



HAL
open science

Simulation des écoulements industriels diphasiques compressibles.

Olivier Hurisse

► **To cite this version:**

Olivier Hurisse. Simulation des écoulements industriels diphasiques compressibles.. Equations aux dérivées partielles [math.AP]. Université de Strasbourg, 2017. tel-01570985

HAL Id: tel-01570985

<https://hal.science/tel-01570985>

Submitted on 4 Aug 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Simulation des écoulements industriels diphasiques compressibles.

Habilitation à Diriger des Recherches,
soutenue publiquement le 6 juillet 2017.

Olivier Hurisse

Université de Strasbourg

Jury :

Christophe Chalons (Univ. Versailles-St Quentin en Yvelines, rapporteur)

Thierry Gallouet (Univ. Aix-Marseille, examinateur)

Sergey Gavriluk (Univ Aix-Marseille, rapporteur)

Philippe Helluy (Univ. Strasbourg, examinateur)

Christophe Prudhomme (Univ. Strasbourg, examinateur)

Nicolas Seguin (Univ. Rennes 1, rapporteur)



Contents

1	Introduction	2
1.1	Principe de fonctionnement d'une centrale REP	2
1.2	Les échelles industrielles de simulation en thermohydraulique diphasique	3
1.2.1	L'échelle dite "système".	3
1.2.2	L'échelle dite "composant".	4
1.2.3	La simulation dite "locale".	5
1.2.4	Quelques remarques	5
1.3	Le couplage interfacial industriel des échelles de simulation	6
1.4	Activités annexes	7
1.5	Contenu du document	8
2	Simulation à l'échelle locale à l'aide d'un modèle bifluide à relaxation en pression	10
2.1	Références	10
2.2	Le modèle bifluide à relaxation en pression	10
2.3	Les schémas numériques de discrétisation	13
2.3.1	Retour à l'équilibre des températures $\psi_l(W)$	14
2.3.2	Retour à l'équilibre des pressions $\phi_l(W)$	17
2.3.3	Prise en compte de la traînée $D_l(W)$	19
2.3.4	Discrétisation du système d'équations associé au transfert de masse $\Gamma_v(W)$	21
2.4	Éléments de vérification et de validation	24
3	Les modèles diphasiques homogènes pour la simulation à l'échelle composant	25
3.1	Références	25
3.2	Introduction	25
3.3	Le modèle Barberon-Helluy	26
3.4	Vérification d'un code pour les écoulements diphasiques basé sur un modèle homogène.	65
4	Modélisation stochastique en thermohydraulique diphasique	90
4.1	Références	90
4.2	Quelques notions de modélisation lagrangienne stochastique	90
4.3	Un modèle diphasique compressible à relaxation en pression avec changement de phase	91
4.4	Modélisation du comportement thermodynamique d'un fluide compressible	92
5	Annexes	93
5.1	Annexe de la section 4.2	93
5.2	Annexe de la section 4.3	113
5.3	Curriculum Vitae	131

1 Introduction

L'ensemble des travaux présentés ci-après a été mené dans un cadre de recherche industrielle à EDF R&D, au sein du département Mécanique des Fluides, Environnement, et Energie (MFEE). Une des activités du département est de fournir au groupe EDF des outils de simulation industriels avancés en mécanique des fluides diphasiques. L'objectif de ces outils est de permettre de comprendre, contrôler et prédire les écoulements eau-vapeur dans les divers organes des centrales nucléaires afin d'augmenter la sûreté et l'efficacité des centrales.

1.1 Principe de fonctionnement d'une centrale REP

Cette section présente de manière très succincte le fonctionnement d'une centrale nucléaire à réacteur à eau pressurisée (REP). Ces unités de production d'électricité sont d'une très grande complexité, avec de très nombreux circuits et des kilomètres de tuyauterie. Nous nous contentons ici de décrire (voir figure (1)) les 3 circuits principaux (primaire, secondaire et tertiaire) ainsi que les échanges thermiques entre eux.

Le circuit primaire est un circuit en eau à haute pression, autour de 155 bars, et à haute température, autour de 300°C, soit une température inférieure à la température de saturation. La cuve contient les barres de combustible nucléaire chauffées par les réactions neutroniques. En passant entre les assemblages de combustible la température de l'eau du circuit primaire augmente. Elle est ensuite acheminée vers le générateur de vapeur où elle circule dans des tuyaux. Le générateur de vapeur sert d'interface entre les circuits primaire et secondaire. L'eau du primaire y cède une partie de son énergie thermique au profit de l'eau du circuit secondaire qui circule lui autour des tuyaux. Celle-ci est ensuite renvoyée vers la cuve pour y être réchauffée et ainsi recommencer le cycle. Les conditions de fonctionnement dans le circuit primaire sont telles que l'on s'assure que l'eau reste sous forme liquide. Il n'est pas souhaitable d'y générer de la vapeur car elle viendrait diminuer les échanges thermiques entre le cœur de combustible et l'eau du primaire. Toutefois, des scénarios accidentels étudiés attentivement à la R&D peuvent entraîner la vaporisation du liquide primaire, en particulier les brèches dans les tuyauteries qui provoquent une forte dépressurisation (passage de 155 bars à la pression atmosphérique).

A l'inverse, dans le circuit secondaire, on souhaite générer le maximum de vapeur. En effet le circuit secondaire transforme l'énergie thermique fournie par le primaire en énergie mécanique permettant d'actionner les turbines. L'eau de ce circuit n'a donc plus le rôle d'un simple fluide caloporteur comme c'est le cas de l'eau du circuit primaire. La vapeur est produite dans le générateur de vapeur (GV). L'eau "froide" du secondaire y entre en contact avec les tuyaux dans lesquels circule l'eau chaude du primaire. La pression au sein du GV étant "basse", autour de 60-70 bars, l'eau du secondaire se vaporise. Cette vapeur est ensuite conduite vers les turbines qui génèrent l'électricité, puis elle est condensée dans le condenseur afin d'être à nouveau injectée dans le GV. Les écoulements au sein du circuit secondaire sont extrêmement complexes de part leur nature diphasique et de part les échanges qui interviennent. En particulier dans le GV, l'eau entre sous forme liquide et ressort sous forme de vapeur après avoir parcouru des milieux de géométrie complexe. On y rencontre une très large gamme de régimes d'écoulements diphasiques, dont la simulation est très complexe.

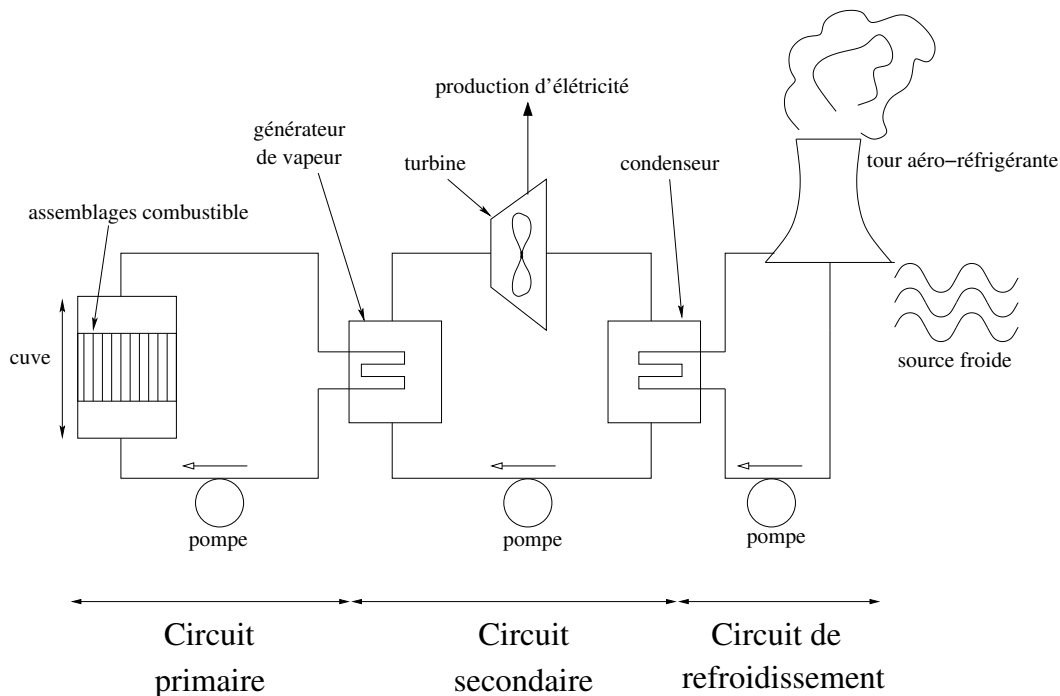


Figure 1: Schéma des trois circuits principaux d'une centrale nucléaire REP.

Le rôle du circuit tertiaire est de refroidir la vapeur du circuit secondaire au niveau du condenseur pour la liquéfier. L'eau du circuit tertiaire y circule dans des tuyaux sous forme liquide autour desquels se trouve la vapeur du secondaire. Cette eau a donc un rôle de caloporteur, comme l'eau du primaire. Elle est elle-même refroidie à l'aide des tours aéro-réfrigérantes et le plus souvent de sources froides externes comme une rivière, un fleuve ou l'océan. Ce circuit sert donc à dissiper dans l'environnement la puissance thermique produite par le primaire et qui n'a pu être récupérée sous forme mécanique dans le circuit secondaire. On trouve des écoulements diphasiques au niveau des tours aéro-réfrigérantes qui génèrent des panaches de vapeur d'eau (écoulements vapeur d'eau-air).

1.2 Les échelles industrielles de simulation en thermohydraulique diphasique

Pour la simulation des écoulements dans les circuits des centrales nucléaires, trois stratégies de simulation différentes ont été développées au cours des 40 dernières années. Elles correspondent aux trois échelles de simulation dénommées : système, composant et locale, décrites ci-dessous et résumées par le schéma de la figure (2).

1.2.1 L'échelle dite "système".

Dans ce domaine, EDF est utilisateur du code CATHARE développé depuis les années 80 par le CEA (et historiquement issu du code RELAP développé aux Etats-Unis), principalement pour ses partenaires français du nucléaire : AREVA, EDF et IRSN (Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire). Le code CATHARE permet de simuler des régimes de fonctionnement nominaux ou accidentels sur l'ensemble des circuits d'une centrale REP (Réacteur à Eau Pressurisée). Les temps

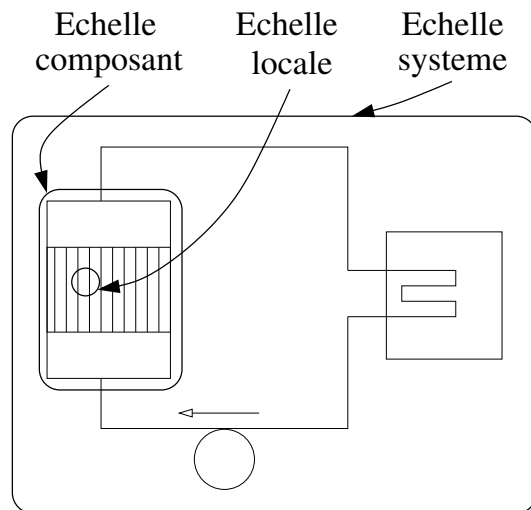


Figure 2: Circuit primaire d'une centrale REP et exemple d'échelles système, composant et locale.

physiques simulés sont donc parfois longs et portent sur des domaines assez grands. Le code est construit autour d'un modèle multichamps et de lois de corrélation, validées sur des installations expérimentales représentatives. Le but est donc d'obtenir un outil permettant d'avoir une vision d'ensemble des principaux circuits d'une centrale, vus séparément ou de manière couplée, et de "jouer" une grande variété de scénarios de fonctionnement accidentel ou nominal. On notera qu'en pratique, les schémas de discrétisation en espace font appel à des techniques mixtes volumes finis et différences finies appliquées à des maillages décalés ; les schémas d'intégration en temps sont implicites et basés sur des algorithmes de résolution de type Newton-Raphston.

1.2.2 L'échelle dite "composant".

Concernant certains composants d'une centrale REP, en particulier pour les générateurs de vapeur et le coeur, l'ingénierie d'EDF a besoin d'informations sur la thermohydraulique plus précises que celles fournies par le code système CATHARE. Dans ce but, le code spécifique THYC a été développé par EDF R&D dans les années 80 pour permettre la simulation des phénomènes physiques au sein de ces organes. Les contraintes auxquelles sont soumises ce code sont les suivantes.

- (i) Les organes ciblés ont des dimensions importantes, de l'ordre de plusieurs mètres, et mettent en jeu des temps caractéristiques longs : soit liés aux transitoires intervenant dans la conduite d'une centrale ; soit liés à la durée de vie de ces organes qui peut dépasser plusieurs dizaines d'années.
- (ii) Les études d'ingénierie menées avec ces codes doivent avoir des temps de retour courts, de l'ordre de la journée, afin de permettre : soit de répondre au plus vite à une sollicitation émise par les équipes opérationnelles ; soit de permettre de jouer plusieurs scénarios. Ces codes composants de thermohydraulique sont par ailleurs couplés à des codes de thermique du solide, de neutronique ou des codes de calcul des instabilités vibratoires et ne doivent donc pas pénaliser l'ensemble de la chaîne de calcul.

Dans les années 80, la solution la plus adaptée pour répondre à ce cahier des charges était de combiner un modèle homogène¹ à des lois de fermetures sous forme de corrélations et d'utiliser une méthode numérique de type correction de pression pour discrétiser le système obtenu. Les complexités géométriques des domaines de calcul sont prises en compte grâce à une porosité fixe en temps, ce qui permet d'utiliser des maillages cartésiens.

1.2.3 La simulation dite “locale”.

L'approche locale est destinée à pousser la description des écoulements fluides diphasiques au-delà des limites intrinsèques des codes composant. Ces derniers font une grande utilisation de corrélations construites pour des gammes de fonctionnement thermodynamique bien spécifiques et liées aux applications des codes (on notera, par exemple, que les corrélations utilisées dans le code THYC diffèrent dans le cas des simulations de cœurs et de générateurs de vapeur). De plus, l'approche poreuse associée à des maillages cartésiens retenue pour la conception des codes composant limite leur utilisation à des géométries simples avec un faible niveau de raffinement en maillage. L'idée de base de la simulation “locale” est de pouvoir mailler finement la géométrie réelle des domaines (sans faire appel à une approche par porosité équivalente) et de se passer au maximum des fermetures de type corrélation qui contraignent le domaine d'utilisation des codes composant et système. On insiste sur le fait que le recours aux corrélations donne des résultats satisfaisants dans le cadre de ces échelles. Mais dans le cas de la thermohydraulique diphasique locale leur utilisation est limitée par la difficulté à construire des lois valables sur une plage de conditions thermohydrauliques suffisamment vaste. Le principe de la simulation à l'échelle locale est donc d'utiliser des modèles “plus complets” permettant de “simuler” plus de phénomènes physiques.

1.2.4 Quelques remarques

Dans le cadre de la thermohydraulique diphasique locale, deux types de modèles sont souvent opposés : les modèles bifluïdes et les modèles homogènes. Les premiers sont souvent supposés représenter une physique plus fine que les seconds car faisant intervenir un plus grand nombre de variables simulées. Ceci n'est pas toujours vrai. En effet, le modèle proposé dans [6] est un modèle de type homogène. Il possède 6 variables et 6 EDP associées, et il permet de prendre en compte les 3 déséquilibres phasiques en : pression, température et potentiel chimique (voir aussi la section 3.2). D'un autre côté, le modèle bifluïde standard [40], qui est largement utilisé dans l'industrie, possède quant à lui également 6 variables et 6 EDP, et il permet de simuler les 3 déséquilibres phasiques en : vitesse, température et “potentiel chimique”². La distinction entre modèle homogène et modèle bifluïde porte donc plus sur la gestion du déséquilibre cinématique et sur la formulation de bilans phasiques ou de bilans sur le mélange, que sur le nombre de variables ou de déséquilibres pris en compte.

¹On appelle modèle homogène tout modèle diphasique ne possédant qu'une équation aux dérivées partielles (EDP) sur le moment du mélange des deux phases. Le déséquilibre cinématique entre les phases pouvant néanmoins être pris en compte grâce à une fermeture algébrique, faisant éventuellement intervenir des dérivées en espace des variables.

²On notera qu'en pratique le déséquilibre en potentiel chimique, associé au transfert de masse entre les phases, est souvent remplacé par un écart à la saturation.

Les simulations faites à l'échelle locale sont souvent coûteuses en terme de temps CPU. Elles sont jusqu'à aujourd'hui réservées à des études avancées de R&D ou en appui à des études d'ingénierie. Les études d'ingénierie sont encore majoritairement réalisées sur la base de simulations à l'échelle système et à l'échelle composant, mais l'augmentation constante des capacités de calcul des ordinateurs commence à rendre possible l'utilisation de l'échelle locale.

Afin de réaliser un code de calcul robuste, et ce quelle que soit l'échelle de simulation, un modèle devrait respecter certaines propriétés comme :

- le respect de la positivité des variables *ad'hoc* (masses volumiques, fractions de mélange, énergies internes, etc ...) ;
- le respect du premier principe et du second principe de la thermodynamique ;
- l'hyperbolicité du système d'EDP qui est une condition nécessaire mais non suffisante permettant d'avoir à résoudre des problèmes à condition initiale bien posés [22].

1.3 Le couplage interfacial industriel des échelles de simulation

Cette problématique a été développée à EDF R&D et au CEA entre 2002 et 2009 [28] avec pour objectif de réaliser une plateforme de simulation multi-échelle. Le développement des échelles système, composant et locale ayant suivi des voies différentes, la mise en œuvre de simulations couplées requiert donc des méthodes instationnaires de transfert de l'information respectant au mieux la physique de chacune des échelles. Plusieurs configurations simples de couplage instationnaire ont ainsi été étudiées au cours de ma thèse [34] ou par la suite, comme :

- le couplage entre un modèle écrit en une dimension d'espace et le "même modèle" écrit en trois dimensions [27, 34];
- le couplage d'un modèle diphasique homogène relaxé (transfert de masse en temps fini) et du même modèle avec un transfert de masse instantané [2, 34];
- le couplage d'un modèle diphasique homogène relaxé et d'un modèle bifluide à équilibre en pression [34] ;
- le couplage d'un modèle diphasique homogène relaxé et d'un modèle bifluide à relaxation en pression [31].

Dans toutes les configurations testées, une même méthode a été retenue. Le transfert interfacial d'information entre les deux domaines de simulation est réalisé à l'aide d'un "sur-modèle". Ce dernier englobe les deux modèles de part et d'autre de l'interface de couplage, au sens où il peut se ramener de manière formelle aux modèles à coupler en imposant certains équilibres. A chaque instant, les données calculées au niveau de l'interface de couplage par les deux codes de calcul à coupler sont transférées au "sur-modèle". Celui-ci calcule alors un flux numérique en résolvant un problème de Riemann qui, à l'interface de couplage, sert de condition aux limites aux deux codes. On assure ainsi un transfert d'information instationnaire entre les codes.

Les différents résultats obtenus montrent l'importance d'assurer une compatibilité physique entre les deux modèles. En effet, plus les modèles sont basés sur des hypothèses de modélisation différentes, et *a fortiori* si elles sont de plus incompatibles, plus les résultats couplés sont perturbés. En particulier, on observe un comportement dissymétrique dans le transfert de l'information. Les pollutions engendrées par l'interface de couplage sont d'autant plus importantes que le transfert d'information s'effectue d'un code "riche" (plus d'EDP) en information vers un code "pauvre" (moins d'EDP) en information.

Afin de construire un outil de simulation générique en terme d'échelles, une solution idéale pourrait donc être d'utiliser directement un "sur-modèle", quitte à le simplifier si besoin à l'aide de processus de relaxation. En pratique, cette solution n'est pas forcément souhaitable dans le cadre de la simulation diphasique industrielle. En particulier un sur-modèle est plus gourmand en coût CPU et certains phénomènes sont potentiellement plus difficiles à gérer (les phases évanescences par exemple). Toutefois, on peut conserver l'idée de choisir des modèles ayant un grand nombre de degrés de liberté, ce qui en thermohydraulique diphasique peut se traduire par un grand nombre de déséquilibres entre les phases. C'est notamment le cas des modèles présentés dans les sections 2 et 3.2.

On termine cette section par un exemple de situation industrielle où le couplage de modèles pourrait améliorer la qualité des simulations. Le Générateur de Vapeur (GV) (voir figure (3)) est alimenté par le bas en eau liquide. Cette eau "froide" remonte dans le GV et se vaporise progressivement au contact des tubes contenant l'eau chaude du primaire. La vapeur quasiment sèche ressort en haut du GV. On peut donc distinguer deux zones dans le GV : la zone basse où l'écoulement est principalement parallèle aux tubes ; et la partie haute appelée chignon où les tubes sont incurvés et où les écoulements sont donc transverses aux tubes. Dans le chignon, la phase vapeur monte et est extraite par le haut du GV, tandis que l'eau liquide redescend, ce qui implique un fort glissement mécanique entre les deux phases. Or on sait qu'à l'heure actuelle les corrélations des codes homogènes pour la vitesse relative ne sont pas entièrement satisfaisantes dans cette zone du GV. Il serait alors intéressant d'y simuler les écoulements grâce à un modèle bifluide. Ceux-ci sont *a priori* plus aptes à traiter ces forts glissements, d'autant que le régime d'écoulement dans le chignon est de type phase dispersée vapeur-gouttes pour lequel des lois de traînée satisfaisantes existent. On conserverait ainsi une approche homogène dans la partie basse du GV, couplée à une approche locale bifluide dans le haut du GV.

1.4 Activités annexes

Dans le cadre de mes activités de R&D à EDF, je suis amené à suivre des travaux de recherche portant sur des aspects en marge du domaine du diphasique. Ces travaux sont principalement réalisés par des équipes universitaires ou par des doctorants en contrat CIFRE avec EDF. J'ai ainsi participé à l'encadrement de Christophe Henry qui a soutenu sa thèse publiquement le 6/09/2012 [25]. Ses travaux portaient sur la prise en compte de la rugosité pour le dépôt pariétal de particules dans des écoulements turbulents et ils ont donné lieu à une publication commune [24]. J'ai également suivi pour le compte d'EDF R&D une collaboration avec le LECIME (Laboratoire d'Electrochimie, Chimie des Interfaces et Modélisation pour l'Energie, Chimie ParisTech et CNRS UMR 7575) sur l'interaction entre l'ébullition et un dépôt pariétal. Ces études expérimentales et numériques ont fait l'objet des publications suivantes [12, 48].

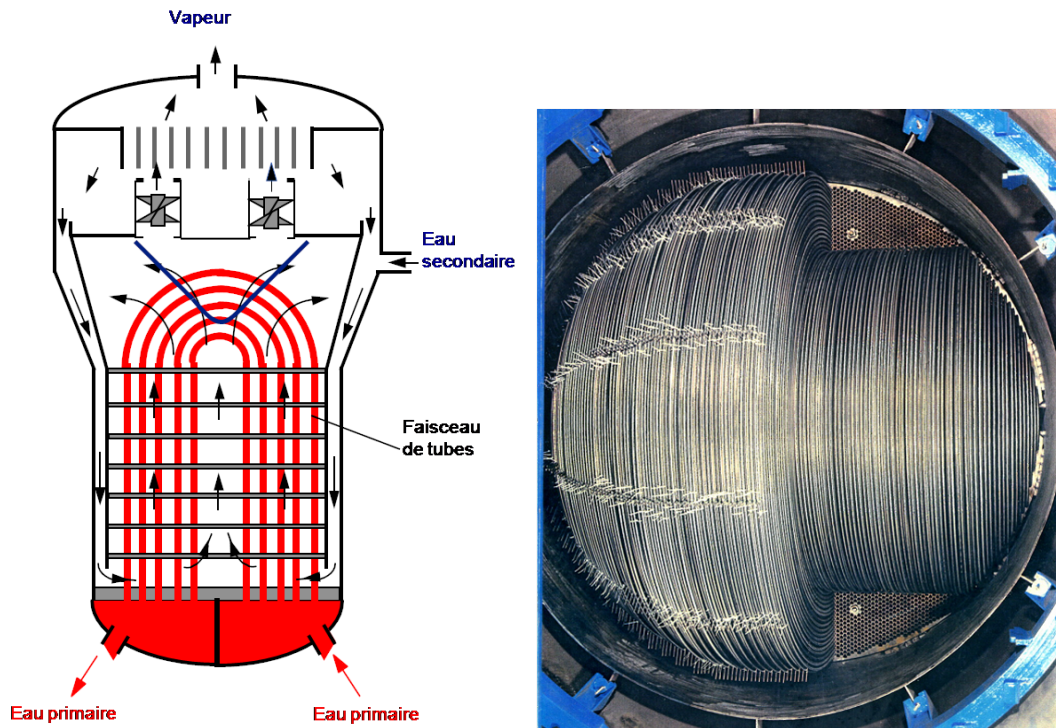


Figure 3: Schéma d'un générateur de vapeur (à gauche) et image du chignon partiellement assemblé d'un générateur de vapeur (à droite).

1.5 Contenu du document

Les travaux résumés dans ce document, correspondant aux développements réalisés à la suite de ma thèse, sont regroupés autour de 3 thèmes ayant comme dénominateur commun la modélisation et la simulation des écoulements diphasiques, en particulier des écoulements eau-vapeur. Seront donc abordés :

- (i) la modélisation et la simulation par approche de type bifluide ;
- (ii) la modélisation et la simulation *via* des modèles de type homogène ;
- (iii) la modélisation stochastique en thermohydraulique.

C'est dans les deux premiers thèmes que j'ai investi le plus de mon temps de recherche de 2007 à 2016. Ceci explique la relative hétérogénéité des sections de ce document, ainsi que de la bibliographie. Le deuxième thème est amené à prendre plus de place dans mes activités.

Le premier thème (i) a été développé en étroite collaboration avec Jean-Marc Hérard. Ma contribution personnelle porte plus sur les aspects de simulation industrielle que sur les aspects de modélisation. Le modèle choisi, proche de celui proposé par Baer-Nunziato, a subi peu de modifications importantes par rapport à la formulation proposée au milieu des années 80 [5]. Toutefois, de nombreuses clarifications ont été apportées concernant certains choix de modélisation [20]. De plus, un travail de synthèse de construction formelle du modèle a été proposé récemment dans [30]. Ce thème a été l'occasion de participer à l'encadrement de la doctorante Yujie Liu (thèse CIFRE EDF R&D AMA - LATP Université de Marseille), dont la soutenance a eu lieu le 11/09/2013. A

l'occasion de cette thèse [44], des premiers résultats de validation ont été obtenus sur un cas de type coup de bélier et sur un cas de type dépressurisation rapide.

Le second thème (ii) répond à un besoin industriel à moyen terme. Il ne semble en effet pas possible, et ce avant plusieurs dizaines d'années, de réaliser une étude industrielle avec un code à l'échelle locale sur un composant entier (comme un coeur REP ou un GV) avec une approche bifluide. Au-delà des simples aspects liés à la performance CPU à précision donnée de cette approche sur un composant complet, de nombreuses questions de modélisation se posent encore. En particulier, il n'existe pas de loi mécanique pour modéliser la trainée qui soit valable pour tous les régimes d'écoulements. Ce premier point est en fait issu d'une problématique commune aux modèles bifluides qui nécessitent une loi pour la force de trainée et aux modèles homogènes utilisant des corrélations pour prendre en compte le déséquilibre cinématique. Il existe des fermetures mécanistes pour la trainée issues du cadre gaz-particules et donc restreintes aux écoulements dilués : soit des bulles dispersées dans un liquide, soit des gouttes dispersées dans un gaz. Il n'existe pas à l'heure actuelle de modèle pour les régimes intermédiaires que l'on rencontre dans les circuits des centrales REP. D'autre part, les modèles bifluides sont définis tant que les deux phases sont présentes en tout point et à tout instant. Il est souvent plus aisé de proposer des modèles homogènes permettant de traiter naturellement ces situations de phases évanescentes. Enfin, la formulation des modèles homogènes sous forme de bilan sur le mélange des phases permet un couplage plus naturel avec les codes de thermique au niveau des parois chauffantes. En effet, dans les approches locales bifluides classiques, la topologie de l'écoulement à l'échelle d'une maille est inconnue. Il devient donc difficile de répartir la puissance de chauffage pariétale entre les deux phases au niveau des mailles de paroi. L'approche homogène possède donc toujours un avenir dans le domaine de la simulation de la thermohydraulique diphasique des circuits REP.

Dans le dernier thème (iii), la modélisation des écoulements diphasiques compressibles est abordée avec un point de vue lagrangien et en utilisant des modèles stochastiques. Dans un premier temps, un formalisme de modélisation des écoulements diphasiques compressibles avec changement de phase est proposé, tout en conservant une description simple de la thermodynamique. Par souci de simplicité, cet aspect est d'abord étudié sur une situation purement monophasique compressible, sachant que les conclusions qui en sont issues sont transposables au cadre diphasique. Les modèles ainsi développés pourraient permettre des simulations couplées avec des modèles diphasiques à champs moyens eulériens, dans l'esprit de ce qui a été proposé dans [13, 14].

2 Simulation à l'échelle locale à l'aide d'un modèle bifluide à relaxation en pression

2.1 Références

Mes publications sur le sujet sont [7, 9, 26, 29, 31, 32] ; auxquelles s'ajoutent les notes techniques internes (non publiées) [37, 47]. Mes principaux collaborateurs sur le sujet sont : J.-M. Hérard (ingénieur sénior EDF R&D), Y. Liu (thèse EDF R&D [44] pour laquelle j'ai participé à l'encadrement), A. Morente (stagiaire EDF R&D-Université Pierre et Marie Curie [47] que j'ai encadré en 2013). Un partenariat IUSTI-EDF R&D s'est déroulé en 2013 et 2014 concernant la détermination physique du terme source de relaxation en pression, et plus particulièrement sur le temps caractéristique associé. Dans ce cadre, S. Gavriluk a proposé une estimation physique simple de ce temps caractéristique, basée sur des considérations mécaniques ayant comme point de départ l'équation de Rayleigh-Plesset qui décrit l'oscillation d'une bulle isolée dans un liquide [19]. On notera également le travail réalisé par H. Lochon [45] qui s'est notamment attaché à améliorer la prise en compte des déséquilibres thermodynamiques dans le modèle bifluide à relaxation en pression.

2.2 Le modèle bifluide à relaxation en pression

Dans cette section, on se contente de présenter le modèle à relaxation en pression retenu. Tout le processus de dérivation formel est détaillé dans [30]. On rappellera juste que toutes les grandeurs mises en jeu sont des moments statistiques d'ordre 1, et que les moments d'ordre 2 sont négligés. De même, la diffusion moléculaire n'est pas prise en compte. Le modèle est présenté pour une dimension d'espace sans aucune perte de généralité vis-à-vis du cadre tridimensionnel.

Le modèle retenu est celui proposé par Baer et Nunziato [5]. Il permet de prendre en compte les déséquilibres phasiques en vitesse U_ϕ , pression P_ϕ , température T_ϕ et en potentiel chimique μ_ϕ . L'ensemble d'équations régissant l'évolution du système porte sur sept variables et est composé de sept EDP. Les variables de description choisies sont le titre statistique α_ϕ , les masses volumiques ρ_ϕ , les vitesses, et les pressions. Le système d'équations s'écrit sous forme non-conservative :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\alpha_l) + V_i(W)\partial_x(\alpha_l) = S_{1,l} \\ \partial_t(\alpha_l\rho_l) + \partial_x(\alpha_l\rho_l U_l) = S_{2,l} \\ \partial_t(\alpha_l\rho_l U_l) + \partial_x(\alpha_l\rho_l U_l^2 + \alpha_l P_l) - P_i(W)\partial_x(\alpha_l) = S_{3,l} \\ \partial_t(\alpha_l E_l) + \partial_x(\alpha_l U_l(E_l + P_l)) + P_i(W)\partial_t(\alpha_l) = S_{4,l} \\ \partial_t(\alpha_v\rho_v) + \partial_x(\alpha_v\rho_v U_v) = S_{2,v} \\ \partial_t(\alpha_v\rho_v U_v) + \partial_x(\alpha_v\rho_v U_v^2 + \alpha_v P_v) - P_i(W)\partial_x(\alpha_v) = S_{3,v} \\ \partial_t(\alpha_v E_v) + \partial_x(\alpha_v U_v(E_v + P_v)) + P_i(W)\partial_t(\alpha_v) = S_{4,v} \end{array} \right. \quad (1)$$

On ajoute la relation de consistence : $\alpha_l + \alpha_v = 1$, qui permet d'assurer qu'au moins une des deux phases est statistiquement présente en tout point et à tout instant. L'énergie totale de chaque phase est:

$$E_\phi = \rho_\phi e_\phi(P_\phi, \rho_\phi) + \rho_\phi \frac{U_\phi^2}{2} \quad \phi = l, v \quad (2)$$

où les énergies internes $(P_\phi, \rho_\phi) \rightarrow e_\phi(P_\phi, \rho_\phi)$ sont fournies par l'utilisateur. Les masses partielles associées à chaque phase notées m_ϕ où $\phi = l, v$ sont définies par:

$$m_\phi = \alpha_\phi \rho_\phi \quad \phi = l, v \quad (3)$$

On note W la variable conservative :

$$W = (\alpha_l, m_l, m_l U_l, \alpha_l E_l, m_v, m_v U_v, \alpha_v E_v) \quad (4)$$

Les grandeurs P_i et V_i désignent respectivement des pressions et des vitesses dites interfaciales et doivent être exprimées en fonction de W .

Les termes sources $S_{i=1..4,k}$ modélisent les échanges interfaciaux entre les phases, c'est-à-dire que l'on a $S_{i,l} + S_{i,v} = 0$, et sont décomposés en effets élémentaires :

$$\begin{cases} S_{1,k} = \phi_k(W) & k = l, v \\ S_{2,k} = \Gamma_k(W) \\ S_{3,k} = D_k(W) + \Gamma_k(W) \bar{U}_{int} \\ S_{4,k} = \psi_k(W) + \bar{V}_{int} D_k(W) + \Gamma_k(W) \bar{H}_{int} \end{cases} \quad (5)$$

Comme $S_{i,l} + S_{i,v} = 0$ on a les contraintes:

$$\sum_{k=l,v} \Gamma_k(W) = 0 \quad ; \quad \sum_{k=l,v} \psi_k(W) = 0 \quad ; \quad \sum_{k=l,v} D_k(W) = 0 \quad ; \quad \sum_{k=l,v} \phi_k(W) = 0 . \quad (6)$$

Les contributions $\Gamma_k(W)$, $D_k(W)$ et $\psi_k(W)$ correspondent au transfert interfacial de masse, aux effets de traînée statique et à l'échange interfacial de chaleur entre les deux phases. Le terme $\phi(W)$ est issu du processus de moyenne statistique permettant d'obtenir l'équation sur le titre statistique α_k [30]. L'expression de ces termes doit être précisés afin de fermer le système (1).

Les termes \bar{U}_{int} et \bar{H}_{int} sont choisis de manière à garantir que les vitesses U_v et U_l n'interviennent pas dans le transfert de masse :

$$\bar{U}_{int} = \bar{V}_{int} = (U_l + U_v)/2 \quad , \quad \bar{H}_{int} = U_l U_v / 2 \quad (7)$$

Concernant le choix de la pression P_i et de la vitesse V_i , on se conforme aux choix de [20]. Dans la suite, on choisira plus particulièrement $P_i = P_l$ et $V_i = U_v$. Ceci permet au champ associé à la valeur propre $\lambda = V_i$ d'être linéairement dégénéré, et on peut également ainsi établir une inégalité d'entropie contrôlant les solutions régulières pour (1).

Il est possible d'établir une inégalité d'entropie pour le système (1). C'est cette inégalité qui permet de définir les formes admissibles des termes $\phi(W)$, $\Gamma_k(W)$, $D_k(W)$ et $\psi_k(W)$ au sens du second principe de la thermodynamique. Pour cela on introduit l'entropie spécifique $S_k(P_k, \rho_k)$ associée à chaque phase. Elle vérifie:

$$c_k^2 \partial_{P_k} S_k + \partial_{\rho_k} S_k = 0 \quad (8)$$

où c_k est la vitesse des ondes acoustiques dans la phase k :

$$\rho_k c_k^2 = (\partial_{P_k} e_k(P_k, \rho_k))^{-1} \left(\frac{P_k}{\rho_k} - \rho_k \partial_{\rho_k} e_k(P_k, \rho_k) \right) \quad (9)$$

On définit alors les températures T_k :

$$1/T_k = \partial_{P_k}(S_k)/\partial_{P_k}(e_k) \quad (10)$$

ainsi que le potentiel chimique de Gibbs associé à la phase k :

$$\mu_k = e_k + P_k/\rho_k - T_k S_k \quad (11)$$

Une entropie naturelle (principe d'aditivité pour des phases immiscibles) associée au système complet (1) est la combinaison des entropies spécifiques pondérées par leurs masses partielles respectives $\eta(W) = m_l S_l + m_v S_v$. Le flux entropique associé est $F_\eta(W) = m_l U_l S_l + m_v U_v S_v$. Si W est une solution suffisamment régulière de (1), l'équation d'évolution de l'entropie η est alors :

$$\begin{aligned} \partial_t \eta(W) + \partial_x F_\eta(W) &= \Gamma_l(W)(\mu_v(W)/T_v - \mu_l(W)/T_l) \\ &+ D_l(W)(U_v - U_l)(1/(2T_v) + 1/(2T_l)) \\ &+ \psi_l(W)(T_v - T_l)/(T_v T_l) \\ &+ \phi_l(W)(P_l - P_v)(1/T_v) \end{aligned} \quad (12)$$

Cette équation (12) est essentielle. En effet, afin de respecter le second principe de la thermodynamique, l'entropie doit croître:

$$\partial_t \eta(W) + \partial_x F_\eta(W) \geq 0 \quad (13)$$

Ce qui impose au second membre de (12) d'être positif et cela implique donc que seules certaines formes de $\Gamma_l(W)$, $D_l(W)$, $\psi_l(W)$ et $\phi_l(W)$ sont admissibles au sens du second principe. Les quantités $T_v - T_l$, $U_v - U_l$, $P_l - P_v$, $\mu_v/T_v - \mu_l/T_l$ étant indépendantes, il faut imposer la positivité de chaque terme du membre de droite de (12). En conséquence, les formes admissibles sont telles que :

$$\begin{aligned} \Gamma_l(W)(\mu_v(W)/T_v - \mu_l(W)/T_l) &\geq 0, \\ D_l(W)(U_v - U_l) &\geq 0, \\ \psi_l(W)(T_v - T_l) &\geq 0, \\ \phi_l(W)(P_l - P_v) &\geq 0. \end{aligned} \quad (14)$$

On opte alors pour les lois de fermeture suivantes:

$$\begin{aligned} \Gamma_l(W) &= K_\Gamma(W)(\mu_v(W)/T_v - \mu_l(W)/T_l), \\ D_l(W) &= K_U(W)(U_v - U_l), \\ \psi_l(W) &= K_T(W)(T_v - T_l), \\ \phi_l(W) &= K_P(W)(P_l - P_v). \end{aligned} \quad (15)$$

Ces formes sont *a priori* simples et d'autres formes sont également envisageables. Les fonctions scalaires positives $K_U(W)$, $K_T(W)$, $K_\Gamma(W)$ et $K_P(W)$ sont choisies de la façon suivante:

$$K_U(W) = \frac{m_l m_v}{m_l + m_v} \frac{1}{\tau_U(W)}, \quad (16)$$

$$K_T(W) = \frac{m_l m_v C_{V,l} C_{V,v}}{(m_l C_{V,l} + m_v C_{V,v})} \frac{1}{\tau_T(W)}, \quad (17)$$

$$K_\Gamma(W) = \frac{m_l m_v}{(m_l + m_v)(T_v^{-1} |\mu_v| + T_l^{-1} |\mu_l|)} \frac{1}{\tau_\Gamma(W)} \quad (18)$$

$$K_P(W) = \frac{\alpha_l \alpha_v}{|P_l| + |P_v|} \frac{1}{\tau_P(W)}, \quad (19)$$

avec les capacités calorifiques :

$$C_{V,k} = \partial_{T_k}(e_k)|_{\rho_k} \quad k = l, v$$

Ces lois de fermeture font intervenir des échelles de temps positives que l'on note τ_U, τ_P, τ_T , et τ_T et qui doivent être fournies par l'utilisateur.

Le modèle ainsi proposé possède des propriétés intéressantes [53, 22]. Tout d'abord, la partie convective du système (1) admet les sept valeurs propres réelles:

$$\lambda_1 = U_v, \quad (20)$$

$$\lambda_2 = U_v, \quad \lambda_3 = U_v - c_v, \quad \lambda_4 = U_v + c_v, \quad (21)$$

$$\lambda_5 = U_l, \quad \lambda_6 = U_l - c_l, \quad \lambda_7 = U_l + c_l. \quad (22)$$

La famille de vecteurs propres associée est une base de \mathbb{R}^7 , sauf si on a résonance $|U_k - U_v|/c_k = 1$, pour $k = l, v$, d'où la condition d'hyperbolicité. En pratique, dans les applications du domaine nucléaire cette condition est cependant rarement atteinte. Les champs associés aux valeurs propres $\lambda_{1,2,5}$ sont linéairement dégénérés et les autres champs sont vraiment non linéaires. Ensuite, de part et d'autre de la discontinuité associée à la valeur propre $\lambda = U_v$, α_l est uniforme et les produits non conservatifs du système (1) ne sont donc pas actifs (grâce au choix $V_i = U_v$). Par conséquent les conditions de saut obtenues sont uniques:

$$\begin{aligned} -\sigma[\rho_k]_L^R + [\rho_k U_k]_L^R &= 0 \\ -\sigma[\rho_k U_k]_L^R + [\rho_k U_k^2 + P_k]_L^R &= 0 \\ -\sigma[E_k]_L^R + [U_k(E_k + P_k)]_L^R &= 0 \end{aligned} \quad k = l, v \quad (23)$$

où σ désigne la vitesse de l'onde de choc et où les indices L, R font référence aux états gauches et droits de part et d'autre de l'onde de choc considérée.

Par ailleurs, le travail récent [8] a permis de montrer que le système décrit dans cette section admettait une entropie convexe (non-strictement convexe) et que les variables taux de présence, vitesse, pression, entropie permet d'écrire le système sous forme symétrique loin de la résonance. En conséquence, le problème de Cauchy associé au système admet des solutions régulières localement en temps, loin de la résonance.

2.3 Les schémas numériques de discrétisation

Le schéma de discrétisation proposé ici pour calculer des solutions approchées de problèmes associés au système (1) repose sur une approche volumes finis [16] et un découpage du système en plusieurs sous-systèmes à l'aide d'une technique à pas fractionnaires [57]. On discrétise dans un premier temps la convection à l'aide de schémas explicites de type Godunov approché appliqués au système (1) sans termes sources : $\psi_l(W) = 0$, $\phi_l(W) = 0$, $D_l(W) = 0$ et $\Gamma_l(W) = 0$. Cette étape permet de fixer le pas de temps global $\Delta t > 0$ conformément au respect d'une condition CFL. Il existe de nombreux schémas possibles dans la littérature. On utilise ici soit le schéma de Rusanov [50] adapté au cadre non-conservatif, soit le schéma de relaxation [51] adapté au cadre du modèle bifluide avec équations d'énergies. Dans un deuxième temps, chacun des effets sources est pris en compte dans l'ordre suivant : $\psi_l(W)$, $\phi_l(W)$, $D_l(W)$ puis $\Gamma_l(W)$. Cette étape constituée

de 4 sous-étapes correspond donc à la résolution de 4 systèmes d'ODE fortement non linéaires. Le pas de temps étant imposé par l'étape de convection et les termes sources étant pilotés par des échelles de temps physiques données, on privilégie les schémas de discrétisation implicite permettant d'obtenir des approximations stables même pour de grands pas de temps. Des schémas explicites ont néanmoins été proposés et sont présentés dans [7, 9, 37, 44, 47], on se contente dans la suite de présenter les schémas implicites.

Le découpage proposé est consistant avec l'inégalité d'entropie. Ce point s'avère essentiel pour conserver des approximations consistantes avec le système complet. Par ailleurs, l'ordre des différentes étapes peut être changé mais l'influence de celui-ci sur les maillages grossiers n'a jamais été étudiée. Idéalement, un pas de temps devrait être constitué d'une succession de sous-itérations enchaînant : convection, source $\psi_l(W)$, $\phi_l(W)$, $D_l(W)$ puis $\Gamma_l(W)$, jusqu'à convergence des sous-itérés. En pratique on se limite toujours à une seule sous-itération.

Ma contribution vis-à-vis des schémas de convection existants [50, 51] a juste consisté en leur mise en oeuvre dans un prototype industriel tridimensionnel et parallèle. Ils ne seront donc pas détaillés ici. Ma principale contribution concerne le développement des schémas de discrétisation des systèmes d'ODE de prise en compte des termes sources. Les versions implicites de ces schémas sont maintenant présentées. Une attention particulière a été portée à la conservation de la masse, du moment et de l'énergie totale du mélange, ainsi que sur le respect au niveau discret de la positivité des fractions, des masses partielles et des énergies internes. Par ailleurs, on notera que les schémas proposés ici restent valables quelles que soient les lois d'état, ce qui est impératif dans le cadre des simulations industrielles.

