

Modéliser et simuler des systèmes fluide-particules

Tristan GUYON

12^{ème} Biennale de la Société des Mathématiques Appliquées et
Industrielles

5 juin 2025

Équipe

Le projet s'inscrit dans le programme R4G (réacteur de 4e génération) du CEA.

Scénarios accidentels liés à une fuite de sodium dans un réacteur à neutrons rapides

*Laboratoire de Calcul Intensif
et d'Analyse Numérique,
CEA Saclay*

- HPC, calcul GPU
- Code industriel TRUST
- Schémas numériques

*Maison de la simulation,
CEA Saclay*

- HPC, calcul GPU
- Simulations numériques
- Applications physiques

*Laboratoire d'Étude des
technologies Sodium et
Caloporteurs avancés,
CEA Cadarache*

- Expertise sodium
- Expérimental
- Études de risques

Tristan GUYON
(postdoctorat 2024-2026)

Samuel KOKH
Pascal TREMBLIN

Romain BOCCACCIO
Magali ZABIEGO

Plan de la présentation

1. Contexte

Fuite de sodium dans un réacteur à neutrons rapides
Description du projet scientifique

2. Motivation et modèle de spray

Méthode des moments par quadrature (QMOM)
Modèle de spray à deux vitesses

3. Avancées sur le modèle de spray

Mise en évidence d'un comportement instable en 2D
Reprojection stable

4. Validation numérique (code canoP)

Cas test 2D : tuyau rectiligne
Cas test 2D : vortex de Taylor-Green

Plan de la présentation

1. Contexte

Fuite de sodium dans un réacteur à neutrons rapides
Description du projet scientifique

2. Motivation et modèle de spray

3. Avancées sur le modèle de spray

4. Validation numérique (code canoP)

Fuite de sodium dans un réacteur à neutrons rapides



Réacteur à neutrons rapides refroidi au sodium (RNR-Na).

Méthode : neutrons rapides
Meilleure utilisation des ressources fissiles

Caloporteur : sodium liquide
Bonnes propriétés thermiques

Problématique : le sodium est fortement réactif.

Accidents sur des prototypes RNR-Na :

- Mars 1994 : violente explosion de sodium sur le réacteur Rapsodie (CEA Cadarache)
- Décembre 1995 : incendie dans le réacteur de Monju (Japon)

Description du projet scientifique



Cas d'une rupture majeure dans un circuit primaire entraînant une fuite de sodium liquide :

- fragmentation du jet de sodium par impact sur un obstacle
- dispersion de gouttelettes dans l'atmosphère
- réactions chimiques : oxydation et combustion
- surpression, augmentation de la température et production d'aérosols toxiques

Description du projet scientifique

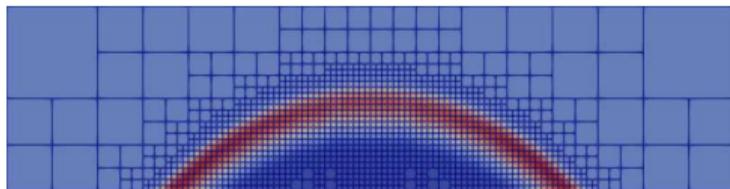
Cas d'une rupture majeure dans un circuit primaire entraînant une fuite de sodium liquide :

- fragmentation du jet de sodium par impact sur un obstacle
- **dispersion de gouttelettes dans l'atmosphère**

Modéliser et simuler : modèle de spray

Intégration dans le code canoP (Maison de la Simulation)

code à raffinement de maillage adaptatif (AMR) pour simulations multiphases



*exemple de maillage AMR
(source : documentation canoP)*

- réactions chimiques : oxydation et combustion
- surpression, augmentation de la température et production d'aérosols toxiques

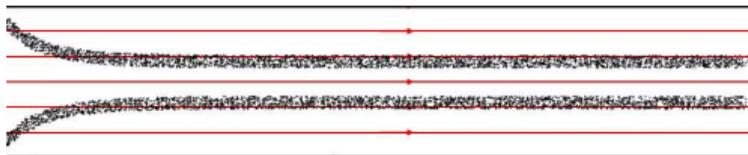
Plan de la présentation

1. Contexte
2. **Motivation et modèle de spray**
Méthode des moments par quadrature (QMOM)
Modèle de spray à deux vitesses
3. Avancées sur le modèle de spray
4. Validation numérique (code canoP)

Alternative à l'approche lagrangienne: modèle fluide

Cadre de travail : 2D, particules (gouttelettes) de même taille sans collisions + force de traînée (temps de réponse τ_p) liée à une phase fluide fixe $\vec{U}_f(\vec{x})$.

En chaque point, on définit une densité moyenne $\rho(t, \vec{x})$ et **une** vitesse **moyenne** $\vec{U}(t, \vec{x})$.

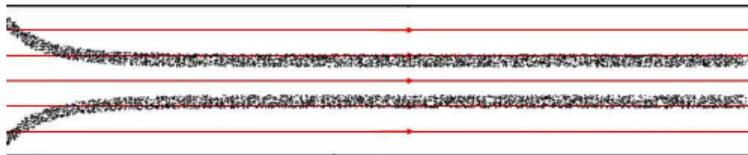


$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_i (\rho U_i) = 0 \\ \partial_t (\rho U_i) + \partial_j (\rho U_i U_j) = \rho \frac{U_{fi} - U_i}{\tau_p} \end{cases}$$

Alternative à l'approche lagrangienne: modèle fluide

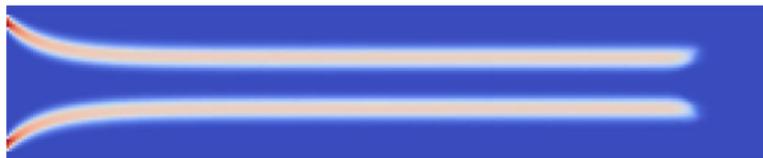
Cadre de travail : 2D, particules (gouttelettes) de même taille sans collisions + force de traînée (temps de réponse τ_p) liée à une phase fluide fixe $\vec{U}_f(\vec{x})$.

En chaque point, on définit une densité moyenne $\rho(t, \vec{x})$ et **une** vitesse **moyenne** $\vec{U}(t, \vec{x})$.



