DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



LE CODE TRIOCFD

Mathieu Peybernes

DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF

HPCDD, 7/04/2016

www.cea.fr



- 1. Le logiciel TrioCFD
- 2. Quelques Applications
- 3. Conclusion. Perspectives



- 1. Le logiciel TrioCFD
- 2. Quelques Applications
- 3. Conclusion et perspectives



- 1. Le logiciel TrioCFD
 - □ Architecture du code
 - Modélisation physique
 - Méthodes numériques
 - Parallélisme
- 2. Quelques Applications
- 3. Conclusion et perspectives



- Développé depuis 1996 au sein de la DEN, passage en OpenSource en 2015 et découpage du projet Trio_U en TRUST et TrioCFD.
- TrioCFD est la partie « application » reposant sur la plateforme informatique TRUST
- Résout les équations aux dérivées partielles par la méthode des volumes différences finis ou volumes éléments finis
- Code multi-physique principalement orienté vers la mécanique des fluides et les applications liées au nucléaire civil
- Des interfaces à des produits de pré et post (Salomé, Paraview, Vislt...), à des librairies (MPI, Metis, PETSc, MED...)
- □ Code 2D/3D développé en C++ (1200 classes)



- Le parallélisme est intrinsèque (découpage de domaines avec recouvrement). Communications MPI
- Des outils pour la <u>vérification/validation</u>, non régression/portage
- un outil de recherche « fondamentale » utilisé pour mener des activités de recherche (réalisation de nombreux stages et thèses basés)
- □ Page web : <u>http://www-trio-u.cea.fr/</u>
- □ Installation multi-plateforme (préférence Linux)

Le code TrioCFD repose sur la plateforme informatique TRUST



- DNS-ijk : modélisation des écoulements diphasiques à l'échelle locale instantanée
- MC2 : modélisation de la thermohydraulique du cœur des RNR
- MPCube : transport et diffusion en milieu poreux

Applications actuelles Applications futures



NOYAU





CEA MODÉLISATION PHYSIQUE

Ecoulement incompressible ou faiblement compressible

- Hypothèse de Boussinesq
 ρ=ρ(T)~ρ₀-β(T-T0)
- Modèle quasi-compressible
 ρ=ρ(P,T) for low mach numbers
- Ecoulement Laminaire ou turbulent (DNS/RANS/LES)
- Navier Stokes avec ou sans équation d'énergie
- Ecoulement monophasique ou diphasique

 $Div(\vec{u}) = 0$ $\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u}\nabla \vec{u} = -\nabla P * + Div(v\nabla \vec{u})$ $P * = \frac{P}{\rho} + gz$ $\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u}\nabla T = Div(\alpha \nabla T)$

Problème de thermohydraulique monophasique pour un écoulement incompressible laminaire

9

MODÈLE QUASI-COMPRESSIBLE

•Prise en compte des variations spatiales et temporelles de densités dues à de fortes variations de température:

Gaz parfait: $\rho(\vec{x},t) = \frac{P_0(t)}{RT(\vec{x},t)}$

•Filtrage des ondes acoustiques pour éviter petits pas de temps:

 $P(x, t) = P_1(x,t) + P_0(t)$ avec P_1 la pression hydrodynamique et P_0 la pression thermodynamique

Domaine de validité:

$$P_{1} \approx M^{2}P_{0} \text{ et } M = Mach <<1$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \vec{u}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_{i}) + div(\rho u u_{i}) - \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\mu(\frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial u_{j}}{\partial x_{i}}) \right] + \frac{\partial P_{1}}{\partial x_{i}} = -\rho g_{i}$$

$$\rho C_{p} \frac{dT}{dt} - \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial}{\partial x_{j}} (K \frac{\partial T}{\partial x_{j}}) = Q + \frac{dP_{0}}{dt} \qquad P_{0} = \rho RT$$

Problème de thermohydraulique monophasique pour un écoulement quasi-compressible laminaire

COME ECOULEMENT DIPHASIQUE AVEC FRONT-TRACKING

- Description locale (Mécanique des fluides continus)
- Navier-Stokes equations :

