



Modélisation numérique de la condensation et de la vaporisation en écoulements turbulents

Contexte : le projet ECOBIOCLEAN

Le classement en CMR (cancérigène, mutagène et reprotoxique) du Formaldéhyde (connu sous le nom de formol) dans l'industrie (Salles blanches, Industries pharmaceutiques, hôpitaux, Agro-alimentaire...) a induit une refonte complète des procédures de bio-décontamination dans ces industries.

La substitution au formol s'est faite par le peroxyde d'hydrogène adjuvanté ou non adjuvanté. Ce changement de produit, passage d'un produit gazeux à un produit liquide, a induit de bien mieux maîtriser l'environnement de la salle blanche en terme d'aéraulique, de conditionnement d'air, de maîtrise des matériaux utilisés en zones classées tout en faisant appel à des équipements de diffusion très énergivores.

Chacun des fabricants s'est jusqu'à aujourd'hui focalisé sur son domaine d'expertise sans travailler avec les autres acteurs de la salle blanche. Ceci entraînant des réponses, aux clients finaux, au mieux non optimisées et au pire non efficaces.

Le projet ECOBIOCLEAN a pour but de faire collaborer ces différents acteurs pour développer une solution globale de DSVA garantie tant en terme de résultats que de reproductibilité dans le temps.

Pour cela 3 industriels : un fabricant de système de désinfection, un fabricant d'enveloppe de salles blanches, un installateur de système de conditionnement d'air ainsi que 2 laboratoires universitaires s'associent pour mener à bien ce projet.

Ce projet va s'attacher à définir :

- les conditions limites d'efficacités des différents biocides testés
- les cycles de désinfection les plus optimisés en terme de consommation de biocide et de consommation d'énergie
- les flux aérauliques optimum permettant une décontamination en tout point
- les matériaux facilement décontaminables et compatibles aux traitements par H₂O₂
- La mise au point d'une régulation fine de système instable de traitement

- d'air
- La mise au point de scénarios d'optimisation énergétique du traitement d'air à détente directe
- La mise au point d'une nouvelle méthode de dénombrement
- Le développement de code numérique spécifique concernant les changements de phases lors d'un cycle de décontamination

Au sein de ce projet, l'équipe MECAFLU du laboratoire ICUBE a en charge la modélisation numérique de la condensation pariétale et de l'évaporation dans des écoulements turbulents et recherche un thésard pour collaborer à cette étude.

État de l'art:

La condensation est un processus thermodynamique hors-équilibre exothermique de transition de phase de l'état gazeux vers l'état liquide dont les applications industrielles ont été étudiées depuis de nombreuses années. Il existe une large gamme de modèles d'échangeurs thermiques dont la fonction est basée sur ce phénomène. Le plus commun, présent dans presque tous les foyers, est le condenseur dans un réfrigérateur. Parmi les applications industrielles, la condensation est très souvent concernée dans le secteur de l'énergie. Dans les centrales électriques conventionnelles (charbon), la condensation des gaz de combustion et la condensation spontanée de la vapeur dans les condenseurs de turbine peut être une source de problèmes très graves. Dans les centrales nucléaires le phénomène de condensation a des conséquences importantes sur la sécurité ce qui explique que l'essentiel de la recherche actuelle sur la modélisation de la condensation pariétale soit dévolu à ces applications.

La condensation en présence de gaz non-condensables est un phénomène très complexe. Déterminer quels sont les effets les plus importants est assez difficile. On peut néanmoins en dégager trois différents en raison de leur impact direct sur le processus de transfert de masse et de chaleur de la condensation et sur leur applicabilité à l'étude des risques dans les centrales nucléaires : la condensation, sous forme de film d'eau en convection libre et forcée, de mélanges binaires et ternaires, l'interaction entre la structure du film liquide et la couche de diffusion de mélange, et la condensation spontanée. Tous ces effets peuvent jouer un rôle important lors de la libération de vapeur d'eau dans le réacteur. Karkoszka, 2007 décrit en détail ces trois modes de condensation et la bibliographie associée.