$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_i (\rho U_i) = 0 \\ \partial_t (\rho U_i) + \partial_j (\rho U_i U_j) = \rho \frac{U_{fi} - U_i}{\tau_p} \end{cases}$$

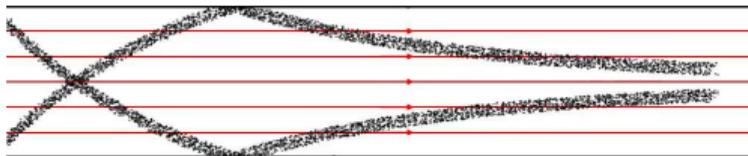
Fonctionne dans ce cas simple



Alternative à l'approche lagrangienne: modèle fluide

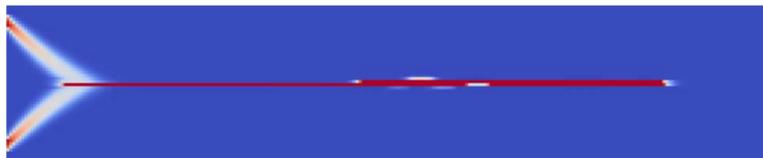
Cadre de travail : 2D, particules (gouttelettes) de même taille sans collisions + force de traînée (temps de réponse τ_p) liée à une phase fluide fixe $\vec{U}_f(\vec{x})$.

En chaque point, on définit une densité moyenne $\rho(t, \vec{x})$ et **une** vitesse **moyenne** $\vec{U}(t, \vec{x})$.



$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_i (\rho U_i) = 0 \\ \partial_t (\rho U_i) + \partial_j (\rho U_i U_j) = \rho \frac{U_{fi} - U_i}{\tau_p} \end{cases}$$

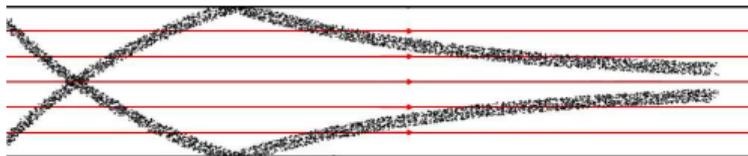
Échoue sur les croisements de jets



Alternative à l'approche lagrangienne: modèle fluide

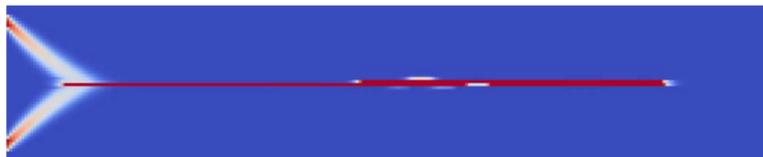
Cadre de travail : 2D, particules (gouttelettes) de même taille sans collisions + force de traînée (temps de réponse τ_p) liée à une phase fluide fixe $\vec{U}_f(\vec{x})$.

En chaque point, on définit une densité moyenne $\rho(t, \vec{x})$ et **une** vitesse **moyenne** $\vec{U}(t, \vec{x})$.



$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_i (\rho U_i) = 0 \\ \partial_t (\rho U_i) + \partial_j (\rho U_i U_j) = \rho \frac{U_{fi} - U_i}{\tau_p} \end{cases}$$

Échoue sur les croisements de jets



Modèle robuste au croisement de jets ?



Méthode des moments par quadrature (QMOM)

Description cinétique :

$$\rho(t, \vec{x}), \vec{U}(t, \vec{x}) \longrightarrow f(t, \vec{x}, \vec{v})$$

Plusieurs vitesses en un point : densité $f(t, \vec{x}, \vec{v})$ de particules en \vec{x} **avec la vitesse** \vec{v} .

$$\text{Quadrature à } n \text{ vitesses : } f(t, \vec{x}, \vec{v}) = \sum_{i=1}^n \rho_i(t, \vec{x}) \times \delta(\vec{v} - \vec{U}_i(t, \vec{x}))$$

Cas à 1 vitesse : modèle fluide de la slide précédente.

Cas à 2 vitesses : permet le croisement de jets.

Distribution $f(t, \vec{x}, \vec{v})$ dans l'espace des phases : on suit et transporte ses **moments**.

On simule ensuite le système d'EDPs correspondant : méthode des volumes finis.

Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments, McGraw, Aerosol science and Technology, 1997

Moment 2D d'ordre $n = k + \ell$: $\int v_x^k v_y^\ell f(t, \vec{x}, \vec{v}) dv_x dv_y$

$$M^{(0)}(t, \vec{x}) = \int f(t, \vec{x}, \vec{v}) dv_x dv_y \equiv \text{densité totale } \rho(t, \vec{x})$$

$$M_i^{(1)}(t, \vec{x}) = \int v_i f(t, \vec{x}, \vec{v}) dv_x dv_y \equiv \text{densité de quantité de mouvement totale}$$

$$M_{ij}^{(2)}(t, \vec{x}) = \int v_i v_j f(t, \vec{x}, \vec{v}) dv_x dv_y$$

$$M_{ijk}^{(3)}(t, \vec{x}) = \int v_i v_j v_k f(t, \vec{x}, \vec{v}) dv_x dv_y$$

Équations de transport des moments

$$\partial_t f + \nabla_{\vec{x}} \cdot (f \vec{v}) + \nabla_{\vec{v}} \cdot \left(f \frac{\vec{U}_f(\vec{x}) - \vec{v}}{\tau_p} \right) = 0$$

Équations de transport des moments

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t M^{(0)} + \partial_i M_i^{(1)} = 0 \\ \partial_t M_i^{(1)} + \partial_j M_{ij}^{(2)} = \frac{M^{(0)} U_{fi} - M_i^{(1)}}{\tau_p} \\ \partial_t M_{ij}^{(2)} + \partial_k M_{ijk}^{(3)} = \frac{M_i^{(1)} U_{fj} - M_{ij}^{(2)}}{\tau_p} + \frac{M_j^{(1)} U_{fi} - M_{ij}^{(2)}}{\tau_p} \\ \dots \end{array} \right.$$

Équations de transport des moments

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t M^{(0)} + \partial_i M_i^{(1)} = 0 \\ \partial_t M_i^{(1)} + \partial_j M_{ij}^{(2)} = \frac{M^{(0)} U_{fi} - M_i^{(1)}}{\tau_p} \\ \partial_t M_{ij}^{(2)} + \partial_k M_{ijk}^{(3)} = \frac{M_i^{(1)} U_{fj} - M_{ij}^{(2)}}{\tau_p} + \frac{M_j^{(1)} U_{fi} - M_{ij}^{(2)}}{\tau_p} \\ \partial_t M_{ijk}^{(3)} + \partial_l \overline{M_{ijkl}^{(4)}} = \frac{M_{ij}^{(2)} U_{fk} - M_{ijk}^{(3)}}{\tau_p} + \frac{M_{ik}^{(2)} U_{fj} - M_{ijk}^{(3)}}{\tau_p} + \frac{M_{jk}^{(2)} U_{fi} - M_{ijk}^{(3)}}{\tau_p} \end{array} \right.$$

La **relation de fermeture** correspond ici à la **forme** de $f(t, \vec{x}, \vec{v})$.