 $\frac{\partial \rho_k \boldsymbol{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{u}_k) = -\nabla p_k + \rho_k \boldsymbol{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k \text{ with } \boldsymbol{\tau}_k \cong \mu_k (\nabla \boldsymbol{u}_k + \nabla^T \boldsymbol{u}_k)$

- Conditions de saut à l'interface:
- Continuité de la vitesse : $u_1^n = u_2^n$ and $u_1^t = u_2^t$
- Conditions d'équilibre des efforts à l'interface : $\sum_k (p_k n_k \tau_k \cdot n_k) = -\sigma \kappa n$

Extension au domaine complet

Fonction indicatrice de phase χ_k : 1 pour la phase k, 0 sinon. $\frac{\partial \chi_k \rho_k \boldsymbol{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\chi_k \rho_k \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{u}_k)$

 $= -\nabla(\chi_k p_k) + \chi_k \rho_k \boldsymbol{g} + \nabla \cdot [\chi_k \mu_k (\nabla \boldsymbol{u}_k + \nabla^T \boldsymbol{u}_k)] - (p_k \boldsymbol{n}_k - \boldsymbol{\tau}_k \cdot \boldsymbol{n}_k) \cdot \nabla \chi_k$

Formulation mono-fluide

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} \boldsymbol{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \boldsymbol{u} + \nabla^T \boldsymbol{u})] + \sigma \kappa \boldsymbol{n} \, \delta^{\boldsymbol{i}}$$

La fonction indicatrice de phase χ_k est advectée par le champ de vitesse local (algorithme VOF/FT)



FRONT TRACKING

- Méthode Front-Tracking/VOF implémentée dans TrioCFD :
- Taux de changement de phase et courbure sur le maillage lagrangien; -
- Propriétés physiques, vitesse, pression et température sur le maillage eulérien.
- 1.Transport de l'interface : $\frac{\partial \chi}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \chi = 0$

2.Masse :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0$$

3.QDM:
$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = -\nabla P^* + \nabla \cdot (\mu \nabla u) + S^i$$

avec
$$P^* = P - \rho g \cdot x$$
 et $S^i = (\Delta \rho g \cdot x + \sigma \kappa + \phi^r) \nabla \chi$

où ϕ^r est une force artificielle pour éviter les collisions.

- Termes sources à l'interface :
- La méthode CSF (Continuous Surface Force)
 n'a pas été introduite à cause des courants parasites;

$$\delta \boldsymbol{F}_{\sigma} = \sigma \left(\boldsymbol{t}_2 - \boldsymbol{t}_1 \right)$$



 Concession : La discrétisation de la tension de surface n'est plus conservative (l'erreur reste relativement petite).







□ Corps mobiles

Le modèle de "Front Tracking" peut être dégénéré pour utiliser la méthode IBM (Immersed Boundary Method) qui utilise des Immersed Boundary Condition, c'est à dire mettre des frontières solides (immobiles ou en déplacement) à l'intérieur du domaine fluide et modéliser les conditions limites sur ces frontières solides avec des termes sources dans l'équation de quantité de mouvement du fluide.

Example of a flow around a rotating body defined by an IBC





- Modélisations RANS et LES de la turbulence
- Lois de paroi
- Couplage solide thermique
- Rayonnement en milieu transparent ou semi transparent
- □ Combustion homogène et hétérogène
- Conduction
- Transport de scalaires passifs

 $\frac{\partial C_i}{\partial t} + \vec{u} \nabla C_i = Div \left(D_i \nabla C_i \right)$

□ Milieux poreux (approche moyennée)



- •Calculs 2D: coordonnées cartésiennes ou cylindriques
- •Calculs 3D: coordonnées cartésiennes ou polaires
- •Schéma de type Volume Différences Finies (VDF)
- Schéma décalé en espace: vitesses normales aux faces et pression au centre des élément
- Inconnues scalaires au centre des éléments