Ces dangers potentiels expliquent l'intérêt de la recherche liée au nucléaire pour la modélisation numérique du phénomène de condensation. Cette modélisation suit deux approches différentes : la première est directement liée au monde industriel et s'appuie sur des corrélations issues d'observations expérimentales (la plus importante est le coefficient de transfert thermique ou nombre de Nusselt). Ces relations sont généralement fonctions du nombre de Reynolds, du nombre de Prandtl et de la fraction massique du gaz non-condensable. Les plus communes sont celles de Uchida, Tagami, Kataoka et Dehbi (Herranz et al., 1998). La seconde approche s'appuie sur des études plus

fondamentales qui contribuent à améliorer les connaissances sur la thermodynamique et sur les effets de diffusion de composants multiples dans les mélanges de gaz. On retrouve deux concepts dans cette dernière approche : le modèle de couche de diffusion et ses variantes qui s'appuient sur une analogie entre les équations de transport de la chaleur et de la fraction massique ; le deuxième concept s'appuie sur la résolution de système d'équations couplées (équations de transport et de conservation pour les phases liquide et gazeuse). Une description détaillée de ces approches est proposée par Karkoszka, 2007. Nabati, 2007 a comparé les approches basées sur la théorie de Nusselt et celle de la couche limite de diffusion.

Nous allons nous intéresser à ce dernier concept que nous allons mettre en œuvre dans ce projet via la CFD.

Plusieurs auteurs ont déjà abordé ce problème :

Jeon et al, 2009 ont étudié le phénomène de condensation pour une bulle isolée dans un écoulement froid via la méthode VOF (Volume of Fluid, qui consiste à transporter un scalaire passif représentatif de l'interface entre deux phases non miscibles). Les simulations ont été comparées à une étude expérimentale identique (Kim et al, 2008) et les résultats ont montré que cette méthodologie est à même de rendre compte de la physique de la condensation de bulles dans des écoulements. Alizadehdakhel et al, 2010 ont aussi utilisé la méthode VOF pour l'étude de la condensation dans un thermosiphon.

Sharma & al 2012 utilisent un modèle diphasique et des corrélations semi-empiriques dans le code CFD-ACE+ pour simuler l'expérience de condensation pariétale COPAIN (Cheng et al, 2001). La même approche a déjà été proposée par Liu et al 2004 et les résultats étaient comparés à une expérience dans une chambre test où l'on s'intéressait à la répartition spatiale et temporelle de vapeur d'eau (introduite au centre de la chambre test) sur les parois.

Dans le code CFX (Kljenak et al, 2006), l'écoulement est modélisé comme une seule phase et la condensation agit comme une dissipation de masse et d'énergie. Dans cette approche, le film liquide et l'influence de la couche de gaz non condensable sont réduits à un simple terme puits. L'utilisation de corrélations explicites pour évaluer les processus de transfert de masse et de chaleur, même si elles représentent une approche possible pour les grandes installations expérimentales et les réacteurs, ignorent en partie les informations utiles fournies par les modèles CFD détaillées en fonction des conditions locales.

Une autre modélisation est proposée dans FLUENT (Forgione et al, 2005). Avec cette approche, les corrélations de chaleur et de masse sont remplacées par l'utilisation de lois physiques «fondamentales» mais dans ce cas une grille très fine de calcul est nécessaire.

Pour l'écoulement à deux phases avec un mélange gazeux et une pulvérisation des gouttelettes, la code GASFLOW résout un modèle à deux phases homogène (Jongtae et al, 2006) couplé à des corrélations de transfert de chaleur.

Le code NEPTUNE_CFD (Mimouni et al, 2010 puis Mimouni et al, 2011) s'appuie

sur une approche bi-fluide pour la simulation du transfert de masse et de chaleur entre le spray et le mélange de gaz. Le modèle de condensation s'appuie sur les lois fondamentales de la physique et la résolution d'une équation de transport de la densité de gouttelettes. Cette approche prend en compte à la fois l'évaporation et les phénomènes de condensation. En effet Andreani et al, 2008 soulignent que, selon le point de changement de phase et la géométrie de l'enceinte, les films liquides pourraient circuler dans les régions sèches où le liquide serait évaporé. Si les murs sont plus chauds que le film liquide il en résulte un taux d'évaporation accru. Cette approche est à l'heure actuelle la plus complète car elle permet de prendre en compte simultanément la dérive mécanique entre la gouttelette et le gaz, le transfert de masse et de chaleur sur les gouttelettes dans le cœur de l'écoulement et les phénomènes de condensation / évaporation sur les parois. Mimouni et al, 2011 soulignent aussi l'importance de la modélisation turbulente dans la région proche paroi pour ces écoulements.

L'approche que nous proposons d'implémenter dans le code NSIBM est celle de Mimouni et al basée sur un modèle bi-fluide.

