



HAL
open science

Modélisation des effets d'interpénétration entre fluides au travers d'une interface instable.

Grégory Huber

► **To cite this version:**

Grégory Huber. Modélisation des effets d'interpénétration entre fluides au travers d'une interface instable.. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Aix-Marseille Université, 2012. Français. NNT : . tel-00833037

HAL Id: tel-00833037

<https://theses.hal.science/tel-00833037>

Submitted on 11 Jun 2013

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.

AIX-MARSEILLE UNIVERSITE

Institut Universitaire des Systèmes Thermiques Industriels

- UMR CNRS 6595 -

THESE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE AIX-MARSEILLE

Discipline : Mécanique Energétique

Ecole doctorale 353, Sciences pour l'ingénieur

Grégory HUBER

**MODELISATION DES EFFETS
D'INTERPENETRATION ENTRE FLUIDES
AU TRAVERS D'UNE INTERFACE INSTABLE**

Thèse dirigée par le professeur Richard Saurel – IUSTI – Aix-Marseille Université

~ Composition du Jury ~

Dr. Jean-Paul Dussauge	IUSTI, UMR 7343 CNRS	Examineur
Pr. Boniface Nkonga	Université de Nice	Rapporteur
Pr. Maria-Vittoria Salvetti	Université de Pise	Rapporteur
Pr. Richard Saurel	Aix-Marseille Université	Directeur de thèse

« Le manque de science n'est bon pour personne »

La Bible

Avant-Propos

Je tiens tout d'abord à remercier le professeur Richard Saurel qui m'a accordé l'immense privilège de travailler dans son équipe de recherche. Sa disponibilité, sa patience et ses compétences scientifiques m'ont été extrêmement précieuses dans l'avancement de cette thèse. Sa capacité à trouver une piste face aux difficultés que nous avons rencontrées m'a toujours impressionné.

Je remercie Lounès Tadrist, directeur de l'IUSTI, de m'avoir accueilli dans son laboratoire, ainsi que toute l'équipe administrative, et en particulier Pascal Champion, secrétaire de l'école doctorale, qui est d'une efficacité remarquable.

Je remercie également Maria-Vitoria Salvetti, professeur à l'Université, de Pise et Boniface Nkonga, professeur à l'université de Nice, d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ce manuscrit.

Aussi, ce travail n'aurait pas été possible sans les membres de l'équipe SMASH que je tiens à remercier :

Sergey Gavriluk, professeur à l'Université Aix-Marseille, avec qui j'ai réellement apprécié travailler et que j'admèrerai toujours pour son habileté mathématique,

Jacques Massoni, maître de conférence à l'Université Aix-Marseille, qui a su se montrer disponible et actif face à mes soucis informatiques,

Olivier Le Metayer, maître de conférence à l'Université Aix-Marseille, dont j'apprécie la sympathie et la bonne humeur,

Fabien Petitpas, maître de conférence à l'Université Aix-Marseille, qui m'a été plus d'une fois d'un grand secours et qui a très gentiment accepté de relire et de corriger ce manuscrit,

Nicolas Favrie, maître de conférence à l'Université Aix-Marseille, dont j'apprécie le franc-parler, la pédagogie et le recul face à la science.

Je ne manquerai pas de saluer les autres doctorants de l'équipe qui ont partagé mon quotidien au laboratoire :

Sarah Hank, qui a su m'encourager efficacement dans les moments difficiles,

Sébastien Lemartelot, avec qui j'ai pu avoir des débats passionnants sur bien des sujets,

Eliam Herichon, qui n'a jamais manqué de détendre l'atmosphère par son humour dont lui seul a le secret,

Serge Ndanou, qui a commencé à ressentir les joies que peut procurer la recherche.

Enfin, je tiens à remercier particulièrement ma mère pour ses encouragements et son soutien sans faille, mon père pour ses nombreux coups de fil, mon frère Florian avec qui je rigole bien et ma petite sœur Anaëlle avec qui je ne me lasse pas de passer de si bons moments.

Table des matières

Chapitre 1 : Introduction Générale	1
I. Objectif.....	3
II. Organisation de l'étude.....	7
III. Résumé des modèles réduits	8
III.1 Modèle d'interfaces diffuses sans interpénétration	8
III.2 Modèle d'interpénétration de type Darcy	9
III.3 Modèle d'interpénétration diffusif.....	11
Chapitre 2 : Modèle d'interfaces diffuses sans interpénétration	13
I. Introduction.....	15
II. Construction du modèle de Kapila et al. (2001)	15
III. Résolution numérique	21
III.1 Difficultés de la résolution numérique du modèle de Kapila et al. (2001).....	21
III.2 Modèle à 6 équations (hors d'équilibre des pressions)	22
III.3 Méthode de résolution numérique.....	24
IV. Tests et validations.....	29
IV.1 Tube à choc Air-Hélium.....	29
IV.2 Tube à choc Eau-Air.....	30
V. Conclusion.....	31
Chapitre 3 : Modèle d'interpénétration de type Darcy	33
I. Introduction.....	35
II. Asymptotic analysis and drift model.....	35
II.1 Non equilibrium model.....	35
II.2 Stiff mechanical relaxation limit at zero order.....	37
II.3 Drift force and velocity fluctuations	39
III. Derivation of the flow model with interpenetration effects.....	40
III.1 Volume fraction and entropy equations	40
III.2 Pressure equation	43
III.3 Internal energy equations	45
IV. Numerical method	45
IV.1 Hydrodynamic step	46
IV.2 Drift step	48
IV.3 Gravity step	54
V. Test problems.....	54
V.1. Fluid separation under gravity.....	54
V.2. Water faucet.....	55
VI. Unstable interface in a shock tube.....	57
VII. Conclusion.....	62

