

Une classe de modèles diphasiques compressibles

J.M. HÉRARD, O. HURISSE

EDF, R&D, Mécanique des Fluides, Energie et Environnement, 6 quai Watier 78400 CHATOU, FRANCE

Résumé :

Cet article est dédié à la modélisation des écoulements diphasiques en approche bifluide. Les principaux éléments sont rappelés, notamment les lois de fermeture pour les termes de transfert interfacial. Nous donnons ensuite l'algorithme d'ensemble, consistant avec l'inégalité d'entropie, et nous précisons les techniques numériques utilisées pour l'étape de relaxation en pression. Des résultats numériques complètent l'ensemble de la présentation.

Abstract :

We focus in this paper on the modelling of two-phase flows when using the two-fluid approach. The basic ingredients are first recalled, including the closure laws for the interfacial transfer terms. We then provide the whole algorithm that is consistent with the entropy inequality, and examine some ways to compute the pressure relaxation step. Numerical results complete the whole.

Mots clefs : Ecoulements diphasiques, inégalité d'entropie, modèle bifluide, relaxation en pression

1 Introduction

On examine dans cette note une classe de modèles bifluides dédiés à la simulation des écoulements diphasiques compressibles. Depuis quelques années, plusieurs auteurs s'intéressent à proposer un formalisme adéquat à cet effet. On pourra notamment, sans être exhaustif, citer les travaux de Ransom et al ([1]), Baer et Nunziatto ([2]), Kapila et al([3]), Glimm et al ([4]), mais aussi les travaux de modélisation de Gavriluk et Saurel ([5]), Papin et Abgrall ([6]), et Lhuillier ([7, 8]). Plus récemment, quelques travaux ayant pour objectif d'étendre le formalisme sous-jacent aux modèles d'écoulement eau-vapeur ont permis de revisiter cette approche, en considérant un ensemble de contraintes à satisfaire *a priori*. Les travaux [9, 10, 11, 12] s'inscrivent dans cette démarche. Cette dernière approche a également conduit à proposer des modèles de représentation des écoulements triphasiques ou multi-champs ([13, 14]), mais aussi pour la description des milieux poreux ([15, 16]), ou des milieux granulaires denses ([17]). Le principe d'ensemble est simple, et repose sur l'imposition d'un cahier des charges. Celui-ci nécessite que le système soit tel que :

- les effets de convection soient de nature hyperbolique,
- le système soit régi par une inégalité d'entropie physiquement admissible,
- les relations de saut dans la limite non visqueuse soient définies de manière unique,
- les conditions de positivité des taux de présence, densités et autres grandeurs thermodynamiques *ad hoc* soient satisfaites au niveau continu.

On présente tout d'abord le système d'équations ouvert, les relations de fermeture, ainsi que les principales propriétés du modèle. On présente ensuite les grandes lignes de la méthode numérique, et quelques résultats.

2 Equations d'évolution du modèle à deux fluides

Les variables sont les suivantes : $\alpha_k \in [0, 1]$ est la fraction volumique de phase k , sachant que : $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$, U_k , P_k , ρ_k , et $m_k = \alpha_k \rho_k$ désignent respectivement la vitesse, la pression, la densité et la masse partielle de phase k . Enfin, l'énergie totale de phase k est : $E_k = \rho_k U_k^2 / 2 + \rho_k e_k(P_k, \rho_k)$. Le système d'équations ouvert, portant sur les sept inconnues α_1 et (ρ_k, U_k, P_k) est alors le suivant, :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + V_I \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} = \phi_1(W) ; \\ \frac{\partial m_k}{\partial t} + \frac{\partial m_k U_k}{\partial x} = 0 ; \\ \frac{\partial m_k U_k}{\partial t} + \frac{\partial m_k U_k^2}{\partial x} + \alpha_k \frac{\partial P_k}{\partial x} + (P_k - P_I) \frac{\partial \alpha_k}{\partial x} = I_k(W) ; \\ \frac{\partial \alpha_k E_k}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_k U_k (E_k + P_k)}{\partial x} + P_I \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} = V_I I_k(W) . \end{array} \right. \quad (1)$$

Les termes de transfert interfacial $\phi_1(W)$ et $I_1(W)$ doivent faire l'objet de lois de fermeture, ainsi que la vitesse V_I et la pression P_I , sachant que $I_1(W) + I_2(W) = 0$.