DISCRÉTISATION SPATIALE: MAILLAGE NON STRUCTURÉ

- Une méthode numérique originale, qui a fait l'objet de 3 thèses
- Propriétés de stabilité
- Méthode Volumes Eléments Finis (VEF)
- Maillages de triangles (2D) ou de tétraèdres (3D)
- Champ de vitesse centrées sur les faces (P1NC)
- Autres variables (sauf pression) centrées sur les faces
- Différentes approches pour la pression: P0, (P0+P1), (P0+P1+Pa) en 3D (voir transparent suivant)



DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRI

DISCRÉTISATION SPATIALE: DDL EN PRESSION









P0+P1





Adapté aux termes sources violents et cas de faibles vitesses d'écoulement pour lesquels le gradient de pression P0+P1 a du mal à compenser le terme source DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRI

DISCRÉTISATION SPATIALE : VOLUMES DE CONTROLE



<u>Algorithms:</u>

-Iterators to loop on elements or faces

-Evaluators to calculate fluxes on faces or facets Velocity Pressure VEF

Algorithms:

-Repeated loops on elements, faces or facets to calculate fluxes on the control volumes for <u>each</u> scheme



Momentum control volumeMass control volume



□ Schéma explicite : méthode de projection



DISCRETISATION EN TEMPS



DISCRETISATION EN TEMPS





Domain partitioning tools:

- Metis
- Tranche "band partitioning"
- Performances are partition dependent:
 - Same number of cells by sub-domain
 - To minimize the joints length (boundaries between sub-domains



useritriou Thu Jan 22 19:15:22 2004

- Some rules of thumb for performance:
 - If possible, use 20000-30000 cells per MPI process
 - Look at cluster specificities:
 - Look at cluster specificities:
 - L2 size cache
 - Latency network
 - ...



Definition of overlapping width value

- Number of vertexes or elements on the remote sub-domain known by the local sub-domain
- Specified by the users during partitioning task
- This value depends on the space scheme orders:
 - 1 if 1-2nd order
 - 2 if 3-4th order
- In practice, use 2 except if you use only upwind schemes





MPI PARALLELIZATION

Virtual values



processes.

Virtual items in blue (faces, cells, vertexes) constitute the « virtual space » of the process 0.

For the process 1, the same items are real and constitute the « remote space » of process 0.



•Number of **real** items:





How to find the source(s) of parallelism differences in TrioCFD ?

- Use the Debog keyword by inserting in the sequential and parallel data files after the Discretize keyword:
 - Debog problem_name seq faces 1.e-6 0 # In the sequential datafile
 - Debog problem_name seq faces 1.e-6 1 # In the parallel datafile
- Run the sequential then the parallel calculation. The Debog keyword will compare arrays each time this line is found in the code :
 - Debog::verifier(« I am checking array », array);
 - Look at the log files to detect when the parallel difference appears.



PERFORMANCES

- □ Pour les simulations cibles \rightarrow plusieurs millions d'inconnues \rightarrow HPC indispensable.
- □ La résolution numérique de la CFD est basé sur la méthode de projection de la pression → entre 60% et 80% du temps CPU passé dans le solveur linéaire
- □ Analyse de la scalabilité forte sur des benchmarks à 100M de mailles.

Processor cores	Iterations to convergence	CPU time in s	tetras/core
500	5733	181,4	213260
1000	5735	82,9	100663
2000	6019	43,6	50331
4000	5877	22,1	25165
6000	6018	16,2	16777
8000	6042	13,2	12583
10000	5979	11,9	10066