Chapitre 4 : Modèle d'interpénétration par déséquilibre de vitesses	63
I. Introduction.....	65
II. Conventional two-phase hyperbolic model.....	65
II.1 Non equilibrium model.....	65
II.2 Supplementary equations.....	66
III. Reduced model in pressure equilibrium	67
IV. Hyperbolic subsystems.....	70
V. Numerical approximation.....	74
V.1 Interface dynamics solver	74
V.2 Interpenetration solver.....	75
V.3 Test of the interpenetration solver.....	84
VI. Test problems	86
VI.1. Fluid separation under gravity.....	87
VI.2. Water faucet.....	88
VI.3 Comparison with the DEM on two-phase shock tube test problems.....	89
VII. Unstable interface in a shock tube.....	94
VII.1. Light/heavy fluid configuration	94
VII.2. Heavy/light fluid configuration.....	97
VIII. Conclusion	100
Chapitre 5 : Modèle de diffusion d'interface	101
I. Introduction.....	103
II. Etablissement d'un modèle d'interpénétration simplifié	103
II.1 Modèle en équilibre de pression	105
II.2 Modèle hors d'équilibre de pression	106
II.3 Sous-système pour le champ d'écoulement moyen	109
II.4 Résumé du modèle simplifié	110
III. Limites asymptotiques.....	111
III.1 Limite asymptotique 'classique'.....	111
III.2 Limite asymptotique 'discrète'	112
IV. Modèle de diffusion d'interface	118
IV.1 Sous-système d'interpénétration hors d'équilibre des pressions	118
IV.2 Sous-système en équilibre de pression	119
IV.3 Modèle complet d'interpénétration par diffusion d'interface.....	120
V. Résumé de la résolution numérique.....	121
VI. Illustrations sur les expériences en tube à choc.....	121
IX. Conclusion	125
Chapitre 6 : Explosions sphériques	127
I. Introduction.....	129
II. Résultats et illustrations	129
II.1 Tube à choc TNT-Air en l'absence d'interpénétration	129
II.2 Tube à choc TNT-Air avec interpénétration.....	130
II.3 Explosion sphérique TNT-Air sans interpénétration.....	131
II.4 Explosion sphérique TNT-Air avec interpénétration	132

III. Modélisation de la post combustion	134
IV. Résultats qualitatifs	138
IV.1 Calcul sans interpénétration et sans post-combustion.....	138
IV.2 Calculs avec interpénétration et sans post-combustion.....	138
IV.3 Calculs avec interpénétration et post-combustion	139
V. Comparaison avec les expériences	140
V.1 Conditions initiales	141
V.2 TNT traité en gaz parfait, sans interpénétration et sans post combustion.....	141
V.3 TNT traité en gaz parfait avec interpénétration et post combustion	142
V.4 TNT traité avec l'équation d'état JWL sans interpénétration ni post combustion	144
V.5 TNT traité en JWL avec interpénétration et post combustion	146
V.6 TNT en JWL avec interpénétration et post combustion au-delà de 0.01 t/R0.....	147
V.7 Conclusions sur le TNT.....	149
VI. Vérification du scénario sur le HMX.....	149
VI.1 Simulation sans interpénétration et sans post-combustion.....	149
VI.2 HMX avec interpénétration et post combustion.....	150
VI.3 Analyse des résultats du HMX	151
VII. Loi empirique pour le coefficient de diffusion	152
VIII. Conclusion	153
Conclusion générale.....	155
Références	159
Annexes	165
Annexe A. General two-phase flow model with velocity drift, heat and mass transfer.....	167
Annexe B. Thermodynamic compatibility of the pressure equilibrium model.....	171
Annexe C. Thermodynamic compatibility of System (4.15).....	173
Annexe D. Asymptotic analysis of System (4.13) in the limit of stiff pressure relaxation.....	175
Annexe E. Newton-Raphson method for the 5-wave approximate Riemann solver.....	177
Annexe F. Analyse asymptotique du Système (5.28) dans la limite des forts coefficients de relaxation de pressions	181
Annexe G. Schéma implicite pour le modèle d'interpénétration.....	183
Annexe H. Schémas numériques sphériques pour le modèle d'interpénétration.....	185
Annexe I. Utilisation de l'équation d'état de Jones-Wilkins-Lee (Lee, Hornig and Kury, 1968)	187
Annexe J. Relations thermodynamiques avec la loi d'état JWL.....	188
Annexe K. Calcul des profils de détonations initiaux	190

Chapitre 1 : Introduction Générale

I. Objectif

Les interfaces entre milieux fluides sont présentes dans de nombreux problèmes de mécanique des fluides. Selon l'écoulement étudié, cette interface est amenée à évoluer et est souvent le siège d'instabilités. On peut citer les problèmes d'écoulements à 'surface libre' comme par exemple l'écoulement d'une rivière. Dans ce cas, l'interface entre l'eau et l'air peut changer de forme à cause d'une perturbation locale comme la présence d'un obstacle.

Les explosions entraînent de fortes perturbations de l'interface séparant les produits de détonation et l'air. Ces instabilités d'interface jouent un rôle dominant dans la détermination du volume de la 'boule de feu'. Un calcul unidimensionnel sphérique classique conduit à un volume de cette sphère 5 fois inférieur à celui mesuré ! De plus, des réactions de postcombustion peuvent se produire dans la zone de mélange, libérant une énergie deux fois supérieure à l'énergie de détonation, déjà considérable. En effet, le TNT libère dans la zone de réaction de la détonation environ 5 MJ/kg et fournit une énergie de 10 MJ/kg lors de la postcombustion des produits de détonation avec l'air.

Le contenu énergétique de ces produits a longtemps été négligé alors qu'il est prépondérant.

La zone de mélange gaz-gaz qui se produit dans les explosions aériennes peut présenter un caractère encore plus extrême si des particules sont disposées autour de la charge, comme on peut le voir sur la Figure 1.1.



Figure 1.1 A gauche, explosion sphérique formant une boule de feu. A droite, explosion d'une charge entourée d'un lit de sable. Dans les deux cas l'interface présente des perturbations, 'émoussées' dans le cas de gauche ou en forme de véritables jets dans le cas de droite. Ces instabilités d'interface forment des zones de mélange qui augmentent considérablement la zone affectée par les effets de l'explosion.

A une échelle suffisamment petite, on distingue les longueurs d'ondes des instabilités et les tailles de jets. Mais à une échelle plus globale, on observe une zone de mélange, où la forme précise de l'interface n'est plus visible. On dira que les deux phases (produits de détonation et air) s'interpénètrent et on ne parlera donc plus d'interface, mais plutôt de zone de mélange. En d'autres termes, l'interface séparant deux phases se transforme en une zone de mélange lorsqu'elle est perturbée à cause du phénomène d'interpénétration des deux phases.