2.1 Lois de fermeture

Afin d'obtenir une inégalité d'entropie physiquement admissible, il est nécessaire que les termes de transfert interfacial soient choisis judicieusement. La forme suivante "classique" pour le transfert de quantité de mouvement est en particulier admissible :

$$I_k = (-1)^k \frac{m_1 m_2}{\tau_U (m_1 + m_2)} (U_1 - U_2) \quad (2)$$

de même que le terme suivant afférent à l'équation gouvernant la fraction volumique :

$$\phi_1 = \alpha_1 \alpha_2 (P_1 - P_2) / (\tau_P \Pi_0) \quad (3)$$

Les échelles de temps τ_P, τ_U sont fournies par la littérature, le terme Π_0 désignant une constante ayant la dimension d'une pression.

L'inégalité d'entropie fournit également une information essentielle. En effet, si l'on postule la forme consistante :

$$V_I = \beta U_1 + (1 - \beta) U_2 \quad (4)$$

où la fonction scalaire β reste à déterminer, il s'ensuit que la contrainte suivante doit être vérifiée :

$$P_I = \mu P_1 + (1 - \mu) P_2 \quad (5)$$

où $\mu = \frac{a_1(1-\beta)}{a_1(1-\beta)+a_2\beta}$, avec $a_k = 1/T_k$, T_k désignant la température de phase k .

Le troisième point du cahier des charges se traduit par une contrainte sur la nature du champ associé à une des valeurs propres du système convectif associé à (1), qui est $\lambda = V_I$. Il importe effectivement que celui-ci soit linéairement dégénéré, afin de garantir que les relations de saut par champ isolé soient définies de manière unique. Les fermetures du type (4) satisfaisant ce critère, qui peuvent être exhibées ([9, 11]), correspondent de fait à : $\beta = 0$, $\beta = 1$, $\beta = m_1/(m_1 + m_2)$. Ces résultats sont intéressants à plusieurs titres. On remarque tout d'abord que le cas $\beta(1 - \beta) = 0$ correspond au modèle utilisé par Baer et Nunziatto ([2]), Kapila et al ([3]), Glimm et al ([5]) et d'autres auteurs, la forme étant un peu distincte dans [5]. La proposition hybride $\beta = m_1/(m_1 + m_2)$, examinée dans [11], a un comportement dynamique. Par contre, asymptotiquement, elle conduit à privilégier pour V_I la phase la plus présente, ce qui peut surprendre *a priori*. Nous présentons maintenant les principales propriétés du système fermé.

2.2 Principales propriétés

Propriété 1 :

Le modèle (1), muni des fermetures (V_I, P_I) précédentes, est hyperbolique sans condition sur l'espace des états physiques, dès lors que les vitesses relatives ne sont pas soniques, i.e. $|U_1 - U_2| \neq c_k$. Les valeurs propres sont : $\lambda_1 = V_I$, $\lambda_2 = U_1$, $\lambda_3 = U_2$, $\lambda_{4,5} = U_1 \pm c_1$, $\lambda_{6,7} = U_2 \pm c_2$.

Propriété 2 :

Les solutions régulières du modèle (1) muni des fermetures (2), (3), (4), (5), satisfont l'inégalité d'entropie suivante :

$$\frac{\partial \sum m_k s_k}{\partial t} + \frac{\partial \sum m_k u_k s_k}{\partial x} \geq 0. \quad (6)$$

où s_k désigne l'entropie phasique.

Propriété 3 :

Les ondes associées aux valeurs propres $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ sont linéairement dégénérées. Dans chaque onde simple, les relations de saut sont uniques.

Remarque 1 : L'ensemble de ces remarques sera utilisé pour la recherche d'approximations numériques convergentes. Il faut noter que la dernière propriété est essentielle, et n'a pas d'équivalent dans le cadre des modèles bifluïdes classiques à relaxation de pression locale instantanée. Sans cette dernière propriété, des schémas d'approximation distincts vont converger vers des solutions distinctes.