Le principe des schémas présentés dans les sections suivantes reste le même. Les systèmes d'ODE sont approchés par des systèmes linéarisés pour lesquels les termes de normalisation et les temps caractéristiques sont explicités. Les termes les plus importants sont quant à eux conservés implicites. Il s'agit des termes en produit de masses partielles ou taux de présence (qui permettent d'assurer la positivité des masses partielles et des taux de présence) d'une part, et des termes en écart de pression, vitesse, température et potentiel chimique d'autres part. Ensuite, les solutions approchées des systèmes d'ODE linéarisés sont obtenues avec un seul pas de temps Δt avec un schéma d'Euler implicite.

Pour chaque terme source, on notera W^n la condition initiale et $W^{n,*}$ la solution approchée en fin de pas de temps pour le terme considéré. Les étapes s'enchaînant dans le calcul global, l'état final d'un étape devient la condition initiale de l'étape suivante. Pour chaque effet source, W^n est la condition initiale du système d'ODE : $W(t = 0) = W^n$.

2.3.1 Retour à l'équilibre des températures $\psi_l(W)$

L'étape de prise en compte de l'effet de retour à l'équilibre des températures (transfert de chaleur sans transfert de masse ni transfert de quantité de mouvement) est basé sur la résolution approchée

du système d'ODE suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \alpha_v & = 0 \\ \partial_t (\alpha_v \rho_v) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_v \rho_v u_v) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_v E_v) & = (\tau_T)^{-1} \frac{m_v C_{V,v} m_l C_{V,l}}{m_v C_{V,v} + m_l C_{V,l}} (T_l - T_v) \\ \partial_t (\alpha_l \rho_l + \alpha_v \rho_v) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_l \rho_l u_l + \alpha_v \rho_v u_v) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_l E_l + \alpha_v E_v) & = 0 \end{cases} \quad (24)$$

avec comme condition initiale les valeurs déterminées au pas de temps précédent : $W(t=0) = W^n$. Les solutions de ce système sont donc triviales en ce qui concerne le titre, les masses partielles et les vitesses : $\forall t \geq 0$, $\alpha_v(t) = \alpha_v^n$, $u_l(t) = u_l^n$, $u_v(t) = u_v^n$, $m_l(t) = m_l^n$ et $m_v(t) = m_v^n$. En conséquence la mise à jour de ces variables à la fin de l'étape sera :

$$\alpha_v^{n,*} = \alpha_v^n, \quad u_l^{n,*} = u_l^n, \quad u_v^{n,*} = u_v^n, \quad m_l^{n,*} = m_l^n \quad \text{et} \quad m_v^{n,*} = m_v^n$$

Le sous-système permettant de déterminer les énergies internes est donc :

$$\begin{cases} \partial_t (m_v^n e_v) & = (\tau_T)^{-1} \frac{m_v^n C_{V,v} m_l^n C_{V,l}}{m_v^n C_{V,v} + m_l^n C_{V,l}} (T_l - T_v) \\ \partial_t (m_l^n e_l + m_v^n e_v) & = 0 \end{cases} \quad (25)$$

Les capacités calorifiques $C_{V,\varphi}$ peuvent dépendre des grandeurs thermodynamiques. Toutefois, comme les taux de présence et les masses partielles sont constants, on en déduit que les masses volumiques sont constantes. Les capacités calorifiques $C_{V,\varphi}$ et les énergies internes e_φ ne dépendent donc que d'une seule variable thermodynamique phasique. En choisissant de les exprimer en fonction des énergies internes e_φ , le système (25) est équivalent au système (26) :

$$\begin{cases} \partial_t (m_v^n e_v) & = (\tau_T)^{-1} \frac{m_v^n C_{V,v}(e_v, \rho_v^n) m_l^n C_{V,l}(e_l, \rho_l^n)}{m_v^n C_{V,v}(e_v, \rho_v^n) + m_l^n C_{V,l}(e_l, \rho_l^n)} (T_l(e_l, \rho_l^n) - T_v(e_v, \rho_v^n)) \\ \partial_t (m_l^n e_l + m_v^n e_v) & = 0 \end{cases} \quad (26)$$

Ce système (26) peut être délicat à intégrer dans le cas de lois d'état quelconques et suivant les formes de τ_T choisies. Le cofacteur du terme en écart de température est donc explicité. La résolution du sous-système (25) est approchée par la résolution du système linéarisé :

$$\begin{cases} \partial_t (m_v^n e_v) & = (\theta_T^n)^{-1} (T_l(e_l, \rho_l^n) - T_v(e_v, \rho_v^n)) \\ \partial_t (m_l^n e_l + m_v^n e_v) & = 0 \end{cases} \quad (27)$$

Où le terme θ_T^n incorpore le temps caractéristique τ_T ainsi que les capacités calorifiques :

$$(\theta_T^n)^{-1} = (\tau_T^n)^{-1} \frac{m_v^n C_{V,v}^n m_l^n C_{V,l}^n}{m_v^n C_{V,v}^n + m_l^n C_{V,l}^n}$$

Afin de garder le contrôle sur la conservation de l'énergie, le système (27) est vu comme un système portant sur les énergies internes. En lui appliquant un schéma d'Euler implicite pour un seul pas de temps égal à Δt , on a donc :

$$\begin{cases} m_l^n (e_l^{n,*} - e_l^n) = \frac{\Delta t}{\theta_T^n} (T_v(e_v^{n,*}, \rho_v^n) - T_l(e_l^{n,*}, \rho_l^n)) \\ m_l^n (e_l^{n,*} - e_l^n) + m_v^n (e_v^{n,*} - e_v^n) = 0 \end{cases} \quad (28)$$

Il s'agit donc d'un système non linéaire à deux équations et deux inconnues $(e_l^{n,*}, e_v^{n,*})$.

Il est possible de se ramener à la résolution d'une équation résolvante en utilisant l'équation discrète de conservation de l'énergie (*i.e* la deuxième équation de (28)) pour exprimer de manière explicite $e_l^{n,*}$ en fonction de $e_v^{n,*}$ (ou inversement) dans la première équation de (28). Cette équation résolvante est à la base du schéma et permet de démontrer le résultat suivant.

Proposition. *On suppose que les lois thermodynamiques des deux phases vérifient :*

$$\partial_{e_\varphi}(T_\varphi)|_{\rho_\varphi} > 0 \text{ et } \lim_{e_\varphi \rightarrow 0^+} T_\varphi(e_\varphi, \rho_\varphi) = 0 \quad (29)$$

pour $\varphi = l, v$. Le système (28) admet alors une unique solution $(e_l^{n,*}, e_v^{n,*})$ pour toute valeur du pas de temps Δt . De plus, les solutions en énergie interne $e_l^{n,*}, e_v^{n,*}$ sont comprises respectivement dans les intervalles :

$$\left[0, \frac{m_l^n e_l^n + m_v^n e_v^n}{m_l^n} \right] \quad \text{et} \quad \left[0, \frac{m_l^n e_l^n + m_v^n e_v^n}{m_v^n} \right].$$

□

La démonstration de cette proposition peut être trouvée dans [31]. Il faut noter que dans la proposition ci-dessus, les hypothèses demandées sur les lois d'état thermodynamique sont physiquement raisonnables. Certaines lois d'état thermodynamique comme les gaz parfaits par exemple satisfont ces hypothèses, et d'autres comme les gaz raides ou les gaz raides généralisés ne les vérifient pas forcément (en fonction du choix des différents paramètres des lois d'état). Toutefois, on insiste sur le fait que ces hypothèses sont suffisantes et non nécessaires à l'obtention du résultat d'unicité de la solution du schéma (28).

Propriétés du schéma.

- Le schéma proposé assure par construction la conservation de l'énergie totale du mélange.
- La positivité des taux de présence et des masses partielles est trivialement assurée. La positivité des énergies internes dépend des lois thermodynamiques phasiques.
- Plus trivialement encore, il assure la conservation de la masse et du moment du mélange, ainsi que la positivité des taux de présence et des masses partielles.
- Le schéma est d'ordre 1 en général et il est exact dans le cas particulier où τ_T et les capacités calorifiques sont des constantes.

Remarques.

- Les propriétés ci-dessus sont valables pour tout pas de temps.
- La solution du système (28) est déterminée par une équation résolvante non-linéaire dont la solution est dans un intervalle connu, ce qui permet d'utiliser la dichotomie comme méthode numérique de résolution (voire propriété ci-dessus).
- Une version plus complexe de ce schéma pourrait être proposée en basant le calcul de la solution sur le système (26) et non sur le système linéarisé (27).

2.3.2 Retour à l'équilibre des pressions $\phi_l(W)$

Le système d'ODE associé à la prise en compte de la relaxation en pression $\phi_l(W)$ est le suivant :

$$\begin{cases} \partial_t(\alpha_l) = \phi_l(W) \\ \partial_t(\alpha_l \rho_l) = 0 \\ \partial_t(\alpha_l \rho_l U_l) = 0 \\ \partial_t(\alpha_l E_l) + P_l(W) \partial_t \alpha_l = 0 \\ \partial_t(\alpha_v \rho_v + \alpha_l \rho_l) = 0 \\ \partial_t(\alpha_v \rho_v U_v + \alpha_l \rho_l U_l) = 0 \\ \partial_t(\alpha_v E_v + \alpha_l E_l) = 0 \end{cases} \quad (30)$$

avec :

$$\phi_l = \alpha_l \alpha_v (P_l - P_v) / (|P_l| + |P_v|) / \tau_P(W), \quad \text{et} \quad P_i = P_l. \quad (31)$$

On en déduit immédiatement que les solutions de (30) sont telles que $m_\varphi(t) = m_\varphi(0)$ et $U_\varphi(t) = U_\varphi(0)$. Cela nous ramène à la résolution du sous-système d'ODE composé de l'équation d'évolution du taux de présence et des équations d'énergie interne phasique :

$$\begin{cases} \partial_t(\alpha_l) = \phi_l(W) \\ m_l \partial_t \left(e_l \left(P_l, \frac{m_l(0)}{\alpha_l} \right) \right) + P_l \partial_t \alpha_l = 0 \\ m_v \partial_t \left(e_v \left(P_v, \frac{m_v(0)}{\alpha_v} \right) \right) + P_l \partial_t \alpha_v = 0 \end{cases} \quad (32)$$

et dont les inconnues sont les pressions phasiques P_φ et le taux de présence statistique α_l (naturellement il existe d'autres choix d'inconnues). Les dérivées en temps des énergies sont alors réécrites :

$$\partial_t \left(e_\varphi \left(P_\varphi, \frac{m_\varphi(0)}{\alpha_\varphi} \right) \right) = \partial_{P_\varphi} (e_\varphi) \partial_t P_\varphi - \partial_{\rho_\varphi} (e_\varphi) \frac{\rho_\varphi}{\alpha_\varphi} \partial_t \alpha_\varphi$$

puis approchées par :

$$m_\varphi \partial_t \left(e_\varphi \left(P_\varphi, \frac{m_\varphi(0)}{\alpha_\varphi} \right) \right) (t) \sim \tilde{m}_\varphi (\partial_{P_\varphi} (e_\varphi))(0) \partial_t P_\varphi - \tilde{m}_\varphi \frac{\rho_\varphi^*}{\alpha_\varphi^*} (\partial_{\rho_\varphi} (e_\varphi))(0) \partial_t \alpha_\varphi. \quad (33)$$

avec $\tilde{m}_\varphi = \alpha_\varphi \rho_\varphi(0)$, $\alpha_\varphi^* = \alpha_\varphi$ et $\rho_\varphi^* = \rho_\varphi(0)$. Ses choix permettent en fait de retrouver dans le cadre des lois d'état de type gaz parfait et gaz raide le schéma proposé dans [29, 44]. Le système (32) est donc approché par le système linéarisé :

$$\begin{cases} \partial_t(\alpha_l) = \phi_l(W) \\ \alpha_l \rho_l(0) \left[(\partial_{P_l} (e_l))(0) \partial_t P_l - \frac{\rho_l(0)}{\alpha_l} (\partial_{\rho_l} (e_l))(0) \partial_t \alpha_l \right] + P_l \partial_t \alpha_l = 0 \\ \alpha_v \rho_v(0) \left[(\partial_{P_v} (e_v))(0) \partial_t P_v - \frac{\rho_v(0)}{\alpha_v} (\partial_{\rho_v} (e_v))(0) \partial_t \alpha_v \right] + P_l \partial_t \alpha_v = 0. \end{cases} \quad (34)$$

La solution approchée du système (34) au temps $t = \Delta t$ est déterminée par un schéma d'Euler implicite sur un seul pas de temps. Ce qui revient à écrire $\alpha_l^{n,*}$, $P_l^{n,*}$ et $P_v^{n,*}$ de la façon suivante :

$$\begin{cases} \alpha_l^{n,*} - \alpha_l^n = \Delta t \phi_l(W^{n,*}) \\ \alpha_l^{n,*} \rho_l^n \left[(\partial_{P_l}(e_l))^n (P_l^{n,*} - P_l^n) - (\partial_{\rho_l}(e_l))^n \frac{\rho_l^n}{\alpha_l^{n,*}} (\alpha_l^{n,*} - \alpha_l^n) \right] + P_l^{n,*} (\alpha_l^{n,*} - \alpha_l^n) = 0 \\ \alpha_v^{n,*} \rho_v^n \left[(\partial_{P_v}(e_v))^n (P_v^{n,*} - P_v^n) - (\partial_{\rho_v}(e_v))^n \frac{\rho_v^n}{\alpha_v^{n,*}} (\alpha_v^{n,*} - \alpha_v^n) \right] + P_l^{n,*} (\alpha_v^{n,*} - \alpha_v^n) = 0. \end{cases} \quad (35)$$

Ce système est résolu en se ramenant à une équation non-linéaire portant sur la seule inconnue : $\alpha_l^{n,*}$. Pour former cette équation, on remarque que la deuxième équation de (35) permet d'obtenir $P_l^{n,*}$ en fonction de $\alpha_l^{n,*}$ et que la troisième équation de (35) permet d'obtenir $P_v^{n,*}$ en fonction de $\alpha_l^{n,*}$ et $P_l^{n,*}$, et donc en fonction de $\alpha_l^{n,*}$. La première équation de (35) est donc une équation résolvante portant sur $\alpha_l^{n,*}$. Autrement dit, on a :

$$\begin{cases} G(\alpha_l^{n,*}) = \alpha_l^{n,*} - \alpha_l^n - \tilde{\phi}_l(\alpha_l^{n,*}) \Delta t \\ \tilde{P}_l(\alpha_l^{n,*}) = \frac{\alpha_l^{n,*} \rho_l^n A_l^n P_l^n + (\rho_l^n)^2 B_l^n (\alpha_l^{n,*} - \alpha_l^n)}{(\alpha_l^{n,*} - \alpha_l^n) + \alpha_l^{n,*} \rho_l^n A_l^n} \\ \tilde{P}_v(\alpha_l^{n,*}) = P_v^n - \frac{((\rho_v^n)^2 B_v^n - \tilde{P}_l(\alpha_l^{n,*})) (\alpha_l^{n,*} - \alpha_l^n)}{(1 - \alpha_l^{n,*}) \rho_v^n A_v^n}, \end{cases} \quad (36)$$

où on note $A_\varphi = (\partial_{P_\varphi}(e_\varphi))$, $B_\varphi = (\partial_{\rho_\varphi}(e_\varphi))$ et:

$$\tilde{\phi}_l(\alpha_l^{n,*}) = \alpha_l^{n,*} (1 - \alpha_l^{n,*}) \frac{(\tilde{P}_l(\alpha_l^{n,*}) - \tilde{P}_v(\alpha_l^{n,*}))}{(|P_l^n| + |P_v^n|) \tau_P^n}.$$

On résout donc $G(\alpha_l^{n,*}) = 0$ pour déterminer $\alpha_l^{n,*}$. On notera que dans le terme source ϕ , le temps caractéristique τ_P et le terme de normalisation ($|P_l| + |P_v|$) sont explicités. De plus, il est important de remarquer que la résolution de (36) permet de calculer $\alpha_l^{n,*}$ mais pas directement les pressions thermodynamiques. En effet, afin d'assurer la conservation de l'énergie du mélange, la mise à jour des énergies internes doit impérativement être réalisée en utilisant les relations (33) discrétisées :

$$(me)_\varphi^{n,*} = (me)_\varphi^n + \alpha_\varphi^{n,*} \rho_\varphi^n A_\varphi^n (\tilde{P}_\varphi(\alpha_l^{n,*}) - P_\varphi^n) - (\rho_\varphi^n)^2 B_\varphi^n (\alpha_\varphi^{n,*} - \alpha_\varphi^n) \quad (37)$$

Les pressions thermodynamiques $P_\varphi^{n,*}$ déduites à la fin du pas de temps à partir des lois thermodynamiques avec comme arguments $e_\varphi^{n,*}$ et $\rho_\varphi^{n,*} = m_\varphi^{n,*} / \alpha_\varphi^{n,*}$ ne sont pas nécessairement égales aux pressions $\tilde{P}_\varphi(\alpha_l^{n,*})$ qui ne sont que des "intermédiaires de calcul" : $\tilde{P}_\varphi(\alpha_l^{n,*}) \neq P_\varphi(e_\varphi^{n,*}, \rho_\varphi^{n,*})$.

La fonction G définie par les relations (36) est telle que :

$$G(0) = -\alpha_l^n < 0 \quad \text{et} \quad G(1) = \alpha_l^n + \frac{\Delta t \alpha_l^n}{\rho_v^n A_v^n (|P_l^n| + |P_v^n|) \tau_P^n} \left(\frac{\rho_l^n A_l^n P_l^n + \alpha_l^n (\rho_l^n)^2 B_l^n}{\alpha_l^n + \rho_l^n A_l^n} - (\rho_v^n)^2 B_v^n \right)$$

Pourvu que les termes A_φ^n et B_φ^n soient bornés, il existe donc un pas de temps Δt tel que $G(1) > 0$. Si de plus les lois thermodynamiques assurent la continuité et la monotonie de G , alors on peut trouver un pas de temps Δt tel que la résolution de $G = 0$ admette une unique solution sur $]0, 1[$. Par ailleurs, si G est continue sans être monotone sur $]0, 1[$ alors il peut y avoir plusieurs solutions à l'équation $G = 0$, auquel cas un critère supplémentaire doit être proposé pour sélectionner une

unique solution.

Naturellement, il est possible que les lois d'état phasiques soient telles que $G(1) > 0$ quel que soit le pas de temps Δt , comme dans le cas des lois d'état de type gaz parfaits ou gaz raides. La continuité et la monotonie de G permettent alors d'obtenir l'existence et l'unicité de la solution pour tous les pas de temps.

Propriétés du schéma associé à la résolution de (36).

- Lorsqu'une solution existe pour $G = 0$ sur $]0, 1[$, les taux de présence statistiques restent positifs. Les masses partielles restent positives et par conséquent les masses volumiques sont également positives. La positivité des énergies internes dépend des propriétés des lois d'état phasiques et du pas de temps.
- Le schéma assure la conservation de la masse, de la quantité de mouvement du mélange et de l'énergie totale du mélange.
- Le schéma est d'ordre 1.

Remarques.

- Dans le cadre des lois d'état de type gaz parfait et gaz raide, le schéma proposé est équivalent à celui de [29, 44].
- D'autres variantes de ce schéma sont possibles suivant les valeurs choisies pour \tilde{m}_φ , ρ_φ^* et α_φ^* .
- Il est important de mettre à jour les énergies internes avec la formule (37) afin d'assurer la conservation de l'énergie totale du mélange.

2.3.3 Prise en compte de la traînée $D_l(W)$

Cette étape ne prend en compte que les effets de traînée $D_l(W)$. Le système d'ODE à discrétiser est le suivant:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\alpha_l) = 0 \\ \partial_t(\alpha_l \rho_l) = 0 \\ \partial_t(\alpha_l \rho_l U_l) = D_l \\ \partial_t(\alpha_l E_l) = (U_l + U_g) D_l / 2 \\ \partial_t(\alpha_v \rho_v + \alpha_l \rho_l) = 0 \\ \partial_t(\alpha_v \rho_v U_v + \alpha_l \rho_l U_l) = 0 \\ \partial_t(\alpha_v E_v + \alpha_l E_l) = 0 \end{array} \right. \quad (38)$$

avec le terme de traînée :

$$D_l = (\tau_U)^{-1} \frac{m_l m_v}{m_l + m_v} (U_v - U_l) \quad (39)$$

Il est alors possible d'écrire l'équation vérifiée par la vitesse relative $u_r = u_v - u_l$:

$$\partial_t(u_r) = -\frac{1}{\tau_u} u_r$$

qui s'intègre en donnant :

$$u_r(t) = u_r(0) e^{-\int_0^t \frac{ds}{\tau_U(W(s))}}$$

En particulier, dans le cas où le temps de relaxation τ_U est constant cette équation est triviale à intégrer. On choisit donc d'expliciter τ_U dans (39), $\tau_U \leftarrow \tau_U(W(0))$, ce qui permet de donner une expression explicite pour la vitesse relative :

$$u_r(t) = u_r(0) e^{-t/\tau_U(W(0))}$$

Les expressions analytiques des vitesses phasiques sont alors reconstruites en utilisant l'équation de conservation du moment (et les équations de masse). Une fois les vitesses phasiques déterminées, il reste à intégrer l'équation d'énergie vapeur (resp. liquide). Le fait d'avoir explicité τ_u permet également d'intégrer exactement e_v (resp. e_l). L'expression analytique de e_l (resp. e_v) est ensuite obtenue en utilisant la conservation de l'énergie totale. L'approximation $W^{n,*}$ est alors obtenue en prenant la solution du système (38) avec $\tau_U = \tau_U(W^n)$ décrite ci-dessus à $t = \Delta t$ avec W^n comme condition initiale :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_l^{n,*} = \alpha_l^n \\ m_l^{n,*} = m_l^n \\ m_v^{n,*} = m_v^n \\ U_l^{n,*} = U_l^n + (U_v^n - U_l^n) \frac{m_v^n (1 - e^{-\Delta t/\tau_u^n})}{m_l^n + m_v^n} \\ U_v^{n,*} = U_v^n - (U_v^n - U_l^n) \frac{m_l^n (1 - e^{-\Delta t/\tau_u^n})}{m_l^n + m_v^n} \\ (m_l e_l)^{n,*} = (m_l e_l)^n + \frac{m_l^n m_v^n}{m_l^n + m_v^n} \frac{(U_v^n - U_l^n)^2}{4} (1 - e^{-2\Delta t/\tau_u^n}) \\ (m_v e_v)^{n,*} = (m_v e_v)^n + \frac{m_l^n m_v^n}{m_l^n + m_v^n} \frac{(U_v^n - U_l^n)^2}{4} (1 - e^{-2\Delta t/\tau_u^n}) \end{array} \right. \quad (40)$$

Propriétés du schéma (40).

- Le taux de présence statistique et les masses partielles restent inchangés pendant cette étape, de même que la quantité de mouvement totale et l'énergie totale.
- On vérifie simplement que les énergies internes de chaque phase restent positives au cours de cette étape.
- Ce schéma est d'ordre 1 en général et il est exact lorsque τ_U est une constante.

Remarques.

- Les propriétés ci-dessus sont valables pour tout pas de temps.
- Dans les cas particuliers où τ_U n'est pas constant mais intégrable explicitement, il n'est pas nécessaire de faire l'approximation $\tau_U = \tau_U(W^n)$ et on obtient alors une intégration exacte, pourvu que les équations d'énergie puissent également être exactement intégrées.

2.3.4 Discrétisation du système d'équations associé au transfert de masse $\Gamma_v(W)$

Le système d'équations à résoudre est :

$$\begin{cases} \partial_t \alpha_v & = 0 \\ \partial_t (\alpha_v \rho_v) & = \Gamma_v \\ \partial_t (\alpha_v \rho_v u_v) & = \bar{U}_{int} \Gamma_v \\ \partial_t (\alpha_v E_v) & = \bar{H}_{int} \Gamma_v \\ \partial_t (\alpha_l \rho_l + \alpha_v \rho_v) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_l \rho_l u_l + \alpha_v \rho_v u_v) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_l E_l + \alpha_v E_v) & = 0 \end{cases} \quad (41)$$

On rappelle que l'on a les fermetures $\bar{U}_{int} = \frac{u_l + u_v}{2}$, $\bar{H}_{int} = \frac{u_l u_v}{2}$ et que le terme source de transfert de masse Γ_v s'écrit :

$$\Gamma_v = \frac{m_l m_v}{m_l + m_v} G, \quad \text{avec } G = \frac{1}{\tau_G} \frac{(\mu_l - \mu_v)}{|\mu_v| + |\mu_l|} \quad (42)$$

où μ_φ désigne le potentiel chimique. Le schéma proposé ici consiste à expliciter le temps caractéristique τ_G dans le système (41), $\tau_G = \tau_G(t=0)$, et à trouver les solutions discrètes du modèle approché ainsi obtenu. La solution pour le taux de présence est triviale :

$$\alpha_v(t) = \alpha_v(t=0)$$

On peut alors remarquer que le terme de transfert de masse Γ_v peut s'écrire uniquement en fonction des masses volumiques et des énergies internes spécifiques :

$$\Gamma_v = \tilde{\Gamma}_v(\rho_l, e_l, \rho_v, e_v)$$

De plus, grâce aux choix des fermetures pour \bar{U}_{int} et \bar{H}_{int} , les énergies internes sont constantes :

$$\partial_t(m_v e_v) = 0 \quad \text{et} \quad \partial_t(m_l e_l) = 0 \quad (43)$$

Pour obtenir ce résultat, il faut former l'équation sur l'énergie cinétique de chaque phase en multipliant l'équation de moment par la vitesse phasique et en utilisant l'équation de masse partielle, ce qui donne :

$$\partial_t \left(m_v \frac{u_v^2}{2} \right) = \bar{H}_{int} \Gamma_v \quad \text{et} \quad \partial_t \left(m_l \frac{u_l^2}{2} \right) = -\bar{H}_{int} \Gamma_v \quad (44)$$

La masse totale et l'énergie totale étant conservées, le terme de transfert de masse Γ_v peut en fait être écrit comme une fonction $\bar{\Gamma}_v$ ne dépendant que de m_l (ou m_v) :

$$\begin{aligned} \Gamma_v &= \tilde{\Gamma}_v(\rho_l, e_l, \rho_v, e_v) \\ &= \tilde{\Gamma}_v \left(\frac{m_l}{\alpha_l(t=0)}, \frac{(m_l e_l)(t=0)}{m_l}, \frac{(m_l + m_v)(t=0) - m_l}{\alpha_v(t=0)}, \frac{(m_v e_v)(t=0)}{(m_l + m_v)(t=0) - m_l} \right) \\ &= \bar{\Gamma}_v(m_l) \end{aligned} \quad (45)$$

La conséquence directe de cette remarque est que l'équation sur la masse partielle liquide (i.e. l'équivalent liquide de la deuxième équation de (41)) est indépendante du reste des équations de (41). De plus, une fois cette équation résolutive résolue, les autres équations peuvent être intégrées. Pour cela il faut commencer par le sous-système formé des équations de quantité de mouvement, puis le sous-système formé des équations d'énergie. Le schéma repose donc sur la résolution de

cette équation résolvente sur la masse partielle. Celle-ci est discrétisée de manière implicite sur un pas de temps, fournissant l'équation non-linéaire suivante portant sur $m_l^{n,*}$:

$$m_l^{n,*} = m_l^n - \Delta t \bar{\Gamma}_v(m_l^{n,*}), \quad \text{avec} \quad m_l^{n,*} \in [0, m_l^n + m_v^n]. \quad (46)$$

En pratique, la résolution de cette équation peut être réalisée à l'aide d'une dichotomie.

Une fois $m_l^{n,*}$ calculée, on connaît $\bar{\Gamma}_v(m_l^{n,*})$ et les autres équations peuvent donc être résolues implicitement. Le schéma s'écrit donc :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_l^{n,*} = \alpha_l^n \\ m_l^{n,*} = m_l^n - \Delta t \bar{\Gamma}_v(m_l^{n,*}) \\ m_v^{n,*} = m_l^n + m_v^n - m_l^{n,*} \\ (m_l u_l)^{n,*} = (m_l u_l)^n - \Delta t U_I^{n,*} \bar{\Gamma}_v(m_l^{n,*}) \\ (m_v u_v)^{n,*} = (m_v u_v)^n + (m_l u_l)^n - (m_l u_l)^{n,*} \\ (\alpha_l E_l)^{n,*} = (\alpha_l E_l)^n - \Delta t H_l^{n,*} \bar{\Gamma}_v(m_l^{n,*}) \\ (\alpha_v E_v)^{n,*} = (\alpha_v E_v)^n + (\alpha_l E_l)^n - (\alpha_l E_l)^{n,*} \end{array} \right. \quad (47)$$

En effet, les deux équations de quantité de mouvement forment alors un sous-système fermé qui est en fait un système linéaire de deux équations et à deux inconnues $u_l^{n,*}$ et $u_v^{n,*}$:

$$\begin{pmatrix} (m_l^{n,*} + \delta t \bar{\Gamma}_v(m_l^{n,*})/2) & \delta t \bar{\Gamma}_v(m_l^{n,*})/2 \\ m_l^{n,*} & m_v^{n,*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_l^{n,*} \\ u_v^{n,*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (m_l u_l)^n \\ (m_l u_l + m_v u_v)^n \end{pmatrix} \quad (48)$$

On insiste sur le fait qu'une fois $m_l^{n,*}$ connue, la matrice et le second membre de (48) sont connus. Pour que ce système linéaire accepte une unique solution, il faut que son discriminant soit non nul pour tous les états admissibles. Le discriminant $\Delta_{G,u}$ de la matrice de (48) est :

$$\Delta_{G,u} = m_l^{n,*} m_v^{n,*} + (m_v^{n,*} - m_l^{n,*}) \frac{\delta t \bar{\Gamma}_v(m_l^{n,*})}{2}$$

En utilisant les équations de masse discrètes de (47), celui-ci peut s'écrire en fonction des conditions initiales

$$\Delta_{G,u} = \frac{m_l^n m_v^{n,*} + m_l^{n,*} m_v^n}{2}$$

et il est donc strictement positif si les masses partielles sont strictement positives (ce qui est nécessaire pour que le modèle soit valide). De même, une fois les vitesses $u_l^{n,*}$ et $u_v^{n,*}$ calculées le sous-système composé des deux équations d'énergie est trivial à résoudre en considérant les énergies totales $E_l^{n,*}$ et $E_v^{n,*}$ comme inconnues.

Toute la difficulté du schéma réside donc dans la résolution de l'équation (46). En pratique la fonction

$$m_l^{n,*} \rightarrow \bar{\Gamma}_v(m_l^{n,*})$$

est fortement non-linéaire, elle est *a priori* continue³ mais n'est pas forcément dérivable en tout point. Aucun résultat général n'existe actuellement pour garantir l'existence et l'unicité de la solution de (46). On peut toutefois établir le résultat simple suivant en posant $F(Y) = m_l^n - Y - \Delta t \bar{\Gamma}_v(Y)$. Comme Γ_v s'annule pour $m_l = 0$ ou $m_v = 0$ on a de façon triviale que $F(0) = m_l^n$ et $F(m_l^n + m_v^n) = -m_v^n$. De plus, étant donnée la forme de la fonction Γ_v , si les masses partielles m_φ^n sont strictement positives, alors les masses partielles $m_\varphi^{n,*}$ sont également strictement positives. En effet, étant donné que Γ_v s'annule pour $m_l = 0$ l'équation de masse liquide discrète donne :

$$m_l^n > 0 \quad \text{et} \quad m_l^{n,*} = 0 \Leftrightarrow 0 = \bar{\Gamma}_v(m_l^{n,*}) = \frac{m_l^n}{\Delta t} > 0$$

ce qui est évidemment impossible. La même démonstration peut être utilisée pour la phase vapeur. En définitive, si F est continue et strictement monotone sur $[0, m_l^n + m_v^n]$, alors il existe une unique solution à (46) dans $]0, m_l^n + m_v^n[$. Dans le cas où F est seulement continue, on est assuré d'avoir au moins une solution sur $]0, m_l^n + m_v^n[$, auquel cas un critère de sélection supplémentaire doit être proposé afin de ne retenir qu'une des solutions.

Propriétés du schéma (47).

- Le schéma (47) fournit donc une unique solution $W_v^{n,*}$ sous certaines conditions (suffisantes) portées par les lois d'état thermodynamiques.
- La positivité des masses partielles est assurée. Les taux de présence restant constants, ils restent donc positifs. En ce qui concerne les énergies internes, les équations (43) et les équations de masse garantissent au niveau continu que si les énergies internes spécifiques initiales sont positives, alors les énergies internes spécifiques resteront positives. Malheureusement le schéma ne permet pas de retrouver au niveau discret les équations (44) et les équations (43) ne sont donc pas conservées au niveau discret.
- Le schéma assure la conservation de la masse du mélange, de la quantité de mouvement du mélange et de l'énergie totale du mélange.
- Ce schéma est d'ordre 1.

Remarques.

- Le schéma possède des propriétés intéressantes mais doit encore être amélioré. On peut ainsi chercher à modifier le schéma pour que les vitesses $u_v^{n,*}$ et $u_l^{n,*}$ soient compatibles avec une forme discrète de (44), ce qui permettrait de retrouver (43) au niveau discret.
- D'autres variantes seraient à étudier, notamment celles obtenues en explicitant le terme de normalisation $|\mu_v| + |\mu_l|$.

³La continuité est assurée pour des lois d'état thermodynamiques définies continuellement sur les plans thermodynamique. Cela n'est plus forcément le cas pour des lois d'état tabulées utilisées dans le domaine industriel.

2.4 Eléments de vérification et de validation

L'implémentation de ces schémas de discrétisation dans le code de calcul a été vérifiée de manière classique, en comparant des solutions analytiques aux solutions approchées calculées par le code sur différents maillage. Actuellement, nous n'avons pas de solution analytique non triviale pour le système d'équations complet. Le processus de vérification a donc été réalisé en découpant le système global en plusieurs sous-systèmes, à l'instar du découpage du schéma à pas fractionnaires utilisé. Le découpage est donc le suivant :

- système convectif ;
- terme source de relaxation en pression ;
- terme source de transfert de masse ;
- terme source de relaxation en température ;
- terme source de relaxation en vitesse.

Pour chaque sous-système un ou plusieurs cas test de vérification ont alors été réalisés. Pour le système convectif des problèmes de Riemann ont été utilisés. Etant donné qu'il est difficile de construire une solution d'un problème de Riemann pour le système convectif de (1) en partant des états droits et gauches, le choix a été fait de se donner un état gauche puis de construire les états intermédiaires de la droite vers la gauche en se donnant les conditions de passage au travers de chaque onde. Pour les termes sources, des solutions analytiques simples ont été proposées pour chaque système d'ODE associé. L'ensemble de ces cas ont été présentés dans [44, 47].

Du point de vue de la validation du code, deux principaux cas ont été étudiés [10, 44] :

- un cas de dépressurisation brusque d'une capacité liquide chauffée ;
- un cas de marteau d'eau liquide avec vaporisation.

Ces deux cas sont des transitoires thermohydrauliques rapides dans lesquels il existent de fortes interactions entre la propagation d'onde et les échanges thermodynamiques entre les phases. C'est cas sont représentatifs des applications visées dans le cadre d'études industrielles plus complexes de transitoires rapides dans des écoulements diphasiques eau-vapeur.

3 Les modèles diphasiques homogènes pour la simulation à l'échelle composant

3.1 Références

Mes publications sur le sujet sont [38, 39] ; auxquelles s'ajoute la note technique interne (non publiée) [55]. Mes principaux collaborateurs sur le sujet sont : E. Le Coupanec (ingénieur EDF R&D), O. Touazi (ingénieur EDF R&D) et J.-M. Hérard (ingénieur sénior EDF R&D). J'ai pu également profiter de discussions sur ce sujet avec Philippe Helluy et Sergey Gavriluk.

3.2 Introduction

Les modèles homogènes diphasiques sont très utilisés dans le domaine de la simulation de la cavitation et pour la simulation industrielle à l'échelle composant. La forme générale des modèles homogènes en l'absence de vitesse relative entre les deux phases peut être écrite sur la base du système d'Euler avec équation d'énergie :

$$\begin{cases} \partial_t(\underline{Y}) + U\partial_x(\underline{Y}) + \underline{H}(\underline{Y}, \rho, U, e)\partial_x U = \underline{S}_Y \\ \partial_t(\rho) + \partial_x(\rho U) = 0 \\ \partial_t(\rho U) + \partial_x(\rho U^2 + P) = 0 \\ \partial_t(\rho E) + \partial_x(U(\rho E + P)) = 0 \end{cases} \quad (49)$$

où ρ désigne la masse volumique du mélange, U la vitesse du mélange, $E = e + U^2/2$ l'énergie totale spécifique du mélange, e l'énergie interne spécifique du mélange et P la pression du mélange. Le vecteur \underline{Y} représente un certain nombre de fractions permettant de décrire le mélange des deux phases. La spécificité de chaque modèle vient alors du choix de \underline{Y} , de \underline{S}_Y , de la forme de \underline{H} , et surtout de la loi d'état reliant les paramètres thermodynamiques du mélange et permettant de fermer le système d'équations :

$$\mathcal{F}(\underline{Y}, \rho, e, P) = 0. \quad (50)$$

Etant donnée la structure du système (49), la propriété d'hyperbolicité et l'obtention d'une forme explicite d'entropie sont évidemment directement conditionnées par la loi de fermeture (50) et par celle de \underline{H} .

Dans la section 3.3, nous présentons un modèle homogène pour lequel $\underline{H} = 0$, proposé initialement dans [6] et qui a fait l'objet de la publication [38]. Ce modèle est construit sur la base des premier et second principe de la thermodynamique, et possède de très bonnes propriétés :

- la partie convective du système d'équations aux dérivées partielles associé au modèle est hyperbolique ;
- l'évolution des fractions de mélanges est décrite par une équation de convection avec terme source qui assure leur positivité ;
- la gestion des phases évanescents est naturelle, permettant de traiter simplement l'apparition et la disparition d'une des deux phases.

La section 3.4 est quant à elle dédiée à l'étude de plusieurs schémas numériques de discrétisation des équations de ce modèle. A cette occasion, un travail de vérification du code informatique produit a été réalisé sur la base de problèmes analytiques stationnaire et instationnaire. Ce code informatique découlant de ce travail est d'ores et déjà utilisé pour certaines études industrielles à EDF R&D dans lesquelles des transitoires violents sont considérés.

3.3 Le modèle Barberon-Helluy

On reproduit ci-dessous l'article [38]. Les appels à la bibliographie sont internes à la section 3.3.

1 Introduction

In the nuclear domain, homogeneous models are often used to simulate the steam-water flows in devices such as the core, the steam-generator or other heat exchangers. One can for example cite, among others, the industrial codes THYC (EDF) [aub88, gue03], FLICA (CEA) [tou95] and ATHOS (EPRI) [ath07]. The homogeneous models deal with the flow as a mixture of the two phases. They are based on the Euler system of equations and then involve at least an equation for the mass conservation of the mixture, one for the momentum conservation of the mixture and one for the total energy of the mixture. These three PDE's can be supplemented by additional equations of transport of some fractions (most commonly one equation for the mass fraction of the mixture). The system of equations is then closed by providing an equation of state for the mixture [dow96, fau00] and, if necessary, closure laws for the source terms.

In a practical point of view, the homogeneous models are often obtained from bifluid models [aub88, tou95]. The mixture equations for the mass, momentum and energy are issued from the sum of the corresponding phasic equations of the bifluid model and algebraic closures are proposed to get rid of the remaining phasic equations. If this process seems natural, it leads to some difficulties in defining the entropy of the system. More precisely, the entropy of the mixture is not always the sum of the phasic entropies. An other way of building an homogeneous model starting from a bifluid model has been proposed in [gui05, sau08]. Asymptotic derivation has been performed and the resulting model leads to a model whose entropy is the sum of the phasic entropies. Nevertheless these models make the assumption of pressure equilibrium between the phases.

When no entropy can be exhibited, the second principle of thermodynamics might not hold, which could lead to non-physical behaviours of the model. This point is crucial when focusing on two-phase flows with phase change. In [bar05] a model built directly on the Euler system has been proposed. It is based on the second principle of thermodynamics and on additivity principles. The thermodynamical behaviour of the mixture and the thermodynamical exchanges between phases are then a straightforward consequence of these choices. Moreover, the resulting model is hyperbolic when two sufficient natural conditions hold for the equation of state for the

entropy of each phase: the phasic entropies have to be concave with respect to the phasic specific volume and the phasic internal energy; and they must allow to define a positive thermodynamical temperature through the Gibbs relation.

In the classical homogeneous models, one assumes at least that the pressure equilibrium holds instantaneously ([ath07], [aub88], [tou95], [dow96], [fau00], [gui05], [sau08]). In addition to this hypothesis, the assumption is sometimes made that the mass transfer between the phases is instantaneous, leading to the so-called class of the Homogeneous Equilibrium Models (HEM). But in general, the homogeneous models do not account for the temperature disequilibrium, except in [sau08]. An important point to note is that the model proposed in [bar05] allows to account for the thermodynamical disequilibriums between the phasic temperatures, the phasic pressures and the phasic chemical potentials. In this model, the time-space evolution of these equilibriums is defined by three fractions (the volume, mass and energy fractions), each one being associated with an advection/source equation. The return to equilibrium is determined by the source terms, which are based on six quantities: one equilibrium value for each fraction and three time scales - characteristic of the time to return to equilibrium. The former are obtained from the entropy of the mixture and thus depend on the phasic equations of state, whereas the latter should be specified by the user - on the basis of physical considerations.

Numerical simulations have been performed ([bar05]) using this model. The results of some test cases dedicated to cavitation phenomena show a good behaviour of the model. In these simulations, instantaneous temperature equilibrium has been imposed. This assumption is consistent with the cavitation phenomenon which is often seen as the creation of vapour due to a sudden pressure drop at an almost constant temperature. Our aim in the present paper is to test the behaviour of the model when considering test cases involving the heating of a mixture of steam and water. Indeed, these kinds of tests are representative of some nuclear situations such as: the heating of the primary coolant fluid by the fuel bundles, or the heating of the water in the steam generator device. Hence we do not assume any temperature equilibrium in the sequel.

The simulations are performed with a fractional step method [yan68]. We

first account for the convective part of the system by using classical schemes : the Rusanov scheme [rus61], VFRoe-ncv schemes [mas99, gal96, buf00], and a energy relaxation method based on a VFRoe-ncv scheme [coq98]. The behaviour of these schemes is compared focusing on two Riemann problems described in appendix. The source terms are then taken into account through a straightforward integration which is made possible thanks to the form of the source terms.

The paper is organised as follows. On the basis of the paper [bar05] we first recall the model and its properties. Then, we propose a numerical scheme for the discretization of the model applied to Stiffened Gas equations of state. Eventually, an investigation is carried on an OECD/CNSI test case [csni80].

2 The homogeneous model

2.1 The system of equations

The velocity of the mixture is denoted by U , and since no cinematic disequilibrium is taken into account, U also represents the velocity of each phase. We note : $\rho = 1/\tau$ the volumic mass of the mixture, where τ is the specific volume, $E = e + U^2/2$ the specific total energy of the mixture, e the specific internal energy of the mixture, P the pressure in the mixture. The fractions defining the manner in which the phases are mixed are denoted by $Y = (\alpha, y, z)^\top$ with $0 \leq Y^i \leq 1$, $i = 1..3$. The fraction α is a volumic fraction, y a mass fraction, and z an energetic fraction. We assume that all these quantities fulfil the mass conservation equation, the momentum conservation equation and the equation for the total energy conservation. Moreover, we assume that the fractions are advected with the velocity U and are subject

to source terms Γ_Y . We get then the following system of equations:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (Y) + U \frac{\partial}{\partial x} (Y) = \Gamma_Y \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho U) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U^2 + P) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U E + U P) = 0. \end{array} \right. \quad (1)$$

Obviously, this system is not in a closed form, the equation of state for the mixture pressure $P = \mathcal{P}(Y, \rho, e)$ and the source terms $\Gamma_Y = (\Gamma_Y^1, \Gamma_Y^2, \Gamma_Y^3)^\top$ must be specified. This will be achieved in the following sections.

The entropy of the system (1) is a concave function s depending on Y , τ and e and is solution of the PDE:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (s) - P \frac{\partial}{\partial e} (s) = 0. \quad (2)$$

This constraint allows to ensure that s is advected with the velocity U without source terms (i.e. $\Gamma_Y = 0$). Obviously, the entropy is not unique and several forms might be proposed.