Pour la quadrature à deux nœuds :

$$(M^{(0)}, M_i^{(1)}, M_{ij}^{(2)}, M_{ijk}^{(3)}) \longrightarrow (\rho_1, \vec{U}_1, \rho_2, \vec{U}_2) \longrightarrow \overline{M_{ijkl}^{(4)}} = \rho_1 U_{1i} U_{1j} U_{1k} U_{1l} + \rho_2 U_{2i} U_{2j} U_{2k} U_{2l}$$

Modèle de spray à deux vitesses

Quadrature à deux nœuds : coexistence de (ρ_1, \vec{U}_1) et (ρ_2, \vec{U}_2) .

$$f(t, \vec{x}, \vec{v}) = \rho_1(t, \vec{x}) \times \delta(\vec{v} - \vec{U}_1(t, \vec{x})) + \rho_2(t, \vec{x}) \times \delta(\vec{v} - \vec{U}_2(t, \vec{x}))$$

Cas 1D ($M^{(0)}, M_x^{(1)}, M_{xx}^{(2)}, M_{xxx}^{(3)}$) : on trouve des nœuds de quadrature $(\rho_1, U_{1x}, \rho_2, U_{2x})$ pour n'importe quelle valeur des moments [*Desjardins et al. 2008*]

Cas 2D ($M^{(0)}, M_x^{(1)}, M_{xx}^{(2)}, M_{xxx}^{(3)}, M_y^{(1)}, M_{yy}^{(2)}, M_{yyy}^{(3)}, M_{xy}^{(2)}$) : un problème 1D par axe [*Desjardins et al. 2008*] mais il faut aussi la bonne **corrélation** entre les axes [*Sun et al. 2017*]

A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows, Desjardins, Fox, Villedieu, *Journal of Computational Physics*, 2008

A robust two-node, 13 moment quadrature method of moments for dilute particle flows including wall bouncing, Sun, Garmory, Page, *Journal of Computational Physics*, 2017

Plan de la présentation

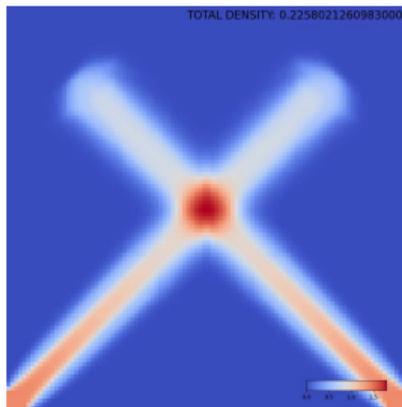
1. Contexte
2. Motivation et modèle de spray
- 3. Avancées sur le modèle de spray**
Mise en évidence d'un comportement instable en 2D
Reprojection stable
4. Validation numérique (code canoP)



Mise en évidence d'un comportement instable en 2D

Méthode [*Sun et al. 2017*] : 1) problème 1D sur un des axes (x **ou** y)
2) adapter l'autre axe pour imposer la bonne corrélation

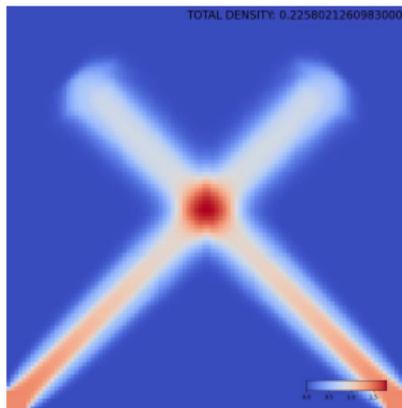
Axe de référence : x



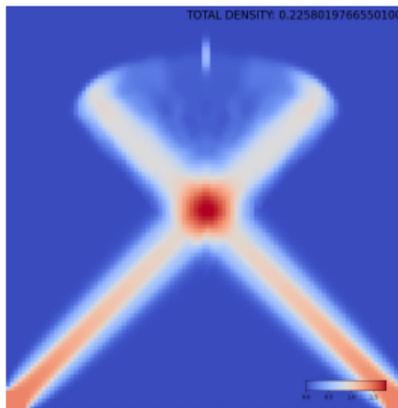
Mise en évidence d'un comportement instable en 2D

Méthode [*Sun et al. 2017*] : 1) problème 1D sur un des axes (x **ou** y)
2) adapter l'autre axe pour imposer la bonne corrélation

Axe de référence : x



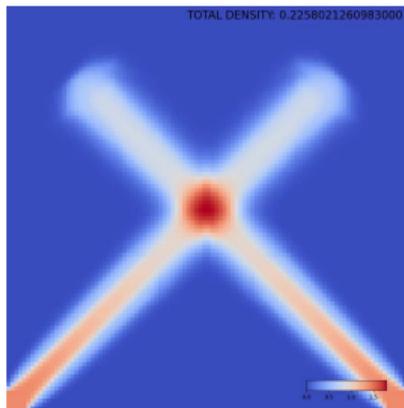
Axe de référence : y



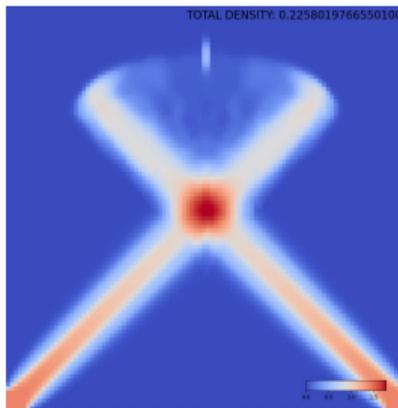
Mise en évidence d'un comportement instable en 2D

Méthode [Sun et al. 2017] : 1) problème 1D sur un des axes (x ou y)
2) adapter l'autre axe pour imposer la bonne corrélation

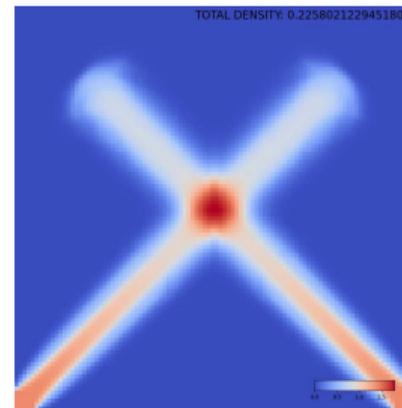
Axe de référence : x



Axe de référence : y



Axe de référence local :
signal maximal



Problème soulevé : contributions parasites (erreurs numériques), **sortie de la relation de fermeture** (3 jets ou 2 jets + jet parasite).