{



Hydraulique 2D laminar flow with Quick scheme # # A media is defined # dimension 2 Fluide Incompressible milieu Read milieu Pb_hydraulique pb Domaine dom mu Champ_Uniforme 1 3.7e-05 # Dynamic viscosity # rho Champ Uniforme 1 2 # Volumic mass # # BEGIN MESH # Read_file Obstacle.geo; # Create links between objects # # END MESH # Associate pb dom **# BEGIN PARTITION** Associate pb mon schema Partition dom Associate pb milieu Discretize pb ma discretisation Partitionneur tranche { tranches 2 1 } Read pb Larg joint 2 Nom Zones DOM Navier_Stokes_standard Fin convection { quick } END PARTITION # **diffusion** { } # By default, 2nd order scheme # **# BEGIN SCATTER** conditions_initiales { vitesse Champ_Uniforme 2 0. 0. } Scatter DOM.Zones dom boundary_conditions { END SCATTER # Square paroi fixe # Wall U= 0 # Upper symetrie # A discretization is selected # Lower symetrie VDF ma discretisation # Neumann boundary condition P=0 # Outlet frontiere_ouverte_pression_imposee Schema_Euler_explicite mon schema Champ_front_Uniforme 1 0. Read mon schema # Dirichlet boundary condition U=(1,0) # Inlet frontiere_ouverte_vitesse_imposee tinit 0 tmax 5.0 Champ_front_Uniforme 2 1. 0. nb pas dt max 1000 dt_min 5.e-3 # Trio_U stops if dt_stab<dt_min # solveur pression GCP { dt max 5.e-3 # Parameter of SSOR # dt_impr 5.e-3 precond ssor { omega 1.5 } dt sauv 1. # Convergence threshold which impacts flow mass rate # facsec 0.5 # Warning: not a dimensionless number so the flow mass # seuil_statio 1.e-8 # rate should be checked during the first time-steps # seuil 1.0e-06 # Calculation timestep dt=min(dt stab,dt max)*facsec # impr # Print the residual error ||Ax-B|| # # dt stab=1/(1/dt(convection)+1/dt(diffusion)) # # 1D : dt(convection)=dx/max(U) dt(diffusion)=dx^2/(2D)



```
Schema Euler explicite sch
Lire sch
     tinit 0.
     tmax 10000.
     dt_min 1.e-6
     dt max 100.
     dt_impr 1.e0
     seuil statio 1.e-10
Navier_Stokes_Turbulent
                                                                            \Delta P = \frac{\rho}{\Lambda t} \nabla \cdot u^t
        solveur_pression Cholesky { }-----
         convection { amont } -----
         diffusion { implicite }-----
         Sources { Canal_perio { bord Entree } }
                                                                      ⇒
                                                                          u^t = u^n + \Delta t (-A^n + D^n)
         conditions initiales
                { vitesse Champ_Uniforme 2 0.05 0. }
         conditions limites
                { WALL paroi_fixe
                 Entree periodique
        modele_turbulence K_Epsilon
                { . . . . . .
                                                                               HPCDD | 7 avril 2016
```



- 1. Le logiciel TrioCFD
- 2. Quelques Applications
- 3. Conclusion et perspectives



PWR MIXING GRIDS

- Mixing grids are designed by nuclear power plant vendors to create a specific coolant mixing behavior in the fuel assembly.
- The mixing grid acts as momentum source which increases the turbulence level and guides the transvers flow pattern as a function of the specific vane design.

Case studies

- Flow in fuel assemblies of PWRs with mixing grids (AGATE experiment)
- Estimation of pressure and viscous forces onto two PWR mixing grids

Modeling approach

- Non-isotropic high turbulent flow behavior \rightarrow LES
- Very large CFD simulations \rightarrow HPC compulsory
- Use of 3D CFD parallel TrioCFD code





U. Bieder



AGATE CALCULATION (2013 CALCULATION)

- CAD model and meshing
- CAD modeling with SALOME
- Full tetra mesh generation of the mixing grid with ICEM
- Two prismatic layers near walls (cut into tetra)
- 300 million velocity calculation points
- 20 days of CPU on 4600 cores of CURIE





U. Bieder

AGATE CALCULATION (2013 CALCULATION)

Results: K-eps vs LES



PAGE 33 HPCDD | 7 avril 2016



TWO MIXING GRIDS CALCULATION (2014 CALCULATION)

Calculation setup

- Determine pressure and viscous forces onto two PWR mixing grids in case of transverse flows.
- Similar approaches as for the AGATE study have been used to model and mesh the geometry
- More than 1 billion of velocity control volume (550M of tetra):
 - 400 M VCV for recirculation box
 - 700 M for the computational domain
- 10K cores on the CURIE machine







