Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques

Spécialité : Mathématiques appliquées

Nicolas Seguin, sous la direction de Jean-Marc Hérard.

L.A.T.P. - UMR CNRS 6632, Centre de mathématiques et d'informatique, Université de Provence, 39 rue Joliot Curie, 13453 Marseille cedex 13

Département M.F.T.T., Division recherche et développement, Électricité de France, 6 quai Watier, 78401 Chatou cedex Approximation numérique des écoulements diphasiques eau-vapeur par approche monofluide, avec thermodynamique complexe.

Avec Thierry Gallouët et Jean-Marc Hérard.

- Étude numérique de la précision et des vitesses de convergence de plusieurs schémas Volumes Finis.
- Classification des lois d'état suivant le comportement des schémas Volumes Finis conservatifs classiques.
- Modification d'une classe de schémas Volumes Finis pour l'amélioration de leur précision et de leur vitesse de convergence dans le cas de lois thermodynamiques complexes (voire tabulées).

Analyse et approximation d'un modèle simplifié pour la simulation d'écoulements diphasiques eau-huile en milieu poreux.

Avec Julien Vovelle.

- Loi de conservation scalaire $u_t + (k(x)u(1-u))_x = 0$.
- Existence et unicité de la solution entropique dans L^∞ .
- Phénomène de résonnance, étude du problème de Riemann.
- Nouveaux schémas Volumes Finis (comparaison avec les schémas pétroliers).

Approximation des termes sources raides pour les systèmes hyperboliques par splitting d'opérateur ou par décentrement.

Avec Thierry Gallouët et Jean-Marc Hérard.

- Application aux équations de Saint-Venant avec topographie.
- Proposition de schémas de Godunov approchés adaptés et comparaison avec la technique de splitting d'opérateur.
- Technique de montée en ordre prenant en compte les solutions stationnaires du système avec terme source.
- Comparaison numérique sur des cas tests sensibles (convergence vers des états stationnaires, apparition de zones sèches, ...).

Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques eau-vapeur par approche bifluide.

Avec Frédéric Coquel, Thierry Gallouët et Jean-Marc Hérard.

- Deux phases compressibles, deux vitesses, deux pressions.
- Proposition de fermetures originales pour la vitesse interfaciale et la pression interfaciale.
- Étude du problème de Riemann (fermeture des produits non conservatifs).
- Approximation du système par une méthode de splitting d'opérateur avec schémas Volumes Finis.

Système de lois de conservation et hyperbolicité

Soit W est l'inconnue dépendant du temps t et de l'espace x,

 $\begin{array}{rcl} W & \colon \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R} & \longmapsto & \Omega \\ & & (t,x) & \longmapsto & W(t,x), \end{array}$

avec $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ l'espace des états admissibles. On s'intéresse au problème de Cauchy suivant :

$$W_t(t,x) + (F(W(t,x)))_x = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R},$$

 $W(t = 0,x) = W_0(x), \quad x \in \mathbb{R},$

où $W_0 : \mathbb{R} \to \Omega$ est la donnée initiale. Écriture non conservative (pour les solutions régulières):

```
W_t(t,x) + A(W(t,x))W_x(t,x) = 0,
```

avec $A(W) = \mathrm{D} F(W)$ la matrice jacobienne du flux F .

Définition. Si la matrice A admet n valeurs propres réelles et si les n vecteurs propres à droite de A engendrent \mathbb{R}^n , alors ce système est *hyperbolique*.

Cas linéaire :

$$W_t(t,x) + A W_x(t,x) = 0$$
$$\iff (R^{-1}W(t,x))_t + \Lambda (R^{-1}W(t,x))_x = 0,$$

R est la matrice des vecteurs propres à droite de A et Λ est la matrice diagonale des valeurs propres de A.

schémas Volumes Finis : Godunov et VFRoe-ncv

On veut approcher les solutions de

$$W_t(t,x) + (F(W(t,x)))_x = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R},$$

 $W(t = 0,x) = W_0(x), \quad x \in \mathbb{R}.$

Soit le *maillage* de pas de temps Δt et de pas d'espace Δx et notons $t^n = n\Delta t$, $n \in \mathbb{N}$ et $x_{i+1/2} = (i+1/2)\Delta x$, $i \in \mathbb{Z}$. On définit W_i^0 comme la moyenne de $W_0(x)$ sur $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ et le schéma suivant pour $n \in \mathbb{N}$ et $i \in \mathbb{Z}$:

$$W_{i}^{n+1} = W_{i}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \big(\phi(W_{i}^{n}, W_{i+1}^{n}) - \phi(W_{i-1}^{n}, W_{i}^{n}) \big).$$