On peut observer ce phénomène dans le cas, par exemple, des instabilités de Richtmyer-Meshkov (Figure 1.2). Elles apparaissent lorsqu'une interface initialement perturbée est accélérée par une impulsion (une onde de choc par exemple). La différence de densité des phases est à l'origine de l'amplification de ces instabilités. En effet, lorsqu'une onde de choc traverse une interface le gradient de pression n'est pas colinéaire au gradient de densité dès qu'une perturbation quelconque est présente. Il s'ensuit une production de vorticités qui se traduit en l'apparition d'effets multidimensionnels qui sont à l'origine de la formation de 'jets', 'bulles', 'champignons' et formes diverses.

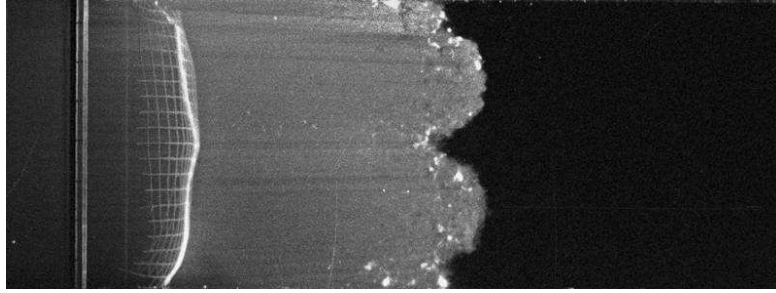


Figure 1.2 Instabilité de Richtmyer-Meshkov.

Pour traiter correctement chacune des structures des instabilités, une approche multidimensionnelle s'impose. Dans la modélisation des écoulements à interfaces, il existe deux approches numériques bien distinctes.

La première est appelée méthode à 'interfaces raides'. Chaque phase possède en principe sa propre loi d'état, distincte d'un fluide à l'autre, et évolue avec son propre système d'équations (équations d'Euler généralement) de part et d'autre de l'interface que l'on repère précisément. On peut citer les méthodes de reconstruction d'interface (Hirt and Nichols, 1981), les méthodes « Level set » (Fedkiw et al., 1999) et les méthodes de Front-Tracking (Glimm et al., 1998). Les phases sont alors considérées comme pures, ce qui exclut totalement le cas des zones de mélange à l'échelle locale.

La deuxième méthode consiste à résoudre le même système d'équations en chaque point de l'écoulement, c'est-à-dire aussi bien les phases pures que les mélanges, de manière routinière. C'est la méthode des 'interfaces diffuses', dont les premiers travaux sont dus à Karni (1994) et qui, dans un formalisme multiphasique, est développée depuis maintenant environ 15 ans dans l'équation SMASH (Saurel and Abgrall, 1999).

On distingue un grand nombre de modèles d'écoulements diphasiques. Nous allons discuter de deux classes de modèles.

La première catégorie considère les mélanges diphasiques d'un point de vue macroscopique par des équations moyennées, formant des descriptions d'écoulements hors d'équilibre. Les modèles à 6 et 7 équations aux dérivées partielles font partie de cette catégorie. Ils décrivent l'évolution de chaque phase dans leur volume associé. Les phases ont chacune une vitesse, densité et température et éventuellement une pression. Comme exemple de modèle à 6 équations on peut citer ceux d'Ishii (1975), Drew (1983) et Ishii and Hibiki (2006) et comme modèle à 7 équations, on peut citer celui de Baer and Nunziato (1986). La principale différence entre ces approches porte sur l'hyperbolicité des équations. Les modèles à 6 équations ne sont en général pas hyperboliques, alors que le modèle à 7 équations est hyperbolique de façon inconditionnelle. Ceci a de sérieuses conséquences sur la propagation des ondes dans ces milieux, ainsi que sur la construction de schémas numériques.

La seconde catégorie considère la dynamique de l'interface à l'échelle locale. On estime maintenant que les phases sont en permanence en équilibre mécanique, c'est-à-dire qu'elles ont la même vitesse et la même pression. Le modèle de Kapila et al. (2001) fait partie de cette catégorie de modèles et joue un rôle particulièrement important dans l'approche 'interfaces diffuses'. Il peut être considéré comme une extension des équations d'Euler pour deux phases en déséquilibre de température. Il a déjà permis de simuler efficacement des problèmes à interfaces (Murrone and Guillard, 2005, Abgrall and Perrier, 2006, Saurel et al, 2009). Cette approche, robuste et précise, est extensible à divers phénomènes physiques comme les réactions chimiques dans les fronts de détonation (Chinnayya et al, 2004), les effets de tension de surface dans les fluides compressibles (Perigaud and Saurel 2005), la transition de phase dans les liquides métastables (Saurel, Petitpas and Abgrall 2008), et les couplages solides-fluides (Favrie et al. 2009). L'objectif de cette thèse est d'introduire les effets d'interpénétration entre deux fluides dans ce type de formulation.

La simulation des problèmes d'instabilités, comme celles de Richtmyer-Meshkov ou Rayleigh-Taylor, est réalisée sur la base de modèles à une seule vitesse (Euler ou Navier-Stokes) lorsque les fluides ont la même équation d'état, ou à l'aide d'un modèle d'interface diffuse lorsque les équations d'état sont différentes. Un maillage fin a été utilisé pour résoudre les instabilités de Richtmyer-Meshkov (RMI) sur la Figure 1.3. sur la base du dernier de ces modèles. Un grand nombre de mailles est nécessaire pour résoudre correctement une seule structure de la zone de mélange. Ainsi, dans des applications concrètes comme les explosions dans lesquelles le nombre d'instabilités est très grand, il faudrait un nombre très élevé de mailles pour traiter correctement le problème. Ceci peut s'avérer prohibitif.

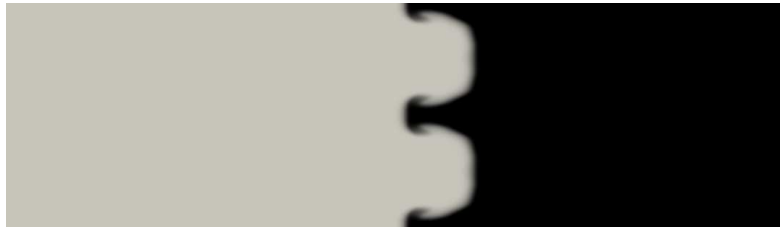


Figure 1.3 Simulation des instabilités de Richtmyer-Meshkov avec le modèle de Kapila (2001).

