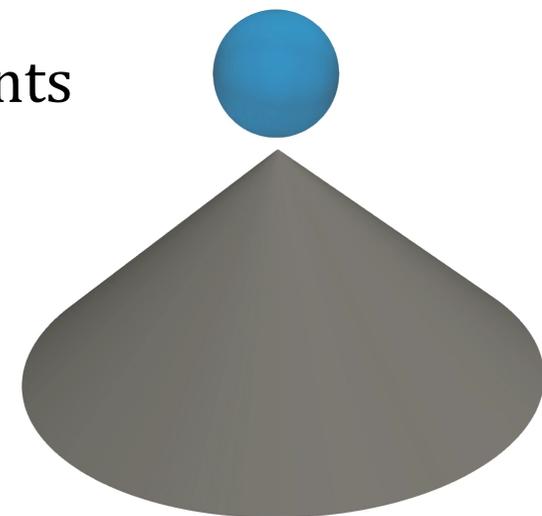


Grande précision (vitesse, température) requise à la ligne triple !

Conclusion

- ✓ Développement d'une méthode numérique pour simuler les écoulements diphasiques avec effets de mouillabilité sur maillages non structurés
 - Adaptation de méthodes de la littérature aux maillages non structurés
 - Imposition de l'angle de contact, glissement de la ligne triple

- ✓ Poursuite du développement d'un solveur d'ébullition dans YALES2
 - Couplage avec l'adaptation de maillage dynamique et la gestion des lignes triples
 - Validation sur des cas de complexité croissante



Merci de votre attention !