The differential of s reads:

$$ds(Y, \tau, e) = \frac{\partial}{\partial Y} (s) dY + \frac{\partial}{\partial \tau} (s) d\tau + \frac{\partial}{\partial e} (s) de,$$

or in another form:

$$\left(\frac{\partial}{\partial e} (s) \right)^{-1} ds(Y, \tau, e) = \left(\frac{\partial}{\partial e} (s) \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial Y} (s) dY + \left(\frac{\partial}{\partial e} (s) \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \tau} (s) d\tau + de.$$

The classical Gibbs relation :

$$T ds = de + P d\tau + T \frac{\partial}{\partial Y} (s) dY,$$

can be retrieved by using (2) and by defining the thermodynamical temperature T and pressure P of the mixture through the entropy s :

$$T^{-1} = \frac{\partial}{\partial e} (s), \quad (3)$$

$$P = T \frac{\partial}{\partial \tau} (s) = \left(\frac{\partial}{\partial e} (s) \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \tau} (s). \quad (4)$$

In fact, the caloric law (definition of the temperature) and the equation of state for the pressure are fully defined by the definition of the mixture entropy s . This will be achieved in the section 2.3. We now turn to the specification of the source terms Γ_Y which are obtained on the basis of the second law of thermodynamics.

2.2 Entropic characterisation of the source terms

We now use the second law of the thermodynamics to specify admissible forms for the source terms Γ_Y . By using the equations (1) and (2), it can be shown that when considering regular solutions the mixture entropy $s(Y, \tau, e)$ is ruled by the equation:

$$\frac{\partial}{\partial t} (s) + U \frac{\partial}{\partial x} (s) = \sum_i \frac{\partial}{\partial Y^i} (s) \Gamma_Y^i. \quad (5)$$

In order to ensure the increase of the entropy along all the streamlines, s and Γ_Y must be chosen such that:

$$\sum_i \frac{\partial}{\partial Y^i} (s) \Gamma_Y^i \geq 0, \forall (Y, \tau, e).$$

This specification remains general. We now choose a particular form for the source terms Γ_Y . For each fraction Y^i , we assume a classical ‘‘exponential’’ return to equilibrium form defined by a characteristic time scale $\lambda^i \geq 0$ and an equilibrium value $Y_{eq}^i(\tau, e)$:

$$\Gamma_Y^i = \frac{Y_{eq}^i(\tau, e) - Y^i}{\lambda^i}, \quad (6)$$

This kind of form of source term is widely used in the literature, especially for homogeneous models [dow96, fau00]. Given the form (6) and using the property of the concavity of the entropy, we get:

$$\sum_i \frac{\partial}{\partial Y^i} (s) \Gamma_Y^i \geq \frac{s(Y_{eq}(\tau, e), \tau, e) - s(Y, \tau, e)}{\lambda^i}$$

As a consequence, the increase of the entropy is ensured if the equilibrium fractions are defined such that:

$$\forall(\tau, e), s(Y_{eq}(\tau, e), \tau, e) \geq s(Y, \tau, e).$$

In [bar05], the authors proposed to define Y_{eq} as the fractions realising the maximum of the entropy for a given specific volume τ and a given internal energy e , in other words:

$$s(Y_{eq}(\tau, e), \tau, e) = \max_{\{0 \leq Y \leq 1\}} [s(Y, \tau, e)]. \quad (7)$$

This definition of Y_{eq} is of course in agreement with the second law of thermodynamics.

It is an important point to be noted that the source terms defined by (6) and (7) ensure the positivity of the fractions.

At this point of the paper, the entropy of the mixture s allows to close the system. The time scales λ^i are not defined but they should be specified by the user. Let us turn to the explicit choice of the entropy s .

2.3 Definition of the mixture entropy

We define now the entropy $s(Y, \tau, e)$ for the mixture following the approach of [bar05], but other choices might be possible.

The volume fraction $\alpha_l = \alpha$ represents the fraction of volume locally occupied by the liquid phase and, thanks to the volume conservation, $\alpha_v = 1 - \alpha$ represents the fraction of volume occupied by the vapour. As a consequence, if ρ_l and ρ_v are respectively the liquid and vapour volumic mass, the volumic mass of the mixture is then:

$$\rho = \alpha\rho_l + (1 - \alpha)\rho_v. \quad (8)$$

For each phase $k = l, v$ the mass fraction is defined as :

$$y_k = \alpha_k \rho_k / \rho,$$

and the energetic fraction as:

$$z_k = y_k e_k / e.$$

Due to the relation (8), we have $y_l + y_v = 1$ and we then note $y = y_l$. We impose $z_l + z_v = 1$ and we note $z = z_l$. This is in fact equivalent to assume that the internal energy of the mixture is the sum of the phasic internal energies weighted by the mass fractions:

$$e = y e_l + (1 - y) e_v. \quad (9)$$

We assume now that the thermodynamical behaviour of each phase is given by a phasic entropy $s_k = s_k(\tau_k, e_k)$. Each phasic entropy allows to define a phasic caloric law

$$T_k^{-1} = \frac{\partial}{\partial e_k} (s_k), \quad (10)$$

and a phasic pressure law

$$P_k = T_k \frac{\partial}{\partial \tau_k} (s_k), \quad (11)$$

in agreement with the definitions (3) and (4). We then write the mixture entropy as the mixing of the two phasic entropies:

$$s(\tau, e, Y) = y s_l(\tau_l, e_l) + (1 - y) s_v(\tau_v, e_v) = y s_l\left(\frac{\alpha}{y} \tau, \frac{z}{y} e\right) + (1 - y) s_v\left(\frac{1 - \alpha}{1 - y} \tau, \frac{1 - z}{1 - y} e\right). \quad (12)$$

This proposition is classical for mixtures of non-miscible phases, since the entropy of the union of two systems is the addition of the entropy of each system. Moreover, if each entropy $s_k = s_k(\tau_k, e_k)$ is concave with respect to (τ_k, e_k) , then the mixture entropy (12) is also concave, which is mandatory to define a unique Y_{eq} using (7).

Once the phasic entropy functions $(\tau_k, e_k) \rightarrow s_k(\tau_k, e_k)$ and the time scales λ_i are chosen, the whole system is closed and we can then study its properties.

2.4 Properties of the model

Given the mixture entropy (12), the mixture temperature (3) and the mixture pressure (4) can be explicitly written in term of the phasic temperatures (10) and pressures (11):

$$P = \frac{\alpha T}{T_l} P_l + \frac{(1-\alpha)T}{T_v} P_v \quad \text{and} \quad \frac{1}{T} = \frac{z}{T_l} + \frac{1-z}{T_v}. \quad (13)$$

The mixture temperature is a geometric barycentre of the phasic temperatures. Moreover, the pressure is not a barycentre of the phasic pressures, excepted in the single-phase situations which is a degenerate situation. Indeed it can be written:

$$P = \frac{\frac{\alpha}{T_l} P_l + \frac{(1-\alpha)}{T_v} P_v}{\frac{z}{T_l} + \frac{1-z}{T_v}}.$$

The equilibrium fractions are implicitly defined by the maximisation of the mixture entropy (7). When the maximum is not reached on the boundary of the domain, i.e. when $0 < Y_{eq} < 1$, the gradient of s with respect to Y evaluated at $Y = Y_{eq}$ equals zero:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} (s)|_{Y=Y_{eq}} = \frac{\partial}{\partial y} (s)|_{Y=Y_{eq}} = \frac{\partial}{\partial z} (s)|_{Y=Y_{eq}} = 0.$$

By using the definition (12), this yields:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} (s)|_{Y=Y_{eq}} = 0 \Leftrightarrow \tau \left(\frac{P_l}{T_l} - \frac{P_v}{T_v} \right) = 0, \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} (s)|_{Y=Y_{eq}} = 0 \Leftrightarrow e \left(\frac{1}{T_l} - \frac{1}{T_v} \right) = 0, \quad (15)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} (s)|_{Y=Y_{eq}} = 0 \Leftrightarrow - \left(\frac{\mu_l}{T_l} - \frac{\mu_v}{T_v} \right) = 0, \quad (16)$$

with the chemical potentials $\mu_k = e_k + P_k \tau_k - T_k s_k$. The fraction Y_{eq} is thus the solution of the non-linear system:

$$\begin{cases} T_l(\tau, e, Y_{eq}) = T_v(\tau, e, Y_{eq}) \\ P_l(\tau, e, Y_{eq}) = P_v(\tau, e, Y_{eq}) \\ \mu_l(\tau, e, Y_{eq}) = \mu_v(\tau, e, Y_{eq}). \end{cases} \quad (17)$$

Note that when considering stiffened gas EOS, the system (17) can have a solution with one or two equilibrium fractions equal to zero and the other lying in $]0, 1[$. Such a case is described in appendix and more detailed explanations can be found in [jun13].

Remark. The fraction z is related to the temperature disequilibrium (15) and the fraction y to the potential disequilibrium (16) (and models the mass transfer). For a perfect gas we have $P_k/T_k = \tau_k R/M_k$, where R is the universal perfect gas constant R and where the molar masses M_k are such that $M_l = M_v = M$ when considering steam and liquid water. The equilibrium (14) related to the fraction α can thus be written using the phasic specific volumes τ_k :

$$(\tau_l - \tau_v) = 0$$

and corresponds to a specific volume equilibrium.

The sound speed c for the system (1) is defined as:

$$c^2 = -\tau^2 \frac{\partial}{\partial \tau} (P)|_s = -\tau^2 \frac{\partial}{\partial \tau} (P)|_e + \tau^2 P \frac{\partial}{\partial e} (P)|_\tau,$$

and using the formula (13) it can be written:

$$\begin{aligned} -\frac{c^2}{T\tau^2} &= \frac{1}{y} (-\alpha, Pz) \cdot s_l'' \cdot \begin{pmatrix} -\alpha \\ Pz \end{pmatrix} \\ &+ \frac{1}{1-y} (-(1-\alpha), P(1-z)) \cdot s_v'' \cdot \begin{pmatrix} -(1-\alpha) \\ P(1-z) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (18)$$

where s_k'' stands for the Hessian matrix of the phasic entropies $(\tau_k, e_k) \rightarrow s_k(\tau_k, e_k)$. We recall that the phasic sound speeds are defined as:

$$\frac{c_k^2}{T_k \tau_k^2} = -[-1, P] \cdot s_k'' \cdot [-1, P]^\top \quad (19)$$

It must be emphasised that the mixture celerity c is thus not a barycentre of the phasic celerities c_k . Some empiric formulations and some experiments tend to confirm this behaviour for c [kar58, wal69, liu13]. Moreover, two natural sufficient conditions can be expressed for the celerity c to be defined in the real space. If :

- each phasic entropy is concave with respect to the phasic specific volume and to the phasic specific internal energy,

- and the mixture temperature is positive,

then c^2 is non-negative, and hence c is positive. These conditions are sufficient and not necessary. With the present model, the mixture sound speed can be defined even if one of the phasic celerities is not defined and/or if one phasic temperature is not positive.

The eigenstructure of system (1) is the same as the eigenstructure of the Euler system. The fields associated with the fractions Y^i are linearly degenerated and the corresponding eigenvalue is U . The mass, momentum, energy sub-system yields the eigenvalues U and $U \pm c$. The former is associated with a linearly degenerated field, while the latter are genuinely non-linear waves.

Thanks to the form of the equations for the fractions Y and thanks to the equilibrium fractions Y_{eq} which, by definition, lie in $[0, 1]$, the positivity of the fractions is ensured.

3 Numerical schemes

We propose herein a finite volume scheme to simulate the model defined in the previous section. The general scheme relies on a classical fractional step method [yan68] : we first account for the convective part of the system (1) and then the source terms for the fractions are discretised involving the computation of the equilibrium fractions Y_{eq} .

3.1 The Stiffened Gas EOS

In order to avoid numerical difficulties and to diminish computational cost in the computation of the equilibrium fractions, we focus on the stiffened gas equations of state. This class of equation of state allows to obtain rather satisfactory behaviour for the liquid phase, and it degenerates naturally to the perfect gas equation of state for the steam. The phasic entropies are then:

$$s_k(\tau_k, e_k) = C_{v,k} \ln \left((e_k - \Pi_k \tau_k) \tau_k^{\gamma_k - 1} \right) + s_k^0, \quad (20)$$

where

- $C_{v,k}$ is the calorific capacity,

- $-\Pi_k$ is the minimal pressure (the phasic entropy and the phasic sound speed are defined for $P_k > -\Pi_k$; and the phasic temperature is positive for $P_k > -\Pi_k$),
- γ_k is the adiabatic coefficient,
- s_k^0 is the reference entropy.

The phasic pressure and phasic temperature laws are respectively given by (11) and (10), and for stiffened gas it yields:

$$P_k(\tau_k, e_k) = \frac{e_k}{\tau_k}(\gamma_k - 1) - \Pi_k \gamma_k, \quad \text{or} \quad P_k(\tau, e, Y) = \frac{z_k}{\alpha_k} \frac{e}{\tau} (\gamma_k - 1) - \Pi_k \gamma_k, \quad (21)$$

$$T_k(\tau_k, e_k) = \frac{e_k - \Pi_k \tau_k}{C_{v,k}}, \quad \text{or} \quad T_k(\tau, e, Y) = \frac{\frac{z_k}{y_k} e - \Pi_k \frac{\alpha_k}{y_k} \tau}{C_{v,k}}. \quad (22)$$

The ‘‘conservative’’ thermodynamical variables of the system are (Y, τ, e) . In the previous section the thermodynamical pressure has been defined using these variables, so that the calculus of (Y, τ, P) is straightforward when (Y, τ, e) is known. In general, the inverse variables change $(Y, \tau, P) \rightarrow (Y, \tau, e)$ is not straightforward. In the particular case of the Stiffened Gas EOS, an explicit variable change can be exhibited. By replacing the definition of the phasic pressure (21) and the phasic temperature (22) in the the definition of the mean pressure (13), a second degree polynomial in e can be formed:

$$A(Y, \tau, P) e^2 + B(Y, \tau, P) e + C(Y, \tau, P) = 0, \quad (23)$$

with the coefficients :

$$A(Y, \tau, P) = z(1 - z) \frac{1}{\tau} [\alpha C_{v,1}(\gamma_1 - 1) + (1 - \alpha) C_{v,2}(\gamma_2 - 1)],$$

$$\begin{aligned} B(Y, \tau, P) = & -Pz(1 - z)(yC_{v,1} + (1 - y)C_{v,2}) \\ & - \alpha C_{v,1} [(1 - \alpha)z(\gamma_1 - 1)\Pi_2 + y(1 - z)\gamma_1\Pi_1] \\ & - (1 - \alpha)C_{v,2} [\alpha(1 - z)(\gamma_2 - 1)\Pi_1 + (1 - y)z\gamma_2\Pi_2], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C(Y, \tau, P) = & \alpha(1 - \alpha)\Pi_1\Pi_2\tau [yC_{v,1}\gamma_1 + (1 - y)C_{v,2}\gamma_2] \\ & + P\tau [(1 - \alpha)yzC_{v,1}\Pi_2 + \alpha(1 - y)(1 - z)C_{v,2}\Pi_1]. \end{aligned}$$

For any non-negative pressure, $P > 0$, this polynomial has always two non-negative solutions, and the smallest solution equals zero in the case of perfect gases $\Pi_k = 0$. We thus retain the greatest solution as the unique physical solution. When the pressure is negative, no general result has been exhibited. Hence, if (Y, τ, P) is known with $P > 0$, (Y, τ, e) can be explicitly computed. This variable change will be useful in the convection step and in the computation of an analytical solution through the Hugoniot curve (see appendix).

3.2 The convection step

The convective part of the system (1) is based on the Euler system of equations and a lot of Finite Volume schemes can be found in the literature to obtain numerical approximations of its solutions. The main difficulty here lies in the complexity of the equation of states. A strong jump of the fractions Y may lead to an important jump in the thermodynamical functions which may lead to numerical difficulties on coarse meshes as described in [gal02a]. In order to achieve this step, four different first-order schemes have been tested here:

- (i) the classical Rusanov scheme [rus61];
- (ii) the VFRoe-ncv scheme [buf00] using the variables (Y, τ, U, e) with the entropic correction [hel10];
- (iii) the VFRoe-ncv scheme using the variables (Y, τ, U, P) [buf00] with the entropic correction [hel10];
- (iv) the VFRoe-ncv scheme using the variables (Y, τ, U, P) and the energy relaxation method [coq98, gal02a].

Despite its poor accuracy, the Rusanov scheme remains a reference scheme because it is very easy to implement, and because it is very robust. The VFRoe-ncv schemes form a class of accurate schemes. Depending on the choice of the non-conservative variables, interesting properties can be obtained [gal96, gal02a, gal03]. In particular, when choosing U and P , it allows to preserve unsteady contact discontinuity for a specific class of EOS [gal02b]. The last scheme (iv) is based on the VFRoe-ncv scheme but it uses a relaxation of the EOS that is very convenient for the systems that possess

a complex EOS.

We set $W = (Y, \rho, \rho U, \rho E)$ and $\mathcal{F} : W \rightarrow (\rho Y, \rho U, \rho U^2 + P, \rho U E + U P)$. For any quantity Φ , Φ_i^n stands for the Finite Volume [eym00] approximation of Φ in the cell i at time t^n . For the sake of simplicity, we assume that all the cells have the same size Δx . The time step $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$ is chosen in agreement with a CFL condition that depends on the scheme. For an approximation W_j^n of W at time t^n and in the cell j , the approximation $W_j^{n+1,*}$ at the end of the convection step is computed by the scheme:

$$W_i^{n+1,*} - W_i^n + \frac{\Delta x}{\Delta t^n} (F(W_{i+1}^n, W_i^n) - F(W_i^n, W_{i-1}^n)) = 0, \quad (24)$$

$F(.,.)$ is the two-point numerical flux and it is described for each scheme in the sections below.

3.2.1 The Rusanov scheme

For the Rusanov scheme, we have:

$$F(W_l, W_r) = \frac{1}{2} (\mathcal{F}(W_l) + \mathcal{F}(W_r)) - \frac{\max(\Lambda_r, \Lambda_l)}{2} (W_r - W_l), \quad (25)$$

where Λ_r (resp. Λ_l) denotes the spectral radius of the convection matrix $\nabla_W \mathcal{F}$ at $W = W_r$ (resp. $W = W_l$). The time step Δt^n must fulfil the CFL constraint:

$$\frac{\Delta t^n}{\Delta x} \max(\Lambda_r, \Lambda_l) < 1/2.$$

3.2.2 The VFRoe-ncv scheme

Let us note V a set of variables such that a variable change Φ (diffeomorphism) exists with: $W = \Phi(V)$ and $V = \Phi^{-1}(W)$. For regular solutions, the convective part of the system (1) can be written in a non-conservative form using the variable V :

$$\frac{\partial}{\partial t} (V) + A(V) \frac{\partial}{\partial x} (V) = 0,$$

where $A = (\nabla_V \Phi)^{-1} (\nabla_W \mathcal{F}) (\nabla_V \Phi)$ is the convection matrix. The numerical flux for the VFRoe-ncv scheme then reads:

$$F(W_l, W_r) = \mathcal{F}(\Phi(\mathcal{V}(x/t = 0, \Phi^{-1}(W_l), \Phi^{-1}(W_r)))), \quad (26)$$

where $\mathcal{V}(x/t, V_l, V_r)$ is the exact solution of the Riemann problem associated with the system:

$$\frac{\partial}{\partial t}(V) + A(\bar{V})\frac{\partial}{\partial x}(V) = 0, \text{ with } \bar{V} = (V_l + V_r)/2 \quad (27)$$

and with the left state V_l and the right state V_r . The time step Δt^n must fulfil:

$$\frac{\Delta t^n}{\Delta x} \Lambda_{l,r} < 1/2.$$

where $\Lambda_{l,r}$ is the spectral radius of $A(\bar{V})$.

The scheme using the flux (26) can converge towards a wrong solution because of the occurrence of non-entropic shocks in the fan of a rarefaction wave that crosses $x/t = 0$. In order to ensure the convergence towards the right solution a simple entropic correction has been proposed in [hel10]. It consists in modifying the flux (26) by adding a diffusive term:

$$F(W_l, W_r) = \mathcal{F}(\Phi(\mathcal{V}(x/t = 0, \Phi^{-1}(W_l), \Phi^{-1}(W_r)))) - \frac{\delta}{2}(W_r - W_l). \quad (28)$$

The correction coefficient δ is equal to : $\delta = \min(-(U + c)_l, (U + c)_r)$ when $(U + c)_l < 0$ and $(U + c)_r > 0$; $\delta = \min(-(U - c)_l, (U - c)_r)$ when $(U - c)_l < 0$ and $(U - c)_r > 0$; otherwise $\delta = 0$. Hence the additional diffusive term is activated only if necessary, and does not decrease the global accuracy of the scheme.

In the sequel we have chosen two different sets of variables for V , leading to two different schemes. The first choice $V = (Y, \tau, U, e)$ uses the ‘‘conservative’’ variables. The resulting convection matrix has a lot of non-zero terms with a complex expression. Whereas with the second choice, $V = (Y, \tau, U, P)$, the convection matrix is more sparse and the expressions associated with the solution of the linearised Riemann problem (27) are simpler. Moreover, it has been shown in [gal02b] that choosing U and P in the set a variables V ensure the preservation of an unsteady contact discontinuity, provided that the equation of state is of the form:

$$\rho e = \rho \mathcal{G}_1(P) + \rho \alpha \mathcal{G}_2(P) + \rho y \mathcal{G}_3(P) + \rho z \mathcal{G}_4(P) + \mathcal{G}_5(P).$$

Unfortunately, in the present case, the internal energy (23) can not be written in the form above.

An important point to be quoted is that it is mandatory to express the internal energy with respect to (Y, τ, P) (23) in order to compute (26) for the choice $V = (Y, \tau, U, P)$.

3.2.3 The VFRoe-ncv scheme with energy relaxation

This scheme is based on a VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) scheme [buf00] with a method of relaxation for the energy [coq98] that allows to account for complex EOS. In [gal02a] the complex EOS is replaced by a perfect gas EOS and the pressure must then remain positive. With the complex EOS described in the section above, the pressure may become negative and the scheme [gal02a] should be modified by introducing an other parameter Γ to replace the perfect gas EOS by a stiffened gas EOS.

As in [gal02a] we define Γ such that:

$$\Gamma > \sup_{(\tau, e)} \left(1 + \tau \frac{\partial}{\partial e} (P) \right) \quad \text{and} \quad \Gamma > \sup_{(\tau, e)} \left(-\frac{\tau}{P} \frac{\partial}{\partial \tau} (P) + \tau \frac{\partial}{\partial e} (P) \right).$$

A modified energy ϵ is introduced:

$$\epsilon = e - \left(\tau \frac{P}{\Gamma - 1} \right)$$

as well as the system:

$$\frac{\partial}{\partial t} (W^\#) + \frac{\partial}{\partial x} (\mathcal{F}^\#(W^\#)) = 0, \quad (29)$$

with

$$W^\# = (\rho Y, \rho, \rho U, \frac{\rho U^2}{2} + \frac{P}{\Gamma - 1}, \rho \epsilon)$$

and

$$\mathcal{F}^\#(W^\#) = (\rho U Y, \rho U, \rho U^2 + P, U \frac{\rho U^2}{2} + U \frac{\Gamma P}{\Gamma - 1}, \rho U \epsilon).$$

The system (29) corresponds to the system (1) (without the source terms) for a perfect gas EOS with parameter Γ , supplemented by an advection equation for ϵ .

If $F_j^{\#,VFRoe}(W_l^\#, W_r^\#)$, $j = 1..5$, stands for the j^{th} component of the VFRoe-ncv $(Y, \tau, U, P, \epsilon)$ flux described above (26) for the system (29), F_j the j^{th} component of flux corresponding to the Coquel-Perthame energy relaxation scheme is:

$$\begin{aligned} F_1(W_l, W_r) &= F_1^{\#,VFRoe}(W_l^\#, W_r^\#), \\ F_2(W_l, W_r) &= F_2^{\#,VFRoe}(W_l^\#, W_r^\#), \\ F_3(W_l, W_r) &= F_3^{\#,VFRoe}(W_l^\#, W_r^\#), \\ F_4(W_l, W_r) &= F_4^{\#,VFRoe}(W_l^\#, W_r^\#) + F_5^{\#,VFRoe}(W_l^\#, W_r^\#). \end{aligned}$$

Two important points must be emphasised :

- (i) this scheme does not need an entropy correction, the fluxes $F^{VFRoe}(W_l, W_r)$ are computed with (26) and it is not mandatory to use the fluxes (28);
- (ii) the computation of the internal energy with respect to (Y, τ, U, P) (23) is not needed (this is the case for the VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) without energy relaxation, see the section 3.2.2).

3.3 The source terms step

The source terms of the system (1) are accounted for by discretising the system of EDO:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha) = \frac{\alpha_{eq}(\tau, e) - \alpha}{\lambda^{(1)}} \\ \frac{\partial}{\partial t}(y) = \frac{y_{eq}(\tau, e) - y}{\lambda^{(2)}} \\ \frac{\partial}{\partial t}(z) = \frac{z_{eq}(\tau, e) - z}{\lambda^{(3)}} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho U) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) = 0 \end{array} \right. \quad (30)$$

We first remark that it can be written in an equivalent manner:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha(t)) = \frac{\alpha_{eq}(\tau(0), e(0)) - \alpha(t)}{\lambda^{(1)}(t)} \\ \frac{\partial}{\partial t} (y(t)) = \frac{y_{eq}(\tau(0), e(0)) - y(t)}{\lambda^{(2)}(t)} \\ \frac{\partial}{\partial t} (z(t)) = \frac{z_{eq}(\tau(0), e(0)) - z(t)}{\lambda^{(3)}(t)} \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho(t)) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (U(t)) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (e(t)) = 0 \end{array} \right. \quad (31)$$

It can thus be noticed that if the parameters $\lambda^{(j)}$ are constant, the system (31) can be integrated exactly. We then approach system (31) by replacing $\lambda^{(j)}(t)$ by its value $\lambda^{(j)}(0)$. It yields for the fractions:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha(t)) = \frac{\alpha_{eq}(\tau(0), e(0)) - \alpha(t)}{\lambda^{(1)}(0)} \\ \frac{\partial}{\partial t} (y(t)) = \frac{y_{eq}(\tau(0), e(0)) - y(t)}{\lambda^{(2)}(0)} \\ \frac{\partial}{\partial t} (z(t)) = \frac{z_{eq}(\tau(0), e(0)) - z(t)}{\lambda^{(3)}(0)} \end{array} \right. \quad (32)$$

The numerical approximation W^{n+1} is the exact solution of the system (32) at time $t = \Delta t$ and with the initial condition $W^{n+1,*}$, the values obtained after the convection step. The final approximation W^{n+1} then reads:

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha^{n+1} = e^{(-\Delta t/\lambda^{(1),n+1,*})} \alpha^{n+1,*} - \alpha_{eq}^{n+1,*} (e^{(-\Delta t/\lambda^{(1),n+1,*})} - 1); \\ y^{n+1} = e^{(-\Delta t/\lambda^{(2),n+1,*})} y^{n+1,*} - y_{eq}^{n+1,*} (e^{(-\Delta t/\lambda^{(2),n+1,*})} - 1); \\ z^{n+1} = e^{(-\Delta t/\lambda^{(3),n+1,*})} z^{n+1,*} - z_{eq}^{n+1,*} (e^{(-\Delta t/\lambda^{(3),n+1,*})} - 1); \\ \rho^{n+1} = \rho^{n+1,*} \\ U^{n+1} = U^{n+1,*} \\ e^{n+1} = e^{n+1,*} \end{array} \right. \quad (33)$$

It now remains to compute the equilibrium fractions α_{eq} , y_{eq} and z_{eq} for a given couple (τ, e) . In the particular case of the stiffened gas EOS, the non-linear system (17) for Y_{eq} can be reduced to a resolvent equation on the

fraction α_{eq} . Indeed, the temperature equilibrium $T_1(\tau, e, Y_{eq}) = T_2(\tau, e, Y_{eq})$ gives an explicit expression of z_{eq} with respect to α_{eq} :

$$z_{eq}(\alpha_{eq}) = \frac{\alpha_{eq}(\gamma_2 - 1) - \alpha_{eq}(1 - \alpha_{eq})(\Pi_2\gamma_2 - \Pi_1\gamma_1)\tau/e}{\alpha_{eq}(\gamma_2 - 1) + (1 - \alpha_{eq})(\gamma_1 - 1)}.$$

and the pressure equilibrium $P_1(\tau, e, Y_{eq}) = P_2(\tau, e, Y_{eq})$ gives an explicit expression of y_{eq} with respect to α_{eq} and z_{eq} :

$$y_{eq}(\alpha_{eq}, z_{eq}) = \frac{(ez_{eq} - \Pi_1\alpha_{eq})/C_{v,1}}{(ez_{eq} - \Pi_1\alpha_{eq})/C_{v,1} + (e(1 - z_{eq}) - \Pi_1(1 - \alpha_{eq}))/C_{v,2}}.$$

Finally, the equilibrium of the chemical potentials can then be written as a non-linear equation on α_{eq} :

$$\mu_1(\tau, e, \alpha_{eq}, y_{eq}(\alpha_{eq}, z_{eq}(\alpha_{eq})), z_{eq}(\alpha_{eq})) = \mu_2(\tau, e, \alpha_{eq}, y_{eq}(\alpha_{eq}, z_{eq}(\alpha_{eq})), z_{eq}(\alpha_{eq})). \quad (34)$$

In practice, the equation (34) is solved using a dichotomy algorithm.

For more complex EOS it could be more convenient to compute the equilibrium fractions by using definition (7) and an optimisation algorithm instead of solving (17).

4 Numerical simulations

4.1 Comparison of the behaviour of the convection schemes

We first verify the numerical schemes of the section 3.2 by using the two Riemann problems described in appendix.

4.1.1 Test case with initial conditions of table (13)

The approximations obtained by the four schemes have been compared with the analytical solution (see the appendix for details) in term of the L_1 error :

$$err(\phi, T) = \frac{\sum_{i=1}^N |\phi^{approx}(T, x_i) - \phi^{exact}(T, x_i)|}{\sum_{i=1}^N |\phi^{exact}(T, x_i)|}, \quad (35)$$

where N stands for the number of cells on $[0, 1]$, x_i is the centre of the cell i and T is the final time (here $T = 0.001$ s). The CFL number is equal to 0.45, except in the first time steps where it increases from 0.05 to 0.45. The mesh size is uniform $\Delta x = 1/N$, and different values for N have been used: $N = \{100, 500, 1000, 5000, 10000, 50000, 100000\}$. Due to the important oscillations observed in the approximations of the VFRoe-ncv (Y, τ, U, e) scheme for coarse meshes, it has been necessary to increase the number of cells to $N = \{200000, 500000, 1000000\}$ in order to recover the asymptotic convergence rate. These oscillations are stable in L_1 -norm and L^∞ -norm with respect to the mesh size. On coarse meshes, $N < 100000$ for the present test case, they appear in the ghost wave region and in front of the discontinuities. The error (35) has been plotted on figure (1). It can be seen that we get the expected convergence rate of 1/2 due to the presence of the contact wave [gal02a].

The approximations are plotted on figure (2), (3) and (4) for respectively $N = 1000$, $N = 100000$ and $N = 1000000$ with a zoom on the ghost wave location. Numerical approximations obtained with the four schemes contain perturbations around the expected ghost-wave except for the fractions Y . VFRoe-ncv (Y, τ, U, e) and Rusanov schemes are indeed sensitive whereas the two VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) provide better L^∞ estimates. Concerning the preservation of the unsteady contact discontinuity for U and P , the two latter schemes have a satisfactory behaviour even if the EOS does not allow an exact preservation. However, the results obtained with the VFRoe-ncv (Y, τ, U, e) exhibit strong peaks and/or oscillations in the vicinity of the contact wave at the front location of the shock, in particular on coarse meshes, which explains the very poor accuracy for U , ρ and P . Nevertheless the magnitude of the peaks and oscillations decreases when the mesh size decreases.

The computational efficiency of the different schemes has been investigated by plotting the error (35) with respect to the CPU time in seconds. The results can be seen on figure (5). The first remark is that the Rusanov scheme has a very poor efficiency in comparison with the VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) schemes (with or without the energy relaxation). Nevertheless, it remains interesting versus the VFRoe-ncv (Y, τ, U, e) scheme for *coarse* meshes. Despite its poor accuracy on coarse meshes (except for α), the latter is quite efficient on very fine meshes. The two VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) have very similar performances, with a slight advantage for the energy relax-

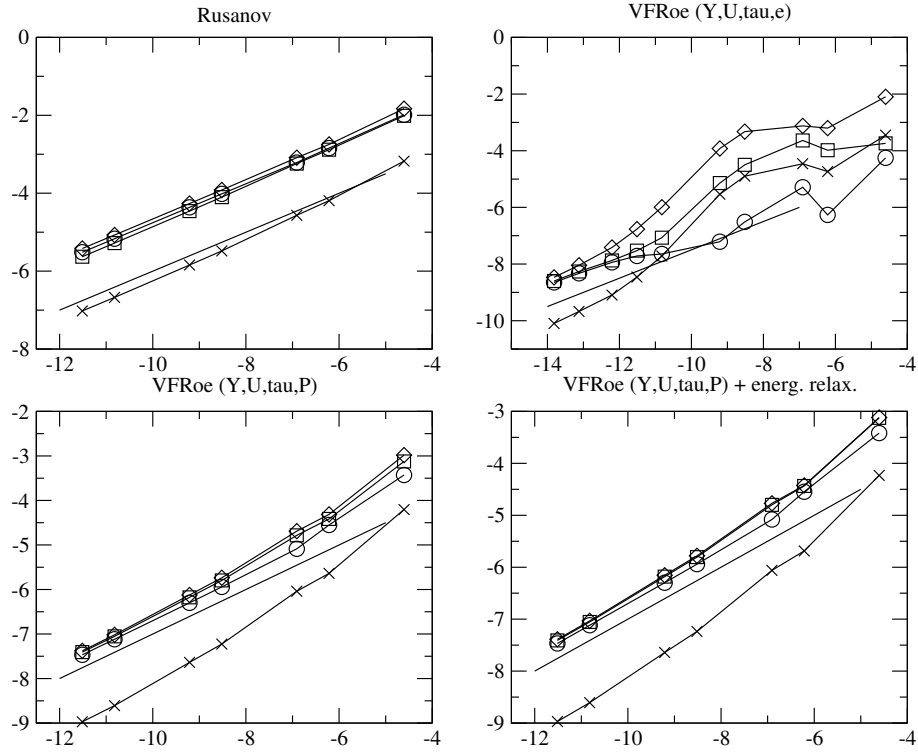


Figure 1: Convergence curves for the test of the section 4.1.1, logarithm of the error (35) versus the logarithm of the mesh size. The meshes contain respectively 100, 500, 1000, 5000, 10000, 50000 and 100000 cells. Additional meshes with 200000, 500000 and 1000000 have been used for the VFRoe-ncv (Y, τ, U, e) scheme. The circles correspond to the fractions, the square to the density, the diamond to the velocity and the "X" to the pressure. The plain line represents the slope 1/2.

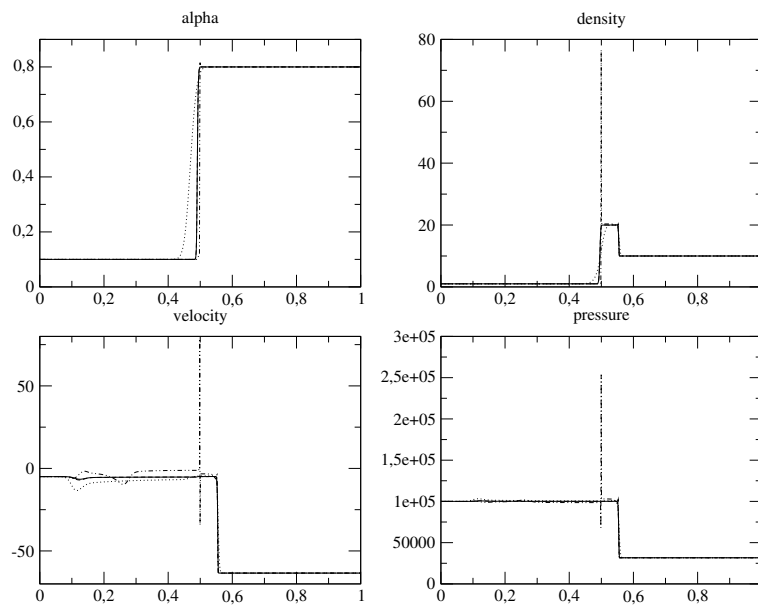


Figure 2: Approximated solutions for $N = 1000$ obtained with: Rusanov (dot), VFroe-ncv (Y, τ, U, e) (dot-dash), VFroe-ncv (Y, τ, U, P) (dash), and VFroe-ncv (Y, τ, U, P) with energy relaxation (plain line).

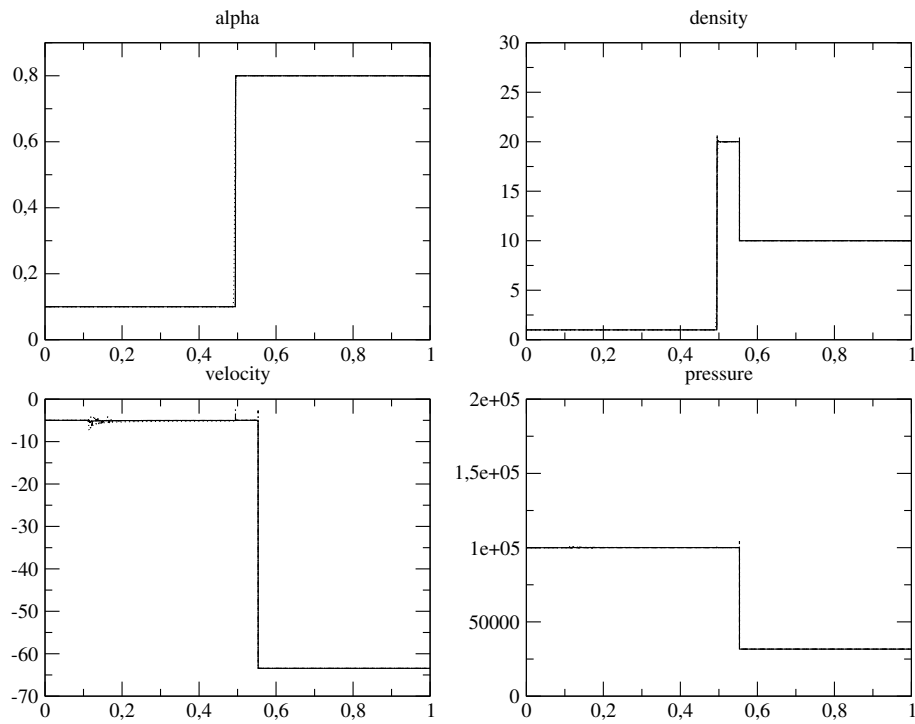


Figure 3: Approximated solutions for $N = 100000$ obtained with: Rusanov (dot), VFRoe-ncv (Y, τ, U, e) (dot-dash), VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) (dash), and VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) with energy relaxation (plain line).

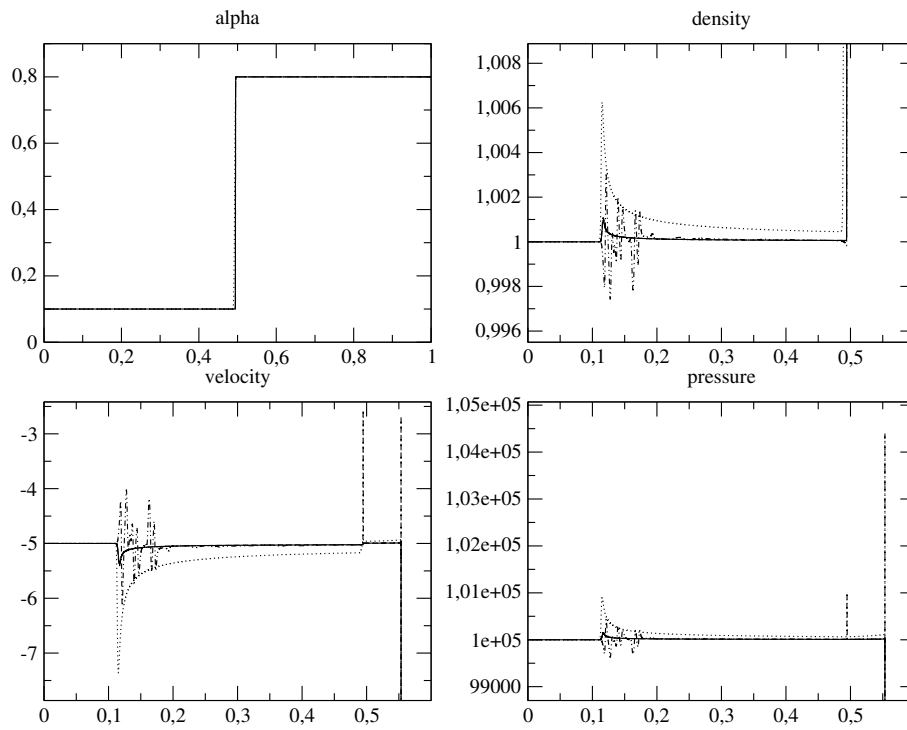


Figure 4: Approximated solutions for $N = 100000$ obtained with: Rusanov (dot), VFRoe-ncv (Y, τ, U, e) (dot-dash), VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) (dash), and VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) with energy relaxation (plain line). Zoom on the ghost wave.

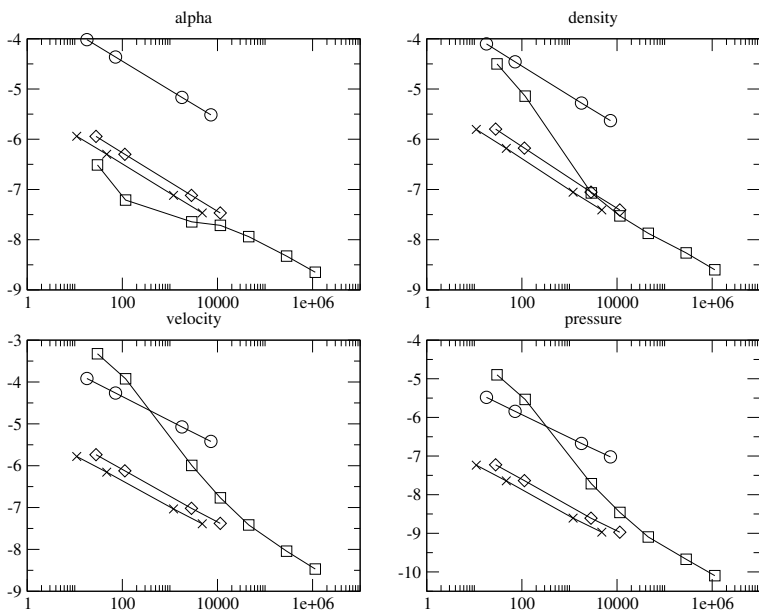


Figure 5: Computational efficiency of the different schemes: error (35) with respect to the CPU time in seconds computed for the meshes $N = \{5000, 10000, 50000, 100000\}$ and with the additional points $N = \{200000, 500000, 1000000\}$ for the VFRoe-ncv (Y, τ, U, e) scheme. The circles stand for Rusanov, the squares for VFRoe-ncv (Y, τ, U, e), the diamonds for VFRoe-ncv (Y, τ, U, P), and the crosses for VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) with energy relaxation.

ation method.

4.1.2 Test case with initial conditions of table (14)

Another analytical test case is investigated now. It is also based on the solution proposed in the appendix, but the EOS parameters are those of section 4.3. These parameters are representative of high-pressure high-temperature water and lead to a very stiff mixture where the two phasic EOS parameters strongly differ. In fact the partial derivative of the pressure with respect to the specific volume, $\partial P / \partial \tau$, has an order of magnitude of 10^{15} which corresponds to a very low compressibility. This term is involved in the com-

putation of the flux of the VFRoe-ncv (Y, τ, U, e) scheme and the resulting convection matrix is ill-conditioned. As a consequence, unstable (with respect to time and with respect to the mesh size) oscillations are observed for this scheme, leading to the blow-up of the code for the meshes up to 500 cells.

The Rusanov scheme, the VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) scheme and the VFROE-ncv (Y, τ, U, P) scheme with energy relaxation do not encounter any particular problem to handle this test case. The convergence curves are plotted on figure (6). The VFRoe-ncv (Y, τ, U, e) scheme can not handle this test case for a mesh containing more than 500 cells and it has thus not been considered here. For the present test case, the final time is small and the contact wave only travels on a distance of $1.46 \cdot 10^{-4} m$ to the left. This explains the flatness of the convergence curves for the two VFRoe-ncv schemes on coarse meshes. Indeed, the accuracy does not change until the mesh size becomes of the order of magnitude of $1.46 \cdot 10^{-4} m$, which corresponds to a mesh with 6800 cells. As shown by the figure (6), the order of convergence 1/2 is recovered on the finest meshes.