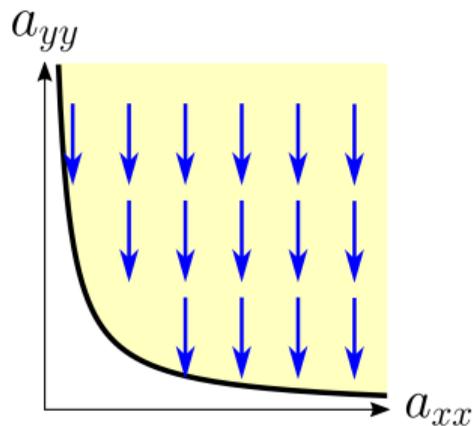
Reprojection des (co)variances $a_{ij} = M_{ij}^{(2)} M^{(0)} - M_i^{(1)} M_j^{(1)}$

En 2D/3D : les **moments réalisables** $(a_{xy})^2 \leq a_{xx} a_{yy}$ ne vérifient pas tous la **relation de fermeture** $(a_{xy})^2 = a_{xx} a_{yy}$. En cas d'écart, il faut **reprojeter**.

Reprojection des (co)variances $a_{ij} = M_{ij}^{(2)} M^{(0)} - M_i^{(1)} M_j^{(1)}$

En 2D/3D : les **moments réalisables** $(a_{xy})^2 \leq a_{xx} a_{yy}$ (**en jaune**) ne vérifient pas tous la **relation de fermeture** $(a_{xy})^2 = a_{xx} a_{yy}$ (**courbe noire**). En cas d'écart, il faut **reprojeter**.

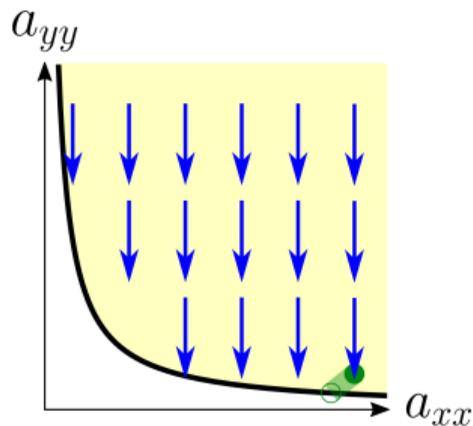
Axe de référence x :
garder a_{xx} , adapter a_{yy}



Reprojection des (co)variances $a_{ij} = M_{ij}^{(2)} M^{(0)} - M_i^{(1)} M_j^{(1)}$

En 2D/3D : les **moments réalisables** $(a_{xy})^2 \leq a_{xx} a_{yy}$ (**en jaune**) ne vérifient pas tous la **relation de fermeture** $(a_{xy})^2 = a_{xx} a_{yy}$ (**courbe noire**). En cas d'écart, il faut **reprojeter**.

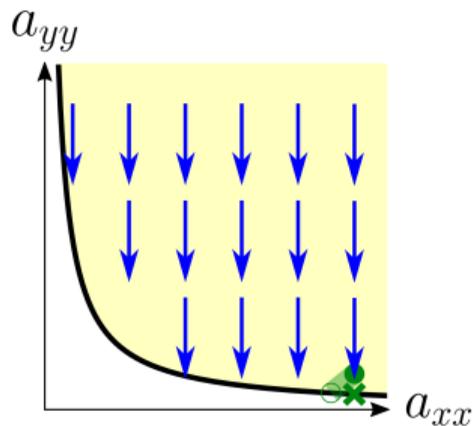
Axe de référence x :
garder a_{xx} , adapter a_{yy}



Reprojection des (co)variances $a_{ij} = M_{ij}^{(2)} M^{(0)} - M_i^{(1)} M_j^{(1)}$

En 2D/3D : les **moments réalisables** $(a_{xy})^2 \leq a_{xx} a_{yy}$ (**en jaune**) ne vérifient pas tous la **relation de fermeture** $(a_{xy})^2 = a_{xx} a_{yy}$ (**courbe noire**). En cas d'écart, il faut **reprojeter**.

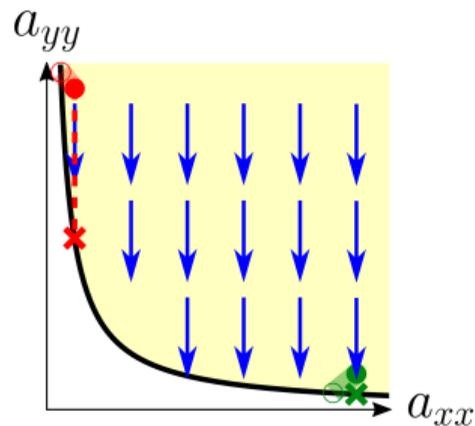
Axe de référence x :
garder a_{xx} , adapter a_{yy}



Reprojection des (co)variances $a_{ij} = M_{ij}^{(2)} M^{(0)} - M_i^{(1)} M_j^{(1)}$

En 2D/3D : les **moments réalisables** $(a_{xy})^2 \leq a_{xx} a_{yy}$ (**en jaune**) ne vérifient pas tous la **relation de fermeture** $(a_{xy})^2 = a_{xx} a_{yy}$ (**courbe noire**). En cas d'écart, il faut **reprojeter**.

Axe de référence x :
garder a_{xx} , adapter a_{yy}

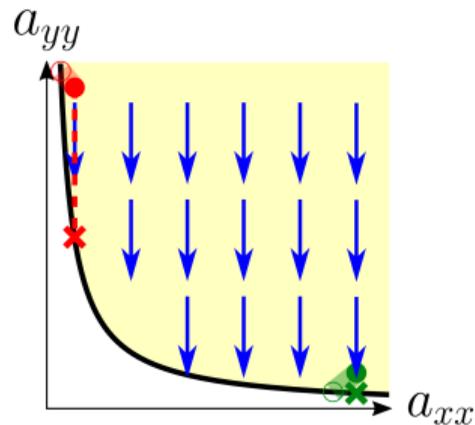


Fermeture instable pour
 $a_{xx} \simeq 0$

Reprojection des (co)variances $a_{ij} = M_{ij}^{(2)} M^{(0)} - M_i^{(1)} M_j^{(1)}$

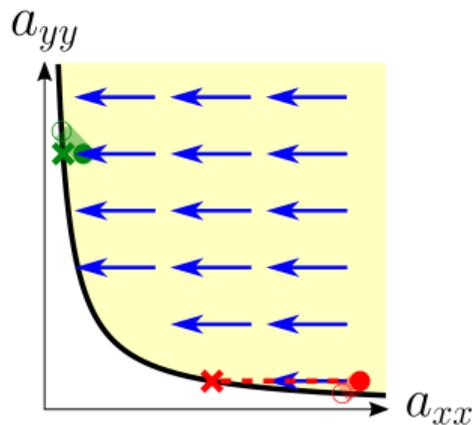
En 2D/3D : les **moments réalisables** $(a_{xy})^2 \leq a_{xx} a_{yy}$ (**en jaune**) ne vérifient pas tous la **relation de fermeture** $(a_{xy})^2 = a_{xx} a_{yy}$ (**courbe noire**). En cas d'écart, il faut **reprojeter**.