De plus, même pour une instabilité isolée le maillage provoque des perturbations parasites apparaissant dans les mailles proches de l'interface, ce qui entraîne des instabilités sur les petites échelles. Ces perturbations dépendent fortement de la viscosité numérique du schéma utilisé (Liska and Wendroff, 2004) (Figure 1.4). Si la viscosité numérique est suffisamment grande, l'instabilité physique aura une forme convenable. Mais si le maillage est trop grossier, la viscosité numérique augmentant, les résultats ne convergeront pas vers la solution réelle.

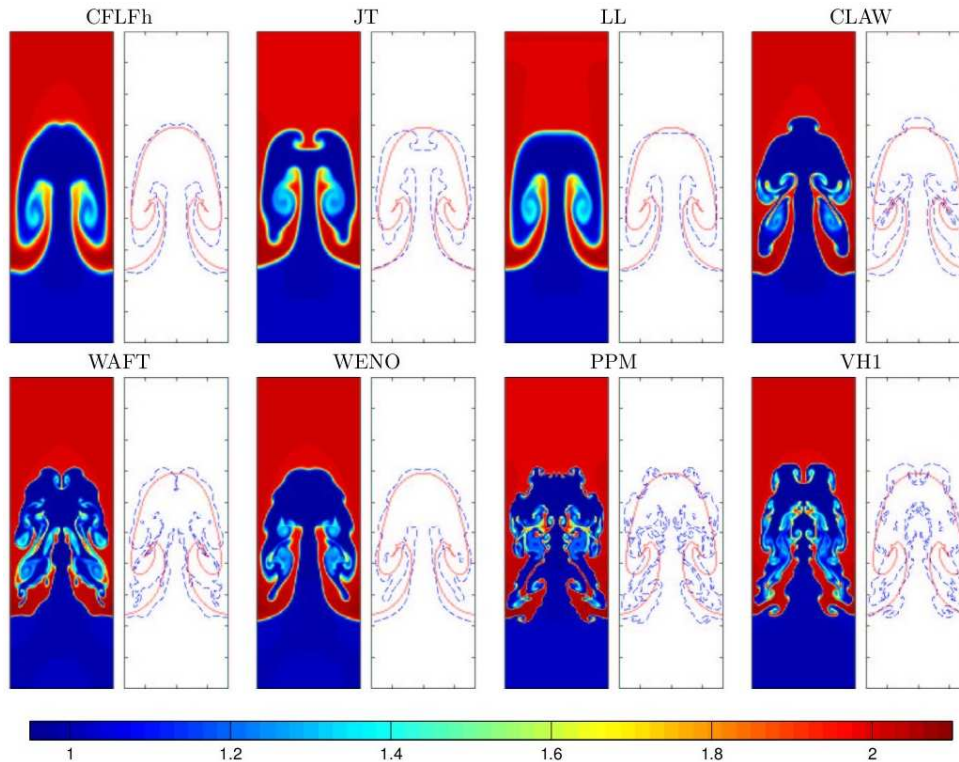


Figure 1.4 Résultats de simulation de l'instabilité de Rayleigh-Taylor avec 8 schémas différents. Le maillage utilisé est le même pour chaque test. Les contours de densité sont représentés sur l'image de gauche. A droite, on trace la limite externe de la zone de diffusion artificielle à l'interface (traits bleus) qui est comparée à la ligne rouge, correspondant aux résultats obtenus avec une méthode de front-tracking (interface raide).

L'approche multidimensionnelle basée sur la simulation numérique directe possède donc ses propres difficultés, dont les principales sont liées d'une part aux ressources informatiques nécessaires et d'autre part aux oscillations parasites et autres incertitudes numériques bien illustrées par la Figure 1.4.

Une approche monodimensionnelle présente donc certains avantages, avec bien évidemment d'autres difficultés, assez sérieuses aussi. La principale porte sur la traduction et la réduction d'effets multidimensionnels en 1D. On parle alors de modèles d'interpénétration.

Etat de l'art

Plusieurs modélisations de l'interpénétration ont été proposées dans le passé.

Andronov et al. (1976) tentent de modéliser ces effets par des termes de diffusion turbulente. Le flux de masse, pour chacune des deux phases s'écrit :

$$F_k = -\rho D \frac{\partial C_k}{\partial x} \quad (1.1)$$

Où ρ est la masse volumique du mélange, D est le coefficient de diffusion, C_k la concentration, par unité de masse, de la phase k .

Youngs (1884) considère que dans la zone de mélange, un gradient de pression génère une accélération différente aux deux fluides présents à cause de leur différence de densité. Les deux fluides ne se déplacent donc pas à la même vitesse, ce qui entraîne l'épaississement de l'interface. Youngs propose alors un modèle à deux vitesses (chacune des deux phases a sa propre vitesse) avec une loi empirique pour modéliser la traînée (frottements entre les deux phases dans la zone de mélange) qui ralentit l'interpénétration des deux fluides. Ce modèle est amélioré (Youngs et al, 1989) par l'ajout de termes de diffusion turbulente. D'après Cheng (2009) ce modèle contient 7 paramètres.

Besnard and Harlow (1988) puis Besnard et al. (1992) proposent une approche diphasique turbulente très complète pour traiter le phénomène d'interpénétration. La difficulté repose alors sur les lois de fermeture, qui d'après Cheng (2009) font intervenir 16 paramètres.

Glimm et al. (1999) utilisent un modèle diphasique de type Baer and Nunziato (1986) dans lequel apparaissent les moyennes de vitesse et pression d'interface dans les termes non conservatifs. Dans ce modèle, chaque phase a sa propre vitesse et pression et obéit à sa propre loi d'état. Les effets de relaxation sont supprimés et l'essentiel du processus d'interpénétration repose sur la modélisation des paramètres interfaciaux. Afin de produire des effets déstabilisants, une modélisation antisymétrique de la vitesse d'interface est adoptée :

$$u_1 = \mu_1(t, \alpha_1) u_2 + \mu_2(t, \alpha_2) u_1 \quad (1.2)$$

Avec $\mu_1(t, \alpha_1) + \mu_2(t, \alpha_2) = 1$. Une expression analogue est adoptée pour la pression d'interface.