The error (35) versus the computational time in seconds is plotted on the figure (7). It can be noted that the gap between the two VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) schemes has increased. If one time-step costs a little more cpu-time for the energy relaxation scheme, the time step can be 300 times greater. Hence the VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) scheme with energy relaxation needs less iterations without losing its accuracy and is then very efficient.

4.1.3 Some remarks

On the basis of these remarks, the VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) schemes seem to be the most appealing for industrial purposes. The VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) with energy relaxation has the great advantage to avoid the computation of e with respect to (Y, τ, P) , which can be tricky and CPU-consuming when considering real EOS. For complex EOS, the CPU-efficiency between the two schemes would thus probably increase, in favour of the energy relaxation method.

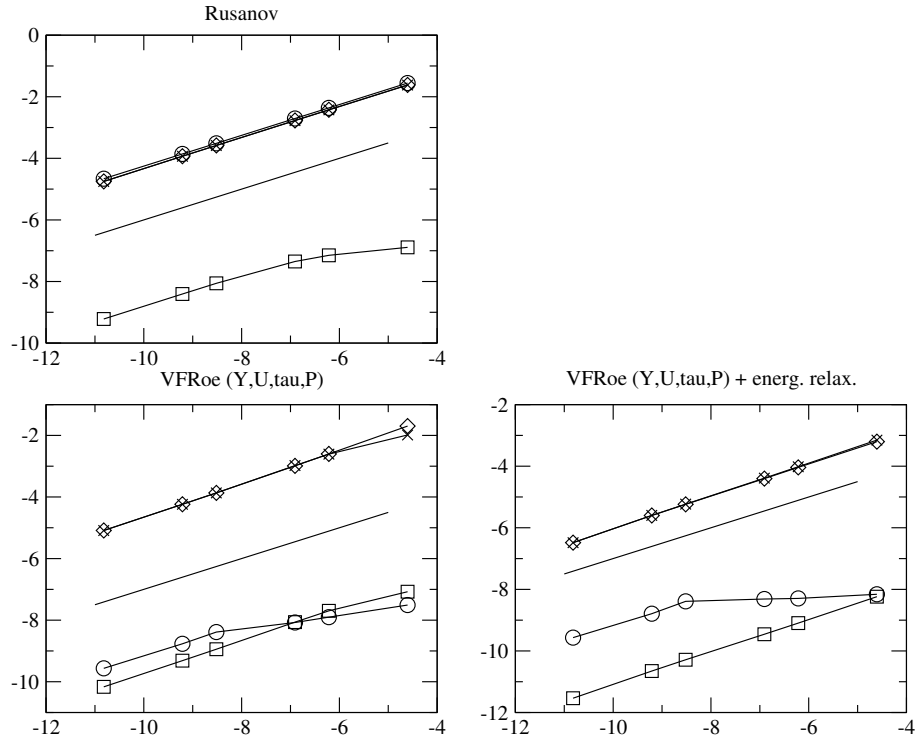


Figure 6: Convergence curves for the test of the section 4.1.2, logarithm of the error (35) versus the logarithm of the mesh size. The meshes contain respectively 100, 500, 1000, 5000, 10000 and 50000 cells. The circles correspond to the fractions, the square to the density, the diamond to the velocity and the “X” to the pressure. The plain line represents the slope 1/2.

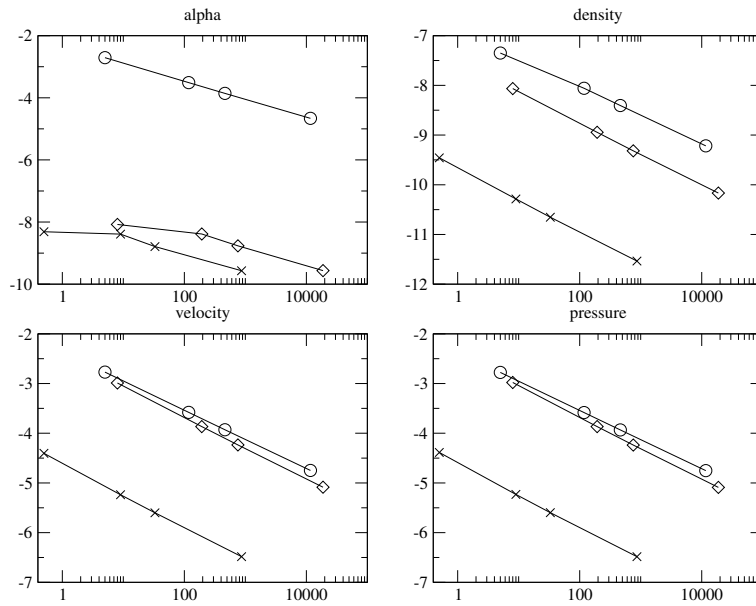


Figure 7: Computational efficiency of the different schemes: error (35) with respect to the CPU time in seconds computed for the meshes $N = \{1000, 5000, 10000, 50000\}$. The circles stand for Rusanov, the diamonds for VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) , and the crosses for VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) with energy relaxation.

4.2 Realist test cases

4.3 Parameters for the EOS

Stiffened gas EOS (section 3.1) have been retained for each phase. The parameters γ_k , $C_{v,k}$, Π_k and s_k^0 must be specified in order to obtain a satisfactory behaviour. We proceed by defining a reference point in the thermodynamical plane, (P^{ref}, T^{ref}) , and by defining the EOS parameters that ensure the equilibrium of the pressure, temperature and chemical potentials of each phase for the reference point (P^{ref}, T^{ref}) . When some additional information is needed, as for example the density at (P^{ref}, T^{ref}) , we use an industrial thermodynamical tools (tabulated laws). It must be emphasised that the parameters s_k^0 are defined at the end of the procedure, they allow to set the equilibrium of the chemical potentials. Indeed, the other quantities do not depend on s_k^0 . Obviously, other methods can be proposed as in [bar05, sau08, liu13].

In the following, all the quantities with a subscript *ref* are obtained with a thermodynamical tabulated EOS for (P^{ref}, T^{ref}) . The subscript *m* stands for mixture. We are interested in almost single-phase liquid configurations. Hence we can assume that the enthalpy h_m^{ref} and the density ρ_m^{ref} are almost equal to the value of the enthalpy and the density of the liquid phase: $h_m^{ref} \sim h_l^{ref}$ and $\rho_m^{ref} \sim \rho_l^{ref}$.

We intend to perform steam-liquid water simulations so that the vapour can be modelled by a perfect gas EOS and we thus impose $\Pi_v = 0$. For the vapour, the temperature law (22) and the definition of the phasic sound speed (19) are then:

$$(\gamma_v - 1)\rho_v^{ref}C_{v,v}T^{ref} = P^{ref} \text{ and } \rho_v^{ref}(c_v^{ref})^2 = \gamma_v P^{ref}.$$

Hence, these equations allow to determine γ_v and $C_{v,v}$:

$$\gamma_v = \frac{\rho_v^{ref}(c_v^{ref})^2}{P^{ref}} \text{ and } C_{v,v} = \frac{P^{ref}}{(\gamma_v - 1)\rho_v^{ref}T^{ref}}$$

We now turn to the liquid phase. The phasic sound speed (19), the pressure

law (21) and the temperature law (22) give γ_l , Π_l and $C_{v,l}$ respectively:

$$\begin{aligned}\gamma_l &= 1 + \frac{(c_l^{ref})^2}{h_l^{ref}} \\ \Pi_l &= \frac{\rho_m^{ref} e_m^{ref} (\gamma_l) - P^{ref}}{\rho_m^{ref}} \\ C_{v,l} &= \frac{e_m^{ref} - \Pi_l / \rho_m^{ref}}{T^{ref}}\end{aligned}$$

where $e_m^{ref} = h_m^{ref} - P^{ref} / \rho_m^{ref}$. The parameters s_k^0 only play a role in the chemical potential, and then for the computation of the chemical potential equilibrium, in which they appear as the difference ($s_v^0 - s_l^0$). We then set $s_l^0 = 0$ and we choose s_v^0 to get small values of the equilibrium fractions (we recall that we have used $\rho_m^{ref} \sim \rho_l^{ref}$, which holds for small fractions). This step is achieved using the equilibrium of the chemical potentials together with the pressure-temperature equilibrium.

This procedure gives the parameters of the phasic EOS and the initial condition of the computations. With the following choices:

$$\begin{aligned}p^{ref} &= 71.41 \cdot 10^5 \text{ (Pa)}, & t^{ref} &= 559.0 \text{ (K)}, \\ \rho_v^{ref} &= 37.0, & c_v^{ref} &= 490.0, \\ h_l^{ref} &= 1.3 \cdot 10^6, & \rho_l^{ref} &= 739.8, & c_l^{ref} &= 978.6,\end{aligned}$$

we get the parameters:

$$\begin{aligned}C_{v,v} &= 2.3083917370268987 \cdot 10^3, & \gamma_v &= 1.2542537313432836, \\ \Pi_v &= 0, & s_v^0 &= -1.85 \cdot 10^4,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}C_{v,l} &= 1.3391115339515329 \cdot 10^3, & \gamma_l &= 1.7366599692307694, \\ \Pi_l &= 4.0046334099937820 \cdot 10^8, & s_l^0 &= 0,\end{aligned}$$

and the equilibrium fractions:

$$\begin{aligned}\alpha_{eq} &= 1.68370180282557914 \cdot 10^{-4}, \\ y_{eq} &= 5.01034544638372543 \cdot 10^{-6}, \\ z_{eq} &= 5.01093788583719112 \cdot 10^{-6}.\end{aligned}$$

The temperature $T^{ref} = 559 \text{ (K)}$ is close to the saturation temperature for the pressure p^{ref} .

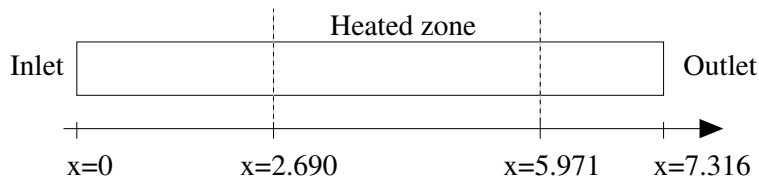


Figure 8: Sketch of the CSNI test case.

4.4 The heating pipe test case

This test case has been the object of the OECD/CSNI benchmark [csni80] and has emerged from discussions in the CSNI working group on Emergency Core Cooling of Water Reactors. It is representative of the cooling of the core of a nuclear power plant and has thus been widely used as a reference test case for the code THYC [lec89] in the 80's. In the present test case, there are two differences with the OECD/CSNI test case. We have our own EOS whereas in the benchmark a EOS is provided; and the heating scenario is different: the heating begins sooner and the maximum of the heating is reached sooner. In fact, the scenario proposed in the benchmark was longer to be sure to start the heating with a stationary state. In our case, the initial condition already corresponds to a stationary state.

As depicted on the figure (8), the domain is $x \in [0, 7.316]$ and the heating is uniform on the interval $[2.690, 5.971]$. The heating starts at $t = 10^{-4}$ s and the power Φ increases linearly from 0 to $1.4 \cdot 10^6$ W during 10^{-3} s. The term Φ then represents the source term of the total energy in system (1) and is explicitly integrated. The initial conditions are those described in the previous section with the velocity:

$$U = 1.46845391999612396.$$

We focus on long time simulations with the two VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) schemes. Indeed, we are interested in the stationary state which is reached after a few seconds on a coarse mesh, which corresponds to the industrial need. In fact we use here a mesh containing 100 uniform cells.

The choice of the time scales λ_i is crucial but we lack of physical information on their value. We thus choose arbitrarily all the time scales $\lambda_i = 10^{-8}$. We recall that, since the λ_i are constant, the numerical scheme for the inte-

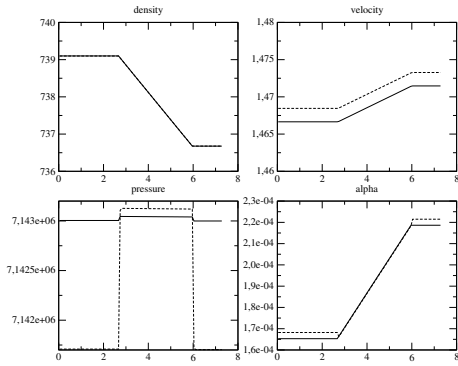


Figure 9: Numerical approximations for the heating pipe test case at time $t = 5$ s and for a mesh with 100 cells. Plain line : VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) scheme with energy relaxation, dashed line : VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) scheme

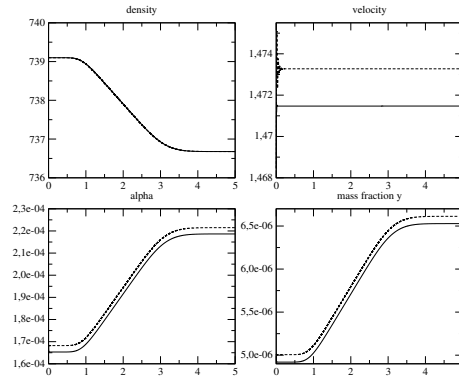


Figure 10: Values at the outlet of the pipe $x = 7.316$ versus the time for the heating pipe test case for a mesh with 100 cells. Plain line : VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) scheme with energy relaxation, dashed line : VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) scheme

gration of the source terms is exact whatever the time step is.

The results are plotted for the time $T_{end} = 5$ s on the figure (9) and the results obtained at the outlet of the pipe are plotted with respect to the time on the figure (10). An offset can be observed for the fractions computed by the two schemes. This offset is also quite important for the pressure and the velocity and almost negligible for the density. The origin of the difference has not been clearly identified but some hypothesis can be proposed. First, the inlet state is enforced without considering local Riemann problem and outgoing waves. This method is rough and a more subtle way of computing this inlet state should probably be tested, as the one proposed in [aud13]. Secondly, considering the mesh size, the time step for the VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) has the same order of magnitude as λ_i , whereas for the VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) scheme with energy relaxation it is much larger than λ_i . This probably leads to a different (de)coupling of the convection and source effects through the fractional step method.

On this test case, the time step for the VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) scheme with energy relaxation is 300 times greater than the time step for the VFRoe-

ncv (Y, τ, U, P). An obvious consequence is that the total CPU time for the simulation is considerably shorter.

With a more physical point of view, the heating of the steam-water mixture leads to steam creation (the fractions increase). The quantity of steam that is generated remains small. This is probably due to the phasic stiffened gas EOS which may be too basic in this test case. Some stable oscillations can be observed on the velocity at the beginning of the simulation (10), during the transient heating period. They are probably due to the interaction of waves coming upstream from the heating zone with the boundary conditions that are too rough. The amplitude of these oscillations is smaller for the VFRoe-ncv (Y, τ, U, P) scheme with energy relaxation.

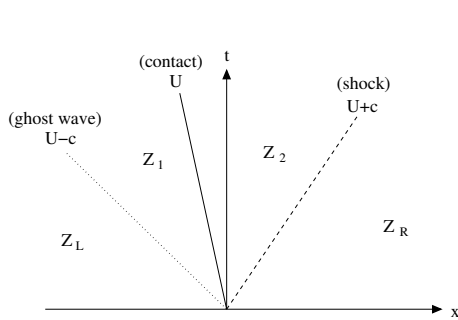


Figure 11: Sketch of the Riemann problem, with a $(U - c)$ ghost-wave and a $(U + c)$ -shock.

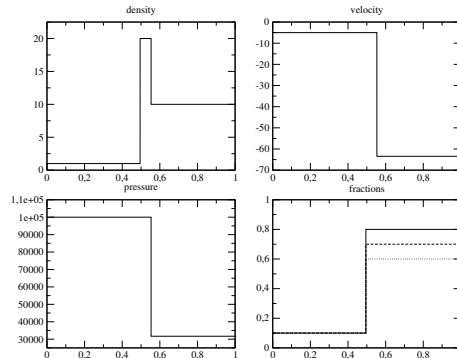


Figure 12: The analytical solution plotted at $t=0.001$ for the first Riemann problem (13).

5 Appendix

5.1 Analytical solutions for the convection system

We consider here the convective part of the system (1) and we propose to construct an analytical solution of the system for a Riemann problem [god96]. We use a classical technique which consists in choosing the left state, and to define the intermediate states from the left state to the right state. For the sake of simplicity in expression of the solution, we only consider a contact discontinuity and a $(U + c)$ -shock. It should be noticed that even if the $(U - c)$ -wave is a ghost-wave it leads to a severe test case.

Let us note $Z = (Y, \rho, U, P)$. As depicted in figure (11), Z_L and Z_R denotes the left and the right states, Z_1 and Z_2 are the intermediate states. Since the $(U - c)$ -wave is a ghost-wave, we obviously have $Z_1 = Z_L$. Through the contact discontinuity the velocity and the pressure are constant : $P_2 = P_1$ and $U_1 = U_2$, and we must specify Y_2 and ρ_2 . In order to define Z_R from Z_2 we use the Rankine-Hugoniot relations :

$$\begin{cases} -\sigma[\rho] + [\rho U] = 0 \\ -\sigma[\rho U] + [\rho U^2 + P] = 0 \\ -\sigma[\rho E] + [\rho U E + U P] = 0 \end{cases} \quad (36)$$

where σ stands for the velocity of the shock and $[\phi] = \phi_R - \phi_L$. We have

omitted the jump relations for the fractions since they are obvious and lead to $Y_R = Y_2$. The system (36) yields one degree of freedom, and we choose to specify ρ_R . The system (36) can be written:

$$\left\{ \begin{array}{l} J^2 = -\frac{[P]}{[\tau]} \\ J = -\frac{[P]}{[U]} \\ [e] + [\tau] \frac{P_R + P_2}{2} = 0 \end{array} \right. \quad (37)$$

with $J = \rho(U - \sigma)$, which thanks to the mass equation is such that $[J] = 0$. For a shock wave, J is negative. Since we have chosen to specify ρ_R the third equation of (37) is a resolvent equation for P_R :

$$e(Y_R, \tau_R, P_R) - e(Y_2, \tau_2, P_2) + (\tau_R - \tau_2) \frac{P_R + P_2}{2} = 0 \quad (38)$$

In our particular case, the EOS for the internal energy leads to a non-linear equation for (38) and it must be solved using some classical numerical algorithm (Newton, Quasi-Newton, dichotomy, etc ...). Once P_R is computed, σ and U_R are obtained through the relations (37). The first equation of (37) gives J , and then the second equation of (37) gives U_R . The velocity σ is obtained by the relation $J = \rho_R(U_R - \sigma)(= \rho_2(U_2 - \sigma))$.

We apply the previous procedure with the following thermodynamical parameters :

$$C_{v,1} = 2.0, \quad \gamma_1 = 1.5, \quad \Pi_1 = 1500, \quad C_{v,1} = 1.0, \quad \gamma_2 = 1.4, \quad \Pi_2 = 1000,$$

and we obtain the states gathered in the table (13) (the values in red are those specified, and the values in blue are those that have been computed). The velocity of the $(U + c)$ -shock is then equal to $\sigma = 53.4429721063797913$. The solution is plotted on the figure (12) at time 0.001.

When applying the previous procedure with the thermodynamical parameters of the section 4.3 we obtain the states gathered in the table (14) (the values in red are those specified, and the values in blue are those that have been computed). The velocity of the $(U + c)$ -shock is then equal to $\sigma = 965.891668252039835$. The solution is plotted on the figure (16) at time $7.3 \cdot 10^{-5}$.

	$Z_L(= Z_1)$	Z_2	Z_R
α	0.1	0.8	0.8
y	0.1	0.7	0.7
z	0.1	0.6	0.6
τ	1.0	0.05	0.1
U	-5.0	-5.0	-63.4429721063797771
P	10^5	10^5	31688.3802274582995

Figure 13: States for the first Riemann problem, the values in red are those specified and the values in blue are those that have been computed from the red values.

	$Z_L(= Z_1)$	Z_2	Z_R
α	$1.68370180282557914 \cdot 10^{-4}$	$1.7 \cdot 10^{-3}$	$1.7 \cdot 10^{-3}$
y	$5.01034544638366529 \cdot 10^{-6}$	$5.1 \cdot 10^{-5}$	$5.1 \cdot 10^{-5}$
z	$5.01093788583713013 \cdot 10^{-6}$	$5.1 \cdot 10^{-5}$	$5.1 \cdot 10^{-5}$
τ	$1.35300183074677709 \cdot 10^{-3}$	$1.34228187919463080 \cdot 10^{-3}$	$1.35501355013550135 \cdot 10^{-3}$
U	-2.0	-2.0	-11.1805442788134375
P	7141636.39642549586	7141636.39642549586	521736.019901064807

Figure 14: States for the Riemann problem with the EOS parameters of the section 4.3, the values in red are those specified and the values in blue are those that have been computed from the red values.

5.2 The vanishing of the energetic fraction with stiffened gas EOS

Let us consider two stiffened gas EOS. We now express the pressure and temperature equilibria with the definitions (21) and (22):

$$\begin{cases} \frac{z}{\alpha} \frac{e}{\tau} (\gamma_l - 1) - \Pi_l \gamma_l = \frac{1-z}{1-\alpha} \frac{e}{\tau} (\gamma_v - 1) - \Pi_v \gamma_v \\ \frac{z}{y} \frac{e - \Pi_l \frac{\alpha}{y} \tau}{C_{v,l}} = \frac{1-z}{1-y} \frac{e - \Pi_v \frac{1-\alpha}{1-y} \tau}{C_{v,v}}. \end{cases}$$

We now assume that the energetic fraction z is equal to zero but that the volumic fraction is not null: $z = 0$ and $0 < \alpha < 1$. The pressure and

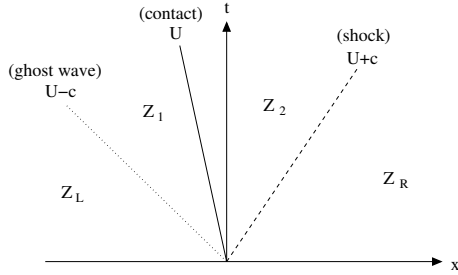


Figure 15: Sketch of the Riemann problem, with a $(U - c)$ ghost-wave and a $(U + c)$ -shock.

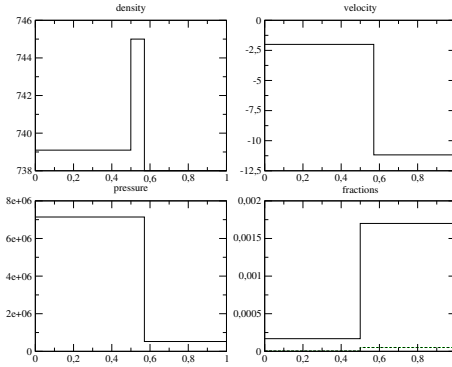


Figure 16: The analytical solution plotted at $t = 7.3 \cdot 10^{-5}$ for the second Riemann problem (14) with the EOS parameters of the section 4.3.

temperature equilibriums then respectively lead to:

$$\begin{cases} \frac{e}{\tau} = (1 - \alpha)\Pi_v - \frac{C_{v,v}\Pi_l(1-y)\alpha}{C_{v,l}y} \\ \frac{e}{\tau} = \frac{(\Pi_v\gamma_v - \Pi_l\gamma_l)(1-\alpha)}{\gamma_v - 1} \end{cases} \quad (39)$$

Hence, the pressure-temperature equilibrium is possible if the two left hand side terms of (39) are equal. This equality is equivalent to define a mass fraction y such that:

$$y = \frac{1}{1 + A}, \quad \text{with } A = \frac{C_{v,l}\Pi_l - \Pi_v}{C_{v,v}\Pi_l} \frac{1 - \alpha}{\gamma_v - 1}. \quad (40)$$

Hence, if the parameters Π_k are such that $\Pi_l - \Pi_v > 0$, A is also positive and the fraction y defined by the pressure-temperature equilibrium (40) is defined in $]0, 1[$. Moreover, the potential equilibrium can be ensured through the adequate choice of the parameters s_k^0 without modifying (40).

As a consequence, when considering stiffened gas EOS and depending on the choice of the values of the parameters, it is possible to get the equilibrium fractions Y^{eq} such that α^{eq} and y^{eq} are in $]0, 1[$ and $z^{eq} = 0$. Further explanations can be found in [jun13].

6 Bibliography

- [ath07] "Steam ATHOS/SGAP 3.1. Analysis of Thermal Hydraulics of Steam Generators/Steam Generator Analysis Package, Version 3.1, Volume 1, Mathematical and Physical Models and Method of Solution". EPRI, Palo Alto report, CA: 2007.1016564.
- [aub88] Aubry S., Cahouet J., Lequesne P., Nicolas G., Pastorini S., (1988), "THYC Code de Thermohydraulique des Coeurs de Racteurs Version 1 .0. Modélisation et Méthodes Numériques". EDF internal report HT-13/8886 A (in french).
- [aud13] Audebert B., Blondel F., Pasutto T., Stanciu M., (2013), "Condensation models and boundary conditions for non-equilibrium wet steam flows". *Int. J. of Finite Volumes*, Vol. 10 pp. 1–53.
- [bar05] Barberon T., Helluy P., (2005), "Finite volume simulation of cavitating flows". *Computers and Fluids*, Vol. 34 pp. 832–858.
- [buf00] Buffard T., Gallouët T., Hérard J.-M., (2000), "A sequel to a rough Godunov scheme : application to real gases". *Computers & Fluids*, Vol. 29 pp. 813–847.
- [coq98] Coquel F., Perthame B., (1998), "Relaxation of energy and approximate Riemann solvers for general pressure laws in fluid dynamics equations". *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 35(6) pp. 2223–2249. In Memory of Ami Harten.
- [dow96] Downar-Zapolski P., Bilicki Z., Bolle L., Franco J., (1996), "The non-equilibrium relaxation model for one-dimensional flashing liquid flow ". *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 22 pp. 473–483.
- [eym00] R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin, (2000), "The finite volume method". *Handbook for Numerical Analysis*, Ph. Ciarlet J.L. Lions eds, North Holland, 715–1022.
- [fau00] Faucher E., Hérard J.-M., Barret M., Toulemonde C., (2000), "Computation of Flashing Flows in Variable Cross-Section Ducts", *Int. J. of Comp. Fluid Dynamics*, Vol. 13 pp. 365–391.
- [gal96] Gallouët T., Masella J.-M., (1996), "Un schéma de Godunov approché". *Comptes rendus de l'Académie des Sciences (Paris)*, Vol. I-323 pp. 77–84.
- [gal02a] Gallouët T., Hérard J.-M., Seguin N., (2002), "Some recent finite volume schemes to compute Euler equations using real gas EOS". *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 39 pp. 1073–1138.
- [gal02b] Gallouët T., Hérard J.-M., Seguin N., (2002), "A hybrid scheme to compute contact discontinuities in one dimensional Euler systems". *Math.*

- Mod. and Num. Analysis, Vol. 36 pp. 1133-1159.
- [gal03] Gallouët T., Hérard J.-M., Seguin N., (2003), "On the use of some symmetrising variables to deal with vacuum". *Calcolo*, Vol. 40 pp. 163-194.
- [gue03] Guelfi A., Pitot S., (2003), "THYC (ThermoHYdraulique des Composants) Version 4.1 - Note de Principe". EDF internal report HI-84-03-020A (in french).
- [gui05] Guillard H., Murrone A., (2005), "A five equation reduced model for compressible two phase flow problems". *Journal of Computational Physics*, Vol. 202 pp. 664-698.
- [god96] Godlewski E., Raviart P.-A., (1996), "Numerical analysis for hyperbolic systems of conservation laws". Springer Verlag.
- [hel10] Helluy P., Hérard J.-M., Mathis H., Müller S., (2010), "A simple parameter-free entropy correction for approximate Riemann solvers". *Comptes Rendus Mécanique*, Vol. 388 pp. 493–498.
- [jun13] Jonathan Jung, (2013), "Méthodes numériques d'écoulements multiphasiques tridimensionnels sur GPU". PhD thesis, IRMA, Université de Strasbourg - CNRS (UMR 7501).
- [kar58] Karplus H.B., (1958), "The velocity of sound in a liquid containing gas bubbles". Armour Research Foundation Project No. A-097.
- [lec89] Le Coq G., Aubry S., Cahouet J., Lequesne P., Nicolas G., Pastorini S., (1989), "The THYC computer code. A finite volume approach for 3 dimensional two-phase flows in tube bundles". EDF Bulletin de la direction des Etudes et Recherche - Série A, Nucléaire. Hydraulique. Thermique, Vol. 1 pp. 61–76.
- [liu13] Liu Y., (2013), "Contribution à la vérification et à la validation d'un modèle diphasique bifluide instationnaire", PhD Thesis, Université Aix-Marseille.
- [mas99] Masella J.-M., Faille I., Gallouët T., (1999), "On an approximate Godunov scheme". *Int. J. of Comp. Fluid Dynamics*, Vol. 12 pp. 133–149.
- [rus61] Rusanov V.V., (1961). "Calculations of interaction of non-steady shock waves with obstacles". *J. Comp. Math. Phys.*, Vol. 1 pp. 267–279.
- [sau08] Saurel R., Petitpas F., Abgrall R., (2008). "Modelling phase transition in metastable liquids: application to cavitating and flashing flows". *J. Fluid Mech.*, Vol. 607 pp. 313–350.
- [tou95] Toumi I., (1995), "FLICA IV : Manuel de référence. Méthode numérique". CEA internal report DMT93/439.
- [wal69] Wallis G.B., (1969), "One-dimensional two-phase flow". McGraw-Hill.

- [csni80] Werner W., (1980), "First CSNI numerical benchmark problem. Comparison report". CSNI report 47.
- [yan68] Yanenko N. N., (1968), "Méthodes à pas fractionnaires". Armand Colin.

3.4 Vérification d'un code pour les écoulements diphasiques basé sur un modèle homogène.

On reproduit ci-dessous l'article [39]. Les appels à la bibliographie sont internes à la section 3.4.

Verification of a two-phase flow code based on an homogeneous model.

Philippe Helluy[°], Olivier Hurisse[†], Erwan Le Coupanec[†]

[°]*IRMA, Université de Strasbourg, 7 rue René-Descartes, 67000 Strasbourg, France.*

[†]*EDF R&D MFEE, 6 quai Watier, 78400 Chatou, France.*

helluy@math.unistra.fr, olivier.hurisse@edf.fr, erwan.lecoupanec@edf.fr

Abstract

We present some verification test cases applied to a code developed at EDF R&D for the simulation of two-phase flows with mass transfer. The aim of this code is to allow the simulation of a wide range of industrial situations by considering all the thermodynamic disequilibria between the phases - pressure, temperature and chemical potential- and by assuming the kinematic equilibrium - a single velocity for both phases. The underlying homogeneous model [1, 13] is based on the Euler system of equations supplemented by a complex pressure law describing the behaviour of the mixture of the two phases. Different first-order schemes are compared on the basis of two analytical solutions: a classical Riemann problem and a steady-state heated pipe test.

Key words : Homogeneous model, two-phase flows, verification.

1 Introduction

The production of electric power through pressurized water nuclear reactor, as many other industrial processes, is associated with the control of the mass transfer phenomena between liquid water and its vapor. The numerical simulation of two-phase flows including phase change is then an important challenge though it is a difficult task. For this purpose, several kinds of models have been proposed for approximately 50 years. The model retained in the sequel has been proposed quite recently [1]. This two-phase flow model accounts for the complete thermodynamical disequilibrium - namely the pressure, temperature and chemical potential disequilibrium - but makes the assumption that both phases have the same velocity. It is based on the Euler system of equations supplemented by a complex pressure law describing the behaviour of the mixture of the two phases. This pressure law depends on

three mixture fractions which define the thermodynamical disequilibrium between the phases, and the return to equilibrium is achieved by three source terms. In the sequel, the verification test cases do not account for these source terms and the focus is put on the convective terms of the model.

In [13], the behaviour of some explicit first-order schemes has been compared on two Riemann problems, which are unsteady test cases. The aim of the present paper is to extend this verification process to a steady-state analytical test-case and to investigate the behaviour of a first-order semi-implicit scheme, based on a fractional step algorithm [19]. The latter class of schemes is known to handle more accurately steady-state situations than the first-order explicit schemes. Besides this semi-implicit scheme, the VFRoe-ncv scheme and the Rusanov scheme already used in [2] are retained here. In order to improve the accuracy of the VFRoe-ncv scheme on the contact waves, a centered-pressure correction is proposed on the basis of the work [4].

Two analytical test cases have been retained here. Both are representative of industrial applications at high pressure and temperature. First, as in [13] the different schemes have been used to compute approximate solutions of a Riemann problem. This unsteady test case allows to test the scheme for breach simulations which are part of the validation test cases for industrial codes in the nuclear domain. The second test case is a rough representation of the way a core or a steam generator operates. It consists in computing the steady state reached by a mixture of liquid and water which is heated by an external source. The solution proposed in [14] for compressible single-phase flow is thus extended to two-phase flows without return to equilibrium.

2 The homogeneous model

In the sequel the two-phase-flow homogeneous model [1, 15, 13] is based on the Euler set of equations. The thermodynamic behaviour of the mixture is ruled by two ingredients: three mixture fractions $Y = (\alpha, y, z)^\top$, which are respectively the volume fraction, the mass fraction and the energy fraction; and a mixture pressure law $P = \mathcal{P}(Y, \tau, e)$ defined through the Gibbs relation on the entropy of the mixture. The thermodynamic disequilibrium and the return to equilibrium are taken into account by source terms Γ_Y on the fraction equations. The whole model then reads:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U Y) = \rho \Gamma_Y \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho U) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U^2 + P) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho U E + U P) = 0. \end{array} \right. \quad (1)$$

The velocity of the mixture is denoted by U . No kinematic disequilibrium is taken into account, then U also represents the velocity of each phase. We note: $\rho = 1/\tau$ the density of the mixture, where τ is the specific volume, $E = e + U^2/2$ the specific total energy of the mixture and e the specific internal energy of the mixture. The pressure law \mathcal{P} is:

$$\mathcal{P}(Y, \tau, e) = \frac{\frac{\alpha}{T_l} P_l + \frac{(1-\alpha)}{T_v} P_v}{\frac{z}{T_l} + \frac{1-z}{T_v}}, \quad (2)$$

where the phasic pressures $P_k = \mathcal{P}_k(\tau_k, e_k)$ and temperatures $T_k = \mathcal{T}_k(\tau_k, e_k)$ must be given by the user, with $e_l = ze/y$, $e_v = (1-z)e/(1-y)$, $\tau_l = \alpha\tau/y$, $\tau_v = (1-\alpha)\tau/(1-y)$ if Y represents the fraction of phase l . The source terms Γ_Y are defined in agreement with the second principle of thermodynamics [1, 15, 13], but they are not considered here for the proposed verification test cases and we set here: $\Gamma_Y = 0$. In the sequel, a Stiffened Gas equation of states will be used for each phase:

$$\mathcal{P}_k(\tau_k, e_k) = \frac{e_k}{\tau_k}(\gamma_k - 1) - \Pi_k \gamma_k \quad \text{and} \quad \mathcal{T}_k(\tau_k, e_k) = \frac{e_k - \Pi_k \tau_k}{C_{v,k}},$$

where γ_k , Π_k and $C_{v,k}$ are parameters. For these Stiffened Gas equations of states, the model (1) is hyperbolic if the phasic temperatures are non-negative. Values of the thermodynamical coefficients will be given in section 4. More details on the whole model can be found in [1, 13].

3 Numerical schemes

The overall numerical scheme follows a fractional step algorithm in which convective terms and source terms are treated successively [13]. Since source terms have been omitted in the sequel, we only describe below the numerical schemes that have been implemented to account for the convective part of the model (1). The numerical approximations are obtained by using two different types of first-order finite-volume schemes [5]:

- approximate godunov schemes which are explicit,
- and a semi-implicit fractional step scheme.

Considering the first class of schemes, three different schemes have been investigated. As proposed in [13] a VFRoe-ncv scheme [2] is used to compute the numerical fluxes at the interface between two cells. The linearised problem at the interface is solved by considering the variables (Y, τ, U, P) . This algorithm is supplemented with the entropic correction proposed in [12]. Moreover, a partial WFRoe scheme [9] is performed to improve the prediction of the speed of the contact wave in the linearised problem at the interface between two cells. Otherwise, non-symmetric behaviours have been observed on some test cases, in particular for bubble collapse. This scheme will be nicknamed here VFROENCV. In order to improve the accuracy of this scheme, another version has been implemented on the basis of the idea of [4]. The interfacial pressure issued from the linearised Riemann problem is mixed with a centered pressure chosen as the mean of the pressure of the left (L) and right

(R) cells. The blending function $f_b(M)$ for the pressure is based on the local Mach number $M = |u_{LR}|/\max(C_L, C_R)$, where u_{LR} is the interfacial WFRoe-ncv velocity. C_L and C_R are respectively the left and right sound speeds. We have chosen the function:

$$f_b(M) = \begin{cases} \frac{1-\cos(\Pi M/M_{lim})}{2}, & \text{if } M \leq M_{lim}, \\ 1, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (3)$$

The modified interfacial pressure P_{LR}^* used to compute the numerical fluxes is then:

$$P_{LR}^* = f_b(M)P_{LR} + (1 - f_b(M))\frac{P_L + P_R}{2};$$

where P_{LR} is the interfacial pressure computed by the VFROENCV scheme, P_L and P_R the left and right pressures. The parameter M_{lim} is the limit mach number above which the pressure correction is not activated. The influence of this parameter on the results will not be discussed here even if it is an important parameter. This scheme will be nicknamed here VFROENCV-C. More details about VFROENCV and VFROENCV-C schemes can be found in appendix B. The Rusanov scheme [17] is also considered as it remains a reference scheme, it will be denoted by RUSANOV.

The VFRoe-ncv scheme is an explicit scheme. In order to maintain the stability of the numerical approximations a CFL condition must be fulfilled by the time-step. Moreover, it is known that for low mach-number situations discrepancies may be observed. These limitations can be strong drawbacks for industrial applications.

The semi-implicit scheme [7] relies on a fractional step method [19] which consists in 4 main steps: a density step, a momentum step, a total energy step and a mixture fraction convection step. The density step consists in solving the continuity equation turned into a pressure equation (thanks to a linearization of the density). This step yields a predicted pressure and allows to update the mass flux and the density. The momentum step then consists in solving the momentum balance equation considering the explicit gradient of the predicted pressure and the updated mass flux. The total energy step finally consists in solving the total energy balance equation considering the updated mass flux. The internal energy can at last be deduced and is taken into account together with the updated density (from the density step) in order to update the pressure. This scheme is detailed in appendix C. It will be nicknamed here SEMI-IMP..

4 Numerical results

The behavior of the schemes is compared on two different test cases: an unsteady test case and a steady-state test case. For both tests we use the same parameters for the phasic equation of states:

$$\begin{aligned} C_{v,v} &= 4.477815802223535 \cdot 10^3 \text{ J/kg/K} & C_{v,l} &= 1.395286166711847 \cdot 10^3 \text{ J/kg/K} \\ \gamma_v &= 1.084875362318841 & \gamma_l &= 1.665128030303030 \\ \Pi_v &= 0.0 & \Pi_l &= 3.725876146842836 \cdot 10^8 \text{ Pa} \end{aligned} \quad (4)$$

These parameters have been computed to be representative of steam-water flows around 81 *bars* and at saturation ($T_{sat}(81 \text{ bars}) = 569 \text{ K}$).

The approximations obtained by the schemes have been compared with the analytical solution in terms of the L_1 error:

$$err(\phi, T) = \frac{\sum_{i=1}^N |\phi^{approx}(T, x_i) - \phi^{exact}(T, x_i)|}{\sum_{i=1}^N |\phi^{exact}(T, x_i)|}, \quad (5)$$

for the variables $\phi = \{\alpha, y, z, \rho, U, P\}$. This error is computed at the final time t for the unsteady test case and when convergence in time is assumed to be reached for the steady case (see 4.2 for the convergence criterium).

4.1 A Riemann problem test case

As in [13], we consider here a Riemann problem consisting in a U -contact wave and a $U + C$ -shock wave. The $U - C$ -wave is a ghost wave. The domain is $[0, 1 \text{ m}]$ and the initial discontinuity is located at $x_d = 1/2 \text{ m}$. The boundary conditions are Dirichlet conditions filled with the exact solution. The exact solution is composed of the left and right uniform states, separated by an uniform intermediate state. The intermediate state in table 1 represents the analytical solution between the U -contact and the $U + C$ -shock wave, that is for: $(x - x_d)/t > 5 \text{ m/s}$ and $(x - x_d)/t < \sigma$, where the shock speed is:

$$\sigma = 857.774166173626327 \text{ m/s}.$$

The left state represents the solution for $(x - x_d)/t < 5 \text{ m/s}$ and the right state for $(x - x_d)/t > \sigma$. The solution is plotted on figure (2) at time $t = 2 \cdot 10^{-4} \text{ s}$. The error between the numerical approximations and the exact solution is computed at this time. The approximate solutions have been computed with the four different

	Left state	Intermediate state	Right state
α	$1.38006860749359000 \cdot 10^{-1}$	$1.48006860749359009 \cdot 10^{-1}$	$1.48006860749359009 \cdot 10^{-1}$
y	$7.84348344805274079 \cdot 10^{-3}$	$8.84348344805273995 \cdot 10^{-3}$	$8.84348344805273995 \cdot 10^{-3}$
z	$1.51281566759211995 \cdot 10^{-2}$	$1.61281566759211986 \cdot 10^{-2}$	$1.61281566759211986 \cdot 10^{-2}$
$\rho \text{ (kg/m}^3\text{)}$	728	738	733
$U \text{ (m/s)}$	5.0	5.0	-0.817013411825560532
$P \text{ (Pa)}$	$7.69 \cdot 10^6$	$7.69 \cdot 10^6$	$4.02907811372492649 \cdot 10^6$

Figure 1: States for the first Riemann problem.

schemes: RUSANOV, VFROENCV, VFROENCV-C and SEMI-IMP. The meshes have from 50 to 200000 regular cells, except for the SEMI-IMP scheme (up to 50000 cells). The error defined in (5) is plotted on figures 3 and 4 and the different approximate solutions are compared on figure 5 for a mesh with 800 cells and a time step chosen such that $CFL_{U+C} = 0.5$.

Considering figure (3), it can be noted that all the schemes have almost the same accuracy on coarse meshes, except the RUSANOV scheme that is less accurate for

α and τ . Nonetheless, when the mesh is refined, the VFROENCV-C scheme widens the gap with the other schemes for the variable P , U and τ . Up to 200000 cells the asymptotic order of convergence $1/2$ is not yet reached with VFROENCV-C for P and U . On the last three meshes the convergence rate is close to 1 for P and U , which indicates that the scheme is very accurate on the contact wave. The SEMI-IMP scheme with a time step chosen such that $CFL_{U+C} = 0.5$ is close to the VFROENCV scheme. Moreover, figure (4) shows that increasing the time-step for SEMI-IMP leads to a loss of accuracy.

Besides the error analysis, one can observe on figure (5) that the schemes have very different behaviours when a discontinuity is approximated, see figure (6).

- **The $U - C$ ghost wave** (on the left on figure (6)).
From an analytical point of view all the variables remain constant when passing through the wave $U - C$, but for all the tested schemes a “numerical wave” $U - C$ can be observed. These discrepancies disappear when the mesh is refined, but they can be noticeable on coarse meshes. The VFROENCV-C scheme shows very strong oscillations with respect to the other schemes, and the SEMI-IMP scheme at $CFL_{U+C} = 0.5$ is very close to the VFROENCV scheme which remains quite accurate.
- **The contact wave** (in the middle on figure (6)).
Through the contact wave, pressure and velocity are constant in the analytical solution. The VFROENCV scheme presents small discrepancies on this wave. The accuracy is then very good despite the fact that the pressure law does not fulfil the requirement to ensure the preservation of P and U as exposed in [8]. The VFROENCV-C scheme generates oscillations from either side of the contact, whereas the SEMI-IMP scheme presents a pressure over-shoot combined with small oscillations.
- **The shock wave** (on the right on figure (6)).
Both SEMI-IMP and VFROENCV-C approximations have oscillations at the shock location, but their order of magnitude is 100 times less for the former than for the latter. They are thus almost negligible for the SEMI-IMP scheme in comparison with the pressure jump through the shock wave ($\sim 36 \cdot 10^5 Pa$).

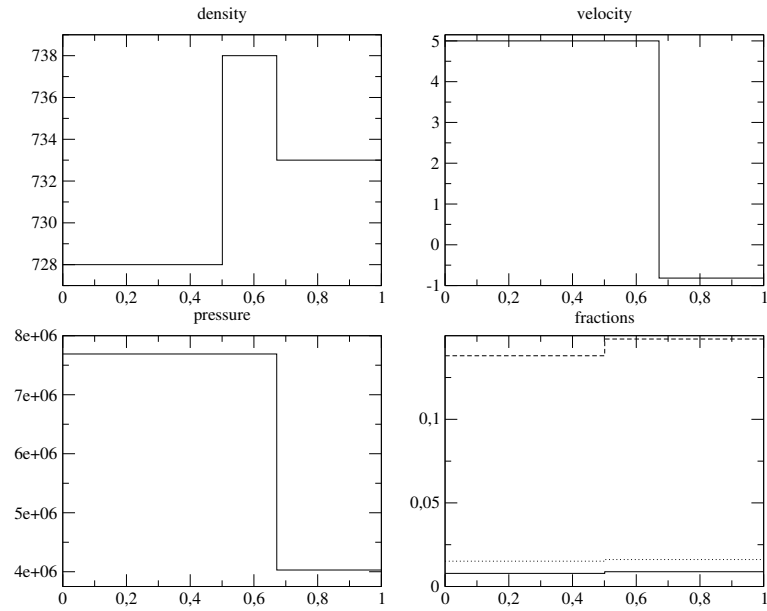


Figure 2: Analytical solution at time $t = 2 \cdot 10^{-4}$ s for the Riemann problem of section 4.1.

