
Simulation numérique d'écoulements multi-phasiques couplés à la température en LBM par un potentiel chimique

5 décembre 2023

Inria, équipe I4S & CEA, LMSF

Présentation des équipes

Le projet est porté conjointement par l'équipe de recherche I4S à Inria et le laboratoire LMSF du CEA.

Inria : Inria est l'institut français de recherche en sciences et technologies du numérique. Ce centre de recherche public d'excellence scientifique est en première ligne de la transformation digitale en France. La recherche en informatique, mathématiques, intelligence artificielle (AI), le développement logiciel, l'innovation dans les disciplines à fort impact technologique et le risque entrepreneurial (DeepTech) constituent l'ADN de l'institut. Inria est en 16^{ème} place du classement mondial « AI Research » et est le 1^{er} institut européen de recherche exploratoire en sciences du numérique.

I4S : L'équipe I4S (Inferences for Structures) est une équipe commune entre Inria et l'Université Gustave Eiffel, spécialisée dans le monitoring de santé des structures (SHM), *i.e.* essayer de prédire, catégoriser, localiser et quantifier les défauts ou dommages pouvant apparaître sur des structures de génie civil, électriques, (bio)-mécaniques, énergétique ou aéronautiques, *etc.* Pour ce faire, il est nécessaire de croiser des données et savoir-faire multiples tels que de la simulation physique numérique, du traitement des données, développement de capteurs, intégration de l'électronique embarquée, de la propagation d'incertitudes statistiques, *etc.*

CEA : Le Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA) est un organisme français de recherche et de développement dédié aux domaines de l'énergie, de la défense, et des technologies émergentes. Ses recherches couvrent un large éventail de domaines, de la physique nucléaire et quantique aux énergies renouvelables, contribuant ainsi de manière significative aux avancées technologiques et à la compréhension des enjeux contemporains.

LMSF : Au sein du DM2S (Département de Modélisation des Systèmes et Structures), le STMF (Service de Thermohydraulique et de la Mécanique des Fluides) est spécialisé dans la conception, le développement, la qualification de logiciels de simulation en thermohydraulique et mécanique des fluides, adaptés aux réacteurs et installations nucléaires, ainsi que les procédés liés au cycle du combustible. Il mène également des programmes expérimentaux en support à la compréhension des phénomènes et valider les modèles physiques des logiciels, tout en effectuant des études et expertises pour des applications nucléaires et énergétiques. En particulier le Laboratoire de Modélisation et Simulation en mécanique des Fluides (LMSF) développe les méthodes numériques et les codes de calcul en relation avec les fluides, les transferts et la thermodynamique.

Contexte général

Le CEA et Inria étudient les écoulements multi-phasiques dans les milieux poreux en interaction avec la matrice poreuse et le champ de température. Ces écoulements sont intrinsèquement plus complexes à résoudre par la nature des phénomènes en jeu : couplage thermo-mécanique, mobilité des interfaces, grand ratio de densité. . . Néanmoins, de tels écoulements se révèlent d'un grand intérêt, car ils sont rencontrés dans des applications en lien avec la production d'énergie et la gestion de l'énergie en ville ainsi que pour le diagnostique de santé des structures poreuses.

D'un autre côté, la méthode de Boltzmann sur réseaux (Lattice Boltzmann Method – LBM) [2] est une méthode numérique qui permet la simulation de problèmes physiques modélisés par des équations aux dérivées partielles telles

que celles impliquées dans la croissance des cristaux, les équations fractionnaires et les écoulements de fluide. La base de la méthode consiste à réaliser une étape de collision suivie d'une étape de déplacement d'une fonction de distribution sur un maillage cartésien régulier. Cette simplicité algorithmique confère à la méthode de bonnes propriétés numériques, telles qu'une bonne scalabilité et une facilité de couplage.

La méthode LBM a été mise en œuvre dans un code de calcul développé en C++ au CEA : `LBM_saclay` [4]. Ce dernier est dédié à la simulation d'écoulements multi-phasiques avec ou sans changement de phase liquide-gaz et exécutable sur différentes architectures matérielles (multi-CPU et multi-GPU) [5]. En parallèle l'Inria a implémenté différents codes de calcul développés en Python et Fortran pour le changement de phase liquide-solide ou liquide-gaz couplé à la température.