3 Algorithme global

3.1 Le schéma temporel

Nous ne détaillons pas ici l'ensemble de l'algorithme, et renvoyons en partie à la littérature afférente en ce domaine. Une technique à pas fractionnaires est utilisée, qui consiste à traiter successivement :

- une étape d'évolution du système convectif hyperbolique associé à (1)
- l'ensemble des termes sources de relaxation en pression et en vitesse associés à ϕ_1 et I_k .

Le schéma de Rusanov et le schéma de Godunov approché ([18, 11]), mis en oeuvre pour obtenir des approximations stables et consistantes des solutions du système convectif (étape d'évolution), sont décrits dans [11]. D'autres schémas peuvent être considérés à ce stade, en particulier des schémas de relaxation tels que celui proposé dans [19], ou d'autres solveurs de Riemann ([20]).

Au sein de la seconde étape, la prise en compte des effets de trainée statique ne pose pas de difficulté particulière. Par contre, l'étape de relaxation en pression n'est pas triviale, celle-ci couplant de manière non linéaire trois EDO distinctes.

3.2 Deux schémas de simulation de l'étape de relaxation en pression

L'étape isolée de relaxation en pression contribue à augmenter le bilan entropique global. Elle s'écrit :

$$\begin{aligned} \tau_P \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \alpha_1 \alpha_2 (P_1 - P_2) / \Pi_0 \\ \frac{\partial m_k e_k}{\partial t} + P_I \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial m_k}{\partial t} &= \frac{\partial m_k U_k}{\partial t} = 0 \end{aligned} \quad (7)$$

Sachant que $P_I = P_1$, il est clair que l'écart de pression $(P_1 - P_2)$ suit au sein de l'étape (7) l'évolution :

$$\frac{1}{2} \frac{\partial (P_1 - P_2)^2}{\partial t} = -(\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 (\gamma_2 - 1)) P_1 + \alpha_1 P_2 (P_1 - P_2)^2 / \tau_P / \Pi_0 \leq 0 \quad (8)$$

dès lors que la phase vapeur 2 suit une loi de gaz parfait : $\rho_2 e_2 = (\gamma_2 - 1) P_2$. Ce résultat est totalement conforme à celui de [11]. Nous décrivons ci-dessous deux algorithmes distincts d'intégration du système (7).

Ces deux algorithmes sont tels que :

- Le principe du maximum pour le taux de présence α_1 est assuré,
- On respecte le principe de conservation local de l'énergie totale.

3.2.1 Algorithme semi-discret

L'algorithme semi-discret évalue, pour une donnée \tilde{W} , l'état implicite W suivant :

$$\begin{aligned} \Delta P = P_1 - P_2 &= (\tilde{P}_1 - \tilde{P}_2) e^{-\tilde{C} \Delta t} \\ \alpha_1 / (1 - \alpha_1) &= \tilde{\alpha}_1 / (1 - \tilde{\alpha}_1) e^{\frac{(P_1 - P_2) \Delta t}{\Pi_0 \tau_P}} \end{aligned} \quad (9)$$

sachant que : $C = (\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2 + \alpha_1 (P_1 - P_2) (\rho_2 \frac{\partial e_2}{\partial P_2})^{-1}) / (\tau_P \Pi_0)$. La pression P_1 est ensuite calculée en résolvant l'équation scalaire implicite non linéaire suivante :

$$H(P_1) = \tilde{m}_1 e_1(P_1, \frac{\tilde{m}_1}{\alpha_1}) + \tilde{m}_2 e_2(P_1 - \Delta P, \frac{\tilde{m}_2}{1 - \alpha_1}) = \tilde{m}_1 \tilde{e}_1 + \tilde{m}_2 \tilde{e}_2 \quad (10)$$

Pour des thermodynamiques classiques, la fonction $H(P)$ est croissante, garantissant l'unicité de la solution ; l'existence étant assurée pour des pas de temps Δt suffisamment grands. Le principe du maximum discret est clairement assuré pour α_1 (voir (9)), et l'algorithme est encore globalement conservatif en énergie totale, par construction.