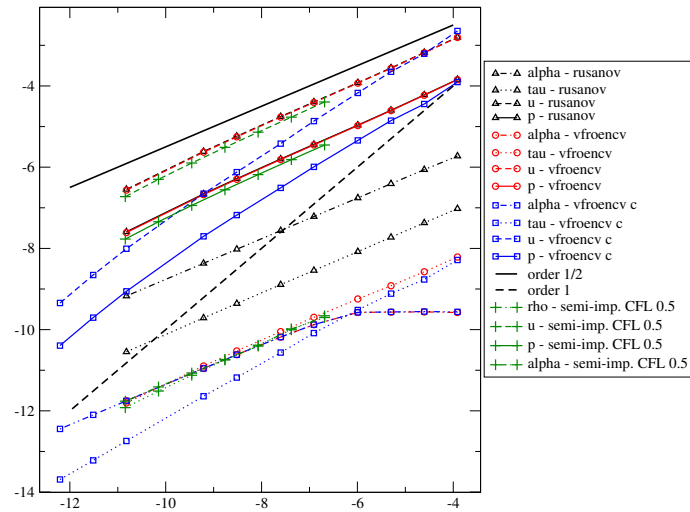


Figure 3: Convergence curves for all the schemes for the Riemann problem: $\ln()$ of the L^1 error norm (5) with respect to $\ln(1/N)$ (N number of cells). The CFL_{U+C} is equal to 0.5 for all the schemes.

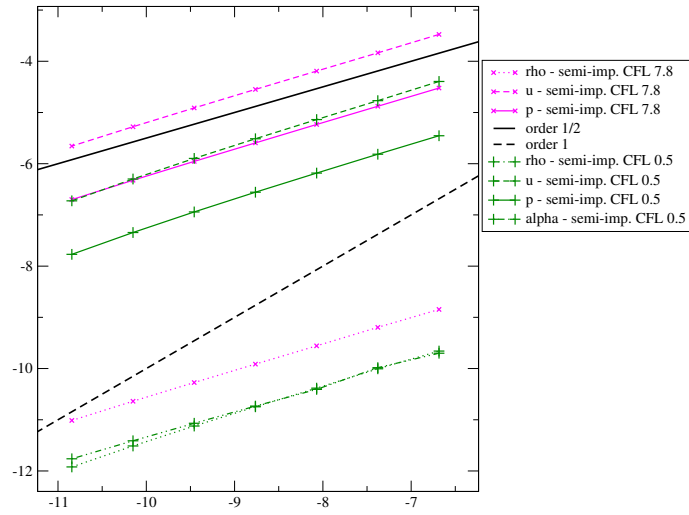


Figure 4: Convergence curves for the SEMI-IMP scheme for the Riemann problem: $\ln()$ of the L^1 error norm (5) with respect to $\ln(1/N)$ (N number of cells). The results obtained with $CFL_{U+C} = 0.5$ (green) and $CFL_{U+C} = 7.8$ (magenta) are plotted.

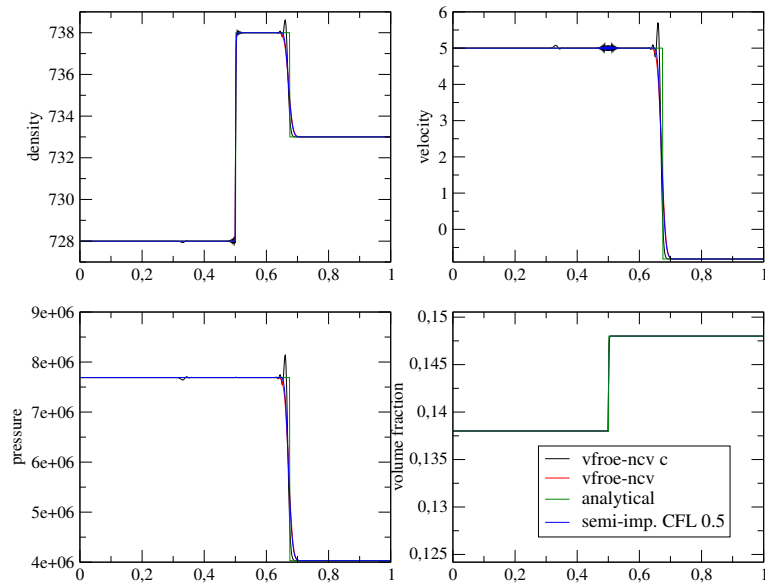


Figure 5: Comparison of the approximate solutions on a mesh with 800 cells and $CFL_{U+C} = 0.5$.

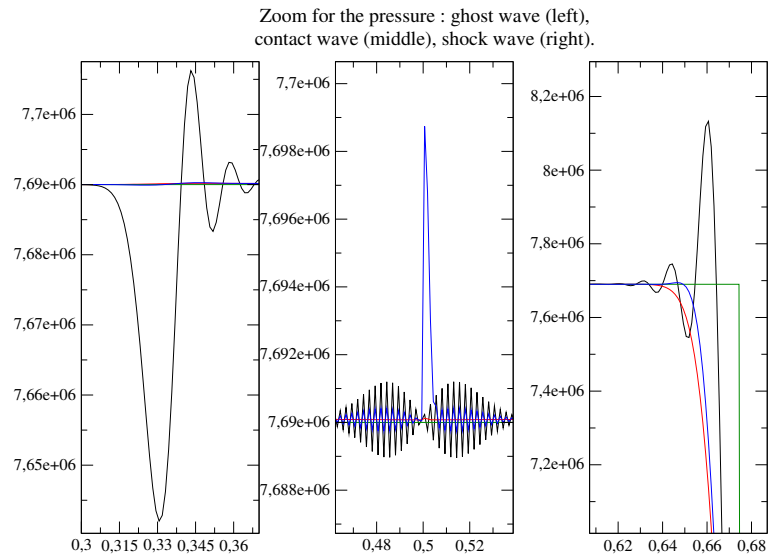


Figure 6: Comparison of the approximate solutions on a mesh with 800 cells, zoom at the wave locations for VFROENCV (red), VFROENCV-C (black), SEMI-IMP at $CFL_{U+C} = 0.5$ (blue). The analytical solution is in green.

4.2 A steady state test case

This test case consists in heating a mixture of water and vapor, assuming that the source terms for the fractions are equal to zero. The heating of the mixture is ensured by an external source term in the energy equation. The computation of the corresponding steady state for system (1) is reported in appendix. Due to the complex mixture equation of state of the model, the solution at each x is obtained by the mean of a Quasi-Newton algorithm. The boundary conditions are Dirichlet conditions filled with the exact solution. The initial conditions are also the exact solution for all x . The iterations are stopped when the relative L_1 -norm between the variables $\Psi \in \{Y, \tau, U, P\}$ at iteration n and $(n - 1)$ is less than 10^{-12} :

$$\forall \Psi \in \{Y, \tau, U, P\}, \frac{\sum_{i=1}^N |\Psi^{approx}(t^n, x_i) - \Psi^{approx}(t^{n-1}, x_i)|}{\sum_{i=1}^N |\Psi^{approx}(t^{n-1}, x_i)|} < 10^{-12}.$$

The domain is $x \in [0, 8 \text{ m}]$. The meshes contain from 60 to 12800 cells, except for the SEMI-IMP scheme. Due to the computation time, the finer mesh contains 6400 cells. The source term Φ is applied for $2 \text{ m} < x < 6 \text{ m}$ and it is uniform within this interval:

$$\Phi(x) = \begin{cases} 5.0 \cdot 10^9 \text{ W/m}^3, & \text{if } 2 \text{ m} < x < 6 \text{ m}, \\ 0, & \text{elsewhere.} \end{cases} \quad (6)$$

At the inlet $x = 0$ the reference state is:

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 728.0 \text{ kg/m}^3; \\ U_0 &= 5.0 \text{ m/s}; \\ P_0 &= 7.69 \cdot 10^6 \text{ Pa}; \\ \alpha_0 &= 1.38006860749359 \cdot 10^{-1}; \\ y_0 &= 7.84348344805274 \cdot 10^{-3}; \\ z_0 &= 1.51281566759212 \cdot 10^{-2}; \end{aligned} \quad (7)$$

The analytical solution, which is computed as explained in appendix, is plotted on figure 7.

REMARQUE 4.1 The reference state corresponds to the left states of the Riemann problem in section 4.1.

From a numerical point of view, the heating source term Φ is integrated using a fractional step approach [19]. The convection terms are first computed and the ODE system including Φ is then integrated by an explicit Euler scheme. For the present steady-state test case with a constant source term, a well-balanced approach could be helpful to improve the accuracy of the VFROENCV scheme. But we are also interested in non constant source terms and unsteady situations for which the fractional step approach remains efficient [10]. We thus focus here on SEMI-IMP and VFROENCV-C schemes which improve the prediction of the steady-state solution as shown on figures (8), (9), (10), (11) and (12).

It should first be mentioned that for all schemes the error between the approximated fractions and the analytical solutions are equal to the round-off errors and are thus not considered in the sequel. The convergence curves are plotted on figure (9). One can note that on coarse meshes VFROENCV-C is less accurate than VFROENCV for the velocity variable, but more accurate for the pressure. As for the problem of section 4.1, the VFROENCV-C scheme still shows an order of convergence of the pressure and velocity greater than the asymptotic order. Due to the discontinuity of the function Φ , a stationary contact wave is introduced in the system of equations, which leads to an asymptotic order of convergence of $1/2$. The latter is recovered on almost all the variables of figure (9), except for the SEMI-IMP scheme for which computations should be pursued on finer meshes.

The results for the different schemes have been plotted on figure (8) for a mesh with 400 cells. The RUSANOV and VFROENCV schemes introduce unphysical pressure gaps at the inlet and outlet of the heating zone (where the source term is discontinuous). These gaps disappear when the mesh is refined (see figure (10)), but on industrial meshes they can lead to unexpected vaporisation/condensation when dealing with mass transfer. The SEMI-IMP ($CF_{LU+C} = 25$) and the VFROENCV-C schemes do not present such important pressure gaps, but oscillations appear around the location of the sudden change of the heating source term. The amplitude of these oscillations is smaller for the SEMI-IMP scheme, but a more important error is observed in the bulk of the heated zone when compared with the VFROENCV-C scheme. This explains why the error on the pressure variable is greater with the SEMI-IMP scheme compared with the error obtained for the VFROENCV-C (see figure (9)).

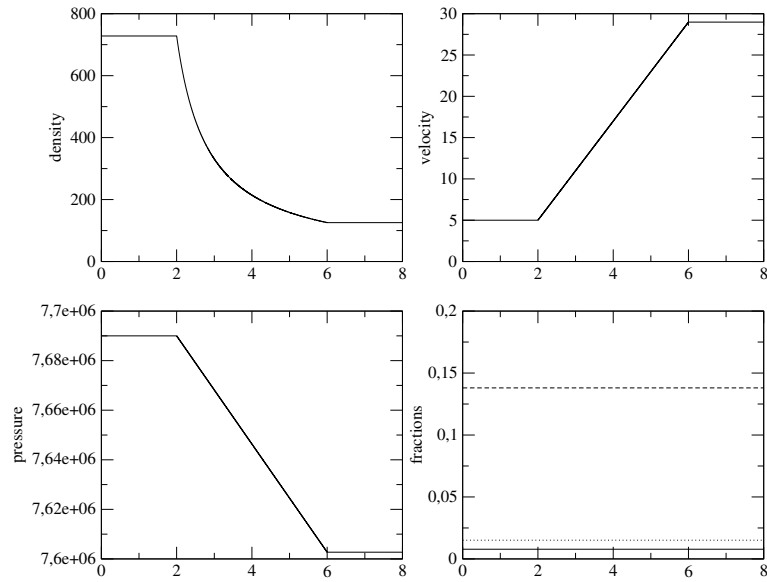


Figure 7: Analytical solution for the steady state heating case.

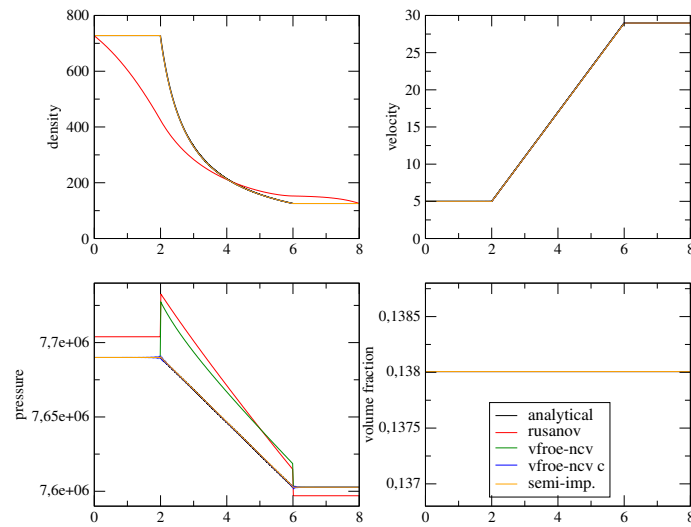


Figure 8: Comparison of the approximated solutions for a mesh with 400 cells. The CFL_{U+C} is equal to 0.5 for the explicit schemes and to 25 for the SEMI-IMP scheme.

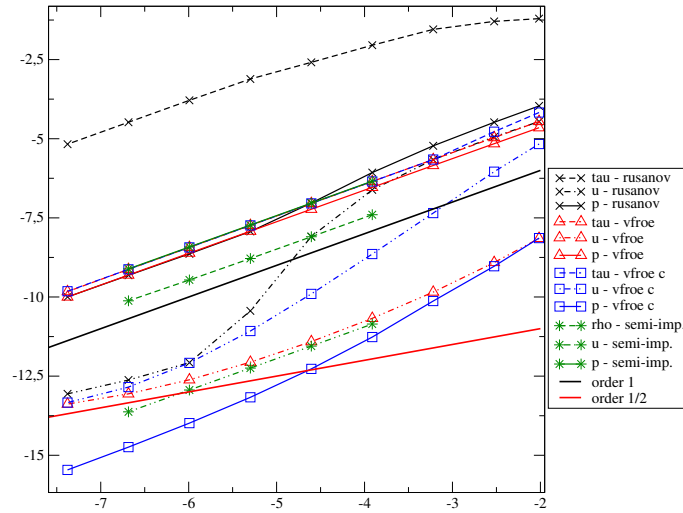


Figure 9: Convergence curves for the steady-state problem: $\ln()$ of the L^1 error norm (5) with respect to $\ln(1/N)$ (N number of cells). The CFL_{U+C} is equal to 0.5 for the explicit schemes and to 25 for the SEMI-IMP scheme.

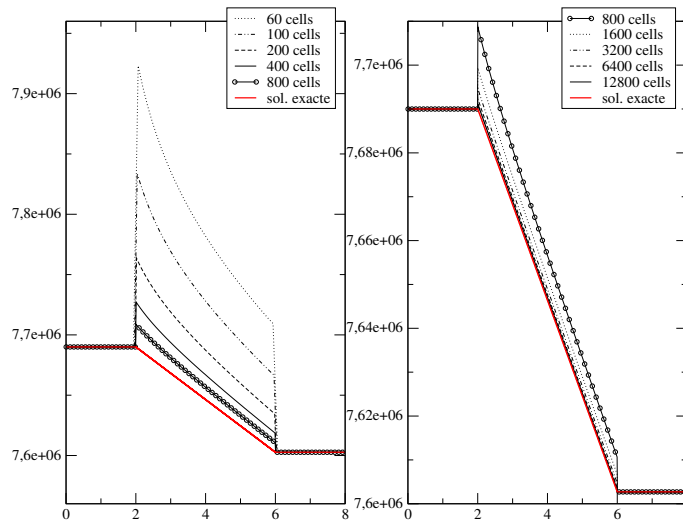


Figure 10: Comparison of the approximated pressure for VFROENCV on different meshes. The CFL_{U+C} is equal to 0.5.

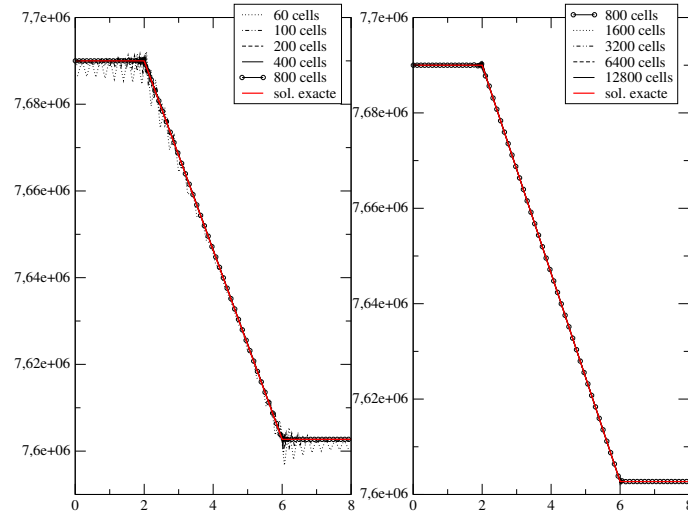


Figure 11: Comparison of the approximated pressure for VFROENCV-C on different meshes. The CFL_{U+C} is equal to 0.5.

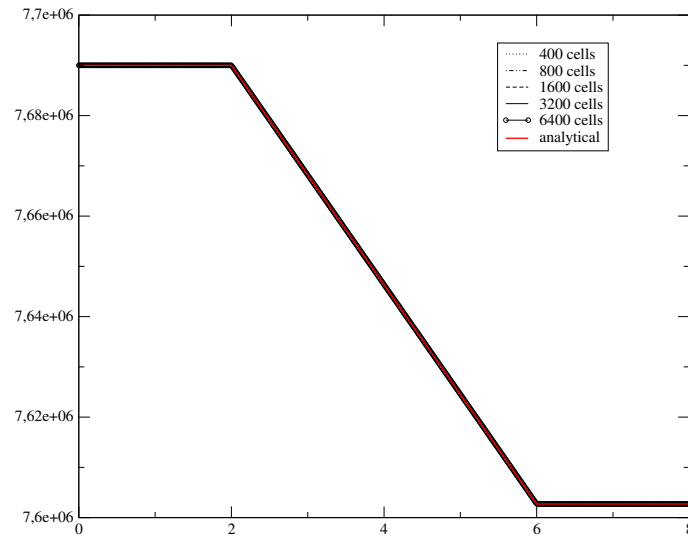


Figure 12: Comparison of the approximated pressure for SEMI-IMP on different meshes and for a time-step corresponding to $CFL_{U+C} = 25$.

5 Conclusion

Four schemes have been tested on two different verification test-cases, which are sketches of industrial configurations. Though the VFROENCV-C scheme presents the best results in terms of the error analysis, the oscillations that appear where discontinuities are computed could be a drawback for industrial purposes. They could for instance be confusing in the case of a configuration where physical oscillations might naturally appear. There are also oscillations in the results obtained with the SEMI-IMP scheme, but their amplitude is smaller on the proposed test cases. On the contrary, the VFROENCV scheme does not generate oscillations, but the main drawback is that it is globally less accurate than the two latter schemes.

Some additional investigations should be performed. In particular a quantitative comparison of the error with respect to the CPU-time would be worthwhile. Actually, if the SEMI-IMP and VFROENCV-C schemes have lower approximation errors for a given mesh size with respect to VFROENCV and RUSANOV, the CPU-time is far greater on the steady-state case of section 4.2. This difference of CPU-time is less important for the unsteady test of section 4.1. Some additional comparisons could also be carried out:

- (i) different values of the parameter M_{lim} of the VFROENCV-C scheme ;
- (ii) different values of the time-step for the SEMI-IMP scheme ;
- (iii) a regular source term Φ ;
- (iv) uniform initial conditions and an outlet boundary conditions at $x = 8$.

6 Appendix A: A class of analytical steady-state solutions for compressible two-phase heated flows

In the following, we extend the solution obtained for single-phase flows in [14] for two-phase flows.

We restrict ourselves to the steady-state solutions of (1) without the source terms S_Y . The variables thus only depend on the space variable x and their space evolution follows the ODE system:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dx} (\rho U Y) = 0 \\ \frac{d}{dx} (\rho U) = 0 \\ \frac{d}{dx} (\rho U^2 + P) = 0 \\ \frac{d}{dx} (U(\rho E + P)) = \Phi, \end{array} \right. \quad (8)$$

where the thermodynamical behaviour of the mixture is described by a law linking Y , ρ , e and P . We set here $e = \epsilon(Y, \rho, P)$. The source term $\Phi(x)$ denotes an external source of heat and it only depends on the space variable x .

The second equation of (8) states that the mass flow rate ρU is uniform, so that we denote it by $D_0 = \rho U$. The system (8) can thus be written:

$$\left\{ \begin{array}{l} D_0 \frac{d}{dx} (Y) = 0 \\ U = \tau D_0 \\ D_0 \frac{d}{dx} (U) + \frac{d}{dx} (P) = 0 \\ D_0 \frac{d}{dx} (E) + \frac{d}{dx} (UP) = \Phi. \end{array} \right. \quad (9)$$

We assume that $D_0 \neq 0$, so that the fractions Y are uniform: $Y = Y_0$. Thanks to the second equation of (9), we replace U by τ in the third and fourth equation of (9). We get the two equations:

$$\left\{ \begin{array}{l} D_0^2 \frac{d}{dx} (\tau) + \frac{d}{dx} (P) = 0 \\ D_0 \frac{d}{dx} (e) + \frac{D_0^3}{2} \frac{d}{dx} (\tau^2) + D_0 \frac{d}{dx} (\tau P) = \Phi. \end{array} \right. \quad (10)$$

Since the mass flow rate D_0 is uniform and since the source term Φ only depends on x , we can integrate this subsystem as follows on $[x_0, x]$:

$$\begin{cases} D_0^2(\tau - \tau_0) + (P - P_0) = 0 \\ D_0(e - e_0) + \frac{D_0^3}{2}(\tau^2 - \tau_0^2) + D_0(\tau P - \tau_0 P_0) = \int_{x_0}^x \Phi(s) ds, \end{cases} \quad (11)$$

where a subscript 0 denotes the value at x_0 which must be given by the user. The symbols without subscript denote the values at a point x . Due to our choice for the equation of states, we have:

$$e = \epsilon(Y, \rho, P) \quad \text{and} \quad e_0 = \epsilon(Y_0, \rho_0, P_0).$$

The first equation of (11) gives explicitly τ as a function of P and since we have $Y = Y_0$, the second equation of (11) is a non linear equation for P :

$$\begin{cases} \tau = \tau_0 - \frac{(P - P_0)}{D_0^2} \\ D_0(\epsilon(Y_0, \frac{1}{\tau}, P) - e_0) - \frac{(P^2 - P_0^2)}{2D_0} = \int_{x_0}^x \Phi(s) ds. \end{cases} \quad (12)$$

Hence, solving this equation for P allows to compute the value for τ (with the first equation of (12)), and then, since $D_0 = \rho_0 U_0 = \rho U$, we get U . Obviously, depending on the equation of state ϵ , Φ and D_0 , the problem can have one, several or no solution. Moreover it can be complex to solve and it may require the use of numerical algorithm to compute P at each x .

7 Appendix B: The VFROENCV-C and VFROENCV scheme

The VFROENCV and the VFROENCV-C schemes rely on the VFROe-ncv scheme using the variable (Y, τ, U, P) [2]. Let us first recall the algorithm of the latter.

For the sake of simplicity, we restrict to regular meshes of size Δx such that $\Delta x = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$, $i \in \mathbb{Z}$. We denote Δt the time step, where $\Delta t = t^{n+1} - t^n$, $n \in \mathbb{N}$. In order to approximate solutions of the exact solution $W \in \mathbb{R}^p$ of the conservative hyperbolic system:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} (W) + \frac{\partial}{\partial x} (F(W)) = 0 \\ W(x, 0) = W_0(x) \end{cases}$$

with $F(W)$ in \mathbb{R}^p . Let W_i^n be the approximate value of $\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} W(x, t^n) dx$.

Integrating over $[x_{i-\frac{1}{2}}; x_{i+\frac{1}{2}}] \times [t^n; t^{n+1}]$ provides:

$$W_i^{n+1} = W_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\phi_{i+\frac{1}{2}}^n - \phi_{i-\frac{1}{2}}^n \right)$$

The numerical flux $\phi_{i+\frac{1}{2}}^n$ through the interface $\{x_{i+\frac{1}{2}}\} \times [t^n; t^{n+1}]$ is defined below. The time step must agree with a CFL condition detailed below. The flux $\phi_{i+\frac{1}{2}}^n$ depends on W_i^n and W_{i+1}^n when restricting to first order schemes. The approximate Godunov flux $\phi(W_L, W_R)$ is obtained by solving exactly the following linear 1D Riemann problem:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} (Z) + B(\hat{Z}) \frac{\partial}{\partial x} (Z) = 0 \\ Z(x, 0) = \begin{cases} Z_L & \text{if } x < 0 \\ Z_R & \text{otherwise} \end{cases} \end{cases} \quad (13)$$

and initial condition: $Z_L = Z(W_i)$ and $Z_R = Z(W_{i+1})$. The matrix:

$$B(Z) = (W_{,Z}(Z))^{-1} A(W(Z)) W_{,Z}(Z)$$

($A(W)$ has the same eigenvalues as the Jacobian matrix of flux $F(W)$). Once the exact solution $Z^*(\frac{x}{t}; Z_L, Z_R)$ of this approximate problem (13) is obtained, the numerical flux is defined as:

$$\phi(W_L, W_R) = F(W(Z^*(0; Z_L, Z_R)))$$

Let us set \tilde{l}_k , $\tilde{\lambda}_k$ and \tilde{r}_k , $k = 1, \dots, p$, left eigenvectors, eigenvalues and right eigenvectors of matrix $B(\hat{Z})$ respectively. The solution $Z^*(\frac{x}{t}; Z_L, Z_R)$ of the linear Riemann problem is defined everywhere (except along $\frac{x}{t} = \tilde{\lambda}_k$):

$$\begin{aligned} Z^* \left(\frac{x}{t}; Z_L, Z_R \right) &= Z_L + \sum_{\frac{x}{t} > \tilde{\lambda}_k} ({}^t \tilde{l}_k \cdot (Z_R - Z_L)) \tilde{r}_k \\ &= Z_R - \sum_{\frac{x}{t} < \tilde{\lambda}_k} ({}^t \tilde{l}_k \cdot (Z_R - Z_L)) \tilde{r}_k \end{aligned}$$

or in a slightly different form:

$$Z_R - Z_L = \sum_{k=1,p} ({}^t\tilde{l}_k \cdot (Z_R - Z_L)) \tilde{r}_k = \sum_{k=1,p} \tilde{\alpha}_k \tilde{r}_k \quad (14)$$

setting:

$$\tilde{\alpha}_k = {}^t\tilde{l}_k \cdot (Z_R - Z_L)$$

The only remaining unknown is the mean \hat{Z} which must comply with the condition:

$$\hat{Z}(Z_l = Z_0, Z_r = Z_0) = Z_0$$

The standard average which is used is:

$$\hat{Z}(Z_L, Z_R) = (Z_L + Z_R)/2$$

The explicit form of the approximate Godunov scheme will be:

$$W_i^{n+1} - W_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (F(W(Z^*(0; Z_i^n, Z_{i+1}^n))) - F(W(Z^*(0; Z_{i-1}^n, Z_i^n)))) = 0$$

A different prediction is obtained using instead:

$$\hat{Z}(Z_L, Z_R) = Z^*(0; Z_L, Z_R)$$

where the approximate value at the interface $Z^*(0; Z_L, Z_R)$ is obtained solving (13) with:

$$\hat{Z}(Z_L, Z_R) = (Z_L + Z_R)/2$$

This corresponds to the WFRoe-ncv scheme [9].

The two schemes VFROENCV and VFROENCV-C proposed in the sequel are based on the variable change $Z = (Y, \tau, U, P)$. Moreover, the velocity value of the average state $\hat{Z}(Z_L, Z_R) = (Z_L + Z_R)/2$ is replaced by the value of the velocity $U^*(0; Z_L, Z_R)$ which is computed through (13) as in the WFroe-ncv scheme.

At last, for the VFROENCV-C, the pressure $P^*(0; Z_L, Z_R)$ obtained by solving (13) is blended with the centred pressure $(P_L + P_R)/2$ as proposed in [4]. The blending function $f_b(M)$ for the pressure is based on the local Mach number

$$M = |U^*(0; Z_L, Z_R)| / \max(C_L, C_R),$$

where C_L and C_R are respectively the left and right sound speeds. We have chosen the function:

$$f_b(M) = \begin{cases} \frac{1 - \cos(\pi M / M_{lim})}{2}, & \text{if } M \leq M_{lim}, \\ 1, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

The modified interfacial pressure P_{LR}^* used to compute the numerical fluxes is then:

$$P_{LR}^* = f_b(M) P^*(0; Z_L, Z_R) + (1 - f_b(M)) \frac{P_L + P_R}{2};$$

where P_L and P_R are the left and right pressures. The parameter M_{lim} is the limit mach number above which the pressure correction is not activated.

8 Appendix C: The SEMI-IMP scheme

The algorithm detailed below is based on a fractional step method [19] and follows the classical idea of the so-called pressure correction schemes [3, 16, 18]. Each time step from t^n to t^{n+1} is divided into five steps:

- (i) a mass balance step allowing to update the density and to predict an approximation of the pressure;
- (ii) a momentum balance step allowing to update the velocity;
- (iii) an energy balance step allowing to update the total energy;
- (iv) a step for the pure convection of the mixture fractions $Y = \{\alpha, y, z\}$;
- (v) and source term step that accounts for the return to the thermodynamical equilibrium.

For each one of the above five steps (i) to (v), the time derivatives are discretized using an implicit Euler scheme. Moreover, the scheme used for the source term step (v) is exactly the same than that used with all the other schemes of the paper [13].

The time step is defined as $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$. By abuse of notation, for any variable Ψ , $\Psi^n = \Psi(t^n)$. Moreover $\Psi^{n+1,-}$ stands for the estimation of the variable Ψ during the fractionnal step, and we set $\delta\Psi = \Psi^{n+1,-} - \Psi^n$. All the variables are then updated (from $t^{n+1,-}$ to t^{n+1}) once the source term step (v) is achieved.

In the following, we set $Q = \rho U$, $\mathcal{E} = \rho E$, and we present the convective part (i.e. steps (i) to (iv)) of the scheme denoted by SEMI-IMP in the paper. It should be mentionned that this algorithm is conservativ and it allows then to retrieve the correct shock solutions.

8.1 Mass balance step

In this first step, pressure and density are implicit, while the velocity, the mixture fractions Y and the entropy are considered frozen at time t^n . The convective mass flux is computed as well, it will be noted \underline{Q}^* in order to distinguish it from the mass flux computed at the next step. The mass balance equation is integrated in time between t^n and t^{n+1} and in space over Ω :

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{Q} \right) d\Omega dt = 0.$$

The two terms of the above equation are treated separately. The divergence term is implicitly treated and Green formula is applied:

$$\int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t^{n+1}) - \rho(\mathbf{x}, t^n) d\Omega + \Delta t^n \int_{\Gamma} \underline{Q}^{n+1} \cdot \underline{n} d\Gamma = 0.$$

In fact, the momentum Q^{n+1} is approximated by the momentum \underline{Q}^* obtained through the following simplified momentum balance equation:

$$\partial_t Q + \nabla P(\rho, s) = 0, \quad (15)$$

which yields:

$$\underline{Q}^* = \underline{Q}^n - \Delta t^n \nabla P^{n+1,-}. \quad (16)$$

The finite volumes scheme becomes:

$$\text{vol}(\Omega) (\rho^{n+1,-} - \rho^n) + \Delta t^n \int_{\Gamma} \underline{Q}^* \cdot \underline{n} d\Gamma = 0.$$

It is then introduced that, for a constant entropy, we have:

$$\delta P = (c^2)^n \delta \rho, \quad (17)$$

with $(c^2)^n = c^2(P^n, \rho^n)$ (see remark 8.1). This linearization is then used to obtain the form:

$$\text{vol}(\Omega^\phi) \frac{1}{(c^2)^n} (P^{n+1,-} - P^n) + \Delta t^n \int_{\Gamma} \underline{Q}^* \cdot \underline{n} d\Gamma = 0. \quad (18)$$

Since \underline{Q}^* depends on $P^{n+1,-}$ through equation (16), the pressure $P^{n+1,-}$ can be computed from equation (18). This step then allows to obtain $P^{n+1,-}$, from which $\rho^{n+1,-}$ can be deduced using the relation (17). This update of the density is mandatory to ensure the mass conservation.

REMARQUE 8.1 Actually, for non constant entropy s , the relation is $dP = c^2 d\rho + \beta ds$ with $\beta = \frac{\partial P(\rho, s)}{\partial s}$. In the mass balance step, it is thus assumed that the entropy remains constant.

8.2 Momentum balance step

In this second step, the velocity is computed implicitly (and the mass flux), while the density and the pressure are known from the previous step; the total energy and the mixture fractions remain constant here. The momentum balance equation is integrated in time between t^n and t^{n+1} and in space over Ω :

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial Q}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{u} \otimes Q) + \nabla P \right) d\Omega dt = 0.$$

As for the mass balance step, the different terms of the equations are treated separately and applying Green formula, the following time scheme is obtained:

$$\begin{aligned} \text{vol}(\Omega) (\underline{Q}^{n+1,-} - \underline{Q}^n) + \Delta t^n \int_{\Gamma} (\underline{u}(\underline{Q} \cdot \underline{n}))^{n+1,-} d\Gamma \\ + \Delta t^n \int_{\Gamma} P^{n+1,-} \underline{n} d\Gamma = 0. \end{aligned}$$

This step allows to obtain $\underline{u}^{n+1,-}$, and thus $\underline{Q}^{n+1,-} = \rho^{n+1,-} \underline{u}^{n+1,-}$.

REMARQUE 8.2 It is possible to rewrite

$$\underline{Q}^{n+1,-} - \underline{Q}^n = \rho^n (\underline{u}^{n+1,-} - \underline{u}^n) + \underline{u}^{n+1,-} (\rho^{n+1,-} - \rho^n)$$

considering that the increment $(\rho^{n+1,-} - \rho^n)$ is known from the previous step.

8.3 Energy balance step

In this third step, the total energy is implicit computed, while the velocity, the pressure and the density are known from the previous steps and do not change. The mixture fractions Y still remain constant in this step. The energy balance equation (written in terms of the total energy) is integrated in time between t^n and t^{n+1} and in space over Ω :

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{u}(\mathcal{E} + P)) - \Phi \right) d\Omega dt = 0,$$

where Φ stands for the external energy source term.

Once again, the terms of the equation are treated separately and Green formula is applied. The following time scheme is deduced:

$$\begin{aligned} \text{vol}(\Omega) (\mathcal{E}^{n+1,-} - \mathcal{E}^n) + \Delta t^n \int_{\Gamma} (\underline{Q}^* \cdot \underline{n}) \left(\frac{\mathcal{E} + P}{\rho} \right)^{n+1,-} d\Gamma & \quad (19) \\ - \Delta t^n \text{vol}(\Omega) \Phi^{n+1,-} & = 0. \end{aligned}$$

We use the mass flux \underline{Q}^* computed during the mass balance step to ensure the consistency with the mass balance equation.

This step allows to obtain the variable $\mathcal{E}^{n+1,-}$.

8.4 Convection of the mixture fractions Y

In this fourth step, the mixture fractions Y are simply convected with the mass flux \underline{Q}^* computed during the mass balance step:

$$\text{vol}(\Omega) \rho^{n+1,-} (Y^{n+1,-} - Y^n) + \Delta t^n \int_{\Gamma} (\underline{Q}^* \cdot \underline{n}) Y^{n+1,-} d\Gamma = 0.$$

We use the mass flux \underline{Q}^* to ensure the consistency with the mass balance equation.

This step allows to obtain the variable $Y^{n+1,-}$.

8.5 Update of the variables at $t = t^{n+1}$

At the end of each time step, the variables are updated from $t^{n+1,-}$ to t^{n+1} as follows:

$$\begin{aligned} \rho^{n+1} &= \rho^{n+1,-} \\ \underline{u}^{n+1} &= \underline{u}^{n+1,-} \\ \mathcal{E}^{n+1} &= \mathcal{E}^{n+1,-} \\ Y^{n+1} &= Y^{n+1,-} \\ P^{n+1} &= P(Y^{n+1}, \rho^{n+1}, \epsilon^{n+1}) \\ \text{where: } \epsilon^{n+1} &= \frac{\mathcal{E}^{n+1}}{\rho^{n+1}} - \frac{1}{2}(\underline{u}^2)^{n+1} \end{aligned}$$

References

- [1] T. Barberon, P. Helluy, “Finite volume simulation of cavitating flows”, *Computers and Fluids*, vol. 34, pp. 832–858, 2005.
- [2] Buffard T., Gallouët T., Hérard J.-M., “A sequel to a rough Godunov scheme: application to real gases”, *Computers and Fluids*, Vol. 29 pp. 813–847, 2000.
- [3] Chorin A. J., “Numerical solutions of the Navier-Stokes equations”, *Math. Comp.*, Vol. 22 pp. 341–353, 1969.
- [4] Dellacherie S., “Analysis of Godonov type schemes applied to the compressible Euler system at low Mach number”, *J. of Comp. Physics*, Vol. 229 pp. 978–1016, 2010.
- [5] Eymard R., Gallouët T., Herbin R., “The finite volume method”, *Handbook for Numerical Analysis*, Ph. Ciarlet J.L. Lions eds, North Holland, 715–1022, 2000.
- [6] Ferrand M., Hérard J.-M., Le Coupancec E., Martin X., “Une formulation intégrale pour la modélisation d’écoulements fluides en milieu encombré”, EDF R&D technical report, H-I83-2015-05276-FR (in french), 2015.
- [7] Martin X., “Modeling fluid flows in obstructed media”, PhD Thesis, Aix Marseille Université, 2015, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01235089>
- [8] Gallouët T., Hérard J. M., Seguin N., “Some recent finite volume schemes to compute Euler equations using real gas EOS”, *Int. J. for Num. Methods in Fluids*, Vol. 39(12), pp. 1073–1138, 2002.
- [9] Gallouët T., Hérard J.-M., “A new approximate Godunov scheme with application to dense gas-solid flows”, *Conference: 17th AIAA CFD Conference*, Toronto, Canada, 2005, <http://dx.doi.org/10.2514/6.2005-4860>.
- [10] Gallouët T., Hérard J. M., Hurisse O., LeRoux A.Y., “Well-balanced schemes versus fractional step method for hyperbolic systems with source terms”, *Calcolo*, Vol. 43(4), pp. 217–251, 2006.
- [11] Godlewski E., Raviart P.-A., “Numerical analysis for hyperbolic systems of conservation laws”, Springer Verlag, 1996.
- [12] Helluy P., Hérard J.-M., Mathis H., Müller S., “A simple parameter-free entropy correction for approximate Riemann solvers”, *Comptes Rendus Mécanique*, Vol. 388 pp. 493–498, 2010.
- [13] Hurisse O., “Application of an homogeneous model to simulate the heating of two-phase flows”, *Int. J. on Finite Volumes*, Vol. 11 pp. 1–37, 2014, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01114808>.

- [14] Hurisse O., Le Coupanec E., “A new verification test case for the compressible module of Code_Saturne based on a non trivial steady-state solution for the Euler system with energy”, EDF R&D technical report, H-I83-2015-04602-EN, 2015.
- [15] Jung J., “Schémas numériques adaptés aux accélérateurs multicœurs pour les écoulements bifluïdes”, PhD. Thesis Strasbourg University (France), 2013, <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00876159>.
- [16] Patankar S.V., Spalding D.B., “A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows”, *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, Vol. 15(10) pp. 1787–1806, 1972.
- [17] Rusanov V.V., “Calculations of interaction of non-steady shock waves with obstacles”, *J. Comp. Math. Phys.*, Vol. 1 pp. 267–279, 1961.
- [18] Temam R., “On an approximate solution of Navier-Stokes equations by the method of fractional step”, *Arch. Ration. Mech. Anal.*, Vol. 32 pp. 377–385, 1969.
- [19] Yanenko N.N., “Méthode à pas fractionnaires. Résolution de problèmes poly-dimensionnels de physique mathématique”, Librairie Armand Colin, 1968.

4 Modélisation stochastique en thermohydraulique diphasique

4.1 Références

Mes travaux concernant la modélisation stochastique en thermohydraulique ont donné lieu à une publication [35] écrite en collaboration avec Jean-Pierre Minier, ainsi qu'une note interne non publiée [36], faisant respectivement l'objet des sections 4.2 et 4.3. J'ai également encadré le stage de fin d'études de C. Henry qui a permis de mettre en avant des pistes d'amélioration d'un code de simulation gaz-particules avec une approche couplée eulérienne - lagrangienne.

4.2 Quelques notions de modélisation lagrangienne stochastique

La modélisation lagrangienne stochastique fait appel à deux notions indépendantes : une description des écoulements suivant un point de vue lagrangien, et l'introduction de termes stochastiques dans les équations d'évolution. Lorsqu'on choisit d'adopter un point de vue lagrangien, la position des éléments de description des fluides est une variable tout comme l'est la vitesse, et le seul paramètre est alors le temps. Au contraire, dans une approche eulérienne, toutes les grandeurs de description des écoulements sont des fonctions du temps et de la position dans l'espace. L'aspect stochastique est quant à lui introduit afin de modéliser des phénomènes rapides par rapport à une échelle donnée représentative des phénomènes d'intérêt. Tous les phénomènes lents vis-à-vis de cette échelle sont pris en compte à l'aide de lois de fermetures déterministes, tandis que tous les phénomènes rapides sont modélisés par des fermetures faisant intervenir des mouvements browniens.

Le principal avantage du point de vue lagrangien est de permettre de traiter de manière plus précise l'advection par la vitesse. En effet, les équations d'évolution sont naturellement écrites comme des dérivées en temps le long des lignes de courant. En pratique, la discrétisation de l'écoulement est réalisée par des particules se déplaçant dans le domaine de simulation en suivant une ligne de courant. La contrepartie est que l'interaction entre les différentes particules peut nécessiter l'introduction de gradients en espace qui doivent être calculés par des méthodes de projection. De plus, l'ensemble des particules forme une sorte de maillage mobile déformable qui peut, selon la physique décrite, se concentrer ou se raréfier dans certaines zones du domaine de simulation, entraînant un appauvrissement local de la description de l'écoulement. Les approches avec point de vue eulérien permettent de simuler les phénomènes sur des maillages fixes et il est donc possible de contrôler plus facilement la finesse de discrétisation (spatiale).

Classiquement les modèles d'écoulements diphasiques sont construits à partir d'opérations de moyennes sur des systèmes d'équations pour des phases pures, délimitées par une indicatrice de phase dépendant du temps et de l'espace. Ces moyennes sont statistiques et seuls les deux premiers moments sont conservés dans le modèle (par exemple dans la section 2.2, le modèle ne porte que sur les moments d'ordre 1). Les EDP sur les moments d'ordre supérieur sont alors remplacées par des fermetures utilisant les moments d'ordre faible. Un modèle stochastique permet de conserver l'information sur tous les moments et donc de décrire complètement la densité de probabilité des phénomènes modélisés ⁴. Autrement dit, d'un point de vue statistique, un modèle sur champs moyens contient moins d'information statistique qu'un modèle stochastique. En revanche, les simulations stochastiques sont faites avec une méthode de Monte-Carlo et la précision des résultats

⁴D'un point de vue numérique il faut néanmoins simuler d'autant plus d'échantillons que l'on veut de moments.

est donc assujettie à la loi des grands nombres. Ce n'est pas le cas pour une simulation eulérienne pour laquelle les moments simulés ne sont pas entachés de ce biais statistique.

En d'autres termes, les deux approches ne fournissent pas les mêmes informations avec la même précision. Elles sont en fait complémentaires. L'exploitation de cette complémentarité est à la base des travaux [46, 14, 13] menés dans le cadre diphasique gaz-particules. Les travaux présentés dans cette section ont pour objectif de construire un modèle diphasique eau-vapeur compressible sous forme lagrangienne stochastique. L'avantage de construire en premier lieu un modèle lagrangien stochastique est qu'il est ensuite possible d'en dériver un modèle eulérien sur champs moyens, ce qui assure donc naturellement la compatibilité entre les deux points de vue. Ce travail a été décomposé en deux parties correspondant aux deux sections suivantes. Dans la section 4.3, un modèle bifluide à relaxation en pression est écrit sous forme lagrangienne stochastique, tout en se contentant d'une description simple de la thermodynamique. Ensuite, la section 4.4 propose une description plus complexe de la thermodynamique en se restreignant au cadre monophasique compressible.