Schéma de S.K. Godunov (1959):

 $\phi(W_g, W_d) = F(W(x/t = 0; W_g, W_d))$

où $W(x/t; W_g, W_d)$ est la solution du problème de Riemann

$$W_t(t,x) + (F(W(t,x)))_x = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R},$$
$$W(t = 0,x) = \begin{cases} W_g & \text{si } x < 0\\ W_d & \text{si } x > 0 \end{cases}.$$

Schéma VFRoe-ncv T. Buffard, T. Gallouët, J.M. Hérard (2000): $\phi(W_g, W_d) = F(\Phi^{-1}(Y(x/t = 0; W_g, W_d)))$

où $Y(x/t; W_g, W_d)$ est la solution du problème de Riemann

$$Y_t(t,x) + B(\overline{Y}(t,x))Y_x(t,x) = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R},$$
$$Y(t = 0,x) = \begin{cases} \Phi(W_g) & \text{si } x < 0\\ \Phi(W_d) & \text{si } x > 0 \end{cases},$$

avec $B(\Phi(W))=(\Phi'(W))(\mathrm{D} F(W))(\Phi'(W))^{-1}$.

Approximation numérique des écoulements diphasiques eau-vapeur par approche monofluide, avec thermodynamique complexe

Le modèle considéré (Homogeneous Equilibrium Model) s'écrit :

$$(\rho_m)_t + (\rho_m u_m)_x = 0, (\rho_m u_m)_t + (\rho_m (u_m)^2 + p_m)_x = 0, (E_m)_t + (u_m (E_m + p_m))_x = 0,$$

avec comme loi d'état $p_m = \varphi \left(\rho_m, E_m - (\rho_m u_m)^2 / (2\rho_m) \right)$.

Lois d'état étudiées :

- loi des gaz parfaits,
- loi de Tammann (liquide),
- loi de Van der Waals (mélange eau-vapeur).

Schémas Volumes Finis testés :

- schémas VFRoe-ncv T. Buffard, T. Gallouët, J.M. Hérard (2000),
- schéma de V.V. Rusanov (1961),
- méthode de relaxation d'énergie F. Coquel, B. Perthame (1998).

Comparaison de la robustesse (apparition et disparition du "vide") et de la précision (vitesse de convergence).

Perte importante de la précision au niveau de l'onde u_m :

- condition C.F.L. classique pénalisante,
- vitesse de convergence : "ordre 1" $\rightarrow 1/2$, "ordre 2" $\rightarrow 2/3$,
- perturbation de u_m et p_m pour la loi de Van der Waals.

Amélioration du comportement de certains schémas (1D)

Distinction de trois classes de lois d'état :

- 1. lois des gaz parfaits, Tammann (comportement désiré),
- 2. lois de type "stiffened gas" R. Abgrall, R. Saurel (1999),
- 3. autres lois (Van der Waals, lois tabulées, ...) K.M. Shyue (1999).

Ajoût au système initial d'équations aux dérivées partielles sur les coefficients de la loi d'état pour les classes 2 et 3.

On obtient alors:

- les variables u_m et p_m restent constantes à travers l'onde u_m quelle que soit la classe de loi d'état considérée,
- amélioration de la vitesse de convergence pour u_m et p_m pour les lois de la classe 2,
- gain de temps CPU par rapport au schéma initial pour certaines lois de la classe 3.

Remarque. Lorsque la loi d'état appartient à la classe 2 ou 3, les e.d.p. ajoutées sont non conservatives. On peut alors perdre la convergence du schéma vers la solution entropique pour les lois de la classe 3.



Convergence d'une discontinuité de contact instationnaire simple en gaz parfait, par le schéma VFRoe-ncv ${}^t(\tau,\!u,\!p)$



par le schéma VFRoe-ncv ${}^t(\rho,\!u,\!p)$

Analyse et approximation d'un modèle simplifié pour la simulation d'écoulements diphasiques eau-huile en milieu poreux

On étudie ici le problème de Cauchy suivant :

$$u_t(t,x) + (k(x)g(u(t,x)))_x = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R}, u(t = 0,x) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}, k(x) = k_L \text{ si } x < 0, k(x) = k_R \text{ si } x > 0,$$

avec $k_L, k_R > 0$.