U. Bieder



TWO MIXING GRIDS CALCULATION (2014 CALCULATION)

First results

- Final results are being analyzed
- The calculation was running for 20 days on 10,000 CPU cores up to reach convergence of the mean values
- Total calculation cost: >6M hours
 - Study setup
 - Calculation itself onto 10k cores
 - Post processing



Norm of the instantaneous velocity in two cut planes

U. Bieder

TWO MIXING GRIDS CALCULATION (2014 CALCULATION)



P.E. Angeli

HPCDD | 7 avril 2016 | PAGE 36

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRI





- Recherche de compacité, puissance augmentée
- Agitation plus importante de la surface libre du Collecteur Chaud
- Risque accru d'aspiration du gaz de ciel de pile par formation de vortex de surface, puis passage d'une poche de gaz dans le cœur



Effets du passage de gaz dans le cœur des RNR-Na

- Augmentation de la réactivité et excursion de puissance
- Mauvaise évacuation de la chaleur des aiguilles combustible
- Disfonctionnement de certains composants ou capteurs

➔ Problème majeur de sûreté à écarter dès la conception !

- Réalisation de maquettes expérimentales de collecteurs chauds : problème d'échelle et de similitude (eau ≠ sodium)
- Recours à la <u>simulation numérique</u> pour choisir entre plusieurs design de collecteurs chauds (quelques dizaines de m) : problème de la taille des bulles (quelques mm)





C. Fournier. M. Bélliard. F. Ducros

HPCDD | 7 avril 2016

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Trio

QUELLE DÉMARCHE POUR LA CFD ?

<u>Approche réaliste</u> : Utilisation d'une simulation numérique fine du collecteur chaud pour renseigner des modèles analytiques corrélant le phénomène d'entrainement de gaz aux grandeurs locales de l'écoulement

Cette démarche nécessite de développer et valider...

- Le code TrioCFD : simulations numériques 3D, turbulentes, instationnaires (du type LES) et diphasiques (avec suivi d'interface de type Front-Tracking) à l'échelle du collecteur chaud
- Un modèle analytique : prédire localement le risque d'entrainement de gaz à partir des grandeurs locales de l'écoulement : vorticité, gradient de vitesse verticale, invariant du tenseur des gradients de vitesse,...





... en s'appuyant sur des maquettes analytiques permettant de simuler la formation de vortex <u>instationnaires</u> (GERATO de JAEA et BANGA du CEA) afin d'améliorer la compréhension des phénomènes physiques mis en jeu

SIMULATION DE LA MAQUETTE ANALYTIQUE GERATO







Nombre de mailles : 10 millions Tailles des mailles : 1 mm

La maquette analytique GERATO (JAEA) :

- A montré que TrioCFD permettait de reproduire un écoulement à surface libre avec formation d'un vortex instationnaire
- A permis de tester la validité des critères d'entrainement de gaz proposés par JAEA et issus de l'étude de modèles analytiques de vortex stables (tourbillon de Burger)

Temps CPU : 2 semaines sur 512 proc. pour 1 min. de temps physique

C. Fournier. M. Bélliard. F. Ducros

cea

SIMULATION « FINE » DU COLLECTEUR CHAUD





Nombre de mailles : 18 millions Tailles des mailles : 3,5 cm Temps CPU : 1 semaine sur 512 proc. pour 50 s de temps physique

TRANSITOIRE ACCIDENTEL ULOF SUR LE PROTOTYPE ASTRID

Echangeur d'évacuation de la

puissance résiduelle

Transitoire étudié: perte des pompes primaires avec chute des barres d'arrêt d'urgence.

Le système complet est calculé avec CATHARE

Collecteur Froid : TRIO_U

Mise en œuvre d'une méthodologie de couplage multi-échelle

- Couplage par recouvrement de domaine.
- Réacteur complet calculé par le code système
- Les codes à échelle plus fine agissent comme un zoom local qui corrige le code système.
- Echange des données entre les codes à chaque pas de temps.