D'après Cheng (2009), ce modèle comporte seulement 1 ou 2 paramètres. Cependant, ce modèle n'est pas physiquement admissible car il ne garantit pas la seconde loi de la thermodynamique.

Saurel et al. (2003) proposent une autre expression de la pression et de la vitesse de l'interface notées respectivement p_1 et u_1 :

$$\begin{aligned} u_1 &= \frac{Z_1 u_1 + Z_2 u_2}{Z_1 + Z_2} + \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{p_2 - p_1}{Z_1 + Z_2} \\ p_1 &= \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2} + \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1) \end{aligned} \quad (1.3)$$

Où $Z_k = \rho_k c_k$ est l'impédance acoustique de la phase k .

Cette modélisation assure une production d'entropie dans chaque phase et par voie de conséquence dans le système, ce qui assure le respect de la seconde loi de la thermodynamique. Ces formules viennent en fait de la solution locale du problème de Riemann sur l'interface qui sépare deux fluides dans un volume de contrôle mixte.

Ce modèle, venant clore une formulation de type Baer et Nunziato (1986) permet de traiter des mélanges hors d'équilibre, comme les liquides à bulles, ainsi que les problèmes à interfaces,

comme ceux illustrés sur les Figures (1.3)-(1.4). Cependant, il ne permet pas de traiter l'apparition d'une zone de mélange à partir de fluides initialement bien séparés (Abgrall and Saurel, 2003). Or, c'est précisément cette application qui nous intéresse ici.

Guillard and Duval (2007) proposent un modèle diphasique à faibles écarts de vitesses et en équilibre des pressions. Celui-ci est obtenu par un développement asymptotique du modèle de Baer and Nunziato (1986) à l'ordre 1, et est restreint aux cas des fluides barotropes. L'écart de vitesse entre phases découle du développement asymptotique et s'apparente à la loi de Darcy (1856):

$$v_r = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\lambda} \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho} \nabla p \quad (1.4)$$

Où λ représente le coefficient de relaxation de vitesses (frottements).

Ce modèle et son extension non barotrope (Saurel et al., 2010) seront examinés dans le présent mémoire.

Les tentatives de modèles réduits pour traiter l'interpénétration sont donc assez nombreuses, d'autres exemples pouvant être trouvés dans Cheng (2009).

Notre objectif est de construire un modèle faisant intervenir le plus petit nombre de paramètres et s'insérant dans la formulation d'interfaces diffuses de type Kapila et al. (2001). Bien évidemment, le modèle devra aussi reproduire les expériences, ou pouvoir être facilement ajusté pour atteindre ce but.

Le modèle qui se rapproche le plus de cet objectif à ce stade est le modèle de Guillard and Duval (2007). Nous verrons un peu plus tard qu'il présente malheureusement aussi certains défauts pour l'application qui nous intéresse.

II. Organisation de l'étude

L'objectif de cette thèse est donc d'établir un modèle permettant de traiter le phénomène d'interpénétration en une seule dimension. On décrira les différentes démarches qui ont été entreprises afin de présenter les différents modèles établis durant cette thèse. Les avantages, les inconvénients et les limites de ces modèles seront étudiés. Ces démarches auront pour point de départ le modèle hors d'équilibre à 7 équations (Baer and Nunziato, 1986) (1.5) et auront pour but l'enrichissement du modèle en équilibre mécanique à 5 équations (Kapila et al, 2001) (1.6) par des termes supplémentaires qui devront traiter l'interpénétration. Cela permettra de différencier la partie hydrodynamique, c'est-à-dire celle qui gère le déplacement moyen de l'interface, et la partie d'interpénétration qui modélise l'épaississement de l'interface.

Le modèle de Baer et Nunziato (1986) considère chaque phase comme étant compressible, évoluant avec sa propre vitesse, température et pression. Ce système est hyperbolique. Il s'écrit de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u)_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial (\alpha \rho u)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u^2 + \alpha p)_1}{\partial x} &= p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda(u_2 - u_1) \\
\frac{\partial (\alpha \rho E)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha (\rho E + p) u)_1}{\partial x} &= p_1 u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda u'_1 (u_2 - u_1) - \mu p'_1 (p_1 - p_2) \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u)_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial (\alpha \rho u)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u^2 + \alpha p)_2}{\partial x} &= p_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda(u_2 - u_1) \\
\frac{\partial (\alpha \rho E)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha (\rho E + p) u)_2}{\partial x} &= p_1 u_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda u'_1 (u_2 - u_1) + \mu p'_1 (p_1 - p_2)
\end{aligned} \tag{1.5}$$

Où α_1 et α_2 sont les fractions volumiques des phases 1 et 2, ρ_1 et ρ_2 les masses volumiques, u_1 et u_2 les vitesses, E_1 et E_2 les énergies totales. ($E_k = e_k + \frac{1}{2} u_k^2$, $k=1,2$), p_1 et u_1 sont la pression et la vitesse de l'interface, λ et μ sont respectivement les coefficients de relaxation des vitesses et des pressions.

Chaque modèle d'interpénétration sera présenté comme une extension du modèle à 5 équations de Kapila et al. (2001). L'étude débutera donc par une présentation de l'analyse asymptotique à l'ordre 0 permettant d'obtenir le modèle de Kapila (2001) (1 vitesse et 1 pression) à partir du modèle de Baer and Nunziato (1986) (2 vitesses et 2 pressions). On présentera une formulation étendue de ce modèle utile pour sa résolution numérique, par une méthode de relaxation (Saurel et al, 2009). Il est important de s'imprégner de cette stratégie à ce stade, car cette approche jouera un rôle central dans la construction des modèles qui suivront.

On exposera successivement ensuite les différents modèles d'interpénétration construits et étudiés. Des méthodes de résolutions numériques seront proposées pour chacun d'eux. Les résultats obtenus sur des cas tests analytiques et expérimentaux seront présentés, ce qui permettra de discuter de la viabilité des modèles.