Axe de référence x :
garder a_{xx} , adapter a_{yy}



Fermeture instable pour
 $a_{xx} \simeq 0$

Axe de référence y :
garder a_{yy} , adapter a_{xx}

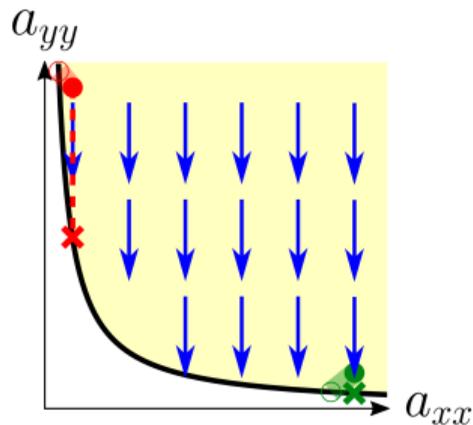


Fermeture instable pour
 $a_{yy} \simeq 0$

Reprojection des (co)variances $a_{ij} = M_{ij}^{(2)} M^{(0)} - M_i^{(1)} M_j^{(1)}$

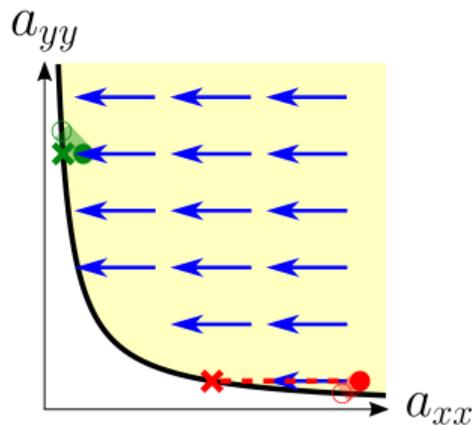
En 2D/3D : les **moments réalisables** $(a_{xy})^2 \leq a_{xx} a_{yy}$ (**en jaune**) ne vérifient pas tous la **relation de fermeture** $(a_{xy})^2 = a_{xx} a_{yy}$ (**courbe noire**). En cas d'écart, il faut **reprojeter**.

Axe de référence x :
garder a_{xx} , adapter a_{yy}



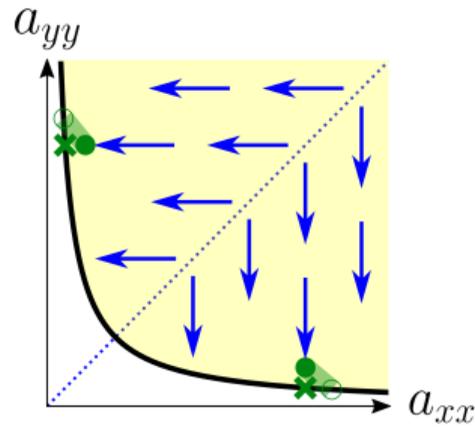
Fermeture instable pour
 $a_{xx} \simeq 0$

Axe de référence y :
garder a_{yy} , adapter a_{xx}



Fermeture instable pour
 $a_{yy} \simeq 0$

Axe de référence local :
garder le max, adapter l'autre



Stable aux perturbations sur
toute la fermeture

Plan de la présentation

1. Contexte
2. Motivation et modèle de spray
3. Avancées sur le modèle de spray
4. **Validation numérique (code canoP)**
Cas test 2D : tuyau rectiligne
Cas test 2D : vortex de Taylor-Green



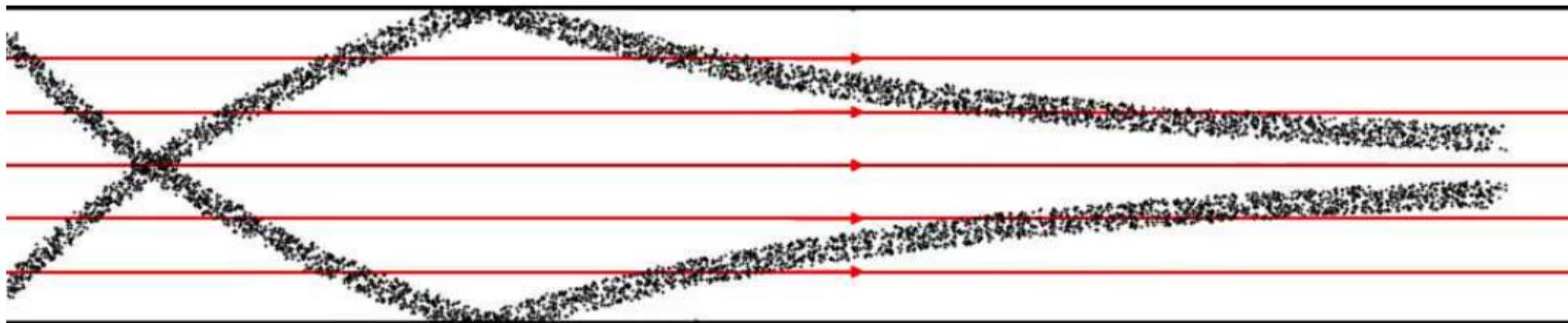
Cas test 2D : tuyau rectiligne

Champ de vitesse fluide :

$$\vec{U}_f(x, y) = 1.2\vec{e}_x$$

Deux jets de particules arrivent en diagonale : $\vec{v}_{in} = 1.0\vec{e}_x \pm 1.0\vec{e}_y$.