4.3 Un modèle diphasique compressible à relaxation en pression avec changement de phase

Dans [35], le formalisme de modélisation lagrangien stochastique proposé dans [46, 49, 11] est adapté au cadre des écoulements diphasiques compressibles avec changement de phase. Deux éléments nouveaux sont apportés.

Le premier élément nouveau concerne la normalisation de la densité de probabilité permettant d'obtenir les grandeurs moyenne eulériennes à partir des grandeurs lagrangiennes instantanées et la notion de conservation du volume qui y est attachée. Cette notion existe dans le cas des écoulements gaz-particules mais sous une forme simplifiée, du fait de l'incompressibilité. Une grandeur eulérienne essentielle apparaît : le taux de présence volumique α . Celle-ci n'a aucun sens au niveau du modèle stochastique lagrangien et n'apparaît que lorsque l'on calcule les moments des variables, et donc n'a de sens que pour le modèle eulérien portant sur les champs moyens. Elle est l'analogue du taux de présence statistique du modèle de la section 2.2 mais intègre une information volumique. C'est par cette variable que s'exprime la notion de conservation du volume qui impose qu'un volume élémentaire doit être toujours être occupé soit par de la vapeur soit par du liquide. Afin de respecter cette notion, il est impératif que les termes de modélisation des deux phases soient cohérents et respectent une contrainte portant sur la modélisation des volumes. Autrement dit, pour qu'un modèle lagrangien stochastique permette d'assurer la conservation du volume, il doit respecter une contrainte portée par des grandeurs moyennes eulériennes.

Le deuxième élément nouveau est le modèle de changement de phase. Ce dernier exploite la description particulière du modèle lagrangien stochastique et est basé sur le déséquilibre en potentiel chimique. Si sa mise en oeuvre dans le modèle lagrangien stochastique est trivial, sa traduction dans le modèle eulérien est difficile. Ce qui laisse penser que dans une simulation couplée, le changement de phase devrait être géré par le code lagrangien stochastique. Etant donné le caractère volumique du taux de présence des phases, le changement de phase intervient sur l'équation d'évolution de α lorsque l'on considère le modèle sur champs moyens. Par ailleurs, si on omet ce terme de transfert de masse, le jeu d'équations du modèle eulérien est le même que celui

de la section 2.2, mais il faut garder à l'esprit que le contenu des variables des deux modèles doit être interprété légèrement différemment, en particulier à cause du caractère volumique du taux de présence (alors que dans la section 2.2, on a un taux de présence statistique local sans information sur les proportions volumiques des deux phases).

Au final, un modèle stochastique complet est proposé. Ce dernier prend en compte de manière très simple la turbulence et utilise une description basique de la thermodynamique. Cet aspect a par la suite été traité dans un cadre monophasique, comme décrit en section 4.3. Ce modèle permet de prendre en compte le retour à l'équilibre des vitesses phasiques (force de trainée) et le retour à l'équilibre en pression. Ce dernier est obtenu en utilisant une loi de Rayleigh-Plesset simplifiée et il est également possible d'utiliser une formulation plus complexe mettant en jeu la pulsation des bulles comme dans [18] ou encore la déformation de bulles (sous forme simplifiée d'un terme de rappel de la surface de la bulle vers la surface de la bulle sphérique équivalente à volume constant).

Cette section reprend le contenu de l'article [35] qui est reproduit en annexe 5.3.

4.4 Modélisation du comportement thermodynamique d'un fluide compressible

Dans le premier travail [35] la modélisation de la thermodynamique de chaque phase a fait l'objet de peu d'attention. Cet aspect a donc été étudié ultérieurement dans le cadre monophasique. Cette limitation au cadre monophasique n'est *a priori* pas restrictive puisque dans le modèle diphasique [35] les comportements thermodynamiques de chaque phase sont indépendants. En revanche, on se limite aux lois d'état de gaz parfait, qui par leur linéarité permettent d'établir plus de résultats.

Le travail [36] reprend donc le formalisme proposé dans [35] en l'appliquant au cadre monophasique. Un modèle lagrangien stochastique est proposé, pour lequel les variables thermodynamiques sont le volume et l'énergie interne. Le choix du volume permet d'exprimer simplement la contrainte de conservation du volume suivant la même approche que celle issue de la section 4.3 et [35] ; tandis que le choix de l'énergie interne permet d'assurer naturellement le premier principe de la thermodynamique.

Les choix de modélisation concernant les évolutions temporelles des variables sont guidés par la volonté d'obtenir des champs moyens dont l'évolution est régie par le système d'Euler avec équation d'énergie. En d'autres termes le modèle stochastique est construit pour que le modèle eulérien sur champs moyens associé soit le système d'Euler. Cela impose donc des contraintes sur certains termes de modélisation. Le comportement des solutions du modèle stochastique final n'est pas facile à étudier de façon analytique et il reste un travail conséquent à effectuer pour vérifier si les choix effectués sont effectivement pertinents ou si d'autres solutions sont préférables. On notera également que le modèle proposé a des points communs avec celui construit dans [11]. Une autre difficulté vient de la limitation du présent travail aux lois d'état de gaz parfait. L'extension aux lois quelconques semble délicate si on désire suivre la même démarche.

Cette section reprend le contenu de la note interne [36] (non publiée) reproduite en annexe 5.4.

5 Annexes

5.1 Annexe de la section 4.2

Modélisation stochastique d'écoulements diphasiques avec changement de phase

Olivier Hurisse^a Jean-Pierre Minier^a

^aEDF R&D, Dépt. MFEE, 6 quai Watier, 78400 Chatou, France.

Résumé

La modélisation stochastique avec point de vue lagrangien a déjà été développée et appliquée au cadre des écoulements monophasiques et des écoulements diphasiques incompressibles. Cet article propose une extension de ce formalisme aux écoulements diphasiques compressibles avec changement de phase (de type eau-vapeur par exemple). L'accent est mis sur deux aspects essentiels, dont la formulation est nouvelle en modélisation stochastique : un modèle de changement de phase et l'expression d'une contrainte portant sur la conservation du volume. Enfin, à titre d'exemple, des éléments de réflexion sont présentés pour deux modèles bifluides.

Abstract

Stochastic modelling of two-phase flows including phase change. Stochastic modelling has already been developed and applied for single-phase flows and incompressible two-phase flows. In this article, we propose an extension of this modelling approach to two-phase flows including phase change (e.g. for steam-water flows). Two aspects are emphasised: a stochastic model accounting for phase transition and a modelling constraint which arises from volume conservation. To illustrate the whole approach, some remarks are eventually proposed for two-fluid models.

Key words: Fluid mechanics; two-phase flow; stochastic process; phase change; compressible; bubble

Mots-clés : Mécanique des fluides ; écoulement diphasique ; processus stochastique ; changement de phase ; compressible ; bulle

Abridged English version

Over the last decades, modelling of compressible two-phase flows has been tackled using approaches based on sets of Partial Differential Equations (PDEs), whose unknowns are eulerian mean fields [1,2]. Therefore, the derivation of constitutive laws, even those describing highly non-linear local phenomena

Email addresses: olivier.hurisse@edf.fr (Olivier Hurisse), jean-pierre.minier@edf.fr (Jean-Pierre Minier).

(e.g. the phase change), are directly done using mean fields, which represent a restricted statistical information. These eulerian models are satisfactory for a certain range of industrial situations. Nonetheless, when the governing phenomena are highly non-linear (e.g. when dealing with cavitation, polydispersed bubbles, nucleate boiling ...), such approaches can lead to descriptions that are not accurate enough. In these situations, one can benefit of the stochastic modelling approach using a lagrangian point of view [3,4] (or lagrangian stochastic modelling). This approach has already been applied to different configurations: incompressible single-phase flows have been widely addressed, see [3] among others for a complete presentation, whereas the effect of compressibility in single-phase flows has been less investigated [5]. Modelling of two-phase flows introduces new aspects, some of which have been addressed in [4] for incompressible flows. In the present paper, we propose an extension to compressible two-phase flows. It is worth recalling that the lagrangian stochastic approach amounts to closing the Probability Density Function (PDF) of the variables chosen to describe the flow, from which classical PDEs for the corresponding mean fields may be obtained.

Flows are described using particles, where each particle represents a sufficient number of molecules so that the classical notions of the continuum mechanics still make sense. Each particle of phase k (with $k = 1, 2$) is associated with a mass m_k , a position in the physical space x_k , a velocity u_k , a volume v_k and an internal energy e_k . This set of variables is one possible minimal set of variables necessary to describe non-uniform transient compressible flows (in the compressible single-phase case depicted in [5], the pressure has been chosen instead of the volume). All other quantities are functions of these five variables: for example pressures $p_k = \mathcal{P}_k(v_k, e_k)$ and the densities $\rho_k = m_k/v_k$. An important point to be put forward is that, since the position in space x_k and the velocity u_k (and thus the trajectory) are variable, we are dealing with a lagrangian description. The time evolution of the variables is governed by stochastic differential equations, each one involving two modelling terms: one term that describes the evolution of the expectation, and one term defining the behaviour of the dispersion around the expectation. These terms are not detailed in the sequel, except those for the volumes v_k .

Phase change is modelled using two ingredients: a condition to fulfill for each particle to change phase and an instantaneous “transformation” applied to the variables $(m_k, x_k, u_k, v_k, e_k)$ when the transition occurs. The choice for the latter is straightforward: the value of the variables does not change. Despite its simplicity, this choice obviously guarantees conservation of the variables $(m_k, x_k, u_k, v_k, e_k)$ and of the total local number of particles. Phase transition is assumed to be instantaneous. In order to account for the non-zero characteristic time scale τ for the phase change of a set of identical particles, we add a variable \mathcal{D} to each particle. This variable follows an exponential law with a parameter $1/\tau$. It represents the lifetime of the particle before the phase transition. Finally, phase change occurs if and only if it is followed by a decrease of the chemical potential and if the realization D of \mathcal{D} is less than δt , where the latter stands for the physical time represented by the phase transition (i.e. for example, δt is a time step when considering a numerical scheme).

Once the model has been defined, it is possible to write a Chapman-Kolmogorov equation (2) which governs the time evolution of the PDF $f^L(t; Z_1^L, Z_2^L)$ of the process in the phase-space, where $Z_k^L = (x_k^*, u_k^*, m_k^*, v_k^*, e_k^*)$ for $k = 1, 2$. This PDF is the basis of the definition of the volumic fraction for the phase k :

$$\alpha_k(t, x) \stackrel{def}{=} \int v_k^* \delta(x - x_k^*) f^L(t; Z_1^L, Z_2^L) dZ_1^L dZ_2^L.$$

This eulerian field represents the fraction of volume per unit of volume occupied by the phase k . In order to ensure the consistency of our model with the physics, the sum of the volumic fractions must always be equal to one. This is related to the so-called volume conservation property. The Chapman-Kolmogorov equation for f^L leads to PDEs (3) on the expectation of any function of Z_k^L . Using the PDEs (3) for the expectation of the inverse of the densities, two PDEs for α_k may be found. Then, it can be shown that the constraint $\alpha_1(t, x) + \alpha_2(t, x) = 1$ is equivalent to the constraint (5) on the modeling terms A_k^v for

the volumes of the particles. When this constraint is fulfilled, it appears that all the PDE systems on the mean fields that can be derived from the stochastic model contain the two equations (6).

It is interesting to focus on the two equations (6) for dispersed spherical bubbles in a liquid. On the one hand, a simplified Rayleigh-Plesset equation (8) for the pulsation of the bubbles can be used to define A_1^v . Then the modelling term A_2^v is chosen according to (5), to ensure the property of volume conservation. The resulting equation for α_1 is close to the equation of the models of [7,8,9,10]. On the other hand, a modelling term for the bubble volume that allows to retrieve the standard two-fluid model can be exhibited (12). It is very intricate and its exact physical content remains an open question.

The modelling approach proposed herein suggests some forthcoming works. First, systems of PDEs can be derived from a physical description of compressible two-phase flows, carried out by a lagrangian stochastic model. In this approach, the physical hypotheses underlying PDE systems appear more clearly. At last, numerical simulations of two-phase flows involving phase transition could be improved by applying hybrid schemes, following the ideas developped in [12,13]. The latter requires to have a stochastic model and a PDEs system derived from this model.

1. Introduction

La physique des écoulements diphasiques compressibles est complexe et, à ce jour, certains de ses aspects restent encore mal compris. C'est notamment le cas des échanges de masse, de quantité de mouvement ou d'énergie entre les phases qui constituent des éléments clefs dans la phénoménologie des applications industrielles.

Depuis plusieurs dizaines d'années la modélisation mathématique de tels écoulements repose essentiellement sur des approches basées sur des champs eulériens moyens. Les systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP) associés à ces modèles sont obtenus en appliquant des opérateurs de moyenne sur des "poches de fluide" monophasiques [1,2]. D'un point de vue formel, une fonction indicatrice définit la répartition spatio-temporelle des phases et dans chacune des zones ainsi décrites un système d'EDP monophasique (Euler par exemple en compressible) régit l'évolution instantanée des champs du fluide. Les systèmes d'EDP pour les champs moyens sont ensuite obtenus par application d'un opérateur de moyenne. Finalement, la modélisation des échanges entre les phases est réalisée *a posteriori* sur les champs moyens obtenus.

Les approches basées sur une description particulière avec modélisation stochastique permettent d'établir les modèles sur les grandeurs instantanées et non sur les champs moyens [3,4]. Ensuite, une fois le modèle instantané établi, il est possible d'en déduire un modèle basé sur un système EDP pour les champs moyens. Ce dernier n'est pas équivalent à la description instantanée, mais il constitue une extraction d'une partie de son information. On peut donc dériver un système d'EDP sur des champs moyens à partir d'un modèle particulière stochastique.

Il est important de noter que les deux approches sont complémentaires. Suivant la physique que l'on veut modéliser et suivant l'information que l'on cherche à obtenir, l'une ou l'autre des approches est préférable. L'atout majeur de la modélisation particulière stochastique repose dans sa capacité à traiter sans approximation les phénomènes locaux non-linéaires comme la convection, les réactions chimiques, etc ...

Le travail présenté constitue une extension aux écoulements diphasiques compressibles d'un formalisme de modélisation particulière stochastique qui est déjà appliqué aux écoulements monophasiques réactifs [3,5] (compressibles et incompressibles) ainsi qu'aux écoulements diphasiques incompressibles de type fluide-particules [4]. En effet, ce formalisme est tout particulièrement adapté à la modélisation des écoulements diphasiques compressibles, car il permet notamment de traiter de façon naturelle le change-

ment de phase et la convection. Par ailleurs, il permet d'expliciter le lien entre une description lagrangienne stochastique et un modèle d'EDP portant sur des champs moyens.

Dans ce qui suit, on se propose tout d'abord d'écrire un modèle particulaire stochastique simple prenant en compte le changement de phase. On présente ensuite les outils permettant d'obtenir un modèle eulérien sur les champs moyens. L'accent est mis sur la formulation d'une contrainte de conservation du volume qui n'est pas explicitement abordée dans [4]. Ce dernier point s'avère essentiel, d'une part car il assure la consistance physique du modèle, mais aussi parce que son étude permet d'ouvrir des perspectives sur les types de modèles sur champs moyens que l'on peut déduire d'une telle approche. Ce lien est illustré dans la section 5 à l'aide de modèles existants. Dans la section 5.1, le comportement du volume d'une bulle est décrit grâce à une loi de type Rayleigh-Plesset simplifiée, puis une EDP décrivant le comportement moyen des bulles est déduite de la formulation instantanée.

2. Le modèle stochastique lagrangien

Le principe de la description particulaire du fluide est de représenter l'écoulement par un ensemble de particules discrètes. Les particules sont des objets mathématiques ponctuels auxquels sont attachées les variables permettant de décrire l'écoulement : volume, pression, vitesse... Chaque particule représente un ensemble de molécules suffisamment grand pour que les notions classiques de mécanique des milieux continus aient un sens, notamment les grandeurs thermodynamiques. Si la position dans l'espace est vue comme une variable attachée aux particules, la trajectoire de ces dernières devient elle-même une variable. On parle alors de description particulaire lagrangienne, par opposition aux descriptions eulériennes pour lesquelles la position en espace est un paramètre.

L'évolution en temps des variables de chaque particule est régie par un système d'équations différentielles en temps (et non en espace puisque la position n'est pas un paramètre mais une variable). Parmi les phénomènes participant à la description de cette évolution, certains peuvent être modélisés de manière stochastique, ce qui reflète le manque d'information associé au choix de la description particulaire (probabilités à une particule ou à N particules, voir [4]). L'évolution en temps est alors déterminée par un système d'équations différentielles stochastiques (EDS).

Le modèle que l'on se propose d'écrire repose sur ces deux principes : description particulaire lagrangienne et modélisation stochastique, ce que l'on désigne par modélisation lagrangienne stochastique.

Le point de départ de cette construction est le choix des variables de description des écoulements que l'on souhaite modéliser. En pratique, le jeu de variables peut être différent pour les deux phases, mais on se contentera de prendre le même ensemble de variables pour les deux phases. Puis, une fois le jeu de variables choisi, le système d'EDS pour chaque phase sera décrit. La construction du modèle est achevée par la description de la prise en compte du changement de phase, qui est traité de façon particulière.

Pour conserver des équations les plus compactes possibles, on se référera à l'indice $k = 1$ pour la phase 1 et $k = 2$ pour la phase 2. Ainsi lorsque l'on s'intéresse à la phase d'indice k , l'indice $3 - k$ désigne l'autre phase : si $k = 1$ (resp. $k = 2$), alors $3 - k = 2$ (resp. $3 - k = 1$). De plus, les sections de présentation du formalisme et du modèle sont écrites dans un cadre mono-dimensionnel, c'est-à-dire que les positions et les vitesses sont scalaires et que les volumes sont homogènes à des distances. L'extension à l'espace tri-dimensionnel est triviale et la dernière section est écrite dans ce cadre. Par ailleurs, il est possible d'enrichir la modélisation proposée en introduisant de nombreuses variables, mais on se limite dans la suite aux seules variables essentielles pour décrire des écoulements diphasiques compressibles.

2.1. Le choix des variables de description

Le choix des variables est essentiel car il détermine les phénomènes qui peuvent être pris en compte dans la modélisation et ceux qui ne le peuvent pas. On se limite ici aux variables indispensables à la description des écoulements diphasiques compressibles. Chaque particule de phase k , et de masse m_k , porte donc une information sur sa propre trajectoire grâce à une position x_k et à une vitesse u_k . Leur thermodynamique est, quant à elle, décrite par un volume v_k et une énergie interne e_k . Pour chaque phase le jeu de variables est donc : m_k, x_k, u_k, v_k et e_k .

Toute autre grandeur associée à la particule doit s'exprimer en fonction de ce jeu de variables. C'est notamment le cas de la pression et de la densité de la particule : $p_k = \mathcal{P}_k(v_k, e_k)$ et $\rho_k = m_k/v_k$; où \mathcal{P}_k est une fonction donnée (loi d'état). Le choix de définir deux pressions différentes pour les deux phases s'explique par la volonté de pouvoir prendre en compte les variations de volume associés aux écarts de pression entre phases, comme dans le cas des équations de type Rayleigh-Plesset. Ce point sera éclairé dans la section 5.

La notion de phase vue a été introduite dans [4] pour la modélisation de la vitesse. Elle repose sur le principe que les trajectoires des particules des deux phases sont différentes : on définit pour la phase 1 la vitesse $u_1^{s,2}$ qui est la vitesse de phase 2 vue par une particule de phase 1 se déplaçant à vitesse u_1 . Par souci de simplicité, de telles variables ne sont pas définies ici. Néanmoins, les résultats présentés dans le reste de ce document restent valides avec ou sans ces variables supplémentaires.

2.2. Le choix des équations d'évolution

Il y a deux manières d'écrire une EDS sur une variable Φ . La forme intégrale :

$$\Phi(t) - \Phi(t_0) = \int_{t_0}^t A dt + \int_{t_0}^t B dw_t,$$

est la plus correcte d'un point de vue mathématique, mais on utilisera la notation $d\Phi = A dt + B dw_t$ qui a l'avantage de la concision. Dans ces deux équations, w_t désigne un processus stochastique de Wiener et la deuxième intégrale du terme de droite est définie au sens de Ito [6]. Les termes A et B modélisent respectivement les phénomènes lents et rapides.

Le système décrivant l'évolution en temps du jeu de variables des particules est donc composé de cinq EDS. La première assure la constance de la masse pour chacune des particules : $dm_k = 0$. En fait, les masses des particules peuvent être différentes, mais chaque particule garde la même masse au cours du temps. Les deuxième et troisième équations définissent la trajectoire en espace des particules :

$$dx_k = u_k dt, \quad du_k = A_k^u dt + B_k^u dw_k^u.$$

Enfin, les deux dernières équations portent sur la thermodynamique :

$$dv_k = A_k^v dt + B_k^v dw_k^v, \quad de_k = A_k^e dt + B_k^e dw_k^e.$$

Cette dernière équation exprimera le premier principe de la thermodynamique. L'ensemble des termes de modélisation A_k^u, A_k^e, B_k^u et B_k^e ne sera pas explicité dans ce document, en revanche des fermetures seront proposées à titre d'exemple pour A_k^v et B_k^v .

2.3. Prise en compte du changement de phase

La modélisation du changement de phase avec une approche lagrangienne stochastique est fondamentalement différente de celles proposées pour les approches classiques par EDP sur des champs moyens, où

elle est souvent identifiée avec le transfert de masse. Dans l'approche adoptée ici, le changement de phase n'est pas pris en compte en faisant varier la masse de chaque particule (d'où la forme de l'équation de masse définie dans la section 2.2), mais en modifiant le nombre de particules de chaque phase.

La transition de phase d'une particule est considérée comme instantanée. La prise en compte du temps caractéristique τ de transition de phase pour un ensemble de particules est décrite un peu plus bas dans cette section, elle est associée à une variable aléatoire \mathcal{D} représentant une durée de vie. Deux ingrédients sont alors nécessaires pour définir le changement de phase : (i) une règle définissant les nouvelles valeurs des variables de la particule après la transition et (ii) une condition à remplir pour que la transition de phase soit effective.

Lorsqu'une particule change de phase, les valeurs des différentes variables sont égales aux valeurs correspondantes aux mêmes variables pour la particule avant la transition. En d'autres termes, si une particule de phase k associée aux variables $(m_k, x_k, u_k, v_k, e_k)$ change de phase pour devenir une particule de phase $3-k$, alors on définit :

$$m_{3-k} = m_k, \quad x_{3-k} = x_k, \quad u_{3-k} = u_k, \quad v_{3-k} = v_k, \quad e_{3-k} = e_k.$$

Si on attribuait une couleur différente pour chacune des phases, la définition ci-dessus revient à dire que lorsqu'elle change de phase la particule change juste de couleur. L'avantage de cette définition est que l'on assure naturellement la conservation de la masse du mélange, du volume du mélange, de la quantité de mouvement du mélange et de l'énergie du mélange.

Remarque. Il est possible de faire d'autres choix concernant les grandeurs conservées lors de la transition de phase. Il est par exemple envisageable de conserver la pression au lieu du volume :

$$\mathcal{P}_{3-k}(v_{3-k}, e_{3-k}) = \mathcal{P}_k(v_k, e_k).$$

Néanmoins, le choix qui est fait ici de conserver le volume permet d'avoir une expression simple de la notion de conservation du volume du mélange présentée dans la section 4.

Pour compléter la définition du changement de phase, une condition doit être spécifiée. Classiquement, en modélisation thermodynamique, un volume de fluide change de phase si et seulement si ce changement s'accompagne d'une diminution du potentiel chimique associé. Si $\mu_k(v_k, e_k)$ désigne ce potentiel chimique, et si (v_k, e_k) et (v_{3-k}, e_{3-k}) sont les grandeurs thermodynamiques associées à la particule respectivement avant et après la transition de phase, la condition ci-dessus se traduit par le respect de l'inégalité :

$$\mu_k(v_k, e_k) > \mu_{3-k}(v_{3-k}, e_{3-k}).$$

En fait, cette inégalité traduit le caractère irréversible de la transition de phase pour des variables de descriptions données.

Par définition la transition de phase est considérée comme instantanée pour les particules prises individuellement. Afin que le temps caractéristique associé au changement de phase d'un ensemble de particules ne soit pas nul, une condition supplémentaire est nécessaire. On suppose donc que la transition de phase instantanée représente une durée physique δT . Par exemple pour une simulation numérique, cette durée sera le pas de temps de discrétisation. On introduit une variable aléatoire \mathcal{D} pour chaque particule. Celle-ci suit une loi exponentielle de paramètre $1/\tau$, où τ est le temps caractéristique de transition de phase pour un ensemble de particules. La condition supplémentaire de transition de phase est que la réalisation D de \mathcal{D} soit inférieure à δT , soit : $D < \delta T$. En d'autres termes, cette variable D modélise la "durée de vie" qu'il reste à la particule avant qu'elle ne change de phase. Si cette durée est supérieure au temps physique représenté par la transition de phase, alors la particule n'a pas le temps de changer de phase. Ainsi, le temps caractéristique de changement de phase d'un ensemble de particules est τ . Au final, la condition de changement de phase est donc :

$$\mu_k(v_k, e_k) > \mu_{3-k}(v_{3-k}, e_{3-k}) \quad \text{et} \quad D < \delta T.$$

La transition de phase telle qu'elle est décrite ci-dessus correspond à un mécanisme très simple. Il consiste à modifier uniquement la phase à laquelle la particule appartient, les grandeurs qui lui sont attachées restant inchangées. Par ailleurs, il est essentiel de noter que ce modèle de changement de phase est indépendant des modèles associés aux équations d'évolution des particules (section 2.2). Cette distinction est flagrante lorsque l'on considère l'équation de Chapman-Kolmogorov (section 3.2) : les termes de modélisation associés aux EDS correspondent à des termes de dérivées d'ordre 1 dans l'espace des phases, tandis que le modèle de changement de phase est présent en tant que terme source.

3. Description dans l'espace des phases

Le modèle de la section précédente utilise une description basée sur des processus stochastiques. Il est donc naturel d'y associer une fonction densité de probabilité (FDP) dont les arguments sont : le temps et les variables de description. Cette FDP est régie dans l'espace des phases (i.e. l'espace constitué par l'ensemble des valeurs possibles pour les variables de description) par une équation de type Chapman-Kolmogorov [6]. Il est alors possible de décrire le comportement de champs moyens de fonctions des variables de description.

3.1. Quelques définitions sur l'espace des phases

Pour toute variable, son image dans l'espace des phases sera notée à l'aide d'une étoile. On définit sur cet espace deux vecteurs pour chaque phase : le premier correspondant à un point de vue lagrangien $Z_k^L = (x_k^*, u_k^*, m_k^*, v_k^*, e_k^*)$ et le second à un point de vue eulérien $Z_k^E = (u_k^*, m_k^*, v_k^*, e_k^*)$. On notera par la suite $Z^L = (Z_1^L, Z_2^L)$. La FDP lagrangienne jointe notée f^L a pour arguments le paramètre temps t et les vecteurs de variables lagrangiens Z_k^L . La quantité $f^L(t; Z^L)dZ^L$ représente alors la probabilité de trouver le processus stochastique $(x_1, u_1, m_1, v_1, e_1, x_2, u_2, m_2, v_2, e_2)$ dans un voisinage dZ^L autour de l'état Z^L à l'instant t . On notera que cette quantité est sans dimension, et donc f^L est homogène à l'inverse de Z^L . L'intégration de f^L sur l'ensemble de l'espace des phases donne naturellement 1 à chaque instant t :

$$\int f^L(t; Z^L)dZ^L = 1 ;$$

et la moyenne de toute fonction $H(Z^L)$ de la variable Z^L contre f^L s'écrit alors :

$$\langle H(Z^L) \rangle^L(t) \stackrel{def}{=} \int H(Z^L)f^L(t; Z^L)dZ^L.$$

A partir de cette FDP jointe, on définit deux fonctions de densité marginales eulériennes associées à chacune des phases :

$$f_k^E(t, x; Z_k^E) \stackrel{def}{=} \int \delta(x - x_k^*)f_k^L(t; Z_k^L)dx_k^*, \quad k = 1, 2,$$

où $\delta(\cdot)$ désigne la fonction de Dirac. Ces fonctions de densité ne sont plus des FDP car leur intégrale sur l'espace des phases ne donne pas toujours 1. Une conséquence de la restriction en espace associée à la fonction de Dirac est que la position devient un paramètre et non plus une variable : avec la définition de f_k^E , on adopte le point de vue eulérien. On définit ensuite la fraction volumique α_k qui dépend du temps et de l'espace (en tant que paramètre) :

$$\alpha_k(t, x) \stackrel{def}{=} \int v_k^* f_k^E(t, x; Z_k^E)dZ_k^E.$$

Cette grandeur définit la proportion de volume occupée par la phase k en x à l'instant t . La fonction de Dirac est homogène à l'inverse d'un volume, en conséquence un rapide calcul permet de remarquer que

α_k est sans dimension. Par ailleurs, les volumes v_k^* étant strictement positifs, α_k est positive et s'annule si statistiquement aucune particule de phase k ne se trouve en x à l'instant t . La fraction volumique a une grande importance dans le cadre des écoulements diphasiques, car elle assure en partie le couplage entre les phases (ce point est abordé dans la section 4).

Pour toute grandeur $H_k(Z_k^E)$ ne dépendant que de Z_k^E , et donc ne dépendant pas de la position de la particule, on définit deux grandeurs moyennes $\langle H_k \rangle_k^{\mathcal{R}}$ (qui correspond, dans l'esprit, à la moyenne de Reynolds) et $\langle H_k \rangle_k^{\mathcal{F}}$ (qui correspond, dans l'esprit, à la moyenne de Favre), qui dépendent de la position x et du temps t considérés :

$$\alpha_k(t, x) \langle H_k \rangle_k^{\mathcal{R}}(t, x) \stackrel{def}{=} \int v_k^* H_k(Z_k^E) f_k^E(t, x; Z_k^E) dZ_k^E,$$

et

$$\alpha_k(t, x) \langle \rho_k \rangle_k^{\mathcal{R}}(t, x) \langle H_k \rangle_k^{\mathcal{F}}(t, x) \stackrel{def}{=} \int m_k^* H_k(Z_k^E) f_k^E(t, x; Z_k^E) dZ_k^E.$$

où on rappelle que la masse peut s'écrire $m_k^* = v_k^* \rho_k(Z_k^E)$. Ces deux définitions n'ont de sens que si la fraction volumique n'est pas nulle, c'est-à-dire si statistiquement il y a au moins une particule en x à l'instant t . Par la suite, les arguments (t, x) seront souvent omis par souci de concision.

La moyenne $\langle \cdot \rangle_k^{\mathcal{R}}$ correspond à une moyenne d'ensemble, tandis que la moyenne $\langle \cdot \rangle_k^{\mathcal{F}}$ définit une moyenne pondérée par la masse volumique de phase k . Cet aspect est mis en lumière lorsqu'on explicite les deux relations ci-dessous entre ces deux moyennes. D'une part, la définition de $\langle \cdot \rangle_k^{\mathcal{F}}$ appliquée à $1/\rho_k(Z_k^E)$ fournit une relation de consistance (1), qui est utile pour la suite :

$$\left\langle \frac{1}{\rho_k(Z_k^E)} \right\rangle_k^{\mathcal{F}} = \frac{1}{\langle \rho_k(Z_k^E) \rangle_k^{\mathcal{R}}}. \quad (1)$$

D'autre part, elle permet d'explicitier une relation entre les deux moyennes qui est indépendante des fractions volumiques :

$$\langle H_k(Z_k^E) \rangle_k^{\mathcal{F}} = \frac{\langle \rho_k(Z_k^E) H_k(Z_k^E) \rangle_k^{\mathcal{R}}}{\langle \rho_k(Z_k^E) \rangle_k^{\mathcal{R}}}.$$

Enfin, on introduit la notion d'espérance conditionnelle de la variable A sachant que la variable B est égale à b , qui est valable pour les moyennes $\langle \cdot \rangle_k^{\mathcal{R}}$ et $\langle \cdot \rangle_k^{\mathcal{F}}$. C'est une fonction de b notée $\langle A | B^* = b \rangle$ ou encore de manière courte $\langle A | B \rangle$. Si $(a, b) \rightarrow f_{A,B}(a, b)$ désigne la FDP jointe pour A et B , et si $b \rightarrow f_B(b) = \int f_{A,B}(a, b) da$ est la FDP marginale de B , alors on a la définition suivante :

$$\langle A | B^* = b \rangle \stackrel{def}{=} \int a^* f_{A|B}(a^*, b) da^* \quad \text{avec} \quad f_{A|B}(a, b) = \frac{f_{A,B}(a, b)}{f_B(b)}.$$

Cette définition conduit à la relation :

$$\langle A | B^* = b \rangle = \langle A \delta(B^* - b) \rangle (f_B(b))^{-1}.$$

3.2. L'équation de Chapman-Kolmogorov

Si le changement de phase n'est pas pris en compte dans notre modélisation, les résultats classiques en terme de processus stochastiques sans sauts montrent que l'évolution dans l'espace des phases de la FDP f^L est régie par une équation de Fokker-Planck [6]. Or le changement de phase tel qu'il est décrit dans la section 2.3 correspond à un processus de saut. En conséquence, l'évolution de f^L est décrite par une équation de Chapman-Kolmogorov [6], qui est plus générale et prend en compte les sauts dans les processus.

On définit la mesure de probabilité de saut $W(Z^{L'}|t; Z^L)$ pour un couple de particules composé d'une particule de chaque phase. Cette mesure est définie pour $Z^L \neq Z^{L'}$, elle représente la densité de probabilité par unité de temps de sauter instantanément en t de l'état Z^L à l'état $Z^{L'}$. Conformément au modèle décrit à la section 2.3, celle-ci s'écrit :

$$W(Z_1^{L'}, Z_2^{L'}|t; Z_1^L, Z_2^L) = \frac{1}{\tau} \delta(Z_1^{L'} - Z_2^L) \delta(Z_1^L - Z_2^{L'}) \mathcal{H}(\delta t - D) \\ \mathcal{H}(\mu_1(Z_1^L) - \mu_2(Z_2^{L'})) \mathcal{H}(\mu_2(Z_2^L) - \mu_1(Z_1^{L'})),$$

où \mathcal{H} désigne la fonction de Heaviside. L'équation de Chapman-Kolmogorov associée à f^L est alors :

$$\frac{\partial}{\partial t}(f^L(t; Z^L)) = \sum_{k=1,2} \left\{ \sum_{Y_k \in \{x_k^*, u_k^*, m_k^*, v_k^*, e_k^*\}} \left(-\frac{\partial}{\partial Y_k} (\langle A_k^Y | Z^L \rangle^L f^L) \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\partial^2}{\partial Y_k^2} (\langle (B_k^Y)^2 / 2 | Z^L \rangle^L f^L) \right) \right\} \\ + \int W(Z^L|t; z^L) f^L(t; z^L) dz^L - \int W(z^L|t; Z^L) f^L(t; Z^L) dz^L. \quad (2)$$

En multipliant cette équation par $\delta(x - x_k^*)$ et en intégrant sur Z_{3-k}^L et x_k^* , on peut déduire de l'équation ci-dessus une équation pour les densités eulériennes f_k^E . Cette dernière permet d'obtenir une équation sur les champs moyens.

3.3. L'équation sur les champs moyens

Si on multiplie l'équation sur f_k^E par $m_k^* H(Z_k^E)$ puis qu'on intègre sur Z_k^E , on obtient une équation aux dérivées partielles en temps et espace portant sur la moyenne $\langle H(Z_k^E) \rangle_k^{\mathcal{F}}$ de $H(Z_k^E)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \langle \rho_k \rangle_k^{\mathcal{R}} \langle H_k \rangle_k^{\mathcal{F}}) + \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_k \langle \rho_k \rangle_k^{\mathcal{R}} \langle u_k H_k \rangle_k^{\mathcal{F}}) = \int m_k^* H_k(Z_k^E) \delta(x - x_k^*) \mathcal{T}_k(t; Z_k^L) dZ_k^L \\ + \sum_{Y_k \in \{u_k^*, m_k^*, v_k^*, e_k^*\}} \alpha_k \langle \rho_k \rangle_k^{\mathcal{R}} \left(\left\langle A_k^Y \frac{\partial}{\partial Y_k} (H_k(Z_k^E)) | Z_k^E \right\rangle_k^{\mathcal{F}} + \left\langle (B_k^Y)^2 / 2 \frac{\partial^2}{\partial Y_k^2} (H_k(Z_k^E)) | Z_k^E \right\rangle_k^{\mathcal{F}} \right). \quad (3)$$

Le terme $\mathcal{T}_k(t; Z_k^L)$ qui apparaît au second membre de l'équation regroupe les différentes contributions (sous forme d'intégrales) portant sur la probabilité de saut $W(Z^{L'}|t; Z^L)$:

$$\mathcal{T}_k(t; Z_k^L) = \int \left\{ \int W(Z^L|t; z^L) f^L(t; z^L) dz^L - \int W(z^L|t; Z^L) f^L(t; Z^L) dz^L \right\} dZ_{3-k}^L.$$

Les termes associés au changement de phase dans (3) satisfont la propriété de conservation suivante.

Propriété. Soit une fonction $H(u, m, v, e)$ telle que $H_1(Z_1^E) = H(Z_1^E)$ et $H_2(Z_2^E) = H(Z_2^E)$, alors :

$$\int m_1^* H_1(Z_1^E) \delta(x - x_1^*) \mathcal{T}_1(t; Z_1^L) dZ_1^L + \int m_2^* H_2(Z_2^E) \delta(x - x_2^*) \mathcal{T}_2(t; Z_2^L) dZ_2^L = 0.$$

La démonstration de cette propriété découle directement de la forme de W . Elle est fondamentale car elle assure que lors de la transition de phase, la moyenne de toute quantité H est conservée pour le mélange. Par exemple, l'application de cette propriété pour la masse, $H(u, m, v, e) = 1$, permet de s'assurer que la masse moyenne du mélange est conservée. Pour $H(u, m, v, e) = u$ on obtient la conservation du moment moyen du mélange et pour $H(u, m, v, e) = e$ on obtient la conservation de l'énergie interne moyenne du mélange.

L'équation (3) permet de décrire les variations en temps et en espace (donc avec un point de vue eulérien) des moyennes de n'importe quelle fonction dépendant des vitesse, masse, volume ou énergie interne des particules d'une phase. Par conséquent, il s'agit d'une extraction d'une partie des données contenues dans le système d'EDS définissant l'écoulement. A ce titre, les équations sur les champs moyens contiennent moins d'information que les EDS.

Pour $H_k(Z_k^E) = 1$, l'équation (3) fournit les équations de masse moyennes :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \langle \rho_k \rangle_k^{\mathcal{R}}) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_k \langle \rho_k \rangle_k^{\mathcal{R}} \langle u_k \rangle_k^{\mathcal{F}}) = \int m_k^* \delta(x - x_k^*) \mathcal{T}_k(t; Z_k^L) dZ_k^L, \quad (4)$$

dont la forme est classique. Il est important de remarquer que ces équations sont indépendantes des termes de modélisation A_k^ϕ . Par ailleurs, le modèle de changement de phase proposé dans la section 2.3 assure naturellement la conservation de la masse totale en (t, x) . Grâce à la propriété énoncée ci-dessus, la somme sur les deux phases des termes sources de (4), associés au changement de phase, est nulle. En choisissant $H_k(Z_k^E) = u_k^*$ et $H_k(Z_k^E) = e_k^*$, on peut obtenir respectivement les équations portant sur la quantité de mouvement moyenne et sur les énergies internes moyennes.

Bien que cela ne soit pas explicité ici, il est possible d'obtenir pour chaque phase une équation aux dérivées partielles en temps et espace portant sur la corrélation entre n'importe quelle fonction des variables de description Z_k^E .

4. La contrainte de conservation du volume

Dans la section 3, la fraction volumique α_k a été définie en se basant sur le volume v_k . Ces grandeurs assurent en fait un lien fort entre les deux phases, qui jusqu'à maintenant sont traitées de manière relativement indépendante. Le but de cette section est double. Tout d'abord la notion de conservation du volume sera explicitée, puis il en sera déduit des contraintes portant sur les termes de modélisation des volumes A_1^v et A_2^v .

4.1. La notion de conservation du volume

Le point de départ de cette section est la ré-écriture de la somme des fractions volumiques définies à la section 3.1. En effet, celle-ci peut s'écrire sous la forme d'une unique intégrale :

$$\alpha_1(t, x) + \alpha_2(t, x) = \int (v_1^* \delta(x - x_1^*) + v_2^* \delta(x - x_2^*)) f^L(t; Z^L) dZ^L.$$

Cette somme représente le volume statistiquement occupé *par unité de volume* par l'ensemble des particules en x à l'instant t . C'est sur cette grandeur que repose l'expression de la conservation du volume, elle se traduit par la propriété suivante.

Propriété. *En chaque point x et à chaque instant t , la somme des fractions de volume des particules des phases par unité de volume doit être égale à 1. Autrement dit :*

$$\forall(t, x), \quad \alpha_1(t, x) + \alpha_2(t, x) = 1.$$

Cette propriété exprime le fait que les particules statistiquement présentes en x à l'instant t doivent occuper tout le volume qui est à leur disposition. Il s'agit en fait d'assurer la consistance du modèle constitué de deux phases avec la physique. Pour ce faire, la manière la plus évidente est de traduire cette propriété en une contrainte portant sur la modélisation des volumes (i.e. sur les termes A_k^v).

4.2. Contrainte de conservation du volume

La propriété de conservation du volume telle qu'elle est exprimée dans la section 4.1 porte sur le mélange des phases et fait intervenir les fractions volumiques, qui sont des grandeurs moyennes associées aux volumes des particules. Pour que cette propriété soit respectée, une contrainte sur les termes de modélisation des volumes A_k^v doit être assurée.

En utilisant la relation (1), pour $H_k(Z_k^E) = 1/\rho_k(Z_k^E)$ l'équation de la section 3.3 donne l'équation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_k \langle u_k \rangle_k^{\mathcal{R}}) = \alpha_k \left\langle \frac{A_k^v}{v_k} \middle| Z_k^E \right\rangle_k^{\mathcal{R}} + \int v_k^* \delta(x - x_k^*) \mathcal{T}_k(t; Z_k^L) dZ_k^L.$$

Lorsqu'on somme ces deux équations, les termes associés au changement de phase s'annulent. En effet, lorsqu'une particule change de phase elle conserve son volume et sa position, ainsi le volume global est conservé en tout point lors de la transition de phase.

On suppose que l'initialisation à $t = 0$ de l'écoulement est telle que $\alpha_1(0, x) + \alpha_2(0, x) = 1$. En sommant pour les deux phases l'équation ci-dessus, il apparaît que la propriété de conservation du volume sera respectée si et seulement si la contrainte suivante est satisfaite :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 \langle u_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} + \alpha_2 \langle u_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}) = \alpha_1 \left\langle \frac{A_1^v}{v_1} \middle| Z_1^E \right\rangle_1^{\mathcal{R}} + \alpha_2 \left\langle \frac{A_2^v}{v_2} \middle| Z_2^E \right\rangle_2^{\mathcal{R}}. \quad (5)$$

En posant $\alpha_2 = 0$, et donc $\alpha_1 = 1$, dans la contrainte (5), celle-ci redonne la contrainte de conservation telle qu'elle est classiquement écrite pour les écoulements monophasiques.

En définitive, si l'on veut assurer la conservation du volume, la modélisation des volumes des particules de chaque phase ne peut être faite de manière totalement indépendante. On peut ainsi énoncer l'équivalence suivante dans le cas où la somme des fractions volumiques est initialement égale à 1 à $t = 0$: la somme des fractions volumiques vaut 1 pour tout (t, x) si et seulement si la relation (5) est vraie pour tout (t, x) .

Si les termes de modélisation des volumes respectent la contrainte (5) et si $\alpha_1(0, x) + \alpha_2(0, x) = 1$, alors le sous-système formé des deux équations aux dérivées partielles sur les fractions volumiques est équivalent au sous-système suivant :

$$\begin{cases} \alpha_1(t, x) + \alpha_2(t, x) = 1, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 \langle u_1 \rangle_1^{\mathcal{R}}) = \alpha_1 \left\langle \frac{A_1^v}{v_1} \middle| Z_1^E \right\rangle_1^{\mathcal{R}} + \int v_1^* \delta(x - x_1^*) \mathcal{T}_1(t; Z_1^L) dZ_1^L. \end{cases} \quad (6)$$

Ce sous-système est un élément clef des modèles de champs eulériens décrivant les écoulements diphasiques, que les phases soient compressibles ou pas. Il intervient dans le couplage entre les phases. Comme on le verra dans la section suivante, il peut être présent soit sous forme explicite soit sous forme implicite.