Au sein des techniques utilisées par la LBM pour appréhender les écoulements multi-phasiques, deux catégories d'approches se distinguent: les approches par champs de phase et les approches par pseudo-potentiels. Les approches par champs de phases ont l'avantage d'être moins sensibles aux larges ratios de densité et se justifie théoriquement à partir de l'énergie libre de Landau ce qui leur permet de s'intégrer facilement avec les outils théoriques et numériques des procédés chimiques de l'industrie. Mais elles ont l'inconvénient d'être plus gourmandes numériquement, car elles recourent à une équation supplémentaire (celle d'Allen–Cahn, par exemple) et son couplage. Cette approche est actuellement celle utilisée par le CEA. Les approches par pseudo-potential ont l'avantage d'être moins gourmandes, car ne nécessite pas d'équation supplémentaire, d'offrir un couplage naturel avec la température [3]. Néanmoins, ces approches sont plus sensibles aux larges ratio de densité et se justifient plus difficilement dans le cadre d'énergie libre (sans l'ajout de terme supplémentaire) et donc elles s'intègrent moins facilement avec les procédés chimiques. Cette approche est utilisée par l'équipe I4S de l'Inria. À l'interface entre ces deux approches, une autre catégorie émerge depuis quelques années. Parallèlement, une nouvelle catégorie de méthode pour les écoulements multi-phasiques en LBM commence à émerger: l'utilisation du potentiel chimique [1, 6]. Ces approches dérivent l'énergie libre pour obtenir le potentiel chimique pouvant être relié au champ de phase et qui vient ensuite remplacer le pseudo-potential dans les termes associés au tenseur de pression.

Cette approche, bien qu'intéressante, car se présente comme un compris entre les précédentes approches, reste sujet à de nombreux développements. Cette thèse propose de s'intéresser aux écoulements multi-phasique en LBM par l'utilisation de potentiels chimiques lors de couplages thermiques. De plus, les Physically Informed Neural Networks (PINN) intègrent des connaissances physiques dans leur architecture et présentent un cadre puissant pour modéliser les phénomènes complexes des écoulements multi-phasiques. Ainsi, une fois entraîné avec un solveur LBM, un PINN pourra simuler, de manière précise et très efficace, les problèmes directs et inverses rencontrés dans les équipes de l'Inria et du CEA.

Objectifs et orientations de la thèse

- Une première partie, inhérente au travail de thèse, sera d'acquérir une compréhension fine des écoulements multi-phasiques par la méthode LBM et les approches par potentiel chimique issues de la littérature. Cette compréhension passera aussi par une prise en main du code de calcul `LBM_saclay` et des essais pratiques.
- Ensuite, l'étudiant pourra entendre les problèmes multi-phasiques (solide-liquide-gaz) par un couplage thermique (ou enthalpique) ainsi qu'une éventuelle adaptation de l'équation d'état.
- Cette extension s'accompagnera par une boucle d'interaction entre le modèle proposé et les implémentations dans les outils de `LBM_saclay`.
- Une attention particulière sera portée sur la consistance thermodynamique et la tension de surface du modèle proposé d'un point de vue théorique et numérique (avec ses termes d'erreur).
- Le parangonnage (batterie de tests, benchmarking) sera réalisé afin d'étudier les critères de stabilités, précisions, temps de calcul, scalabilité de la méthode proposé.
- Le modèle servira ensuite à la résolution de problèmes directs mais également de problème inverse grâce à son incorporation dans des PINNs.

En fonction des appétences du candidat, plusieurs extensions seront possibles telles que le raffinement du potentiel chimique en termes de fugacité ou l'intégration de réaction chimique simple ou équilibre liquide binaire (ou ternaire) ou bien encore l'intégration de méthodes d'accélération numérique en AI.



Proposition de sujet de thèse

Année 2024–2027



Contacts

Envoyer un CV détaillé, lettre de motivation et relevé de notes à :

Romain NOËL
Inria & Université Gustave Eiffel
Campus de Nantes
romain.noel@inria.fr
Allée des Ponts et Chaussées
Route de Bouaye – CS4
44344 Bouguenais Cedex

Alain CARTALADE
CEA Saclay
DES/ISAS/DM2S/STMF/LMSF
alain.cartalade@cea.fr
Bât 451, p. 22
Tél : 01 69 08 40 67

Laurent MEVEL
Inria & Université Gustave Eiffel
Campus de Rennes
laurent.Mevel@inria.fr
Inria Rennes – Bretagne Atlantique
Campus universitaire de Beaulieu
35042 Rennes

Mots clés

Lattice Boltzmann Method, thermodynamique, potentiel chimique, écoulements multi-phasiques, C++.