- -g(u) linéaire F. Bouchut, F. James (1998),
- $-u_t + k(x)(g(u))_x = -g(u)k'(x)$ et g'(u) > 0 A. Vasseur (preprint),
- g(u) concave et g(0) = g(1) = 0 N.H. Risebro *et al.* (1995-1999), J.D. Towers (2000), ...
- -g(u) non concave (ni convexe) Towers (2001), K.H. Karlsen, C. Klingenberg, and N.H. Risebro (preprint).

Ici, on étudie g(u) = u(1-u), avec $u \in [0,1]$.

Définition. Soit $u_0 \in L^{\infty}(\mathbb{R})$ avec $0 \leq u_0 \leq 1$ p.p. sur \mathbb{R} . On appelle *solution entropique* du problème ci-dessus une fonction u de $L^{\infty}(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R})$ vérifiant les inégalités suivantes :

 $\forall \kappa \in [0,1]$, $\forall \varphi \in \mathcal{C}^{\infty}_{c}(\mathbb{R}_{+} \times \mathbb{R})$ positive,

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} |u(t,x) - \kappa| \varphi_t(t,x) + k(x) \Phi(u(t,x),\kappa) \varphi_x(t,x) dx dt + \int_{\mathbb{R}} |u_0(x) - \kappa| \varphi(0,x) dx + |k_L - k_R| \int_0^\infty g(\kappa) \varphi(t,0) dt \ge 0,$$

où Φ correspond au flux d'entropie associé à l'entropie de Kruzkov

$$\Phi(u,\kappa) = \operatorname{sgn}(u-\kappa)(g(u)-g(\kappa))$$

- Existence et unicité de la solution entropique (dans L^{∞}).
- Condition entropique sur la discontinuité de k:

$$g'(\gamma u^+(t)) > 0 \Rightarrow g'(\gamma u^-(t)) \ge 0.$$



- Résolution du problème de Riemann.
- Proposition de deux schémas *équilibres* (VFRoe-ncv et Godunov) basés sur une discrétisation alignée de k et u.

– Comparaison avec les schémas pétroliers ($\Delta x \rightarrow 0$ et $t \rightarrow +\infty$).



Approximation des termes sources raides pour les systèmes hyperboliques par splitting d'opérateur ou par décentrement.

On étudie les systèmes de la forme

$$W_t(t,x) + (F(W(t,x)))_x = S(W(t,x))a_x(x).$$

- Splitting d'opérateur

$$W_t(t,x) + (F(W(t,x)))_x = 0$$
 et $W_t(t,x) = S(W(t,x))a_x(x)$.

– Décentrement du terme source J.M. Greenberg, A.Y. LeRoux (1996) on discrétise a(x) par

$$|M_i|a_{\Delta x}(x) = \int_{M_i} a(x)dx$$
, pour $x \in M_i = (x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$.

On obtient finalement pour $i \in \mathbb{Z}$:

si
$$x \in M_i$$
, $W_t(t,x) + (F(W(t,x)))_x = 0$,
si $x = x_{i+1/2}$, $V_t(t,x) + C(V(t,x))V_x(t,x) = 0$,
où $V = \begin{pmatrix} a_{\Delta x} \\ W \end{pmatrix}$ et $C(V) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ S(W) & DF(W) \end{pmatrix}$.

Schéma équilibre : résolution exacte de $V_t + C(V)V_x = 0$. Schéma VFRoe-ncv : résolution approchée de $V_t + C(V)V_x = 0$.

Application : équations de Saint-Venant avec topographie

Le système correspond à des écoulements fluviaux ou côtiers en eaux peu profondes (l'eau est supposée incompressible):

$$\begin{split} h_t + (hu)_x &= 0, \\ (hu)_t + \left(hu^2 + g\frac{h^2}{2}\right)_x &= -gh\left(Z_f\right)_x(x). \end{split}$$

h: hauteur d'eau – u: vitesse – g: gravité – Z_f : cote du fond. Difficultés numériques:

- Gestion des zones sèches h = hu = 0.
- Préservation et convergence vers les états équilibres :
 - 1. états au repos

$$h + Z_f = C^{te}$$
 et $u = 0$,

2. solutions régulières vérifiant

$$hu = C^{te}$$
 et $\frac{u^2}{2} + g(h + Z_f) = C^{te}$,

3. solutions discontinues à fond régulier vérifiant

$$hu = C^{te}$$
 et $hu^2 + g\frac{h^2}{2} = C^{te}$.

Linéarisation pour VFRoe-ncv suivant la variable ${}^t(Z_f, u, 2\sqrt{gh})$.