Remarque. Dans le cas de deux phases incompressibles, c'est-à-dire telles que $A_k^v = 0$, la contrainte (5) s'écrit simplement :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 \langle u_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} + \alpha_2 \langle u_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}) = 0.$$

5. Éléments de modélisation des volumes

La contrainte de conservation des volumes énoncée à la section 4.2 sert de guide pour la modélisation des volumes qui constitue une étape importante dans la construction d'un modèle. Celle-ci permet notamment

d'éclairer le contenu physique de certains modèles de champs eulériens actuellement utilisés ou étudiés, et de pouvoir établir un lien entre une description microscopique instantanée et les modèles d'EDP qui en découlent. Cette section a donc pour but d'illustrer le formalisme de modélisation développé dans les sections précédentes, en se focalisant sur les termes de modélisation des volumes. A titre d'exemple, un modèle simple complet pour la section 5.1 est disponible en annexe.

La section 5.1 propose une modélisation des volumes dans le cas d'écoulements de bulles dispersées dans un liquide. L'accent est donc mis sur les termes de modélisation A_k^v et $B_k^v = 0$, ainsi que sur la forme prise par la deuxième équation du système (6). Puis, dans la section 5.2, quelques éléments de réflexion concernant le modèle bifluide standard sont proposés.

Dans ce qui suit, la phase des bulles sera représentée par la phase 1, tandis que la phase 2 correspondra à la phase liquide. De plus, on choisit de simplifier l'EDS sur les volumes en prenant B_k^v . Pour cette section, on se place dans l'espace tri-dimensionnel. En conséquence, une grandeur notée en gras désigne un vecteur et les opérateurs $\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{\Phi}(t, \mathbf{x}))$ et $\nabla_{\mathbf{x}} (\phi(t, \mathbf{x}))$ sont respectivement la divergence et le gradient sur l'espace physique du champ vectoriel $\mathbf{\Phi}$ et du champ scalaire ϕ .

5.1. Prise en compte d'une équation de type Rayleigh-Plesset simplifiée

Dans ce premier cas, on ne fait pas l'hypothèse d'équilibre des pressions, c'est-à-dire que l'on ne fait pas l'hypothèse qu'elles sont égales en tout point \mathbf{x} et à tout instant t . La variation de volume d'une bulle est alors prise en compte à travers deux aspects : (i) la divergence du champ moyen de vitesse de la phase bulle et (ii) l'écart de pression avec la phase liquide. De plus, on fait l'hypothèse que ces deux phénomènes s'additionnent pour donner la variation de volume globale de la bulle.

La variation du volume d'un élément matériel de fluide associée à la divergence du champ de vitesse du fluide est un aspect classique pour les écoulements incompressibles. C'est d'ailleurs de cette propriété qu'est issue la contrainte stationnaire de divergence nulle pour le système des équations de Navier-Stokes incompressible. On choisit donc de modéliser cet effet (i) sur la variation de volume de la bulle de la même façon :

$$dv_1 = v_1 \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}}) dt + \mathcal{F} dt,$$

où \mathcal{F} désigne le deuxième effet (ii), qui est associé à l'écart de pression. Dans cette expression, seule la divergence du champ de vitesse moyen en \mathbf{x} est retenue, et non pas sa valeur instantanée. Ce choix est cohérent avec l'hypothèse $B_1^v = 0$. D'autres choix sont évidemment possibles. Par exemple, on pourrait supposer que le terme B_1^v est non nul pour représenter la divergence des fluctuations de vitesse ($\mathbf{u}_1 - \langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}}$). Pour expliciter le terme \mathcal{F} , on admet qu'en présence d'un champ de vitesse moyen $\langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}}$ uniforme, les variations du volume de chaque particule de la phase bulle sont régies par une loi issue d'une simplification de l'équation de Rayleigh-Plesset.

Cette loi de pulsation d'une bulle sphérique est établie à partir de l'équation de Rayleigh-Plesset. Celle-ci décrit les pulsations d'une bulle sphérique dans un champ fluide incompressible infini, on admettra néanmoins qu'elle reste valide dans notre cadre. En négligeant les effets de la viscosité et de la tension de surface, l'équation de Rayleigh-Plesset s'écrit en fonction du rayon r_B d'une bulle :

$$r_B \frac{d^2 r_B}{dt^2} + \frac{3}{2} \left(\frac{dr_B}{dt} \right)^2 = \frac{p_B - p_L}{\rho^0}, \quad (7)$$

où p_B et p_L sont les pressions au sein de la bulle et dans le liquide, et ρ^0 est une densité liquide de référence. On s'intéresse à des situations où la bulle est proche d'un état d'équilibre et faiblement perturbée, $|dr_B/dt| \ll 1$. Par conséquent, on néglige le deuxième terme au membre de gauche et on explicite le premier rayon r_B dans le premier terme de l'équation (7). La vitesse dr_B/dt étant supposées faibles, on intègre alors cette équation et on trouve une équation de la forme :

$$\frac{dr_B}{dt} = \tau_p \frac{p_B - p_L}{\rho^0 r_B^0}, \quad (8)$$

où τ_p est un temps caractéristique. Les bulles étant sphériques, une équation équivalente portant sur les volumes des bulles peut aisément être déduite de (8).

Cette loi simplifiée fournit alors une expression pour le terme \mathcal{F} , et les volumes des bulles sont alors modélisés par l'EDS :

$$dv_1 = v_1 \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \right) dt + 4\Pi \left(\frac{3v_1}{4\Pi} \right)^{2/3} \tau_p \frac{p_1 - p_2}{\rho^0 r_B^0} dt,$$

ce qui fournit le terme de modélisation A_1^v suivant :

$$A_1^v = v_1 \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \right) + 4\Pi \left(\frac{3v_1}{4\Pi} \right)^{2/3} \tau_p \frac{p_1 - p_2}{\rho^0 r_B^0}. \quad (9)$$

Le choix du terme de modélisation des volumes des particules liquides A_2^v doit être fait tel que, étant donné le terme A_1^v choisi, la contrainte de conservation du volume (5) soit respectée. Cette contrainte portant sur des valeurs moyennes et le terme A_2^v étant instantané, le choix n'est donc pas unique. En pratique, lorsque l'on s'intéresse à des écoulements de bulles dispersées dans un liquide comme c'est le cas ici, la forme instantanée exacte de A_2^v est secondaire. On peut donc se contenter de choisir par exemple :

$$\alpha_2 \frac{A_2^v}{v_2} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\alpha_1 \langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} + \alpha_2 \langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \right) - \alpha_1 \left\langle \frac{A_1^v}{v_1} \middle| Z_1^E \right\rangle_1^{\mathcal{R}}.$$

Une fois les termes A_1^v et A_2^v précisés, l'étape de modélisation des volumes est terminée. Avec les choix présentés ci-dessus et en omettant le terme associé au changement de phase, le sous-système (6) s'écrit :

$$\begin{cases} \alpha_1(t, \mathbf{x}) + \alpha_2(t, \mathbf{x}) = 1, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1) + \langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \nabla_{\mathbf{x}}(\alpha_1) = \alpha_1 \frac{(36\Pi)^{1/3}}{\rho^0 r_B^0} \left\langle \tau_p (p_1 - p_2) v_1^{-1/3} \middle| Z_1^E \right\rangle_1^{\mathcal{R}}. \end{cases} \quad (10)$$

L'élément le plus important dans le terme du second membre de la deuxième équation de (10) est le retour à l'équilibre des pressions. La forme de cette équation est très proche de celle qui apparaît dans les modèles bifluïdes avec relaxation de pressions. Ceux-ci ont notamment été décrits dans [7,8] pour les écoulements de type eau-vapeur et dans [9,10] pour des écoulements gaz-particules sur des applications en détonique. Un modèle stochastique bifluïde à relaxation de pressions complet est décrit en annexe.

Le modèle simplifié (8) pour la pulsation de la bulle est d'ordre 1 en temps, tandis que le modèle de Rayleigh-Plesset est d'ordre 2. En ajoutant au modèle la variable W_1 qui décrit la vitesse de variation du rayon de la bulle, on peut tout à fait intégrer (7). Le modèle qui en découle est alors proche de celui proposé dans [11].

5.2. *Eléments de réflexion concernant le modèle bifluïde standard*

Dans la section 5.1, une équation sur les champs de fraction volumique a été déduite à partir d'une modélisation locale instantanée des volumes des particules (i.e. le choix des termes A_1^v et A_2^v). Le problème va maintenant être considéré avec le point de vue inverse : étant donné un système d'EDP sur des champs moyens, quelles sont les *formes admissibles* pour les termes de modélisation A_1^v et A_2^v ? En effet, les EDP ne peuvent fournir des indications que sur les moyennes des termes de modélisation des EDS, la forme instantanée de ces derniers ne peut donc généralement pas être définie de manière unique à partir des EDP. De plus, les modèles sur champs moyens sont souvent écrits en omettant les opérateurs de

moyennes statistiques, ce qui peut être à l'origine d'ambiguïtés dans l'identification de certains termes. En conséquence, on se place dans un cadre déterministe, c'est-à-dire que pour toute grandeur ϕ_k on a : $\phi_k = \langle \phi_k \rangle_k^{\mathcal{F}} = \langle \phi_k \rangle_k^{\mathcal{R}}$.

On va s'intéresser au modèle sur champs moyens biffuide standard [1,2], et plus particulièrement à sa partie convective (i.e on ne garde que les termes contenant des dérivées d'ordre 1 en espace ou en temps), en négligeant les effets de masse ajoutée. Contrairement au modèle de la section précédente, ce modèle fait l'hypothèse que les pressions des deux phases sont égales à chaque instant et en tout point de l'écoulement. Dans son écriture la plus classique, il est composé de deux équations de conservation des masses partielles moyennes, deux équations sur les moments phasiques et deux équations sur les énergies totales :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k) = 0, & k = 1, 2, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k + \alpha_k p \mathcal{I}_3) - p \nabla_{\mathbf{x}}(\alpha_k) = 0, & k = 1, 2, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k E_k) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha_k \mathbf{u}_k (\rho_k E_k + p)) + p \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k) = 0, & k = 1, 2, \end{cases}$$

où E_k désigne l'énergie totale phasique : $E_k = e_k + \mathbf{u}_k^2/2$ et \mathcal{I}_3 la matrice identité. Ce système d'EDP est complété par la relation $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$.

L'équation d'évolution sur la fraction volumique α_1 n'apparaît donc pas dans le système, qui ne contient que des informations massiques. Néanmoins, les deux équations portant sur l'énergie se ré-écrivent sous forme d'une équation sur la pression et d'une équation sur α_1 . Cette dernière s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1) + \frac{a_1 \mathbf{u}_1 + a_2 \mathbf{u}_2}{a_1 + a_2} \nabla_{\mathbf{x}}(\alpha_1) + \frac{\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2}{a_1 + a_2} \nabla_{\mathbf{x}}(p) \\ + \frac{\alpha_1 a_1}{a_1 + a_2} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u}_1) - \frac{\alpha_2 a_2}{a_1 + a_2} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u}_2) = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

avec $\alpha_1 a_1 = \rho_1 C_1^2$ et $\alpha_2 a_2 = \rho_2 C_2^2$, où C_1 et C_2 désignent les vitesses du son :

$$\rho_k C_k^2 = \left(\frac{\partial}{\partial p}(e_k) \right)^{-1} \left(\frac{p}{\rho_k} - \rho_k \frac{\partial}{\partial \rho_k}(e_k) \right).$$

Les formes admissibles du terme de modélisation des volumes A_1^v que l'on peut déduire en identifiant les équations (11) et (6) (sans le terme de changement de phase et en omettant les opérateurs de moyenne) sont complexes :

$$\begin{aligned} \alpha_1 \frac{A_1^v}{v_1} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha_1 \mathbf{u}_1) - \frac{a_1 \mathbf{u}_1 + a_2 \mathbf{u}_2}{a_1 + a_2} \nabla_{\mathbf{x}}(\alpha_1) - \frac{\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2}{a_1 + a_2} \nabla_{\mathbf{x}}(p) \\ - \frac{\alpha_1 a_1}{a_1 + a_2} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u}_1) + \frac{\alpha_2 a_2}{a_1 + a_2} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u}_2). \end{aligned} \quad (12)$$

Ce terme permet de définir la loi de variation en temps du volume d'une bulle au sens du modèle biffuide standard. S'il est donc possible de trouver une expression pour A_1^v , sa formulation apparaît comme compliquée et, de plus, son interprétation physique reste une question ouverte.

6. Conclusions

Les bases d'un formalisme stochastique de modélisation des écoulements diphasiques compressibles avec changement de phase ont été exposées. Cette modélisation est faite à partir d'une description particulaire lagrangienne de l'écoulement, en utilisant des lois de comportement instantanées. A partir de cette description sous forme d'EDS, la forme générale des EDP portant sur les champs moyens eulériens des fluides

a été explicitée. Ceci a permis de clarifier la notion de conservation du volume au sens de la description retenue. Les contraintes sur les lois de comportement assurant le respect de cette conservation ont été écrites. Enfin, des éléments concrets de modélisation ont permis d'illustrer la démarche.

L'intérêt de la démarche qui a été développée dans cet article est de proposer un lien entre une physique microscopique (écrite sur les variables instantanées associées aux particules) et les modèles eulériens (portant sur des champs moyens) qui en résultent. Cette approche permet ainsi de mieux aborder des questions précises, notamment la contrainte de conservation du volume, et de pouvoir mieux éclairer le contenu physique des modèles eulériens macroscopiques.

Dans la dernière partie de ce document, essentiellement par souci de concision, l'approche a été appliquée partiellement. Ainsi, l'accent a été mis sur la modélisation des volumes des particules. Dans le cas de bulles dispersées, le premier exemple a permis d'illustrer le passage d'une équation issue de l'équation de Rayleigh-Plesset, à une équation sur le champ fraction volumique. Cette dernière prend une forme proche de celle qui apparaît dans certains modèles bifluïdes de la littérature. Il est en fait possible, sous certaines conditions, de trouver un modèle d'EDS complet et physiquement admissible dont les champs moyens sont régis par les mêmes EDP que ces modèles bifluïdes. Dans la section 5.2, les éléments proposés concernant le modèle bifluïde standard font apparaître une description assez complexe des variations de volume instantanées des bulles.

En ce qui concerne le changement de phase, une modélisation locale a été proposée. En revanche, les termes sources associés dans les EDP ne semble pas pouvoir être explicités en fonction des grandeurs moyennes eulériennes. Il est tout à fait envisageable d'utiliser ce modèle tel qu'il est décrit pour la simulation numérique. Pour ce faire, il est possible de construire une méthode mélangeant les systèmes d'EDS et d'EDP en suivant l'esprit des méthodes hybrides comme celle présentée dans [12] ou [13]. Cette dernière méthode combine une approche par champs eulériens et une approche particulière lagrangienne, et son but est de permettre une meilleure prise en compte de la turbulence dans le cadre d'écoulements de type gaz-particules. En conservant la même idée, on peut construire un schéma numérique à pas fractionnaires dont la première étape consiste à discrétiser les trois premiers termes de l'équation (6) par une technique adaptée aux EDP ; la deuxième étape correspond à la prise en compte du changement de phase tel qu'il est décrit en section 2.3. Une telle méthode permet alors de prendre en compte le changement de phase de façon locale sans imposer de fermeture dépendant des champs moyens eulériens.

Références

- [1] M. Ishii, T. Hibiki, *Thermo-fluid dynamics of two phase flow*, Springer (2005).
- [2] H. B. Stewart, B. Wendroff, *Two-Phase flow : models and methods*, J. Comp. Phys., 56 (1984) 363-409.
- [3] S. B. Pope, *Turbulent flows*, Cambridge University Press, 2000.
- [4] J.-P. Minier, E. Peirano, *The pdf approach to turbulent polydispersed two-phase flows*, Phys. Rep., 352 (2001) 1-214.
- [5] B. J. Delarue, S. B. Pope, *Application of PDF methods to compressible turbulent flows*, Phys. Fluids, 9 (1997) 2704-2715.
- [6] C. Gardiner, *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and natural sciences*, Springer (1985).
- [7] F. Coquel, T. Gallouët, J.-M. Hérard, N. Seguin, *Closure laws for a two-fluid two-pressure model*, C.R. Acad. Sci. Paris, I-334 (2002) 927-932.
- [8] V. Ransom, D. Hicks, *Hyperbolic two-pressure model for two-phase flow*, J. of Comp. Phys., 53 (1984) 124-151.
- [9] M. R. Baer, J. W. Nunziato, *A two phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials*, Int. J. for Multiphase Flow, 12-6 (1986) 861-889.
- [10] A. K. Kapila, S. F. Son, J. B. Bdzil, R. Menikoff, D. S. Stewart, *Two-phase modeling of ddt : structure of the velocity relaxation zone*, Phys. of Fluids, 9 (1997) 3885-3897.

- [11] S. Gavriluyk, R. Saurel, *Mathematical and Numerical Modeling of Two-Phase Compressible Flows with Micro-Inertia*, J. of Comp. Phys., 175-1 (2002) 326-360.
- [12] M. Muradoglu, P. Jenny, S.B. Pope, D.A. Caughey, *A consistent hybrid finite-volume/particle method for the pdf equations of turbulent reactive flows*, J. Comp. Phys., 154 (1999) 342-371.
- [13] K. Dorogan, J.-M. Hérard, J.-P. Minier, *A relaxation scheme for hybrid modelling of gas-particle flows*, submitted to publication.

7. Annexe : un modèle simple pour les écoulements dispersés eau-vapeur

Cette annexe présente un modèle stochastique lagrangien pour les écoulements diphasiques dispersés eau-vapeur. Il correspond à une description assez simple de ces écoulements, sans échange avec l'extérieur. La turbulence est isotrope instationnaire et ne revêt qu'un aspect dynamique (et pas thermodynamique). D'autre part, la loi de fermeture du terme \mathcal{F} , décrivant les pulsations d'une bulle, est différente de celle proposée dans la section 5.1. Ce choix permet de retrouver un ensemble d'EDP proche de celui du modèle bifluide à relaxation de pression, dont les caractéristiques sont décrites dans [7,8,9,10]. Les termes de modélisation des deux phases sont choisis conjointement, conformément à la contrainte de conservation du volume (voir section 4.2) et de manière à ce que la masse moyenne du mélange, le moment moyen du mélange et l'énergie totale moyenne du mélange soient conservées (en l'absence de sources externes, le mélange des deux phases constitue un système fermé).

Modélisation des volumes.

Les termes de modélisation des volumes sont : $B_1^v = B_2^v = 0$, et

$$A_1^v = v_1 \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \right) + \frac{v_1}{K_p} \left(\langle p_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} - \langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \right). \quad (13)$$

La grandeur K_p est une constante statistique positive, par exemple :

$$\frac{1}{K_p} = \frac{1}{\tau_p} \frac{\alpha_2}{|\langle p_1 \rangle_1^{\mathcal{R}}| + |\langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}|}, \quad (14)$$

où τ_p est une constante de temps positive. Afin d'assurer la conservation du volume, on choisit :

$$\frac{\alpha_2}{v_2} A_2^v = \left(\alpha_2 \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \right) - \alpha_1 \left\langle \frac{\mathcal{F}}{v_1} \right\rangle_1^{\mathcal{R}} \right) + \left(\langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} - \langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \right) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} (\alpha_1). \quad (15)$$

Modélisation des vitesses.

Les termes de modélisation des vitesses sont :

$$\alpha_2 \rho_2 \mathbf{A}_2^u = -\alpha_2 \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \right) + \mathcal{D}_2 + \frac{1}{T_2^L} \frac{\alpha_2 \rho_2 \alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}}}{\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} + \alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}} \left(\langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{F}} - \mathbf{u}_2 \right), \quad (16)$$

où \mathcal{D}_2 est la force de trainée statique et s'écrit :

$$\mathcal{D}_2 = \frac{1}{\tau_u} \frac{\alpha_2 \rho_2 \alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}}}{\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} + \alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}} \left(\langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{F}} - \mathbf{u}_2 \right). \quad (17)$$

Les constantes de temps τ_u et T_2^L sont des constantes statistiques positives. Pour la phase bulle, on choisit :

$$\begin{aligned} \alpha_1 \rho_1 \mathbf{A}_1^u &= -\alpha_1 \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle p_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \right) + \mathcal{D}_1 + \left(\langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} - \langle p_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \right) \nabla_{\mathbf{x}} (\alpha_1) \\ &\quad + \frac{1}{T_1^L} \frac{\alpha_1 \rho_1 \alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}}{\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} + \alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}} \left(\langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{F}} - \mathbf{u}_1 \right), \end{aligned} \quad (18)$$

où T_1^L est une constante statistique positive et où :

$$\mathcal{D}_1 = \frac{1}{\tau_u} \frac{\alpha_1 \rho_1 \alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}}{\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} + \alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}} \left(\langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{F}} - \mathbf{u}_1 \right). \quad (19)$$

En supposant que les termes de dispersion des vitesses sont isotropes, $B_k^u = B_k^u(1, 1, 1)^\top$, on choisit :

$$\alpha_k \langle \rho_k \rangle_k^{\mathcal{R}} (B_k^u)^2 = \frac{4}{3} \frac{\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}}{\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} + \alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}} \left(\frac{1}{\tau_u} + \frac{1}{T_k^L} \right) e_k^T - \alpha_k \langle \rho_k \rangle_k^{\mathcal{R}} \frac{2 \langle \epsilon_k \rangle_k^{\mathcal{F}}}{3}, \quad (20)$$

En considérant la constante statistique positive $\tau_{\epsilon,k}$ telle que :

$$\frac{1}{\tau_{\epsilon,k}} < 2 \left(\frac{1}{\tau_u} + \frac{1}{T_k^L} \right),$$

la dissipation ϵ_k est modélisée comme suit :

$$\alpha_k \langle \rho_k \rangle_k^{\mathcal{R}} \langle \epsilon_k \rangle_k^{\mathcal{F}} = \frac{\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}}{\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} + \alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}} \frac{e_k^T}{\tau_{\epsilon,k}},$$

où e_k^T est l'énergie cinétique turbulente :

$$e_k^T = \frac{1}{2} \left\langle \left(\langle \mathbf{u}_k \rangle_k^{\mathcal{F}} - \mathbf{u}_k \right) \cdot \left(\langle \mathbf{u}_k \rangle_k^{\mathcal{F}} - \mathbf{u}_k \right) \right\rangle_k^{\mathcal{F}}.$$

Modélisation des énergies internes.

Les énergies internes sont modélisées conformément au premier principe de la thermodynamique. Les termes de dispersion sont nuls, $B_k^e = 0$, et les termes de drift sont :

$$\alpha_k \rho_k A_k^e = -\alpha_k p_k \frac{A_k^v}{v_k} + F_k + I_k + \alpha_k \langle \rho_k \rangle_k^{\mathcal{R}} \langle \epsilon_k \rangle_k^{\mathcal{F}} \quad \text{et} \quad B_k^e = 0. \quad (21)$$

Les différents termes sont :

$$F_1 = \frac{\langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{F}} - \langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{F}}}{2} \cdot \mathcal{D}_1 \quad \text{et} \quad F_2 = \frac{\langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{F}} - \langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{F}}}{2} \cdot \mathcal{D}_2, \quad (22)$$

$$I_2 = 0 \quad \text{et} \quad I_1 = \alpha_1 \frac{\mathcal{F}}{v_1} \left(\langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} - p_1 \right). \quad (23)$$

Modélisation du changement de phase.

La modélisation du changement de phase est telle que décrite dans la section 2.3 et nécessite les définitions des lois d'état des potentiels chimiques, de δt et de τ .

Ainsi, pourvu que les lois d'état des pressions \mathcal{P}_k et des potentiels chimiques μ_k soient données, et pourvu que les constantes τ , δt , τ_p , τ_u , T_k^L , $\tau_{\epsilon,k}$ soient déterminées, le modèle stochastique est fermé. D'autre part, ce modèle assure la positivité des volumes.

Equations sur les champs moyens.

On peut déduire de ce modèle stochastique, un ensemble d'EDP portant sur des champs moyens proche

des modèles à relaxation de pressions[7,8,9,10]. Dans ce qui suit, l'énergie totale E_k d'une particule est la somme de son énergie interne et de son énergie cinétique $E_k = e_k + u_k^2/2$. Le système d'équations portant sur les fractions volumiques, les masses partielles, les moments et les énergies totales est :

$$\alpha_1(t, \mathbf{x}) + \alpha_2(t, \mathbf{x}) = 1, \quad (24)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1) + \langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(\alpha_1) = \alpha_1 \left\langle \frac{\mathcal{F}}{v_1} \right\rangle_1^{\mathcal{R}} + \int v_1^* \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1^*) \mathcal{T}_1(t; Z_1^L) dZ_1^L, \quad (25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{F}}) = \int m_1^* \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1^*) \mathcal{T}_1(t; Z_1^L) dZ_1^L, \quad (26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{F}}) = \int m_2^* \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2^*) \mathcal{T}_2(t; Z_2^L) dZ_2^L, \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{F}}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u}_1 \otimes \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{F}} + \alpha_1 \langle p_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \mathbf{I}_3) - \langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \nabla_{\mathbf{x}}(\alpha_1) = \\ \langle \mathcal{D}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} + \int m_1^* \mathbf{u}_1 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1^*) \mathcal{T}_1(t; Z_1^L) dZ_1^L, \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{F}}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u}_2 \otimes \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{F}} + \alpha_2 \langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \mathbf{I}_3) - \langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \nabla_{\mathbf{x}}(\alpha_2) = \\ \langle \mathcal{D}_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} + \int m_2^* \mathbf{u}_2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2^*) \mathcal{T}_2(t; Z_2^L) dZ_2^L, \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \langle E_1 \rangle_1^{\mathcal{F}}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha_1 \langle \rho_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u}_1 E_1 \rangle_1^{\mathcal{F}} + \alpha_1 \langle p_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}}) + \langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1) = \\ \frac{\langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{F}} + \langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{F}}}{2} \cdot \langle \mathcal{D}_1 \rangle_1^{\mathcal{R}} + \int m_1^* E_1 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1^*) \mathcal{T}_1(t; Z_1^L) dZ_1^L + \langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \int v_1^* \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1^*) \mathcal{T}_1(t; Z_1^L) dZ_1^L, \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \langle E_2 \rangle_2^{\mathcal{F}}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha_2 \langle \rho_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u}_2 E_2 \rangle_2^{\mathcal{F}} + \alpha_2 \langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{R}}) + \langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2) = \\ \frac{\langle \mathbf{u}_1 \rangle_1^{\mathcal{F}} + \langle \mathbf{u}_2 \rangle_2^{\mathcal{F}}}{2} \cdot \langle \mathcal{D}_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} + \int m_2^* E_2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2^*) \mathcal{T}_2(t; Z_2^L) dZ_2^L + \langle p_2 \rangle_2^{\mathcal{R}} \int v_2^* \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2^*) \mathcal{T}_2(t; Z_2^L) dZ_2^L. \end{aligned} \quad (31)$$

La matrice identité de taille 3 est notée \mathbf{I}_3 et \otimes désigne le produit tensoriel de deux vecteurs.

Ce modèle assure donc la conservation de la masse moyenne totale, du moment moyen total et de l'énergie totale moyenne du mélange. Il est important de noter que cet ensemble de huit équations, considéré indépendamment du modèle stochastique, n'est pas fermé.

5.2 Annexe de la section 4.3

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

1 Outline

The stochastic modelling of incompressible single-phase flows has been widely addressed [8], assessing turbulence modelling and chemical reactions. Nonetheless, in some of the situations that we meet in our industrial context, the effects of the compressibility can not be neglected. As an example, the compressibility of the fluid is important in cavitation simulation or in two-phase homogeneous approach used to simulate flows in PWR components.

The above two domains rely on two-phase flows, but the corresponding mean-field models are based on an Euler-type system of equations [1, 4, 6]. Hence the construction of a stochastic model consistent with the latter in a single-phase framework is a first step to account for more complex situations. Moreover, a simple compressible two-phase flow model has been proposed in [5] using a stochastic formalism, and following previous work [7] for incompressible two-phase flows. The thermodynamical part of this compressible two-phase model remains very crude and the present work might provide a good improvement of the work presented in [5].

More precisely, it aims at building a compressible single-phase flow model using a stochastic approach and following the lagrangian point of view. Since the Euler system of equations represents a reference for compressible single-phase flow mean-field models, the stochastic model will be chosen so that the evolution of its first moments matches a complete Euler-type system (with energy).

The turbulence is accounted for by a simple one-equation model, and the thermodynamical part of the model is finally very close from the previous work of [2]. The main difference is related to the choice of the variables and to the way the turbulence is taken into account. The model proposed herein is explicitly written for a perfect gas law. It thus fulfils the first law of thermodynamics, the volume conservation, and ensures the positivity of the density and internal energy. The complete analysis of the behaviour of the stochastic model is not possible, and a partial analysis is performed.

The section 2 of the present note is devoted to a rather general class of models for compressible flows. The definition of these terms is made of two steps : in section 3 the dynamical behaviour is first assessed, whereas the themodynamical behaviour is taken into account in section 4. The section 5 concludes this work.

2 A general stochastic model

This section is devoted to the presentation of a general class of stochastic models for compressible single-phase flows. Some modelling terms will be left undetermined in this section, and will be treated sections 3 and 4.

The flow is described using particles, so that we adopt the lagrangian trajectory point of view. The latter represents a rather natural choice when dealing with particles, and one can benefit from some facilities in the treatment of the convection or complex local phenomena (chemical reactions for example).

The variables and the instantaneous equations

We retain only 8 variables to describe the flows. The position $\mathbf{x}(t)$ is a vector and $(x_i(t))$ $i = 1..3$ are its components, the velocity $\mathbf{u}(t)$ is a vector and $(u_i(t))$ $i = 1..3$ are its components, the volume $v(t)$ and the internal energy $e(t)$ are scalar positive variables. The position and the velocity describe the dynamics of the center of mass of each particles, whereas the volume and the internal energy model the thermodynamics. Moreover, all the particles have the same mass m , which remains constant. Any other quantity, such as the density or the pressure for example, is defined as a function of the variables above. The density ρ and the pressure p respectively read :

$$\rho = \frac{m}{v} \quad \text{and} \quad p = \mathcal{P}(e, v),$$

where \mathcal{P} is the Equation Of State (EOS). For the sake of simplicity, we choose to deal with perfect gas EOS, that is : $v\mathcal{P}(e, v) = me(\gamma - 1)$, where $\gamma > 1$ is a given constant.

The dynamical and thermodynamical aspects of the particle description are coupled through the Stochastic

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

Differential Equations given below. These equations define the time evolution of the variables. We assume the following equations :

$$d\mathbf{x}(t) = \mathbf{u}(t)dt, \quad (1)$$

$$d\mathbf{u}(t) = (-\mathbf{\Pi} + \mathbf{a}^u) dt + B^u d\mathbf{w}_t^u, \quad (2)$$

$$dv(t) = v(t)\Delta dt + v(t)a^v dt + v(t)B^v dw_t^v, \quad (3)$$

$$de(t) = -\frac{P}{m}dv(t) + (\epsilon_d + a^e)dt. \quad (4)$$

All the modelling terms $\mathbf{\Pi}$, \mathbf{a}^u , B^u , Δ , a^v , B^v , ϵ_d and a^e will be discussed thoroughly in this paper. The Wiener processes for the velocity components $w_{i,t}^u$ and for the volume w_t^v are independent. Obviously, the equations (1)-(4) are not completely general, some modelling choices have already been done to guess this system. These choices relate to physical consistencies and are discussed in the sequel.

Some definitions.

We thus consider the physical vector-valued variables

$$Z_L(t) = \{x_1(t), x_2(t), x_3(t), u_1(t), u_2(t), u_3(t), v(t), e(t)\} \text{ and } Z_E(t) = \{u_1(t), u_2(t), u_3(t), v(t), e(t)\},$$

which correspond respectively to a lagrangian and an eulerian point of view. Their counterparts in the sample-space are respectively $Z_L^* = \{x_1^*, x_2^*, x_3^*, u_1^*, u_2^*, u_3^*, v^*, e^*\}$, and $Z_E^* = \{u_1^*, u_2^*, u_3^*, v^*, e^*\}$.

The Probability Density Function (PDF) for the vector-valued process defined by (1)-(4) is denoted by $f^L(t; Z_L^*)$. It is a non-negative function whose integral over the whole sample-space yields 1 :

$$\int f^L(t; Z_L^*) dZ_L^* = 1, \quad \forall t.$$

Following the same ideas as those presented in [5], we now define the eulerian density function $f^E(t, \mathbf{x}; Z_E^*)$ by :

$$f^E(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \stackrel{def}{=} \int f^L(t; Z_L^*) \delta(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}) d\mathbf{x}^*,$$

where $\delta(\cdot)$ stands for the Dirac measure. For each time t and for each position in the physical space \mathbf{x} , this function describes the distribution of the values of the process Z_L^* in the Eulerian sample-space, whereas the PDF f^L describes this distribution for any time t in the whole sample-space. Thus f^E corresponds to an eulerian point of view.

It is noteworthy that the sum of the eulerian density function over Z_E^* does not yield 1. We define the volumic fraction $\alpha(t, \mathbf{x})$ and the mean density $\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}}(t, \mathbf{x})$ using the eulerian density function :

$$\alpha(t, \mathbf{x}) \stackrel{def}{=} \int v^* f^E(t, \mathbf{x}; Z_E^*) dZ_E^*, \quad (5)$$

$$\alpha(t, \mathbf{x}) \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}}(t, \mathbf{x}) \stackrel{def}{=} \int m f^E(t, \mathbf{x}; Z_E^*) dZ_E^* = \int \rho^* v^* f^E(t, \mathbf{x}; Z_E^*) dZ_E^*. \quad (6)$$

We can then extend the definition of the average $\langle \cdot \rangle^{\mathcal{R}}$ used for the mean density (6) to any function $H(Z_E^*)$:

$$\alpha(t, \mathbf{x}) \langle H \rangle^{\mathcal{R}}(t, \mathbf{x}) \stackrel{def}{=} \int H(Z_E^*) v^* f^E(t, \mathbf{x}; Z_E^*) dZ_E^*. \quad (7)$$

We also define an other average for any quantity $H(Z_E^*)$, denoted by $\langle H \rangle^{\mathcal{F}}$, and which reads :

$$\alpha(t, \mathbf{x}) \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}}(t, \mathbf{x}) \langle H \rangle^{\mathcal{F}}(t, \mathbf{x}) \stackrel{def}{=} \int H(Z_E^*) m f^E(t, \mathbf{x}; Z_E^*) dZ_E^*. \quad (8)$$

By setting $H = \rho G$ in the definition (7), we get the usefull consistency relation between the two averages :

$$\langle \rho G \rangle^{\mathcal{R}} = \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle G \rangle^{\mathcal{F}}, \quad (9)$$

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

and in particular we get $1 = \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle 1/\rho \rangle^{\mathcal{F}}$ or thanks to our choice of a constant uniform mass $m = \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle v \rangle^{\mathcal{F}}$. The two statistics averaging operators $\langle \cdot \rangle^{\mathcal{R}}$ and $\langle \cdot \rangle^{\mathcal{F}}$ are often respectively called the Reynolds average and the Favre average [3, 4].

Mean-field equations.

Following the results of [5], it is possible to demonstrate that the time-space evolution of the average $\langle H \rangle^{\mathcal{F}}$ of any quantity $H(Z_E^*)$ is governed by the Partial Derivative Equation (PDE) :

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle H \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} H \rangle^{\mathcal{F}} \right) = \\
& \alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \sum_{i=1}^3 \left\langle \left[-\Pi_i(t, \mathbf{x}; Z_E^*) + a_i^u(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \right] \frac{\partial}{\partial u_i^*} (H(Z_E^*)) \right\rangle^{\mathcal{F}} \\
& + \alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \sum_{i=1}^3 \left\langle \frac{(B^u(t, \mathbf{x}; Z_E^*))^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial u_i^{*2}} (H(Z_E^*)) \right\rangle^{\mathcal{F}} \\
& + \alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \left\langle v^* [\Delta(t, \mathbf{x}; Z_E^*) + a^v(t, \mathbf{x}; Z_E^*)] \frac{\partial}{\partial v^*} (H(Z_E^*)) \right\rangle^{\mathcal{F}} + \alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \left\langle \frac{(v^* B^v(t, \mathbf{x}; Z_E^*))^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^{*2}} (H(Z_E^*)) \right\rangle^{\mathcal{F}} \\
& + \alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \left\langle \left\{ -(\gamma - 1) e^* [\Delta(t, \mathbf{x}; Z_E^*) + a^v(t, \mathbf{x}; Z_E^*)] + (\epsilon_d(t, \mathbf{x}; Z_E^*) + a^e(t, \mathbf{x}; Z_E^*)) \right\} \frac{\partial}{\partial e^*} (H(Z_E^*)) \right\rangle^{\mathcal{F}} \\
& + \alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \left\langle \frac{((\gamma - 1) e^* B^v(t, \mathbf{x}; Z_E^*))^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial e^{*2}} (H(Z_E^*)) \right\rangle^{\mathcal{F}}, \tag{10}
\end{aligned}$$

where the arguments (t, \mathbf{x}) have been omitted for the averages.

Volume conservation constraint.

For $H(Z_E^*) = 1/\rho(Z_E^*) = v^*/m$, the equation (10) leads to the following equation for the volumic fraction :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\alpha \langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{R}} \right) = \alpha \langle \Delta(t, \mathbf{x}; Z_E^*) + a^v(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \rangle^{\mathcal{R}}. \tag{11}$$

In fact the volumic fraction represents the volume per unit of volume occupied by the fluid. When the volume fraction is not equal to one, it means that the fluid does not occupy the whole volume.

Provided that the initial condition is such that $\alpha(t = 0, \mathbf{x}) = 1$, and provided that for all time t we have $\alpha(t, \mathbf{s}) = 1$ for all point \mathbf{s} on the boundary of the spacial domain, a necessary and sufficient condition for α to remain equal to 1 is that the modelling terms Δ and a^v fulfil :

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{R}} \right) = \langle \Delta(t, \mathbf{x}; Z_E^*) + a^v(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \rangle^{\mathcal{R}}, \quad \forall (t, \mathbf{x}). \tag{12}$$

To ensure this constraint, we choose to set :

$$\Delta(t, \mathbf{x}; Z_E^*) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{R}} \right),$$

So that the property (12) holds if and only if $\langle a^v(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \rangle^{\mathcal{R}} = 0$. In the following, we assume that a^v is such that the volume conservation holds.

Other mean-field equations.

The equation (10) is used to write the equations for the mean mass, with $H(Z_E^*) = 1$, for the mean momentum, with $H(Z_E^*) = u_i^*$, $i = 1, 2, 3$, and for the mean total energy $E = e + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}/2$, with $H(Z_E^*) = E(Z_E^*)$. The three corresponding equations are :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \right) = 0, \tag{13}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \right) = - \langle \rho \mathbf{\Pi}(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \rangle^{\mathcal{R}} + \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{a}^u(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \rangle^{\mathcal{F}} \tag{14}$$

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle E \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} E \rangle^{\mathcal{F}} \right) &= - \langle \rho \mathbf{\Pi}(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \cdot \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{R}} + \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{a}^u(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \cdot \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \\
&+ \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \left\langle \frac{3(B^u(t, \mathbf{x}; Z_E^*))^2}{2} \right\rangle^{\mathcal{F}} - \langle p^* [\Delta(t, \mathbf{x}; Z_E^*) + a^v(t, \mathbf{x}; Z_E^*)] \rangle^{\mathcal{R}} \\
&+ \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \epsilon_d(t, \mathbf{x}; Z_E^*) + a^e(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \rangle^{\mathcal{F}}
\end{aligned} \tag{15}$$

In the set of equations (13)-(15), all the modelling terms appear. In the following sections, closure laws are proposed for these terms on the basis of a mean-field Euler-type system. The latter represents a reference to model the mean behaviour of non-viscous compressible single-phase flows, and our aim is to provide a stochastic model (i.e. to define the modelling terms in (1)-(4)) whose mean behaviour mimics the Euler-type system (16) :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \right) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle p \rangle^{\mathcal{R}} \right) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle E \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} E \rangle^{\mathcal{F}} + \langle \mathbf{u} p \rangle^{\mathcal{R}} \right) = 0. \end{cases} \tag{16}$$

In compressible flows, dynamics and thermodynamics are closely intricated. But, for the sake of simplicity, and in order to account for all the models already proposed for the dynamics of incompressible flows, we separate these two aspects. Hence, in section 3 a definition of the modelling terms for the momentum equation is proposed and then the thermodynamical terms involved in the energy equation are investigated in section 4.

Remark. It is an important point to be noted that the mean mass equation (13) does not contain any modelling terms, so that it is already equivalent to the mass continuity equation of (16).

Remark. The system (16) has been obtained by applying the Reynolds average $\langle \cdot \rangle^{\mathcal{R}}$ to the instantaneous Euler system of equations. In mean-field models based on the Euler system, the last term in the energy equation is sometimes simplified in :

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \langle p \rangle^{\mathcal{R}} \right).$$

Moreover, the average pressure $\langle p \rangle^{\mathcal{R}} = \langle \mathcal{P}(e, v) \rangle^{\mathcal{R}}$ is approximated by $\mathcal{P}(\langle e \rangle^{\mathcal{F}}, m / \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}})$, thus neglecting the fluctuations of ρ and e . Excepted for linear EOS, as perfect gas EOS, this approximation for the average pressure is rather rough. Eventually, when using these closures, the only term that must be specified is $\langle \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}}$.

3 The dynamical behaviour

We first pay attention to the dynamical part of the model, which means that we define the modelling terms arising in the velocity equation (2) : $\mathbf{\Pi}$, \mathbf{a}^u and B^u .

We first make a choice to ensure that equation (14) is equivalent to the momentum equation in (16). We then set :

$$\mathbf{\Pi} = \frac{1}{\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}}} \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle p \rangle^{\mathcal{R}} \right),$$

and, consequently, the term \mathbf{a}^u must be chosen such that $\langle \mathbf{a}^u \rangle^{\mathcal{F}} = 0$. This choice [7, 8] separates the force due to the pressure into two parts : the force due to the average pressure $\mathbf{\Pi}$ and the force due to the fluctuating pressure which is modeled by \mathbf{a}^u .

In fact, the terms \mathbf{a}^u and B^u rely on the modelling of the turbulence. Despite the existence of complex and sophisticated models for the incompressible turbulence (see [8] among other), we choose a very simple manner to account for the turbulence. We then set $\phi'' = \phi - \langle \phi \rangle^{\mathcal{F}}$ the fluctuation of any quantity ϕ around the average $\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}}$, the Reynolds stress tensor $(R_{ij})_{i,j}$ is a symmetric semi-definite positive matrix defined as : $R_{ij} = \langle u_i'' u_j'' \rangle^{\mathcal{F}}$. The half of the trace of the Reynolds stress tensor is called the turbulent kinetic energy, and will be denoted by $K = \langle \mathbf{u}'' \cdot \mathbf{u}'' \rangle^{\mathcal{F}} / 2$.

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

For the model (1)-(4), the equation for K reads :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} K \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} K \right) + \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \sum_{i,j=1}^3 \left[R_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\langle u_i \rangle^{\mathcal{F}} \right) \right] \\ & + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \left\langle \mathbf{u}'' \sum_{i=1}^3 \frac{(u_i'')^2}{2} \right\rangle^{\mathcal{F}} \right) + \langle \mathbf{u}'' \cdot (\rho \mathbf{\Pi}) \rangle^{\mathcal{R}} = \frac{3}{2} \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle (B^u)^2 \rangle^{\mathcal{F}} + \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{a}^u(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \cdot \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}}. \end{aligned} \quad (17)$$

Appendix 2 details the calculation of the Reynolds stress tensor, from which equation (17) can be obtained. It is obtained using the equation (10) and the decomposition : $R_{ij} = \langle u_i u_j \rangle^{\mathcal{F}} - \langle u_i \rangle^{\mathcal{F}} \langle u_j \rangle^{\mathcal{F}}$. The right hand side of equation (17) appears in equation (15). This is due to the fact that the total energy E gathers the contributions of the mean internal energy and of the mean kinetic energy $\langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} / 2 \rangle^{\mathcal{F}}$, which can be decomposed as :

$$\frac{\langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}}}{2} = \frac{\langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \cdot \langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}}}{2} + K.$$

A possible model for K corresponds to the choice :

$$\frac{3}{2} \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle (B^u)^2 \rangle^{\mathcal{F}} + \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{a}^u(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \cdot \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} = - \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \epsilon_d \rangle^{\mathcal{F}}.$$

This choice enables to retrieve a classical form of the kinetic turbulent energy : when considering homogeneous turbulence, the decay of the kinetic turbulent energy corresponds to the mean dissipation. In the relation above, the modelling term ϵ_d is chosen to be propotional to K :

$$\epsilon_d = \frac{K}{\tau_{\epsilon}},$$

where τ_{ϵ} is a positive time scale, which is assumed to be a statistical constant (i.e. $\langle \tau_{\epsilon} \rangle^{\mathcal{F}} = \langle \tau_{\epsilon} \rangle^{\mathcal{R}} = \tau_{\epsilon}$). Despite its physical simplicity, the resulting model (and the resulting mean-field model for the mean behaviour) inherits good mathematical properties. We choose for \mathbf{a}^u a return to zero form for the velocity fluctuations :

$$\mathbf{a}^u = - \frac{\mathbf{u}''}{\tau_u},$$

where τ_u is a positive time scale and a statistical constant. Hence it verifies $\langle \mathbf{a}^u \rangle^{\mathcal{F}} = 0$. This choice is classical [7, 8], it dictates that each instantaneous velocity tends towards the average velocity $\langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}}$. This model satisfies the property of momentum conservation, and the modelling term B^u is then defined as :

$$\langle (B^u)^2 \rangle^{\mathcal{F}} = K \left(\frac{4}{3\tau_u} - \frac{2}{3\tau_{\epsilon}} \right).$$

The term B^u is thus defined if and only if the time scales are such that $\tau_u \leq 2\tau_{\epsilon}$. Once again, we choose a simple model for B^u :

$$B^u = \sqrt{K \left(\frac{4}{3\tau_u} - \frac{2}{3\tau_{\epsilon}} \right)}$$

We have now defined all the modelling terms for the dynamics, except the time scales. The turbulence has been modeled according to the simple mean-field K-model, in an isotropic form (in the sense that \mathbf{a}^u and B^u are isotropic).