PhD Candidate Position Offer

Year 2024–2027



Numerical simulation of multi-phase flows coupled to temperature in LBM by a chemical potential

5 novembre 2023

Inria, équipe I4S & CEA, LMSF

Team Presentation

The project is jointly carried out by the I4S research team at Inria and the LMSF laboratory at CEA.

Inria: Inria is the French institute for research in digital science and technology. This public research center of scientific excellence is at the foreground of digital transformation in France. Research in computer science, mathematics, artificial intelligence (AI), software development, innovation in high-impact technological disciplines, and entrepreneurial risk (DeepTech) constitute the DNA of the institute. Inria is ranked 16th in the global AI Research ranking and is the first European institute for exploratory research in digital science.

I4S: The I4S team (Inferences for Structures) is a joint team between Inria and Gustave Eiffel University, specialized in Structural Health Monitoring (SHM), *i.e.* attempting to predict, categorize, locate, and quantify defects or damage that may appear in civil, electrical, (bio)-mechanical, energy, or aeronautical structures, *etc.*. To do this, it is necessary to combine multiple data and expertise, such as numerical physical simulation, data processing, sensor development, embedded electronics integration, statistical uncertainty propagation, *etc.*

CEA: The French Alternative Energies and Atomic Energy Commission (CEA) is a French research and development organization dedicated to energy, defense, and emerging technologies. Its research covers a wide range of fields, from nuclear and quantum physics to renewable energies, significantly contributing to technological advances and understanding contemporary issues.

LMSF: Within the Department of Modeling of Systems and Structures (DM2S), the Thermohydraulics and Fluid Mechanics Service (STMF) specializes in the design, development, and qualification of simulation software in thermohydraulics and fluid mechanics, adapted to reactors and nuclear installations, as well as processes related to the fuel cycle. It also conducts experimental programs to support the understanding of phenomena and validate the physical models of software, while performing studies and expertise for nuclear and energy applications. The Laboratory of Modeling and Simulation in Fluid mechanics (LMSF) develops numerical methods and calculation codes related to fluids, transfers, and thermodynamics.

General Context

Numerical simulation of multi-phase flows coupled to temperature in LBM by a chemical potential CEA and Inria study multiphase flows in porous media interacting with the porous matrix and temperature field. These flows are inherently more complex to solve due to the nature of the phenomena involved: thermo-mechanical coupling, interface mobility, high density ratio, and so on. However, such flows are of great interest as they are encountered in applications related to energy production, energy management in cities, and for the health diagnosis of porous structures.

On the other hand, the Lattice Boltzmann Method (LBM) [2] is a numerical method that allows the simulation of physical problems modeled by partial differential equations, such as those involved in crystal growth, fractional equations, and fluid flows. The basis of the method is to perform a collision step followed by a displacement step



PhD Candidate Position Offer

Year 2024–2027



of a distribution function on a regular Cartesian grid. This algorithmic simplicity gives the method good numerical properties, such as good scalability and ease of coupling.

The LBM method has been implemented in a C++ code at CEA: `LBM_saclay` [4]. It is dedicated to simulating multiphase flows with or without liquid-gas phase change and is executable on different hardware architectures (multi-CPU and multi-GPU) [5]. In parallel, Inria has implemented different calculation codes developed in Python and Fortran for liquid-solid or liquid-gas phase change coupled with temperature.

Among the techniques used by LBM to understand multiphase flows, two categories of approaches stand out: phase field approaches and pseudo-potential approaches. Phase field approaches have the advantage of being less sensitive to large density ratios and are theoretically justified from Landau's free energy, allowing easy integration with theoretical and numerical tools in the chemical industry. However, they are more numerically demanding, as they rely on an additional equation (such as the Allen-Cahn equation) and its coupling. This approach is currently used by CEA. Pseudo-potential approaches have the advantage of being less computationally demanding, as they do not require an additional equation, and offer natural coupling with temperature [3]. Nevertheless, these approaches are more sensitive to large density ratios and are more difficult to justify in terms of free energy (without the addition of an additional term), making them less easily integrated with chemical processes. This approach is used by the I4S team at Inria. At the interface between these two approaches, another category has emerged in recent years. In parallel, a new category of method for multiphase flows in LBM is beginning to emerge: the use of chemical potential [1, 6]. These approaches derive free energy to obtain the chemical potential that can be related to the phase field and then replaces the pseudo-potential in terms associated with the pressure tensor.