L'étude se terminera par un modèle présentant des caractéristiques satisfaisantes pour les applications liées aux explosions sphériques (Figure 1.1). Le modèle présente un seul paramètre, qui sera ajusté sur la base de quelques expériences en tube à choc et quelques expériences d'explosions aériennes. On décrira alors la méthode adoptée pour traiter les effets de postcombustion, qui n'introduit aucun paramètre supplémentaire.

III. Résumé des modèles réduits

Le premier modèle réduit est celui de Kapila et al. (2001). Il permet de décrire le champ d'écoulement moyen. Ce modèle est obtenu par analyse asymptotique à l'ordre 0 du modèle de Baer and Nunziato (1986) en faisant tendre les paramètres de relaxation (μ pour les pressions et λ pour les vitesses) vers l'infini.

III.1 Modèle d'interfaces diffuses sans interpénétration

Le modèle à 5 équations considère que les phases ont la même vitesse et la même pression (équilibre mécanique) mais qu'elles sont en déséquilibre thermique et chimique. Il s'écrit de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
\frac{d\alpha_1}{dt} &= \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \frac{\partial u}{\partial x} \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial\rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + p_t)}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial\rho E}{\partial t} + \frac{\partial(\rho E + p + p_t)u}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{1.6}$$

Ce modèle est hyperbolique et ses vitesses d'ondes sont $\lambda_1 = u - c_w$, $\lambda_2 = u$ et $\lambda_3 = u + c_w$, où c_w est la vitesse du son de Wood (1930).

Les modèles d'interpénétration présentés dans la suite de ce manuscrit seront des extensions de ce modèle.

III.2 Modèle d'interpénétration de type Darcy

Le premier modèle d'interpénétration fait apparaître une vitesse relative donnée par la loi de Darcy. Il s'agit d'une extension non barotrope (Saurel et al., 2010) du modèle de Guillard and Duval (2007).

Ces modèles font intervenir la vitesse du mélange que l'on note $u = Y_1 u_1 + Y_2 u_2$ et la vitesse relative, notée $w = u_2 - u_1$.

L'analyse asymptotique à l'ordre 1 du modèle de Baer and Nunziato (1986) dans la limite des forts coefficients de relaxation de pression conduit au système suivant :

$$\begin{aligned}
\frac{d\alpha_1}{dt} &= \rho c_w^2 \left[\alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{1}{\rho_1 c_1^2} - \frac{1}{\rho_2 c_2^2} \right) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right] \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial\rho u}{\partial t} + \frac{\partial\rho u^2 + p}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial\rho E}{\partial t} + \frac{\partial(\rho E + p)u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 u_R (h_2 - h_1)}{\partial x} &= 0 \\
\text{Avec } w &= \frac{1}{\lambda_0} \rho Y_1 Y_2 \left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2} \right) \frac{\partial p}{\partial x}
\end{aligned} \tag{1.7}$$

Où λ_0 est le paramètre de relaxation des vitesses (coefficient de traînée).

Le système est fermé par la loi d'état $p(\rho, e, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 P_{\infty 1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2 \gamma_2 P_{\infty 2}}{\gamma_2 - 1} \right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}$.

Ce modèle est séduisant mais il présente un défaut rédhibitoire. L'interpénétration n'est active qu'en présence de gradients de pression. Or, des fluides mis en mouvement de façon impulsive continuent à interpénétrer même lorsque l'impulsion a cessé. En effet, la quantité de mouvement accumulée dans chacun des fluides permet l'entretien de ce mouvement. En d'autres termes, les effets inertiels sont importants dans l'interpénétration : une couche de mélange générée par choc continue à s'épaissir longtemps après le passage du choc, en absence de tout gradient de pression.

Le système (1.7) n'est donc pas adapté car la loi de Darcy exclue les effets inertiels.

Ce constat conduit à la construction d'un modèle où les effets inertiels sont présents.

Modèle d'interpénétration à vitesse relative

Avec les mêmes notations que précédemment et quelques définitions complémentaires,

- énergie totale de mélange $E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + e_t + \frac{1}{2} u^2$,

- débit massique relatif $m = \rho Y_1 Y_2 w$,

- énergie de turbulence $e_t = \frac{1}{2} Y_1 Y_2 w^2 = \frac{p_t}{2\rho}$

- pression turbulente $p_t = \rho Y_1 Y_2 w^2$,

- coefficient de traînée $\Lambda = \lambda + a \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} \left| \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \right|$,

Où a est un paramètre, qu'on appelle coefficient de perméabilité de l'interface, compris entre 0 et 1, il s'écrit :

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\begin{array}{l} \left(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2 \right) \frac{\partial u}{\partial x} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial m}{\partial x} + \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1 Z_1} - \frac{\Gamma_2}{\alpha_2 Z_2} \right) \frac{Z_1 Z_2 \Lambda}{Z_1 + Z_2} w^2 \\ - m \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \end{array} \right)$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} - \frac{\partial m}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} + \frac{\partial m}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + p_t)}{\partial x} = 0$$

(1.8)

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left[\left(\frac{Y_1 - Y_2}{2} w + u \right) w \right]}{\partial x} + (v_2 - v_1) \frac{\partial p}{\partial x} = - \frac{\Lambda}{\rho Y_1 Y_2} w$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \left((\rho E + p + p_t) u + m \left(h_2 - h_1 + \frac{1}{2} (Y_1 - Y_2) w^2 \right) \right)}{\partial x} = 0$$

Avec $w = \frac{1}{\lambda_0} \rho Y_1 Y_2 \left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2} \right) \frac{\partial p}{\partial x}$

Ce modèle ressemble beaucoup au précédent, mais quelques changements majeurs apparaissent. Premièrement, une équation sur la vitesse relative est présente. On remarque que lorsque le gradient de pression est nul, la vitesse relative obéit à une loi de conservation. La vitesse relative pourra donc être non nulle même lorsque le gradient de pression sera nul. Deuxièmement, on observe l'apparition de termes de turbulence : l'énergie e_t et la pression p_t de turbulence. Enfin, ce modèle contient deux paramètres, le coefficient de relaxation de vitesse λ et le coefficient d'interpénétration 'a'.