Rupture de barrage au-dessus d'une butte – hauteurs d'eau



Double détente supersonique sur une marche

Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques eau-vapeur par approche bifluide

On s'intéresse aux modèles bifluides à deux vitesses et deux pressions.

- M.R. Baer, J.W. Nunziato (1986), A.K. Kapila et al. (1997),
 - S. Gavrilyuk et R. Saurel (2002)
- J. Glimm et al. (1998-1999)
- R. Saurel et R. Abgrall (1999), R. Saurel et O. LeMetayer (2001)

On écrit la partie convective sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1) &+ V_i \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_1 \rho_1 u_1) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1 u_1) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_1 (\rho_1 u_1^2 + p_1)) &- P_i \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 E_1) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_1 u_1 (E_1 + p_1)) &+ P_i \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \rho_2) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_2 \rho_2 u_2) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \rho_2 u_2) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_2 (\rho_2 u_2^2 + p_2)) &+ P_i \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 E_2) &+ \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_2 u_2 (E_2 + p_2)) &- P_i \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= 0. \end{aligned}$$

Remarque. On peut remplacer $P_i \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}$ par $-V_i P_i \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}$.

Relations de fermetures

Fractions volumiques:

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1.$$

Énergies totales de la phase k:

$$E_k = \rho_k e_k + \rho_k u_k^2 / 2, \quad k = 1, 2.$$

Loi d'état thermodynamique :

$$p_k = \phi_k(e_k, \rho_k), \quad k = 1, 2.$$

Seules les lois d'état de type gaz parfaits sont préservées par les opérateurs de moyenne.

Vitesse interfaciale:

$$V_i(W) = \beta(W)u_1 + (1 - \beta(W))u_2.$$

Pression interfaciale:

Si
$$u_1 = u_2 = u$$
 et $p_1 = p_2 = p$, alors $P_i = p_i$

Proposition de fermetures pour le coefficient $\beta(W)$ et pour P_i .

Matrice de convection

Le système peut se réécrire pour les solutions régulières :

 $Y_t + B(Y)Y_x = 0,$

avec

 $Y = {}^{t}(\alpha_1, s_1, u_1, p_1, s_2, u_2, p_2)$

où s_k est l'entropie spécifique de la phase k et

$$B(Y) = \begin{pmatrix} V_i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \times & u_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \times & 0 & u_1 & \tau_1 & 0 & 0 & 0 \\ \times & 0 & \hat{\gamma}_1 p_1 & u_1 & 0 & 0 & 0 \\ \times & 0 & 0 & 0 & u_2 & 0 & 0 \\ \times & 0 & 0 & 0 & 0 & u_2 & \tau_2 \\ \times & 0 & 0 & 0 & 0 & \hat{\gamma}_2 p_2 & u_2 \end{pmatrix}$$

avec $\hat{\gamma}_k p_k = \rho_k c_k^2$ (c_k la vitesse du son de la phase k).

Propriétés du système convectif

Le système est hyperbolique, non strictement.

Les valeurs propres du système sont :

Champ???	Champ VNL	Champ LD	Champ VNL
$\lambda_1 = V_i,$	$\lambda_2 = u_1 - c_1,$	$\lambda_3 = u_1,$	$\lambda_4 = u_1 + c_1,$
	$\lambda_5 = u_2 - c_2,$	$\lambda_6 = u_2,$	$\lambda_7 = u_2 + c_2.$

Pour les solutions régulières, le principe du maximum sur la fraction volumique et la positivité des masses partielles sont assurés.

Le problème de Riemann



Phase 1:





Fermeture de la vitesse interfaciale

Si le coefficient $\beta(W)$ s'écrit

$$\beta(W) = \frac{\alpha_1 \rho_1}{\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2}$$
, ou $\beta(W) = 0$, ou $\beta(W) = 1$

dans

$$V_i = \beta(W)u_1 + (1 - \beta(W))u_2,$$

alors le champ associé à l'onde V_i est linéairement dégénéré. \implies L'interface correspondant au transport de la fraction volumique est une discontinuité de contact (la 1-onde reste *infiniment mince* quelles que soient les conditions initiales).

Fermeture de la pression interfaciale

On suppose que la pression interfaciale est de la forme

$$P_i(W) = \mu(W)p_1 + (1 - \mu(W))p_2,$$

on peut alors définir de manière unique la pression interfaciale telle que l'on ait l'inégalité d'entropie suivante

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial F_{\eta}}{\partial t} \le 0$$

où

$$\eta = -(\alpha_1 \rho_1 \eta_1 + \alpha_2 \rho_2 \eta_2),$$

$$\eta_k = \operatorname{Log}(s_k) + \psi_k(\alpha_k),$$

$$F_\eta = -(\alpha_1 \rho_1 \eta_1 u_1 + \alpha_2 \rho_2 \eta_1 u_2)$$

et $\psi_1(\alpha_1) = \psi_2(\alpha_2)$.