R. Bavière, N. Tauveron, F. Perdu, E. Garré, System-CFD coupled simulation of the Phénix Reactor Natural Circulation Test, *The 15th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics* (NURETH-15), Pisa, Italie, (2013).

HPCDD | 7 avril 2016

PROCÉDÉ DE VITRIFICATION EN CREUSET FROID

Ces études s'inscrivent dans le cadre de l'optimisation du processus de vitrification des déchets radioactifs, sur la base d'un nouveau procédé : le **creuset froid**





AA

790 mm

nd

ETUDE TRIOCFD DE LA MAQUETTE « VITRIF »

Simulation de l'hydraulique et des transferts thermiques au sein du bain de verre agité

- Maillage cartésien avec méthode de frontière immergée (IBC) pour la prise en compte du mouvement de l'agitateur et de la paroi du creuset
- Simulations massivement parallèles (20 millions d'éléments)
- Validation en fluide simulant grâce à la maquette hydraulique VITRIF (maquette en huile silicone)
 - Mesures du champ de vitesse bidimensionnel par PIV (vélocimétrie par images de particules) dans des plans verticaux en l'absence de bullage (présence d'une zone d'ombre correspondant à la zone de traversée de l'agitateur dans le plan)
 - Comparaison calcul / expérience pour les vecteurs vitesse moyens : erreur relative (en norme L2) inférieure à 20%



















HPCDD | 7 avril 2016



UP-SCALING EXAMPLES SUBCOOLED HEAT TRANSFER

Condensation rate models are based on experiments on isolated bubbles without flow;
 Up-scaling lesson : 20% improvement of heat transfer due to "pseudo-turbulence".



Validation of the simulation tool and the mesh on a single bubble



OTHER EXAMPLES NUCLEATION



Isolated nucleation site



Regular grid of nucleation sites

OTHER UP-SCALING EXAMPLES INTERFACES AND SUB-GRID SCALE MODELING

DNS is too expensive to be used in parametric studies or at high Reynolds numbers;
 Single-phase LES has been very useful but what should be done close to interfaces?

⇒ Interfaces and Subgrid Scale modeling (ISS, Toutant 2006, Bois 2011)



OTHER UP-SCALING EXAMPLES INTERFACES AND SUB-GRID SCALE MODELING

- DNS is too expensive to be used in parametric studies or at high Reynolds numbers;
- Single-phase LES has been very useful but what should be done close to interfaces?
- ⇒ Interfaces and Subgrid Scale modeling (ISS, Toutant 2006, Bois 2011)
 - Development and applications :
 - Interaction with Homogeneous Isotropic Turbulence;
 - Condensation rate;
 - Drag force and interfacial area modeling.









CONCLUSION. PERSPECTIVES.

TrioCFD:

- Code de Thermo Hydraulique monophasique (échelle CFD) et diphasique (échelle DNS);
- Code mature, qui a fait l'objet de nombreuses études pour des applications variées;
- Parallélisme MPI avec décomposition de domaine géométrique sur plusieurs dizaines de milliers de coeurs;
- Utilisation d'une méthode de validation;
- Des méthodes numériques originales.
- Une architecture évolutive qui permet de développer de nouveaux modèles ou schémas numériques;
- Nécessité de s'adapter aux nouvelles architectures à travers l'utilisation d'un parallélisme hétérogène
- Introduction à venir d'une méthode de décomposition de domaine (ANR CINE-PARA) : problème de Stokes puis Navier-Stokes
- TrioCFD est en quête de nouvelles applications

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives Centre de Saclay | 91191 Gif-sur-Yvette Cedex T. +33 (0)1 69 08 21 61 | F. +33 (0)1 69 08 85 68

Etablissement public à caractère industriel et commercial | RCS Paris B 775 685 019

Direction de l'Energie Nucléaire Département de Modélisation des Systèmes et Structures Service de Thermohydraulique et de Mécanique des Fluides