Ce modèle présente deux défauts :

- D'une part l'hyperbolicité n'est assurée que pour de faibles écarts de vitesses. Nous verrons que des stratégies ont été mises en place pour élargir son domaine d'hyperbolicité.
- D'autre part, il ne permet pas de traiter l'inversion d'instabilités d'interface. Lorsqu'un fluide lourd est en contact d'un fluide léger et qu'un gradient de pression est présent, la perturbation initiale s'amplifie : les sommets deviennent des 'pics', les creux deviennent des 'bulles'. Lorsque l'ordre des fluides est inversé, les sommets deviennent des 'bulles' et les 'creux' deviennent des pics. Ce processus d'inversion est très problématique et s'est avéré bloquant pour ce modèle, alors que la plupart des tests avaient été franchis avec succès.

III.3 Modèle d'interpénétration diffusif

Ces 'échecs' successifs ont conduit à un modèle 'diffusif', qui constitue une certaine limite du Système (1.8). Sans entrer dans les détails qui seront exposés plus loin, le modèle diffusif va consister en un schéma de viscosité artificielle appliqué au modèle de Kapila et al. (2001).

Le Système (1.8) va permettre d'assurer la validité du modèle limite (diffusif) par rapport à la seconde loi de la thermodynamique. En effet, il est bien connu en CFD que le raidissement numérique des interfaces est un sujet très difficile alors que leur épaissement est un défaut de tous les schémas numériques. Dès lors, on peut être tenté d'augmenter cette viscosité artificielle.

Une difficulté apparaît cependant. Si on calcule la production d'entropie du système en présence des termes de viscosité artificielle, aucune garantie n'apparaît sur la positivité de la production. Pourtant, ces méthodes fonctionnent, bien que présentant des défauts.

On montre ici que le modèle de viscosité artificielle qui est appliqué au modèle de Kapila et al. (2001) respecte l'inégalité d'entropie (au moins d'un point de vue global) car il constitue un modèle limite (un modèle de relaxation) d'un modèle plus général respectant l'inégalité d'entropie locale.

Le modèle diffusif finalement obtenu contient un seul paramètre de viscosité artificielle, qu'il n'est pas très difficile d'ajuster à l'aide de quelques expériences. Une fonction de 'viscosité artificielle générale' est ainsi obtenue en examinant l'épaississement d'interfaces dans des configurations en tube à choc et l'épaississement de zones de postcombustion dans des explosions aériennes. Cette fonction étant déterminée, le modèle ne contient plus de paramètre.

On termine ces travaux de thèse par la modélisation des effets de postcombustion dans la zone de mélange ainsi créée. L'approche simplifiée 'mixed is burnt' est utilisée et ne conduit à l'introduction d'aucun nouveau paramètre.

Les résultats sont validés de façon très favorable par rapport à des expériences d'explosions sphériques réalisées au CEA Gramat. La zone de mélange est correctement reproduite, ce qui n'est pas surprenant puisque le modèle a été construit dans ce but, mais il permet aussi de reproduire les effets de souffle mesurés indépendamment, sans avoir recours à un quelconque ajustement supplémentaire.

Chapitre 2 : Modèle d'interfaces diffuses sans interpénétration

I. Introduction

Avant de présenter les modèles d'interpénétration, on présente dans ce chapitre le modèle de Kapila et al. (2001) qui est l'élément essentiel de l'approche 'interfaces diffuses' car sa résolution permet le calcul du champ moyen d'écoulement, en particulier la détermination de la position moyenne de l'interface.

Le modèle de Kapila et al. (2001) est à la base un modèle d'écoulement diphasique pour des milieux en équilibre mécaniques, c'est-à-dire des situations assez marginales. Cependant, de part et d'autre d'une interface, les conditions à respecter sont précisément l'égalité des vitesses normales et des pressions. Le modèle de Kapila et al. (2001) va forcer l'équilibre mécanique en tout point de l'écoulement et en particulier dans la zone diffuse d'interface. Ceci va permettre le raccord parfait entre la pression à droite et la pression à gauche de l'interface, c'est-à-dire de part et d'autre de la zone diffuse. Il en est de même pour les vitesses normales.

Cette stratégie de 'forçage' ou 'relaxation raide' dans la zone de mélange est due à Saurel et Abgrall (1999).

Dans ce chapitre, on présente dans un premier temps l'établissement du modèle de Kapila et al. (2001) à partir d'un modèle de type Baer and Nunziato (1986). Dans un second temps, on décrit une stratégie de résolution numérique proposée par Saurel et al. (2009) pour résoudre le modèle de Kapila et al. (2001). En effet, les idées de base de cette méthode seront réutilisées pour la résolution des différents modèles d'interpénétration.

II. Construction du modèle de Kapila et al. (2001)

Le modèle de Kapila et al. (2001) est un modèle d'écoulement diphasique dans lequel les deux phases sont en équilibre de vitesse et de pression. Il est obtenu par un développement asymptotique à l'ordre 0 du modèle de Baer and Nunziato (1986) dans la limite des forts effets de relaxation des vitesses et des pressions. Ce dernier modèle décrit les écoulements hors d'équilibre des vitesses et des pressions. Il s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= \mu(p_1 - p_2) \\
 \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u)_1}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial (\alpha \rho u)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u^2 + \alpha p)_1}{\partial x} &= p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda(u_2 - u_1) \\
 \frac{\partial (\alpha \rho E)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha (\rho E + p) u)_1}{\partial x} &= p_1 u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda u'_1 (u_2 - u_1) - \mu p'_1 (p_1 - p_2) \\
 \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u)_2}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial (\alpha \rho u)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u^2 + \alpha p)_2}{\partial x} &= p_2 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda(u_2 - u_1) \\
 \frac{\partial (\alpha \rho E)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha (\rho E + p) u)_2}{\partial x} &= p_2 u_2 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda u'_2 (u_2 - u_1) + \mu p'_2 (p_1 - p_2)
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Où α , ρ , u , p , $E = e + \frac{1}{2} u^2$ et e sont respectivement la fraction volumique, la densité de mélange, la vitesse, la pression de mélange, l'énergie totale de mélange et l'énergie interne.

L'énergie interne du mélange est définie par

$$e = Y_1 e_1(\rho_1, p) + Y_2 e_2(\rho_2, p)$$

Avec $Y_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho}$, la fraction massique de la phase k .