Solution du problème de Riemann

Proposition. Si $(\alpha_1)_L = (\alpha_1)_R$, le problème de Riemann admet une unique solution entropique composée d'états constants séparés par des ondes de chocs, des ondes de raréfactions et des dicontinuités de contact sous la condition classique

$$|(u_k)_R - (u_k)_L| < \frac{2}{\gamma_k - 1}((c_k)_L + (c_k)_R), \quad k = 1, 2,$$

pour des lois d'état de type gaz parfaits dans chaque phase.

Proposition. Si on suppose maintenant que $(\alpha_1)_L \neq (\alpha_1)_R$, alors la connexion des états constants à travers les ondes isolées dans la solution du problème de Riemann assure que tous les états vérifient le principe du maximum sur la fraction volumique et la positivité des fractions massiques et des pressions pour des lois de type gaz parfaits dans chaque phase.

Quelques difficultés :

- les ondes ne sont pas ordonnées ;
- les ondes peuvent se superposer;
- la paramétrisation à travers la 1-onde n'est pas "explicite".

Méthodes numériques

Prise en compte des termes sources par une méthode de splitting (relaxation en vitesse, relaxation en pression, gravité, ...).

Adaptation au cadre non conservatif des schémas de Rusanov et VFRoe-ncv en variable ${}^t(\alpha_1,s_1,u_1,p_1,s_2,u_2,p_2)$.

- Principe du maximum pour la fraction volumique discrète et positivité des masses partielles discrètes, pour Rusanov.
- Variable t(s,u,p) pour la gestion du vide avec VFRoe-ncv (Annexe A de la thèse).

Pour les étapes de relaxation, proposition de méthodes en accord avec les principes de positivités des fractions volumiques et des pressions (voir A. Forestier (preprint) pour une discussion sur la décroissance des entropies phasiques).

Quelques difficultés :

- ondes rapides pour la phase liquide;
- problème des (trois) discontinuités de contact;
- résonnance;
- apparition et disparition de phase.

Discontinuité de contact instationnaire



Tube à choc avec résonnance



Robinet de Ransom

Phase 1:	liquide	$p_1 = (1,0005 - 1)\rho_1 e_1$
Phase 2:	air	$p_2 = (1, 4 - 1)\rho_2 e_2$

Condition initiale:

 $\alpha_1(0,.)=0.8$, $\rho_1(0,.)=1000$, $\rho_2(0,.)=1$, $u_1(0,.)=u_2(0,.)=0$, $p_1(0,.)=p_2(0,.)=10^5$.

Conditions limites :

 $\alpha_1(t,0)=0.8$, $u_1(t,0)=10$, $u_2(t,0)=0$, $p_1(t,L)=p_2(t,L)=10^5$.



Sédimentation

Phase 1:	liquide	$p_1 = (1,0005 - 1)\rho_1 e_1$
Phase 2:	air	$p_2 = (1, 4 - 1)\rho_2 e_2$

Condition initiale:

 $\alpha_1(0,.)=0.5$, $\rho_1(0,.)=1000$, $\rho_2(0,.)=1$, $u_1(0,.)=u_2(0,.)=0$, $p_1(0,.)=p_2(0,.)=10^5$.

Conditions limites : parois (état miroir).



Approximation numérique des écoulements diphasiques eau-vapeur par approche monofluide, avec thermodynamique complexe.

- Extension au cadre multidimensionnel (+ énergie cinétique).
- Obtention d'un schéma convergeant vers la bonne solution pour tout loi d'état.
- Étude de la température.

Analyse et approximation d'un modèle simplifié pour la simulation d'écoulements diphasiques eau-huile en milieu poreux.

- Étude des schémas testés.
- Extension au cas non convexe (solution faible entropique).

Approximation des termes sources raides pour les systèmes hyperboliques par splitting d'opérateur ou par décentrement.

- Saint-Venant avec terme source de friction.
- Termes de type chimie.
- Comparaison avec d'autres méthodes (relaxation).

Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques eau-vapeur par approche bifluide.

- Étude de la résonnance.
- Étude (et approximation) du système convectif avec relaxation.
- Extension au cadre turbulent.
- Tests avec effets compressibles.