3.2.2 Algorithme discret

L'algorithme discret calcule, pour une donnée \tilde{W} , l'état implicite W satisfaisant :

$$\begin{aligned} \tau_P(\alpha_2 - \tilde{\alpha}_2) + \Delta t \alpha_1 \alpha_2 (P_1 - P_2) / \Pi_0 &= 0 \\ m_1 e_1(P_1, \frac{m_1}{1-\alpha_2}) + P_1(\tilde{\alpha}_2 - \alpha_2) &= \tilde{m}_1 \tilde{e}_1 \\ m_2 e_2(P_2, \frac{m_2}{\alpha_2}) - P_1(\tilde{\alpha}_2 - \alpha_2) &= \tilde{m}_2 \tilde{e}_2 \end{aligned} \quad (11)$$

sachant que : $m_k = \tilde{m}_k$, et : $U_k = \tilde{U}_k$. Considérant pour simplifier la présentation deux lois phasiques du type suivant : $\rho_k e_k = (\gamma_k - 1)P_k$, on peut alors montrer que le système discret (11) admet une unique solution α_2 dans l'intervalle $[0, \alpha_{max}]$, sachant que $\alpha_{max} = \frac{1+(\gamma_1-1)\tilde{\alpha}_2}{\gamma_1}$, quelque soit la valeur de Δt . Les pressions P_1, P_2 sont alors positives. L'algorithme est ici encore globalement conservatif en énergie totale. Ce résultat est en parfait accord avec celui énoncé dans [17].

Remarque 2 : On notera également que lorsque $\tau_P = 0$, l'algorithme discret s'identifie avec l'algorithme de relaxation instantanée décrit dans [21]. On rappelle cependant que l'utilisation d'une telle valeur conduira à une divergence du calcul, lorsque le maillage est raffiné, indépendamment du cas test considéré.

4 Résultats numériques

On présente ci-dessous deux résultats simples. Le premier correspond à l'évaluation de la précision obtenue lors de l'approximation des solutions de l'étape de relaxation en pression, le second à la simulation d'un problème de Riemann diphasique.

4.1 Un cas test analytique

Ce cas test analytique est extrait de [22]. L'échelle de temps considérée pour ce test est : $\tau_P = 10^{-6}$. Le temps d'intégration est $T = 10^{-5}$, et $\Pi_0 = 21 \times 10^5$. On montre l'erreur de convergence en norme L^1 obtenue sur un cas analytique avec les deux algorithmes décrits ci-dessus (voir les figures (1,2)).

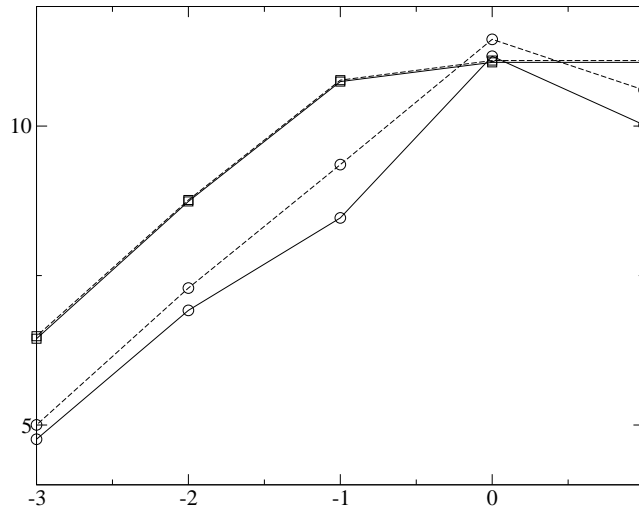


FIG. 1 – Convergence des deux schémas de relaxation en pression : algorithme discret (cercles) et semi-discret (carrés), pour P_l et P_v (pointillés), avec $\tau_P = 10^{-6}$. On trace ici $\text{Log}(\|erreur\|_1)$ en fonction de $\text{Log}(\frac{\delta t}{T})$.