Modèle lagrangien de référence :



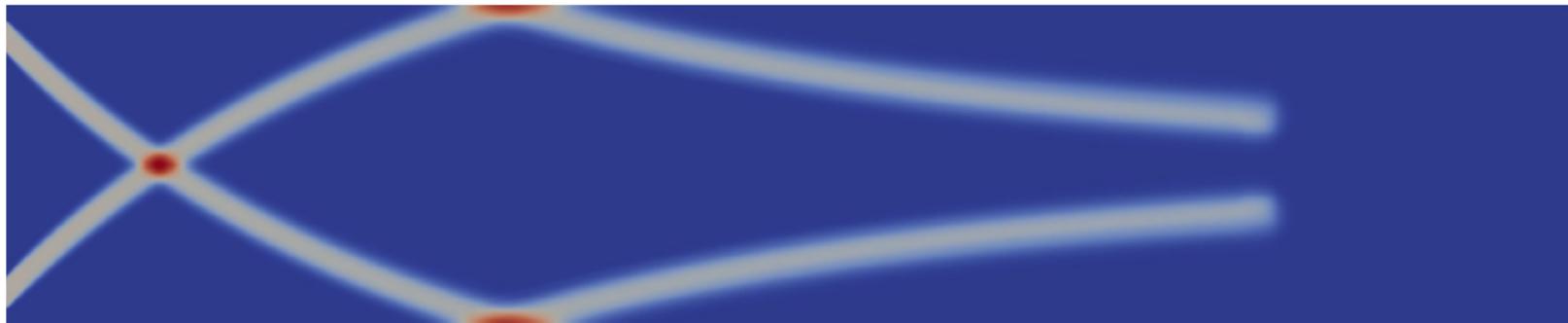
Cas test 2D : tuyau rectiligne

Champ de vitesse fluide :

$$\vec{U}_f(x, y) = 1.2\vec{e}_x$$

Deux jets de particules arrivent en diagonale : $\vec{v}_{in} = 1.0\vec{e}_x \pm 1.0\vec{e}_y$.

Modèle de spray à deux vitesses : résultats similaires à la littérature.



Discrétisation : 1280×256

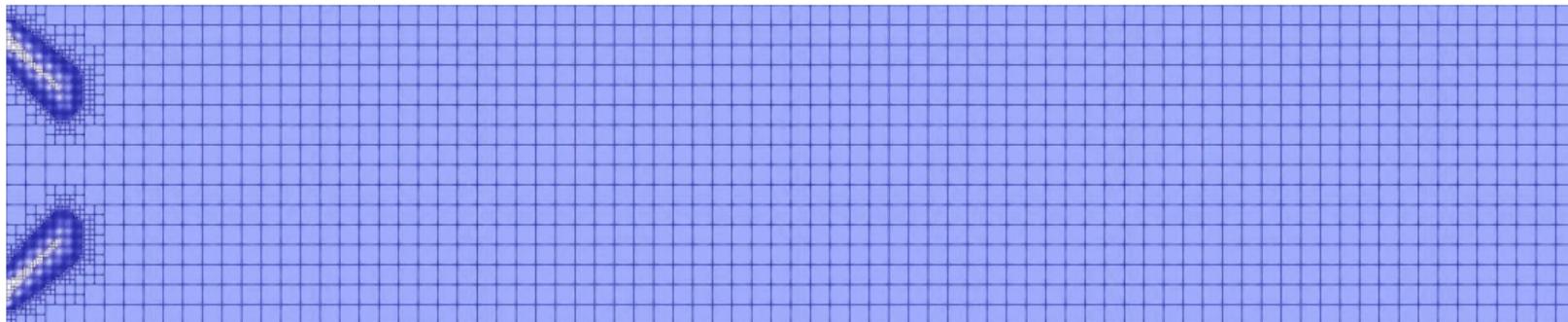
Cas test 2D : tuyau rectiligne

Champ de vitesse fluide :

$$\vec{U}_f(x, y) = 1.2\vec{e}_x$$

Deux jets de particules arrivent en diagonale : $\vec{v}_{in} = 1.0\vec{e}_x \pm 1.0\vec{e}_y$.

Modèle de spray à deux vitesses : validation de l'AMR.



Discrétisation : 80×16 — 1280×256

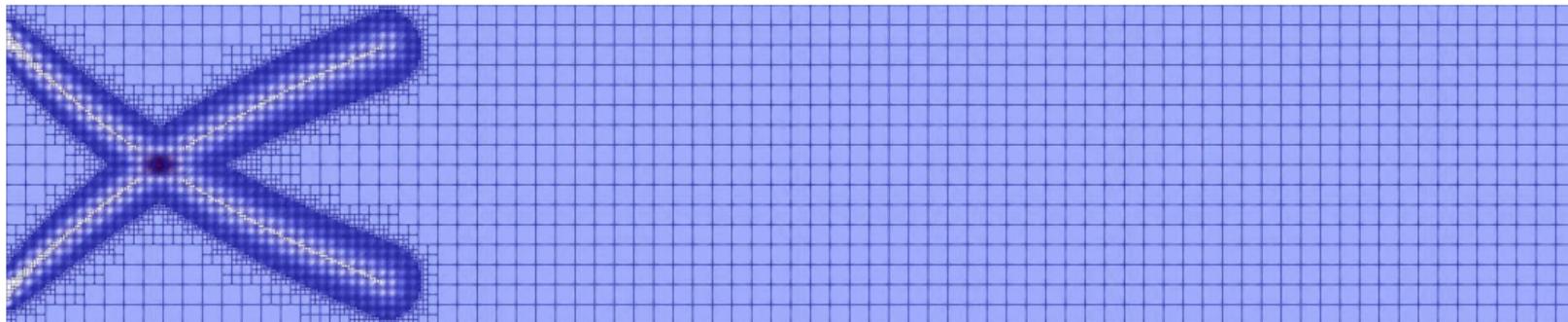
Cas test 2D : tuyau rectiligne

Champ de vitesse fluide :

$$\vec{U}_f(x, y) = 1.2\vec{e}_x$$

Deux jets de particules arrivent en diagonale : $\vec{v}_{in} = 1.0\vec{e}_x \pm 1.0\vec{e}_y$.

Modèle de spray à deux vitesses : validation de l'AMR.



Discrétisation : 80×16 — 1280×256

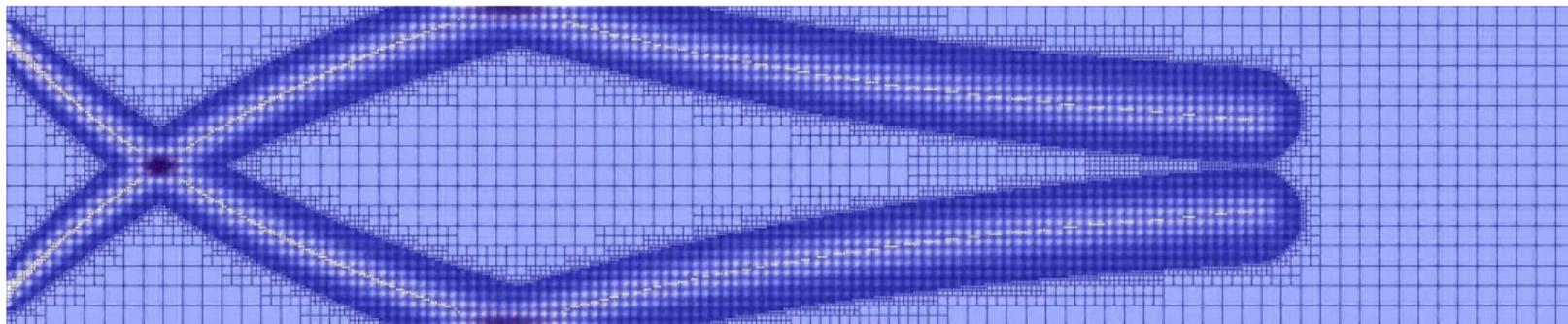
Cas test 2D : tuyau rectiligne

Champ de vitesse fluide :