This approach, although interesting as it represents a compromise between the previous approaches, remains subject to many developments. This thesis proposes to focus on multiphase flows in LBM using chemical potentials during thermal couplings. Furthermore, Physically Informed Neural Networks (PINN) integrate physical knowledge into their architecture and provide a powerful framework for modeling complex phenomena in multiphase flows. Thus, once trained with an LBM solver, a PINN will be able to simulate, accurately and very efficiently, direct and inverse problems encountered in the teams of Inria and CEA.

Thesis Objectives and Directions

- A first part, inherent to the thesis work, will be to acquire a detailed understanding of multiphase flows using the LBM method and chemical potential approaches from the literature. This understanding will also involve getting familiar with the `LBM_saclay` calculation code and practical experimentation.
- Next, the student will address multiphase problems (solid-liquid-gas) through thermal (or enthalpic) coupling and a possible adaptation of the equation of state.
- This extension will be accompanied by an interaction loop between the proposed model and implementations in `LBM_saclay` tools.
- Special attention will be given to the thermodynamic consistency and surface tension of the proposed model from both theoretical and numerical perspectives (with error terms).
- Benchmarking will be conducted to study stability criteria, precision, computation time, and scalability of the proposed method.
- The model will then be used for solving direct problems as well as inverse problems through its incorporation into PINNs.

Depending on the candidate's interests, several extensions will be possible, such as refining the chemical potential in terms of fugacity, integrating simple chemical reactions, binary (or ternary) liquid equilibrium, or integrating numerical acceleration methods in AI.

Contacts

To candidate please send a detailed CV, letter of motivation, and transcript of grades to:



PhD Candidate Position Offer

Year 2024–2027



Romain NOËL
Inria & Université Gustave Eiffel
Campus de Nantes
romain.noel@inria.fr
Allée des Ponts et Chaussées
Route de Bouaye – CS4
44344 Bouguenais Cedex

Alain CARTALADE
CEA Saclay
DES/ISAS/DM2S/STMF/LMSF
alain.cartalade@cea.fr
Bât 451, p. 22
Tél : 01 69 08 40 67

Laurent MEVEL
Inria & Université Gustave Eiffel
Campus de Rennes
laurent.Mevel@inria.fr
Inria Rennes – Bretagne Atlantique
Campus universitaire de Beaulieu
35042 Rennes

Keywords

Lattice Boltzmann Method, thermodynamics, chemical potential, multi-phase flows, C++.

Références

- [1] Zhaoli Guo. Well-balanced lattice Boltzmann model for two-phase systems. *Physics of Fluids*, 33(3):031709, March 2021.
- [2] T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, and E.M. Viggen. *The Lattice Boltzmann Method. Principles and Practice*. Springer, 2017.
- [3] Feifei Qin, Ali Mazloomi Moqaddam, Luca Del Carro, Qinjun Kang, Thomas Brunswiler, Dominique Derome, and Jan Carmeliet. Tricoupled hybrid lattice boltzmann model for nonisothermal drying of colloidal suspensions in micropore structures. *Physical Review E*, 99(5):053306, 2019.
- [4] W. Verdier, T. Boutin, P. Kestener, and A. Cartalade. LBM_saclay : application HPC multi-architectures sur base LBM. Guide du développeur. Technical report, CEA-Saclay, 2022. DES/ISAS/DM2S/STMF/LMSF/NT/2022-70869/A.
- [5] W. Verdier, P. Kestener, and A. Cartalade. Performance portability of lattice Boltzmann methods for two-phase flows with phase change. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 370:113266, 2020.
- [6] Binghai Wen, Liang Zhao, Wen Qiu, Yong Ye, and Xiaowen Shan. Chemical-potential multiphase lattice Boltzmann method with superlarge density ratios. *Physical Review E*, 102(1):013303, July 2020.