4.2 Un problème de Riemann

On considère maintenant un problème de Riemann, pour lequel les conditions initiales sont les suivantes : $W(x < 500, t = 0) = W_L$ et $W(x > 500, t = 0) = W_R$, avec :

	α_l	ρ_l	U_l	P_l	ρ_v	U_v	P_v
Etat L	0.95	800	10	$150 \cdot 10^5$	80	15	$145 \cdot 10^5$
Etat R	0.90	700	10	$145 \cdot 10^5$	70	15	$140 \cdot 10^5$

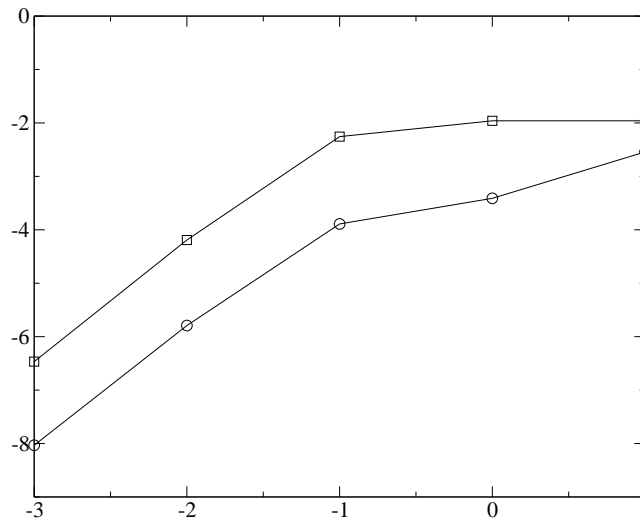


FIG. 2 – Convergence des deux schémas de relaxation en pression : algorithme discret (cercles) et semi-discret (carrés), pour la fraction volumique α_l , avec $\tau_P = 10^{-6}$.

La figure 3 illustre à l'instant $T = 0.012$ le comportement des vitesses et pressions de phase, sachant que $\tau_U = \tau_P = 10^{-3}$, la simulation ayant été réalisée sur un maillage comportant 1000 mailles.

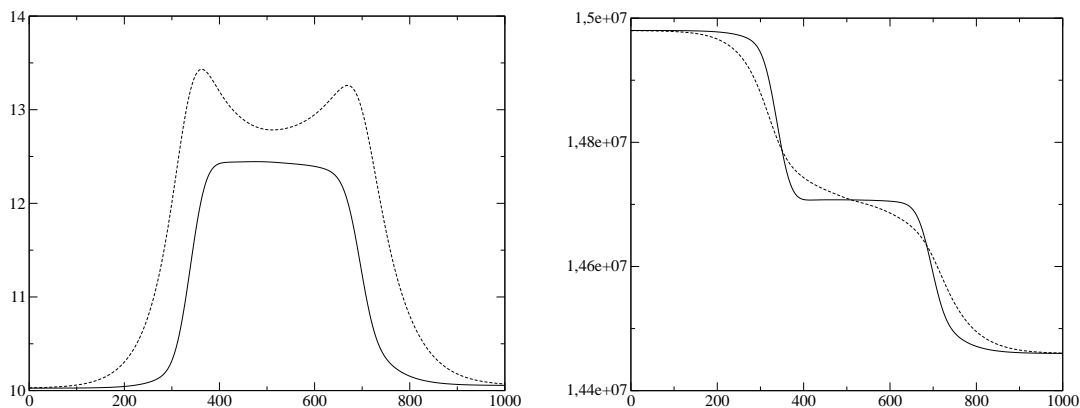


FIG. 3 – Profils de vitesse (à gauche) et de pression (à droite) pour la simulation du cas 2, pour un maillage comportant 1000 cellules, avec : $CFL = 0.5$, sachant que $\tau_U = \tau_P = 10^{-3}$.

5 Conclusion

La prise en compte des termes de transfert de masse et de chaleur interfaciaux rentre parfaitement dans le cadre du présent formalisme ([13]). La classe de modèles considérés permet en outre d'envisager le couplage interfacial instationnaire avec d'autres modèles diphasiques, notamment avec les modèles homogènes. Les potentialités d'utilisation sont assez vastes, et le contrôle entropique est un outil puissant pour la modélisation, mais aussi pour la recherche d'approximations stables et consistantes. Signalons enfin qu'une possibilité d'extension dynamique de l'approche décrite dans cette note est faite dans [23], l'objectif étant cette fois de pouvoir gérer la transition d'écoulement. La formulation pourrait alors devenir une alternative à la formulation multi-champs utilisée dans le contexte nucléaire civil.