Démarche :

L'objectif de cette thèse est de mettre en place et de valider un outil numérique capable d'optimiser les débits et la géométrie de ventilation ainsi que la fraction massique de vapeur initiale afin d'obtenir un mouillage optimal des murs par le peroxyde d'hydrogène dans des configurations réelles.

Pour ce faire nous nous appuyerons sur le code NSIBM développé à Icube (Durrenberger and Hoarau, 2013). Ce solveur incompressible parallélisé résout les équations de Navier-Stokes sur un maillage cartésien non-structuré et la géométrie est prise en compte via la méthodologie des frontières immergées avec raffinement de maillage automatique. L'implémentation de modèles de turbulence est en cours de validation. Cette implémentation de modèle de turbulence s'apparente en fait à un transfert de technologie. En effet la modélisation de la turbulence stationnaire et instationnaire nécessite la mise en place et l'optimisation d'un modèle spécifiquement adapté à la situation visée.

Le travail à fournir dans cette thèse se décompose en quatre tâches :

1. Après une étude bibliographique approfondie, le modèle proposé par Mimoudi et al, 2011 sera implémenté sous sa forme originale dans le solveur NSIBM et validé sur des cas test expérimentaux de la littérature (COPAIN, TOSQAN, (Ambrosini et al))
2. Après cette étape d'implémentation et de validation pour des gouttelettes de vapeur d'eau, le modèle sera appliqué au cas de l'isolateur développé par Areco. Les résultats expérimentaux obtenus dans cette configuration (profils de température, épaisseurs des films de condensation, concentration de vapeur ...) nous permettront d'affiner le modèle numérique et de l'adapter à la condensation de gouttelettes beaucoup plus fines. Cette étape est essentielle pour la validation de l'outil numérique dans ce projet. En effet, bien que la physique de la condensation et donc le jeu d'équations utilisé soit le même pour des

gouttelettes d'eau et des gouttelettes plus fines, le modèle numérique s'appuie sur plusieurs corrélations expérimentales qu'il nous faudra vérifier ici. Plus la base de donnée expérimentale sera fournie, plus le modèle sera précis. Nous effectuerons aussi des simulations pour vérifier que les paramètres optimaux de température, de débit et de concentrations initiales de vapeur obtenus dans le projet sont bien compatibles avec un mouillage optimal de l'isolateur. Cette dernière étape nous permettra d'obtenir des relations de dépendance qui seront utiles pour optimiser une configuration réelle.

3. Le code ainsi validé sera utilisé pour modéliser et optimiser une configuration réelle. Ce changement d'échelle ne modifie en rien la validation du modèle mais se traduit par une géométrie plus grande et plus complexe ce qui va nécessiter un maillage beaucoup plus conséquent et donc des moyens et des temps de simulation beaucoup plus importants. Nous nous appuierons sur le centre HPC de l'université de Strasbourg ainsi que sur les centres de calcul nationaux.
4. Dans un deuxième temps nous utiliserons la méthodologie Level-Set pour étudier plus en détail et de façon plus fondamentale la physique de la condensation de quelques gouttes sur une paroi. L'intérêt de la méthode Level-Set est sa capacité à modéliser l'appariement ou l'arrachement de gouttelettes mais cette méthodologie n'a jamais encore été utilisée pour modéliser et comprendre le phénomène de condensation. Cette étude permettra d'améliorer les corrélations de transferts de masse et de chaleur utilisées dans la plupart des modèles.

References :

- Krzysztof Karkoszka. Mechanistic Modelling of Water Vapour Condensation in Presence of Noncondensable Gases, PhD of School of Engineering Sciences, Department of Physics, Div. of Nuclear Reactor Technology, Stockholm, 2007.
- Herranz L. E., Anderson M. H., Corradini M. L.. A diffusion layer model for steam condensation within the AP600 containment, Nuclear Engineering and Design 183, 133 - 150, 1998.
- Hamid Nabati. Investigation on Numerical Modeling of Water Vapour Condensation from a Flue Gas with High CO₂ Content, Energy and Power Engineering, 3, 181-189, 2011.
- Seong-Su Jeon, Seong-Jin Kim, Goon-Cherl Park. CFD Simulation of Condensing Vapor Bubble using VOF Model , World Academy of Science, Engineering and Technology, 36, 209-215, 2009.
- Asghar Alizadehdakhel, Masoud Rahimi, Ammar Abdulaziz Alsairafi. CFD modeling of flow and heat transfer in a thermosyphon, International Communications in Heat and Mass Transfer 37, 312-318, 2010.
- Seong-Jin Kim and Goon-Cherl Park. Interfacial Heat Transfer of Condensing Bubble in Subcooled Boiling Flow at Low Pressure, Fifth International Conference on Transport Phenomena In Multiphase Systems, Bialystok, Poland, June 30-July 3, 2008.
- W. Ambrosini, M. Bucci, N. Forgiione, F. Oriolo, S. Paci, J-P. Magnaud, E. Studer, E. Reinecke, St. Kelm, W. Jahn, J. Travis, H. Wilkening, M. Heitsch, I. Kljenak, M. Babi, M. Houkema, D.C. Visser, L. Vyskocil, P. Kostka, R. Huhtanen, Comparison and Analysis of the Condensation Benchmark Results, CONTRACT SARNET