$$\vec{U}_f(x, y) = 1.2\vec{e}_x$$

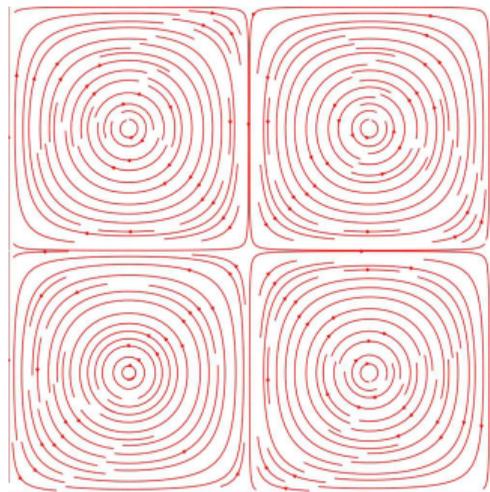
Deux jets de particules arrivent en diagonale : $\vec{v}_{in} = 1.0\vec{e}_x \pm 1.0\vec{e}_y$.

Modèle de spray à deux vitesses : validation de l'AMR.



Discrétisation : 80×16 — 1280×256

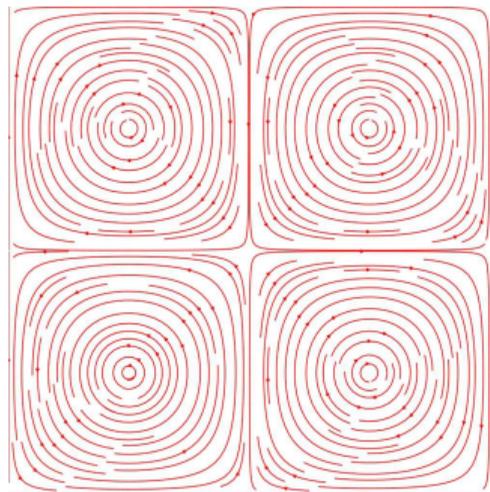
Cas test 2D : vortex de Taylor-Green



$$\vec{U}_f(x, y) = \sin(2\pi x) \cos(2\pi y) \vec{e}_x \\ - \cos(2\pi x) \sin(2\pi y) \vec{e}_y$$

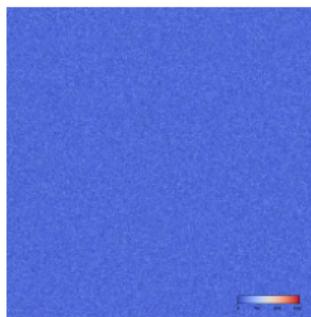
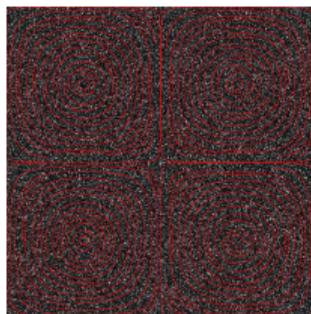
Carré unité, bords périodiques

Cas test 2D : vortex de Taylor-Green



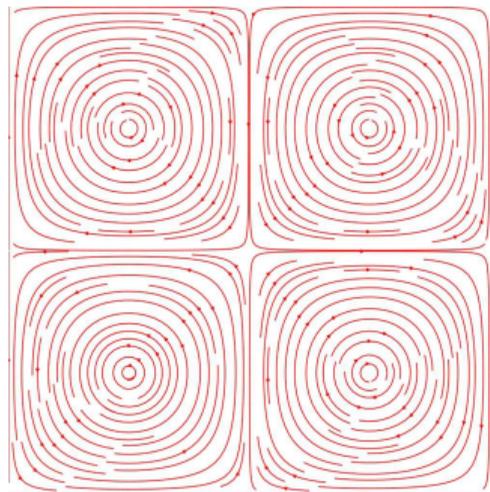
$$\vec{U}_f(x, y) = \sin(2\pi x) \cos(2\pi y) \vec{e}_x - \cos(2\pi x) \sin(2\pi y) \vec{e}_y$$

Carré unité, bords périodiques



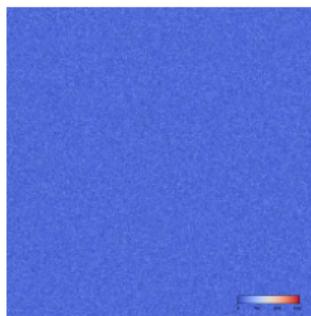
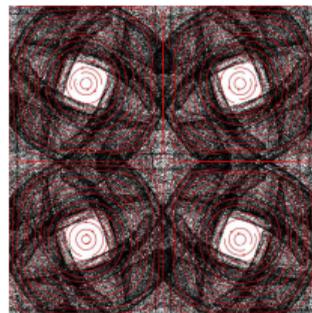
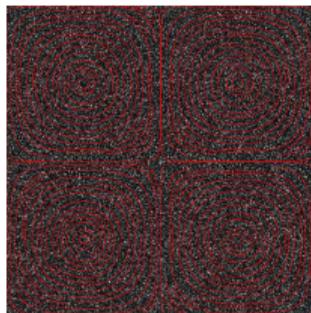
$t = 0s$

Cas test 2D : vortex de Taylor-Green

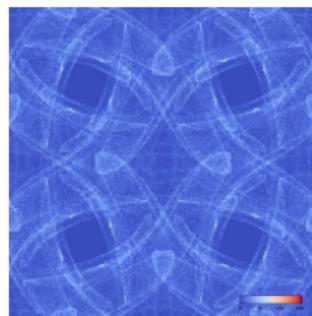


$$\vec{U}_f(x, y) = \sin(2\pi x) \cos(2\pi y) \vec{e}_x \\ - \cos(2\pi x) \sin(2\pi y) \vec{e}_y$$