Remerciements

Ce travail a été réalisé dans le cadre du projet NEPTUNE, qui est financé par le CEA (Commissariat à l'Énergie Atomique), EDF, l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire) et AREVA-NP.

Références

- [1] Ransom V. and Hicks D. Hyperbolic two-pressure model for two-phase flow. *J. Comp. Phys.*, 53, 124–151, 1984.
- [2] Baer M. and Nunziato J. A two-phase mixture theory for the deflagration to detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *Int. J. Multiphase Flow*, 12(6), 861–889, 1986.
- [3] Kapila A., Son S., Bdzil J., Menikoff R., and Stewart D. Two-phase modeling of a DDT : structure of the velocity relaxation zone. *Phys. of Fluids*, 9(12), 3885–3897, 1997.
- [4] Glimm J., Saltz D., and Sharp D. Two-phase flow modelling of a fluid mixing layer. *J. Fluid Mech.*, 378, 119–143, 1999.
- [5] Gavriluk S. and Saurel R. Mathematical and numerical modelling of two-phase compressible flows with micro-inertia. *J. Comp. Phys.*, 175, 326–360, 2002.
- [6] Papin M. and Abgrall R. Fermetures entropiques pour les systèmes bifluïdes à sept équations. *C. R. Mécanique*, 333, 838–842, 2005.
- [7] Lhuillier D. A mean field description of two-phase flows with phase changes. *Int. J. of Multiphase Flow*, 29, 511–525, 2003.
- [8] Lhuillier D. Evolution of the volumetric interfacial area in two-phase mixtures. *C. R. Mécanique*, 332, 103–108, 2004.
- [9] Coquel F., Gallouët T., Hérard J., and Seguin N. Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *C. R. Acad. Sci. Paris*, I-332, 927–932, 2002.
- [10] Hérard J. Numerical modelling of turbulent two phase flows using the two-fluid approach. AIAA paper 2003-4113, [http ://www.aiaa.org/](http://www.aiaa.org/), 2003.
- [11] Gallouët T., Hérard J., and Seguin N. Numerical modelling of two phase flows using the two-fluid two-pressure approach. *Math. Mod. Meth. in Appl. Sci.*, 14(5), 663–700, 2004.
- [12] Hérard J. and Hurisse O. Some recent numerical advances for two-phase flow modelling in NEPTUNE project. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 59, 285–307, 2009.
- [13] Hérard J. A three-phase flow model. *Mathematical and Computer Modelling*, 45, 732–755, 2007.
- [14] Hérard J. A relaxation scheme to compute three-phase flow models. AIAA paper 2007-4455, [http ://www.aiaa.org/](http://www.aiaa.org/), 2007.
- [15] Hérard J. Un modèle hyperbolique diphasique bifluïde en milieu poreux. *C. R. Mécanique*, 336, 650–655, 2008.
- [16] Girault L. and Hérard J. A two-fluid hyperbolic model in a porous medium. soumis, 2008.
- [17] Gallouët T., Helluy P., Hérard J., and Nussbaum J. Hyperbolic relaxation model for granular flows. soumis, 2008.
- [18] Buffard T., Gallouët T., and Hérard J. A sequel to a rough Godunov scheme. Application to real gases. *Computers and Fluids*, 29(7), 813–847, 2000.
- [19] Ambroso A., Chalons C., Coquel F., and Galié T. Relaxation and numerical approximation of a two-fluid two-pressure diphasic model. *Math. Mod. Numer. Anal.*, 2008.
- [20] Schwendeman D., Wahle C., and Kapila A. The Riemann problem and high resolution Godunov method for a model of compressible two-phase flow. *J. Comp. Phys.*, 212, 490–526, 2006.
- [21] Hérard J. and Hurisse O. A simple method to compute two-fluid models. *Int. J. of Comp. Fluid Dyn.*, 19(7), 475–482, 2005.
- [22] Hérard J. and Hurisse O. Schémas d’approximation pour une classe de modèles bifluïdes. Rapport interne EDF, à paraître.
- [23] Hérard J. Une classe dynamique de modèles diphasiques bifluïdes. Rapport interne EDF, à paraître.