4 The thermodynamical behaviour

The modelling of the dynamics, carried out in section 3, has benefited from the models that have already been developed during the 3 preceeding decades for compressible and incompressible flows. Unfortunately, no such developments can be found when looking for models for the thermodynamics. Very few works or

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

results are available concerning the thermodynamical behaviour of compressible turbulent flows. Nonetheless, the reader can refer to [2] where a complete model for turbulent compressible flows can be found. Our approach here is almost similar to those of [2]. In this section, some closure laws for a^v , B^v and a^e are investigated.

According to the choices of the section 3 for the modelling terms $\mathbf{\Pi}$, \mathbf{a}^u and B^u , the equation (15) now reads :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle E \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} E \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{R}} \langle p \rangle^{\mathcal{R}} \right) = \\ - \langle p^* a^v(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \rangle^{\mathcal{R}} + \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle a^e(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \rangle^{\mathcal{F}}. \end{aligned} \quad (18)$$

Hence, in order to recover the energy equation of system (16), the modelling terms a^v and a^e have to be chosen such that :

$$\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle a^e(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \rangle^{\mathcal{F}} = \langle p^* a^v(t, \mathbf{x}; Z_E^*) \rangle^{\mathcal{R}} - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{u}' p' \rangle^{\mathcal{R}} \right),$$

where ϕ' stands for the fluctuation of the quantity ϕ around its average $\langle \phi \rangle^{\mathcal{R}}$, or $\phi' = \phi - \langle \phi \rangle^{\mathcal{R}}$. We choose the following definition for a^e :

$$\rho a^e = p a^v - \frac{\rho e}{\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle e \rangle^{\mathcal{F}}} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{u}' p' \rangle^{\mathcal{R}} \right). \quad (19)$$

At last, the terms a^v and B^v must be defined to obtain a closed stochastic lagrangian model.

In order to achieve this, we consider the equation for the volume (3) and for the energy (4) in an homogeneous box : in other words, we assume that all the space-derivative terms vanish but the velocity and its fluctuations are not neglected, that is :

$$dv(t) = v(t) a^v dt + v(t) B^v dw_t^v, \quad (20)$$

$$de(t) = -(\gamma - 1) e(t) B^v dw_t^v. \quad (21)$$

We intend now to describe the thermodynamical behaviour of a statistical collection of particles located at the same place. Our choice is to model a^v and B^v in order to obtain a return to equilibrium of the instantaneous pressures. Nevertheless, since the kinetic turbulent energy is non-zero and since the velocity fluctuations rely on the pressure fluctuations, K has to be accounted for in the model for a^v and B^v . We first give a^v such that the instantaneous pressures tend to the mean pressure $\langle \mathcal{P}(e, v) \rangle^{\mathcal{R}}$:

$$a^v = \frac{p'}{\langle p \rangle^{\mathcal{R}} \tau_v},$$

where $p' = \mathcal{P}(e, v) - \langle \mathcal{P}(e, v) \rangle^{\mathcal{R}}$ and with τ_v a positive statistically-constant time scale. This closure obviously ensures the conservation of the volume as exposed in section 2.

The resulting equations (20)-(21) leads to McKean SDEs for which very few theoretical results exist. The McKean equation for the joint PDF $f_{e,v}(t; e^*, v^*)$ for the couple of variables (e^*, v^*) is :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_{e,v}(t; e^*, v^*)) = - \frac{\partial}{\partial v^*} (v^* (a^v)^* f_{e,v}(t; e^*, v^*)) + \frac{\partial^2}{\partial v^{*2}} \left(\frac{1}{2} (v^* (B^v)^*)^2 f_{e,v}(t; e^*, v^*) \right) \\ + \frac{\partial^2}{\partial e^{*2}} \left(\frac{1}{2} (e^* (\gamma - 1) (B^v)^*)^2 f_{e,v}(t; e^*, v^*) \right). \end{aligned} \quad (22)$$

This equation yields to the following ODE, which describes the time evolution of the average value of any function G depending on the internal energy and the volume :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\langle \rho G(e, v) \rangle^{\mathcal{R}} \right) = \left\langle \rho v a^v \frac{\partial}{\partial v} (G(e, v)) \right\rangle^{\mathcal{R}} + \left\langle \rho \frac{1}{2} (v B^v)^2 \frac{\partial^2}{\partial v^2} (G(e, v)) \right\rangle^{\mathcal{R}} \\ + \left\langle \rho \frac{1}{2} (e (\gamma - 1) B^v)^2 \frac{\partial^2}{\partial e^2} (G(e, v)) \right\rangle^{\mathcal{R}}. \end{aligned} \quad (23)$$

The mean density $\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}}$ and the mean internal energy $\langle e \rangle^{\mathcal{F}}$ are then constant :

$$\frac{d}{dt} \left(\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \right) = 0 \quad \text{and} \quad \frac{d}{dt} \left(\langle e \rangle^{\mathcal{F}} \right) = 0.$$

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

These results are straight consequences of closure (19). Thanks to the perfect gas EOS, it follows that the mean pressure $\langle p \rangle^{\mathcal{R}}$ is also a constant :

$$\frac{d}{dt} \left(\langle p \rangle^{\mathcal{R}} \right) = 0,$$

and since the mass m is constant and uniform we also have :

$$\frac{d}{dt} \left(\langle v \rangle^{\mathcal{F}} \right) = 0.$$

Hence the time evolution of the mean behaviour of the thermodynamics depicted by (20) and (21) is straightforward.

Using the equation (23) (or the Fokker-Plank equation for PDF of the pressure of the Appendix 1), the time evolution of the pressure variance can be found. It reads :

$$\frac{d}{dt} \left(\langle (p')^2 \rangle^{\mathcal{R}} \right) = -\frac{2}{\tau_v} \langle (p')^2 \rangle^{\mathcal{R}} + \gamma \langle (pB^v)^2 \rangle^{\mathcal{R}} - \frac{1}{\tau_v \langle p \rangle^{\mathcal{R}}} \langle (p')^3 \rangle^{\mathcal{R}}. \quad (24)$$

For the sake of simplicity, we then assume that B^v is deterministic and belongs to $\mathcal{L}(\mathbb{R}^+)$. Hence the equation (24) can be simplified in :

$$\frac{d}{dt} \left(\langle (p')^2 \rangle^{\mathcal{R}} \right) = \left(\gamma (B^v)^2 - \frac{2}{\tau_v} \right) \langle (p')^2 \rangle^{\mathcal{R}} + \gamma (B^v)^2 \left(\langle p \rangle^{\mathcal{R}} \right)^2 - \frac{1}{\tau_v \langle p \rangle^{\mathcal{R}}} \langle (p')^3 \rangle^{\mathcal{R}}. \quad (25)$$

As a consequence, the time evolution of the variance $\langle (p')^2 \rangle^{\mathcal{R}}$ depends on : $B^v(t)$, $\langle p \rangle^{\mathcal{R}}(0)$ and $\langle (p')^3 \rangle^{\mathcal{R}}(t)$. Considering a Cauchy problem based on equation (25), a necessary condition to get a bounded solution is that $(B^v)^2$ and $\langle (p')^3 \rangle^{\mathcal{R}}$ must belong to $L^1(\mathbb{R}^+)$. In that case, if $(B^v)^2$ and $\langle (p')^3 \rangle^{\mathcal{R}}$ are continuous, there exists a unique solution to the Cauchy problem.

The difficulty arising in the analysis of equation (25) is related to $\langle (p')^3 \rangle^{\mathcal{R}}$. An equation on $\langle (p')^3 \rangle^{\mathcal{R}}$ could be exhibited, but the latter would depend on $\langle (p')^4 \rangle^{\mathcal{R}}$, and so on. In fact, the pressure behaviour should be analysed through the Fokker-Planck equation for the PDF of the pressure (which is available in appendix 1). This remains a very difficult task, so we perform now a partial analysis by truncating the PDF : we assume that $\langle (p')^3 \rangle^{\mathcal{R}}$ is equal to zero in (25), so that it now reads :

$$\frac{d}{dt} \left(\langle (p')^2 \rangle^{\mathcal{R}} \right) = \left(\gamma (B^v)^2 - \frac{2}{\tau_v} \right) \langle (p')^2 \rangle^{\mathcal{R}} + \gamma (B^v)^2 \left(\langle p \rangle^{\mathcal{R}} \right)^2. \quad (26)$$

The equation (26) has a classical form since the mean pressure is constant. The term B^v make the instantaneous pressures deviate from the equilibrium, and it appears as positive contribution in the equation for the pressure variance. We choose a simple model for B^v which depends on the turbulent kinetic energy :

$$(B^v)^2 = \frac{1}{\tau_d} \frac{K}{K(0)},$$

where τ_d is a positive statistically-constant time scale. When considering an homogeneous box, the dynamical model depicted in section 3, and the corresponding equation for the turbulent kinetic energy (17), lead to the exponential decrease in time of K to zero. Hence, if $1/\tau_d$ belongs to $L^\infty(\mathbb{R}^+)$, the expression of $(B^v)^2$ given above belongs to $L^1(\mathbb{R}^+)$. Thus, the solution of the Cauchy problem based on (26) for an homogeneous box reaches a stationnary state such that :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} B^v = 0 \quad \text{and} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\langle (p')^2 \rangle^{\mathcal{R}} \right) = 0.$$

In order to ensure a stable behaviour of the pressure variance even for small times, one can choose τ_v and τ_d such that first term of the right-hand-side of (26) remains positive for every times, that is :

$$\frac{\gamma}{\tau_d} \frac{K}{K(0)} < \frac{2}{\tau_v}.$$

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

Finally, the complete equations (3) and (4) now read :

$$dv(t) = v(t) \left[\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{R}}) + \frac{p'}{\langle p \rangle^{\mathcal{R}} \tau_v} \right] dt + v(t) \sqrt{\left[\frac{1}{\tau_d} \frac{K(t)}{K(0)} \right]} d\omega_t^v, \quad (27)$$

$$de(t) = e(t) \left[-(\gamma - 1) \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{R}}) - \frac{1}{\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle e \rangle^{\mathcal{F}}} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle \mathbf{u}' p' \rangle^{\mathcal{R}}) \right] dt + \epsilon_d dt - (\gamma - 1) e(t) \sqrt{\left[\frac{1}{\tau_d} \frac{K}{K(0)} \right]} d\omega_t^v. \quad (28)$$

These equations ensure the positivity of the volume and the internal energy, provided that the spatial derivative terms remain bounded.

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

5 Conclusion

The stochastic model proposed above remains simple and can only deal with perfect gas equation of states. Nonetheless, the system of PDEs governing the time-space evolution of the mean-fields for the density, momentum, total energy and turbulent kinetic energy [6] corresponds to an Euler-type system of equation supplemented by an equation for the turbulent kinetic energy. It is an important point to be noted that this mean-field model is realizable. Moreover, the stochastic model naturally ensures the positivity of the density and the energy.

Hence, the stochastic model owns mathematical properties that are necessary conditions to get physical relevance, and that allow to build stable and robust numerical schemes [8]. Since the complete behaviour of the model can not be studied analytically, it seems necessary to pursue this analysis using numerical simulations.

The results of the present work could be extended to two-phase flow stochastic models, (see for instance the model proposed in [5]) where the thermodynamical model was left out. The extension to more complex equations of state remains a tricky question since the linearity of the perfect gas equation of state helps in obtaining a complete model in closed form. This point is important for industrial applications with water. The turbulence model is quite simple, but more sophisticated models could be considered. In fact, the difficulty arises in determining a compressible turbulence mean-field model which is physically relevant [1].

An effort could be made to build a stochastic model without the use of a reference mean-field model; the latter would then stem directly from the stochastic model as a consequence of the different modelling choices. Nevertheless, the main difficulty remains : the modelling of turbulence for compressible flows lacks of theoretical and physical works. As an example, the different time scales involved in the model have not been specified. This specification requires a sharp physical knowledge of the compressible turbulent flows.

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

6 Appendix 1 : The fokker-Planck equation for the pressure

We consider the thermodynamical sub-system of section 4, composed of the two equations for the volume and the internal energy (20)-(21) with the closures of section 4 :

$$a^v(p) = \frac{p - \langle p \rangle^{\mathcal{R}}}{\langle p \rangle^{\mathcal{R}} \tau_v}.$$

For the term B^v , we only assume that it belongs to $L^2(\mathbb{R}^+)$. The equation for the instantaneous pressure then reads :

$$dp(t) = -p(t) \left\{ (a^v - \gamma(B^v)^2)dt + \gamma B^v d\omega_t^v \right\}. \quad (29)$$

The Fokker-Planck equation for the PDF of the process $\{e(t), p(t)\}$ can be written on the sample-space :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_{e,p}(t; e^*, p^*)) + \frac{\partial}{\partial p^*} (-p^* [a^v(p^*) - \gamma(B^v(t)^2)] f_{e,p}(t; e^*, p^*)) = \\ \frac{\partial^2}{\partial p^{*2}} \left([p^* \gamma B^v(t)]^2 f_{e,p}(t; e^*, p^*) \right) + \frac{\partial^2}{\partial e^{*2}} \left([e^* (\gamma - 1) B^v(t)]^2 f_{e,p}(t; e^*, p^*) \right). \end{aligned} \quad (30)$$

The PDF f_p stands for the PDF for the pressure, obtained by averaging $f_{e,p}$ on the energy :

$$f_p(t; p^*) = \int f_{e,p}(t; e^*, p^*) de^*.$$

We assume that $f_{e,p}(t; e^*, p^*)$ tends to zero when e^* tends to zero or to infinity. Hence, integrating (30) over e^* yields the following Fokker-Planck equation for the PDF f_p :

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_p(t; p^*)) + \frac{\partial}{\partial p^*} (-p^* [a^v(p^*) - \gamma(B^v(t)^2)] f_p(t; p^*)) = \frac{\partial^2}{\partial p^{*2}} \left([p^* \gamma B^v(t)]^2 f_p(t; p^*) \right), \quad (31)$$

or in non-conservative form :

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_p(t; p^*)) + \mathcal{A}(t, p^*) \frac{\partial}{\partial p^*} (f_p(t; p^*)) = \mathcal{B}(t, p^*) f_p(t; p^*) + \mathcal{C}(t, p^*) \frac{\partial^2}{\partial p^{*2}} (f_p(t; p^*)), \quad (32)$$

with :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(t, p^*) &= -p^* \left\{ a^v(p^*) - \gamma(B^v(t))^2 + 4[\gamma B^v(t)]^2 \right\}, \\ \mathcal{B}(t, p^*) &= \left\{ 2[\gamma B^v(t)]^2 + \frac{\partial}{\partial p^*} (p^* a^v(p^*)) \right\}, \\ \mathcal{C}(t, p^*) &= [p^* \gamma B^v(t)]^2. \end{aligned}$$

The term involving \mathcal{A} represents the convection, the term involving \mathcal{B} is a source term and since \mathcal{C} is positive it corresponds to a diffusion term. This diffusion terms tends to spread f_p over the sample-space. For $B^v = 0$, the coefficients above are :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(t, p^*) &= -p^* a^v(p^*) = -p^* (p^* - \langle p \rangle^{\mathcal{R}}) \frac{1}{\tau \langle p \rangle^{\mathcal{R}}}, \\ \mathcal{B}(t, p^*) &= \frac{\partial}{\partial p^*} (p^* a^v(p^*)) = \left(p^* - \frac{\langle p \rangle^{\mathcal{R}}}{2} \right) \frac{2}{\tau \langle p \rangle^{\mathcal{R}}}, \\ \mathcal{C}(t, p^*) &= 0. \end{aligned}$$

We can then make a quantitative analysis of the evolution of the corresponding PDF. The convection term \mathcal{A} tends to concentrate the PDF at $p^* = \langle p \rangle^{\mathcal{R}}$ (note that the pole $p^* = 0$ is repulsive). The source term \mathcal{B} increases the PDF on the interval $p^* \in [\langle p \rangle^{\mathcal{R}}, +\infty[$ and decreases the PDF on $p^* \in]0, \langle p \rangle^{\mathcal{R}}]$. Since the diffusion term is null, the PDF is not spread. Hence, the PDF tends to a Dirac function located at $p^* = \langle p \rangle^{\mathcal{R}}$.

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

7 Appendix 2 : Equations for the co-variance terms : application to the Reynolds stress tensor

This appendix presents an example of calculus of the time variation of co-variance terms. The formulae obtained are then applied to the Reynold stress tensor.

Let us assume that ϕ and ψ are two variables associated to a particle with an instantaneous velocity \mathbf{u} . The SDEs for this variables are then written :

$$d\phi = A^\phi dt + B^\phi d\omega^\phi, \text{ and } d\psi = A^\psi dt + B^\psi d\omega^\psi,$$

where we assume that $\langle d\omega^\phi d\omega^\psi \rangle^{\mathcal{F}} \sim dt \delta(d\omega^\phi, d\omega^\psi)$, with $\delta(d\omega^\phi, d\omega^\psi)$ equal to zero if the processes $d\omega^\phi$ and $d\omega^\psi$ are uncorrelated and $\delta(d\omega^\phi, d\omega^\psi)$ equal to one otherwise. The fluctuation ϕ'' are defined with respect to the average of $\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}}$: $\phi = \langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} + \phi''$. For an average quantity, say $\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}}$, the derivative $d\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}}$ corresponds to the derivative operator :

$$d\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} = dt \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} \right) \right\},$$

where the convection velocity is the instantaneous velocity \mathbf{u} , and not an average value. It represents the derivative of the average of ϕ along the instantaneous trajectory of the particle. We can thus define the SDE for the fluctuation :

$$d\phi'' = \{A^\phi dt + B^\phi d\omega_\phi\} - dt \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} \right) \right\}. \quad (33)$$

Thanks to equation (10), we have :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \phi \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \right) = \alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle A^\phi \rangle^{\mathcal{F}}, \quad (34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \right) = 0, \quad (35)$$

By using the mean mass equation (35), equation (34) is equivalent to :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} \right) = \langle A^\phi \rangle^{\mathcal{F}} - \frac{1}{\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}}} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \phi'' \mathbf{u}'' \rangle^{\mathcal{F}} \right), \quad (36)$$

thus equation (33) reads :

$$d\phi'' = \left\{ (A^\phi)'' - \frac{1}{\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}}} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \phi'' \mathbf{u}'' \rangle^{\mathcal{F}} \right) - \mathbf{u}'' \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} \right) \right\} dt + B^\phi d\omega_\phi. \quad (37)$$

From the Itô's formula, we can find the SDE for the product of the fluctuations. If the second order terms in $o(dt^2)$ are omitted, the latter reads :

$$\begin{aligned} d(\phi'' \psi'') &= \psi'' \left\{ (A^\phi)'' - \frac{1}{\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}}} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \phi'' \mathbf{u}'' \rangle^{\mathcal{F}} \right) - \mathbf{u}'' \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} \right) \right\} dt + \psi'' B^\phi d\omega_\phi \\ &+ \phi'' \left\{ (A^\psi)'' - \frac{1}{\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}}} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \psi'' \mathbf{u}'' \rangle^{\mathcal{F}} \right) - \mathbf{u}'' \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle \psi \rangle^{\mathcal{F}} \right) \right\} dt + \phi'' B^\psi d\omega_\psi + B^\phi B^\psi d\omega_\psi d\omega_\phi. \end{aligned}$$

Since it has been assumed that $\langle d\omega^\phi d\omega^\psi \rangle^{\mathcal{F}} \sim dt \delta(d\omega^\phi, d\omega^\psi)$, the last term of the SDE is involved in the average behaviour of $\phi'' \psi''$. So that, thanks to the results of section 2, we get the following PDE for the co-variance $\langle \phi'' \psi'' \rangle^{\mathcal{F}}$:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \phi'' \psi'' \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u} \phi'' \psi'' \rangle^{\mathcal{F}} \right) \\ &+ \alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \left\{ \langle \psi'' \psi'' \rangle^{\mathcal{F}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle \phi \rangle^{\mathcal{F}} \right) + \langle \mathbf{u}'' \phi'' \rangle^{\mathcal{F}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \left(\langle \psi \rangle^{\mathcal{F}} \right) \right\} \\ &= \alpha \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \left(\langle (A^\phi)'' \psi'' \rangle^{\mathcal{F}} + \langle (A^\psi)'' \phi'' \rangle^{\mathcal{F}} + \langle B^\phi B^\psi \rangle^{\mathcal{F}} \delta(d\omega^\phi, d\omega^\psi) \right). \end{aligned} \quad (38)$$

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

Let us now apply these results to the Reynolds stress tensor $\langle \mathbf{u}'' \otimes \mathbf{u}'' \rangle^{\mathcal{F}}$. By applying the equation (38) for $\phi = u_i$ and $\psi = u_j$, we get an equation for $R_{ij} = \langle u_i'' u_j'' \rangle^{\mathcal{F}}$:

$$\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (R_{ij}) + \langle \mathbf{u} \rangle^{\mathcal{F}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} (R_{ij}) + \langle \mathbf{u}'' u_j'' \rangle^{\mathcal{F}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} (\langle u_i \rangle^{\mathcal{F}}) + \langle \mathbf{u}'' u_i'' \rangle^{\mathcal{F}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} (\langle u_j \rangle^{\mathcal{F}}) \right\} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \langle \mathbf{u}'' u_i'' u_j'' \rangle^{\mathcal{F}}) = \langle \rho \rangle^{\mathcal{R}} \left(\langle (A_i^u)'' u_j'' \rangle^{\mathcal{F}} + \langle (A_i^u)'' u_j'' \rangle^{\mathcal{F}} + \langle B_i^u B_j^u \rangle^{\mathcal{F}} \delta_{ij} \right),$$

where $\mathbf{A}^u = -\mathbf{\Pi} + \mathbf{a}^u$ and $B_j^u = B^u$. We obviously have :

$$\langle \mathbf{u}'' u_j'' \rangle^{\mathcal{F}} = (R_{1j}, R_{2j}, R_{3j})^{\top}.$$

The turbulent kinetic energy is defined as half the sum of the trace of the Reynolds stress tensor :

$$K = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 R_{ii}.$$

Hence, the equation for R_{ij} allows to exhibit the PDE for the evolution of the turbulent kinetic energy used in section 3.

EDF R&D	Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach	H-I83-2012-03036-FR Version 1.0
---------	--	------------------------------------

8 References

Références

- [1] B. AUDEBERT, "Contribution à l'analyse de l'interaction onde de choc - couche limite", *Thèse Université Paris 6*, 19/12/2006.
- [2] B.J. DELARUE, S. B. POPE, "Application of PDF methods to compressible turbulent flows", *Phys. of Fluids*, vol. 9, pp. 2704–2715, 1997.
- [3] A. FAVRE, "Equations des gaz turbulents compressibles", *J. Mécanique*, vol. 4(3), pp. 361–390, 1965.
- [4] A. FAVRE, L. S. G. KOVASZNY, R. DUMAS, J. GAVIGLIO, M. COANTIC, "La turbulence en mécanique des fluides", *Gauthier-Villars*, 1976.
- [5] O. HURISSE, J.-P. MINIER, "Modélisation stochastique d'écoulements diphasiques avec changement de phase", *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 339(6), pp. 418–431, 2011.
- [6] X. LOUIS, "Modélisation numérique de la turbulence compressible", *Thèse Université Paris 6*, 06/07/1995.
- [7] E. PEIRANO, J.-P. MINIER, "The pdf approach to polydispersed turbulent two-phase flows", *Physics reports*, vol. 352, pp. 1–214, 2001.
- [8] S. B. POPE, "Turbulent Flows", *Cambridge University Press*, 2000.

5.3 Curricilum Vitae

Olivier Hurisse

EDF R&D
Dép. MFEE
6 quai Watier
78400 Chatou

né le 11/02/1977
Tel: 01.30.87.70.43
Email: olivier.hurisse@edf.fr

Formation

2003-2006 : Thèse de doctorat en Mathématiques Appliquées (soutenue le 16/10/2006)
Université de Provence, Aix-Marseille I
Sujet : "Couplage interfacial instationnaire de modèles diphasiques".
Jury : F. Coquel, T. Gallouët, O. Guès, J.-M. Hérard, P. Helluy^R, P.-A. Raviart^R.

2002 : DEA de Mathématiques Appliquées, Université Joseph Fourier de Grenoble.

1999-2002 : Ingénieur ENSIMAG (Ecole Nat. Sup. d'Inform. et de Math. Appli. de Grenoble)
filiale Modélisation et Calcul Scientifique.

Expérience professionnelle

Depuis 2006 : Ingénieur de recherche à EDF R&D en mécanique des fluides

- Compétences clefs :
 - Modélisation et simulation des écoulements diphasiques
 - Modélisation et simulation des écoulements monophasiques
 - Modélisation stochastique et simulation par méthode Monte-Carlo
 - Vérification et validation de codes de calcul
 - Couplage de codes de calcul
- Activités principales :
 - Développement de modèles, de schémas numériques et de codes de calcul
 - Réalisation d'études industrielles
 - Animation de séminaires techniques
 - Suivi de contrats de partenariat

Outils informatiques

Codes de calcul : Neptune_CFD, Code_Saturne

Langages informatiques : Fortran, C/C++, Python, scripts Linux/Unix

Autres : Matlab, Scilab, Simail, Gambit, Latex

Doctorants co-encadrés

Christophe Henry, "Modélisation stochastique du dépôt de particules colloïdales sur des parois rugueuses dans un écoulement turbulent", thèse soutenue le 06/09/2012, directeur de thèse : G. Lefèvre, encadrement EDF : O. Hurisse, J.-P. Minier.

Yujie Liu, "Contribution à la vérification et à la validation d'un modèle diphasique bifluide instationnaire", soutenue le 11/09/2013, directeur de thèse : J.-M. Hérard, encadrement EDF : J.-M. Hérard, F. Daude, O. Hurisse.

Christophe Leclercq - thèse en cours 2014-2017, directeur de thèse : R. Fortes-Patella, encadrement EDF : A. Archer.

Communications

Revues avec comité de lecture :

"A simple method to compute standard two-fluid models ", Hérard J.M., Hurisse O. , *Int. J. of Computational Fluid Dynamics*, vol. 19 (7), pp. 475-482, 2005.

"Well balanced schemes versus fractional step method for hyperbolic systems with source terms ", Gallouët T., Hérard J.M., Hurisse O., LeRoux A.Y. , *Calcolo*, vol. 43 (4), pp. 217-251, 2006.

"Coupling of two and one dimensional unsteady Euler equations through a thin interface ", J. Hérard, O. Hurisse., *Computers and Fluids*, vol. 36 (4), pp. 651- 666, 2007.

"A method to couple HEM and HRM two-phase flow models ", Ambroso A., Hérard J.M., Hurisse O. , *Computers and Fluids*, vol. 38, pp. 738-756, 2009.

"Some recent numerical advances for two-phase flow modelling in NEPTUNE project", Hérard J.M., Hurisse O., *Int. J. Numerical Methods in Fluid*, vol. 59, pp. 285- 307, 2009.

"Some attempts to couple distinct fluid models ", Hérard J.M., Hurisse O. , *Networks and Heterogeneous Media*, vol. 5 (3), pp. 649- 660, 2010.

"Numerical study on the deposition rate of hematite particle on polypropylene walls : role of surface roughness ", C. Henry, J.-P. Minier, G. Lefèvre, O. Hurisse, *Langmuir*, vol. 27 (8), pp. 4603-4612, 2010.

"Modélisation stochastique d'écoulements diphasiques avec changement de phase ", O. Hurisse, J.-P. Minier, *Comptes-rendus de Mécanique*, vol. 339 (6), pp. 418-431, 2011.

"A fractional step method to compute a class of compressible gas-liquid flows ", J.-M. Hérard, O. Hurisse, *Computers and fluids*, vol. 55, pp. 57-69, 2012.

"Modelling compressible multiphase flows ", F. Coquel, T. Gallouët, P. Helluy, J.-M. Hérard, O. Hurisse, N. Seguin, *ESAIM: PROCEEDINGS*, vol. 40, p. 34-50, 2013.

"Approximate solutions of the Baer-Nunziato Model ", F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, P. Helluy, J.-M. Hérard, O. Hurisse, Y. Liu, *ESAIM: PROCEEDINGS*, vol. 40, p. 63-82, 2013.

"Water evaporation in silica colloidal deposits ", J. Peixinho, G. Lefèvre, F.-X. Coudert, O. Hurisse, *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 408, pp. 206-211, 2013.

"Adsorption in complex porous networks with geometrical and chemical heterogeneity ", Q.-T. Doan, G. Lefèvre, O. Hurisse, F.-X. Coudert, *Molecular Simulation*, vol. 40, pp. 16-24, 2014.

"Application of an homogeneous model to simulate the heating of two-phase flows ", O. hurisse, *Int. J. of Finite Volumes*, <http://www.latp.univ-mrs.fr/IJFV/>, vol. 11, pp. 1-37, 2014.

"Validation of a two-fluid model on unsteady water-vapour flows ", F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, J.-M. Hérard, O. hurisse, Y. Liu, *Computers and Fluids*, vol. 119, pp. 131-142, 2015.

"Verification of a two-phase flow code based on a homogeneous model", P. Helluy, O. hurisse, E. Le Coupanec, *Int. J. of Finite Volumes*, <http://www.latp.univ-mrs.fr/IJFV/>, vol. 13, pp. 1-24, 2016.

"Numerical simulations of steady and unsteady two-phase flows using an homogeneous model", O. hurisse, *Computers and Fluids*, vol. 152, pp. 88-103, 2017.

Conférences (* co-auteur présentant le papier) :

"Coupling Two and One Dimensional Model Through a Thin Interface ", J.-M. Hérard*, O. Hurisse, AIAA paper 2005-4718, 17th AIAA CFD Conference, Toronto (Canada), 2005.

"On the accuracy of upwinding schemes for hyperbolic systems with source terms ", J.-M. Hérard*, O. Hurisse, AIAA paper 2005-4988, 17th AIAA CFD Conference, Toronto (Canada), 2005.

"A Method to Couple Two- Phase Flow Models ", A. Ambroso, J.-M. Hérard, O. Hurisse*, AIAA paper 2006-3900, 36th AIAA FD Conference, San Fransisco (USA), 2006.

"Boundary Conditions For The Coupling Of Two- Phase Flow Models ", J.-M. Hérard*, O. Hurisse, AIAA paper 2007-4458, 18th AIAA CFD Conference, Miami (USA), 2007.

"The numerical coupling of a two-fluid model with an homogeneous relaxation model", J.-M. Hérard, O. Hurisse, FVCA5, Aussois (France), 2008.

"Computing Two-Phase Flows in Porous Media with a Two-Fluid Hyperbolic Model ", F. Archambeau, L. Girault, J.-M. Hérard, O. Hurisse, FVCA5, Aussois (France), 2008.

"Une classe de modèles diphasiques compressibles ", Jean-Marc Hérard, Olivier Hurisse*, Congrès Français de Mécanique 2009, Marseille (France), 2009.

"Computing Two-fluid Models of Compressible Water-vapour Flows with Mass Transfer ", Jean-Marc Hérard*, Olivier Hurisse, AIAA paper 2012-2959, 42nd AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, New Orleans (USA), 2012.

"Application of a two-fluid model to simulate the heating of two-phase flows ", Hérard Jean-Marc, Hurisse Olivier*, Morente Antoine, Saleh Khaled, FVCA7, Berlin (Germany), 2014.

"Some application of a two-fluid model", Fabien Crouzet, Frédéric Daude, Pascal Galon, Hérard Jean-Marc*, Hurisse Olivier, Yujie Liu, FVCA7, Berlin (Germany), 2014.

Preprint non publiés :

"Schémas d'intégration du terme source de relaxation des pressions phasiques d'un modèle bi-fluide hyperbolique", J.-M. Hérard, O. Hurisse, note EDF R&D H-181-2009-01514-FR, 2009.

"Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach ", O. Hurisse, note EDF R&D H-183-2012-03036-FR, 2012.

Articles de vulgarisation :

"Couplage interfacial instationnaire de modèles diphasiques ", O. Hurisse, *La Houille Blanche*, Numéro 1, pp. 78-82, Fév. 2008.

References

- [1] G. Allaire, S. Clerc, S. Kokh, “A Five-Equation Model for the Simulation of interfaces between Compressible Fluids”, *Int. Journal of Comp. Phys.*, Vol. 181, pp. 577-616, 2003.
- [2] A. Ambroso, J.-M. Hérard, O. Hurisse, “A method to couple HEM and HRM two-phase flow models”, *Computers and Fluids*, vol. 38, pp. 738-756, 2009.
- [3] A. Ambroso, “Modélisation et simulation d’écoulements de fluides complexes ”, Habilitation à Diriger des Recherches, Université Pierre et Marie Curie, Septembre 2009.
- [4] S. Aubry, J. Cahouet, P. Lequesne, G. Nicolas, S. Pastorini, “THYC Code de Thermohydraulique des Coeurs de Réacteurs Version 1 .0. Modélisation et Méthodes Numériques”, EDF internal report HT-13/8886 A, 1988.
- [5] M.R. Baer, J. W. Nunziato, “A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition in reactive granular materials”, *Journal of Multiphase Flows*, vol. 12, pp. 861–889, 1986.
- [6] T. Barberon, P. Helluy, “Finite volume simulation of cavitating flows”, *Computers and Fluids*, vol. 34, pp. 832–858, 2005.
- [7] F. Coquel, T. Gallouët, P. Helluy, J.-M. Hérard, O. Hurisse, N. Seguin, “Modelling compressible multiphase flows ”, *ESAIM: PROCEEDINGS*, 2013, vol. 40, pp. 34–50
- [8] F. Coquel, J.-M. Hérard, K. Saleh, N. Seguin, “Two properties of two-velocity two-pressure models for two-phase flows”, *Comm. in Math. Scien.*, vol. 12 (3), 2014.
- [9] F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, P. Helluy, J.-M. Hérard, O. Hurisse, Y. Liu, “Approximate solutions of the Baer-Nunziato Model ”, *ESAIM: PROCEEDINGS*, 2013, vol. 40, pp. 63-82.
- [10] F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, J.-M. Hérard, O. Hurisse, Y. Liu, “Validation of a two-fluid model on unsteady liquid-vapor water flows”, *Computers & Fluids*, 2015, vol. 119, pp. 131-142.
- [11] B. J. Delarue, S. B. Pope, “Application of PDF methods to compressible turbulent flows”, *Phys. Fluids*, vol. 9, pp. 2704-2715, 1997.
- [12] Q.-T. Doan, G. Lefèvre, O. Hurisse, F.-X. Coudert, “Adsorption in complex porous networks with geometrical and chemical heterogeneity”, *Molecular Simulation*, vol. 40., 99. 16-24, 2014.
- [13] K. Dorogan, “Schémas numériques pour la modélisation hybride des écoulements turbulents gaz-particules”, thèse de doctorat, Université d’Aix-Marseille, soutenue le 24/05/2012, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00820978>.
- [14] K. Dorogan, J.-M. Hérard, “A two-dimensional relaxation scheme for the hybrid modelling of gas-particle two-phase flows”, *Int. J. of Finite Volume*, Vol. 8, pp. 1-30, 2012.
- [15] P. Downar-Zapolski, Z. Bilicki, L. Bolle, J. Franco, “The non-equilibrium relaxation model for one-dimensional flashing liquid flow”, *Int. J. of Multiphase Flow*, Vol. 22, pp. 473-483, 1996.

- [16] R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin, “The finite volume method”, Handbook for Numerical Analysis, Ph. Ciarlet J.L. Lions eds, North Holland, pp. 715-1022, 2000.
- [17] E. Faucher, J.M. Hérard, M. Barret, C. Toulemonde, “Computation of Flashing Flows in Variable Cross-Section Ducts”, Int. J. of Comp. Fluids Dynamic, Vol. 13, pp. 365-391, 2000
- [18] S. Gavrilyuk, R. Saurel, “Mathematical and Numerical Modeling of Two-Phase Compressible Flows with Micro-Inertia”, J. of Comp. Phys., Vol. 175(1), pp. 326-360, 2002.
- [19] S. Gavrilyuk, “The structure of pressure relaxation terms : one-velocity cas”, EDF Report H-I83-2014-00276-EN, 2002.
- [20] T. Gallouët, J.-M. Hérard, N. Seguin, “Numerical modeling of two-phase flows using the two-fluid two-pressure approach”, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, vol. 14(15), pp. 663–700, 2004.
- [21] H. Guillard, A. Murrone, “A five equation reduced model for compressible two phase flow problems”, Journal of Computational Physics, Vol. 202, pp. 664-698, 2005.
- [22] E. Godlewski, P.-A. raviart, “Numerical analysis for hyperbolic systems of conservation laws”, Springer Verlag, 1996.
- [23] P. Helluy, “Simulation numérique des écoulements multiphasiques : de la théorie aux applications”, Habilitation à diriger des Recherches, 06/01/2005, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00657839>.
- [24] C. Henry, J.-P. Minier, G. Lefèvre, O. Hurisse “Numerical study on the deposition rate of hematite particle on polypropylene walls: role of surface roughness”, Langmuir, vol. 27 (8), pp. 4603-4612, 2010.
- [25] C. Henry, “Modélisation stochastique du dépôt de particules colloïdales sur des parois rugueuses dans un écoulement turbulent”, thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, soutenue le 6/09/2012.
- [26] J.-M. Hérard, O. Hurisse, “A simple method to compute standard two-fluid models”, Int. J. of Computational Fluid Dynamics, vol. 19 (7), pp. 475-482, 2005.
- [27] J.-M. Hérard, O. Hurisse, “Coupling of two and one dimensional unsteady Euler equations through a thin interface”, Computers and Fluids, Vol. 36(4), pp. 651-666, 2007.
- [28] J.-M. Hérard, O. Hurisse, “Some recent numerical advances for two-phase flow modelling in NEPTUNE project”, Int. J. for Num. Meth. in Fluids, vol. 59, pp. 285-307, 2009.
- [29] J.-M. Hérard, O. Hurisse, “Schémas d’intégration du terme source de relaxation des pressions phasiques pour un modèle bifluide hyperbolique”, EDF report H-I81-2009-1514-FR, 2009
- [30] J.-M. Hérard, Y. Liu, “Une approche bifluide statistique de modélisation des écoulements diphasiques à phases compressibles”, EDF R&D note H-I81-2013-01162-FR , 2013.
- [31] J.-M. Hérard, O. Hurisse, “Computing two-fluid models of compressible water-vapour flows with mass transfer”, EDF report H-I81-2012-01677-EN, 2012; and AIAA paper 2012-2959, AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, New Orleans, june 2012.

- [32] J.-M. Hérard, O. Hurisse, “A fractional step method to compute a class of compressible gas-liquid flows”, *Computers and Fluids*, Vol. 55, pp. 57-69, 2012.
- [33] J.-M. Hérard, O. Hurisse, “Some attempts to couple distinct fluid models”, *Networks and Heterogeneous Media*, vol. 5 (3), pp. 649-660, 2010.
- [34] O. Hurisse, “Couplage interfacial instationnaire de modèles diphasiques”, thèse de doctorat, Université d’Aix-Marseille, soutenue le 16/10/2006, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00823584>.
- [35] O. Hurisse, J.-P. Minier, “Modélisation stochastique d’écoulements diphasiques avec changement de phase”, *Comptes Rendus Mécanique*, Vol. 339(6), pp. 418-431, 2011.
- [36] O. Hurisse, “Modelling of compressible single-phase flows using a stochastic approach”, EDF R&D note H-I83-2012-03036-FR, 2012.
- [37] O. Hurisse, J.-M. Hérard, Y. Liu “Note de vérification des schémas d’intégration numérique des termes sources d’un modèle diphasique à relaxation en pression”, EDF R&D note H-I83-2013-02014-FR, 2013.
- [38] O. Hurisse, “Application of an homogeneous model to simulate the heating of two-phase flows”, *Int. J. of Finite Volumes*, <http://www.latp.univ-mrs.fr/IJFV/>, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01114808>, Vol. 11, pp. 1-37, 2014.
- [39] P. Helluy, O. Hurisse, E. Le Coupanec, “Verification of a two-phase flow code based on a homogeneous model”, *Int. J. of Finite Volumes*, <http://www.latp.univ-mrs.fr/IJFV/>, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01396200>, Vol. 13, pp. 1-24, 2016.
- [40] M. Ishii, T. Hibiki, “Thermo-Fluid Dynamics of two-phase flow”, Springer, 2006.
- [41] J. Jung, “Schémas numériques adaptés aux accélérateurs multicoeurs pour les écoulements bifluïdes”, thèse de doctorat, Université de Strasbourg, soutenue le 28/10/2013, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00876159v3>.
- [42] A.K. Kapila, J.B. Bdzil, R. Menikoff, S.F. Son, D.S. Stewart, “Two-phase modelling of DDT in granular materials : reduced equations”, *Phys. of Fluids*, Vol. 13, pp. 3002-3024, 2001.
- [43] G. Le Coq, S. Aubry, J. Cahouet, P. Lequesne, G. Nicolas, S. Pastorini, “The THYC computer code. A finite volume approach for 3 dimensional two-phase flows in tube bundles”, *EDF Bulletin de la direction des Etudes et Recherche - Série A, Nucléaire. Hydraulique. Thermique*, Vol. 1 pp. 61–76, 1989.
- [44] Y. Liu, “Contribution à la vérification et à la validation d’un modèle diphasique bifluïde instationnaire”, thèse de doctorat, Université d’Aix-Marseille, soutenue le 11/09/2013, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00864567>.
- [45] H. Lochon, “Modélisation et simulation d’écoulements transitoires eau-vapeur en approche bifluïde”, thèse de doctorat, Université Aix-Marseille, soutenue le 07/10/2016, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01379453>.
- [46] J.-P. Minier, E. Peirano, “The pdf approach to turbulent polydispersed two-phase flows”, *Phys. Rep.*, Vol. 352, pp. 1-214, 2001.

- [47] A. Morente, O. Hurisse, J.-M. Hérard “Vérification d’un code pour les écoulements diphasiques”, EDF R&D note H-I83-2013-03283-FR , 2013.
- [48] J. Peixinho, G. Lefèvre, F.-X. Coudert, O. Hurisse, “Water evaporation in silica colloidal deposits”, *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 408, pp. 206-211, 2013.
- [49] S. B. Pope, “Turbulent flows”, Cambridge University Press, 2000.
- [50] V.V. Rusanov, “Calculations of interaction of non-steady shock waves with obstacles”, *J. Comp. Math. Phys*, 1961, vol. 1, pp. 267–279.
- [51] K. Saleh, “Analyse et simulation numérique par relaxation d’écoulements diphasiques compressibles”, thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, soutenue le 26/11/2012, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00761099>.
- [52] R. Saurel, F. Petitpas, R. Abgrall, “Modelling phase transition in metastable liquids : applications to cavitating and flashing flows”, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 607, pp. 313-350, 2008.
- [53] J. Smoller, “Shock waves and reaction diffusion equations”, Springer Verlag, 1983.
- [54] H. B. Stewart, B. Wendroff, “Two-Phase flow: models and methods”, *J. Comp. Phys.*, Vol. 56, pp. 363-409, 1984.
- [55] O. Touazi, O. Hurisse, “Synthèse bibliographique concernant les modèles diphasiques homogènes eau-vapeur appliqués à la simulation de la cavitation et à la simulation à l’échelle composant”, EDF R&D note H-I84-2012-00934-FR, 2012.
- [56] I. Toumi, “FLICA IV : Manuel de référence. Méthode numérique”, CEA internal report DMT93/439, 1995.
- [57] N.N. Yanenko, “Méthodes à pas fractionnaires”, Armand Colin, 1968.