Carré unité, bords périodiques

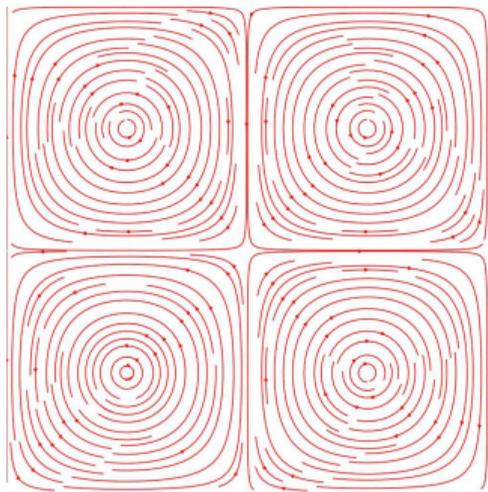


$t = 0s$



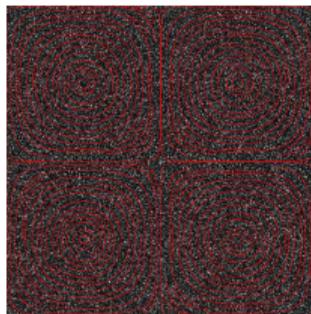
$t = 4s$

Cas test 2D : vortex de Taylor-Green

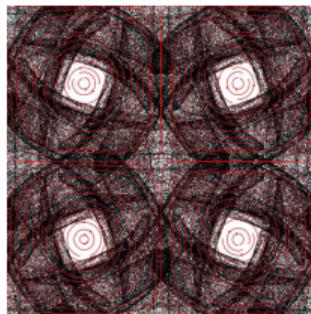


$$\vec{U}_f(x, y) = \sin(2\pi x) \cos(2\pi y) \vec{e}_x - \cos(2\pi x) \sin(2\pi y) \vec{e}_y$$

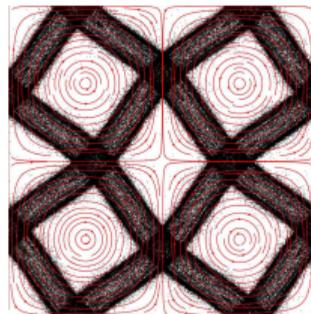
Carré unité, bords périodiques



$t = 0s$



$t = 4s$

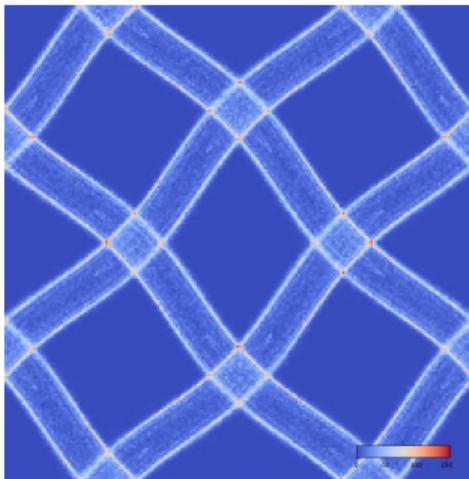


$t = 20s$

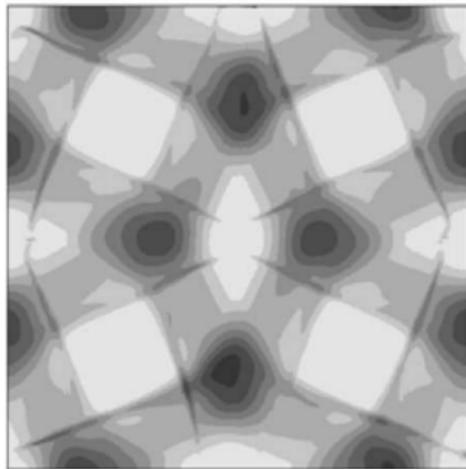
Cas test 2D : vortex de Taylor-Green



Simulation lagrangienne



[Sun et al. 2017]

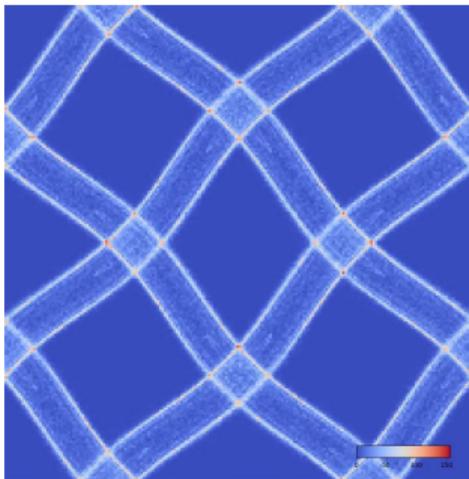


Discrétisation : 200×200

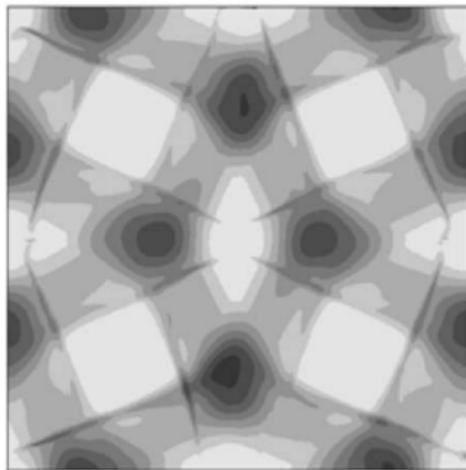
Cas test 2D : vortex de Taylor-Green



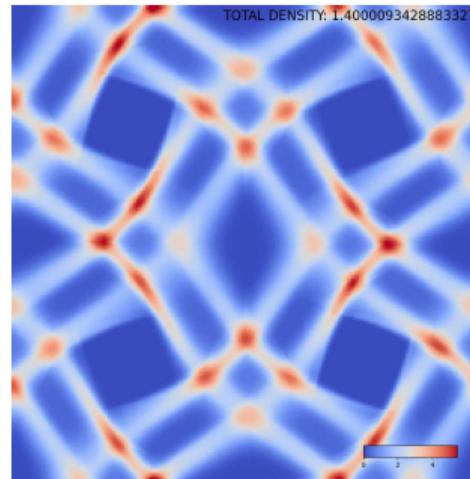
Simulation lagrangienne



[Sun et al. 2017]



Reprojection stable



Discrétisation : 200×200

Conclusion

Contexte

- Fuite de sodium liquide dans un réacteur RNR-Na
- Modélisation de la phase dispersée de gouttelettes

Travaux réalisés

- Mise en évidence d'instabilités dans le modèle de spray à deux vitesses
- Reprojection stable : résultats améliorés sur les vortex de Taylor Green 2D
- Différentes reprojctions stables possibles

Travaux en cours

- Implémentation dans le code canoP
- Sonder la robustesse des choix possibles pour la reprojction