FI6O-CT-2004-50906, The 3rd European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2008), Nessebar, Vigo Hotel, Bulgaria, 23-25 September 2008

- S. Mimouni, J.-S. Lamy, J. Lavieville, S. Guieu, M. Martin. Modelling of sprays in containment applications with A CMFD code, Nuclear Engineering and Design 240, 2260-2270, 2010

- S.Mimouni, N.Mechitoua, A. Foissac, M. Hassanaly, and M. Ouraou. CFD Modeling of Wall Steam Condensation: Two-Phase Flow Approach versus Homogeneous Flow Approach, Science and Technology of Nuclear Installations, Article ID 941239, Volume 2011.

- Kljenak, M. Babić, B. Mavko, and I. Bajsić. Modeling of containment atmosphere mixing and stratification experiment using a CFD approach, Nuclear Engineering and Design vol. 236, no. 14-16, 1682-1692, 2006.

- M. Andreani, D. Paladino, and T. George. On the unexpectedly large effect of the re-vaporization of the condensate liquid film in two tests in the PANDA facility revealed by simulations with the GOTHIC code," in Proceedings of the XCFD4NRS, Workshop, Grenoble, France, September 2008.

- N. Forgione and S. Paci. Computational analysis of vapour condensation in presence of air in the TOSQAN facility, in Proceedings of the 11th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics (NURETH '05), Avignon, France, October 2005.

- Jongtae, K., Unjang, L., Seong, W.H., Sang-Baik, K., Hee-Dong, K. Spray effect on the behavior of hydrogen during severe accidents by a loss-of-coolant in the APR1400 containment, International Communications in Heat and Mass Transfer 33, 1207-1216, 2006.

- Pavan K. Sharma, B. Gera, R. K. Singh, and K. K. Vaze. Computational Fluid Dynamics Modeling of Steam Condensation on Nuclear Containment Wall Surfaces Based on Semiempirical Generalized Correlations, Science and Technology of Nuclear Installations, Article ID 106759, Volume 2012

- X. Cheng, P. Bazin, P. Cornet et al. Experimental data base for containment thermalhydraulic analysis, Nuclear Engineering and Design, vol. 204, no. 1-3, 267-284, 2001.

- Jing Liu, Hiroyoshi Aizawa, Hiroshi Yoshino. CFD prediction of surface condensation on walls and its experimental validation, Building and Environment 39, 905 - 911, 2004

- D. Durrengerger and Y. Hoarau . NSIBM: a parallel incompressible Navier-Stokes solver on unstructured Cartesian mesh with Automatic Mesh Refinement, VI International Conference on Adaptive Modeling and Simulation, ADMOS 2013, 3-5 June 2013, Lisbon, Portugal

Profil du candidat :

Les candidats potentiels doivent avoir un diplôme d'ingénieur ou un diplôme de Master 2 et avoir une expérience dans les domaines de la mécanique des fluides et de la simulation numérique. Une connaissance en programmation Fortran et en calcul parallèle sera très appréciée. Le salaire sera d'environ 1400-1500€ net par mois sur 36 mois. La date limite des candidatures est le 15 Novembre 2013.

Directeurs de Thèse :

Yannick Hoarau

Maître de conférence HDR à l'Université de Strasbourg

ICUBE

Département de Mécanique

2 rue Boussingault

67000 STRASBOURG

hoarau@unistra.fr

Robert Mosé

Professeur à l'ENGEES

ICUBE

Département de Mécanique

2 rue Boussingault

67000 STRASBOURG