Des expressions de la pression et de la vitesse d'interface sont proposées dans Saurel et al.(2003) :

$$\begin{aligned}
u_1 &= \frac{Z_1 u_1 + Z_2 u_2}{Z_1 + Z_2} + \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{p_2 - p_1}{Z_1 + Z_2}, \\
p_1 &= \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2} + \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1), \\
p'_1 &= \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2}, \\
u'_1 &= \frac{Z_1 u_1 + Z_2 u_2}{Z_1 + Z_2}
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Ces expressions ont au moins deux avantages :

- D'une part le modèle de Baer and Nunziato (1986) respecte la seconde loi de la thermodynamique, avec ces relations de fermeture, comme vont le montrer les expressions (2.3).
- D'autre part, le modèle devient symétrique, ce qui n'est pas le cas de la version de base du modèle de ces auteurs. En d'autres termes, la phase 1 n'est pas privilégiée par rapport à la phase 2 et inversement. Dans la version de base de ces auteurs, la pression d'interface était celle du gaz et la vitesse d'interface était celle du liquide. Ces estimations deviennent un cas limite des formules (2.2) plus générales.

Par ailleurs, Saurel et al. (2003) déterminent des formules explicites pour les coefficients de relaxation dans la limite de fluides non dissipatifs :

$\mu = \frac{A_1}{Z_1 + Z_2}$ représente le coefficient de relaxation de pression dans lequel A_1 représente l'aire interfaciale spécifique.

$\lambda = \frac{1}{2} \mu Z_1 Z_2$ représente le coefficient de relaxation des vitesses.

Les équations d'entropies des phases s'écrivent alors :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\alpha \rho s)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha \rho s u)_1}{\partial x} &= \frac{1}{T_1} \left\{ \begin{aligned} &\frac{Z_1}{(Z_1 + Z_2)^2} \left((p_2 - p_1) \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) + Z_2 (u_2 - u_1) \right)^2 \left| \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \right| \\ &+ \lambda \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1)^2 + \mu \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2} (p_1 - p_2)^2 \end{aligned} \right\} \\
\frac{\partial(\alpha \rho s)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha \rho s u)_2}{\partial x} &= \frac{1}{T_2} \left\{ \begin{aligned} &\frac{Z_2}{(Z_1 + Z_2)^2} \left(Z_1 (u_1 - u_2) - (p_2 - p_1) \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial x}\right) \right)^2 \left| \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} \right| \\ &+ \lambda \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1)^2 + \mu \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} (p_1 - p_2)^2 \end{aligned} \right\}
\end{aligned} \tag{2.3}$$

On se place dans la limite de très grands coefficients de relaxation de vitesse et de pression :

$$\mu = \frac{\mu_0}{\varepsilon}, \quad \lambda = \frac{\lambda_0}{\varepsilon} \quad \text{avec } \mu_0 = \frac{1}{Z_1 + Z_2}, \quad \lambda_0 = \frac{1}{2} \mu_0 Z_1 Z_2, \quad \varepsilon^{-1} = A_1$$

Avec ε qui tend vers 0.

Le développement asymptotique consiste à écrire chaque variable de l'écoulement sous la forme suivante :

$$f = f^0 + \varepsilon f^1$$

Où f^0 est la valeur moyenne de la variable f et f^1 représente les fluctuations de cette variable autour de f^0 . ε est un paramètre qui tend vers 0. Par la suite, on négligera les termes à l'ordre 1 et supérieurs.

Equations de masse

Les équations de masse s'écrivent :

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_k \rho_k u_k}{\partial x} = 0 \text{ avec } k=1,2$$

En développant chaque variable on obtient

$$\frac{\partial (\alpha_k^0 + \varepsilon \alpha_k^1)(\rho_k^0 + \varepsilon \rho_k^1)}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_k^0 + \varepsilon \alpha_k^1)(\rho_k^0 + \varepsilon \rho_k^1)(u_k^0 + \varepsilon u_k^1)}{\partial x} = 0$$

En ne gardant que les termes d'ordre 0 on obtient :

$$\frac{\partial \alpha_k^0 \rho_k^0}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_k^0 \rho_k^0 u_k^0}{\partial x} = 0 \quad (2.4)$$

Equation de quantité de mouvement

On cherche à écrire un modèle à 1 vitesse. Le modèle ne doit donc contenir qu'une seule équation sur la quantité de mouvement. Les équations de quantités de mouvement s'écrivent :

$$\frac{\partial (\alpha \rho u)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u^2 + \alpha p)_1}{\partial x} = p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda(u_2 - u_1)$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho u)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u^2 + \alpha p)_2}{\partial x} = p_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda(u_2 - u_1)$$

On réalise l'analyse asymptotique sur l'équation de quantité de mouvement de la phase 1.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\alpha_1^0 + \varepsilon \alpha_1^1)(\rho_1^0 + \varepsilon \rho_1^1)(u_1^0 + \varepsilon u_1^1)}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_1^0 + \varepsilon \alpha_1^1)(\rho_1^0 + \varepsilon \rho_1^1)(u_1^0 + \varepsilon u_1^1)^2 + (\alpha_1^0 + \varepsilon \alpha_1^1)(p_1^0 + \varepsilon p_1^1)}{\partial x} \\ & = p_1 \frac{\partial (\alpha_1^0 + \varepsilon \alpha_1^1)}{\partial x} + \frac{\lambda^0}{\varepsilon} ((u_2^0 + \varepsilon u_2^1) - (u_1^0 + \varepsilon u_1^1)) \end{aligned}$$

$$\text{Avec, } p_1 = \frac{Z_2(p_1^0 + \varepsilon p_1^1) + Z_1(p_2^0 + \varepsilon p_2^1)}{Z_1 + Z_2} + \text{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} ((u_2^0 + \varepsilon u_2^1) - (u_1^0 + \varepsilon u_1^1))$$

En négligeant les termes d'ordre 1 et supérieurs, on obtient

$$\frac{\partial \alpha_1^0 \rho_1^0 u_1^0}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1^0 \rho_1^0 u_1^0{}^2 + \alpha_1^0 p_1^0}{\partial x} = p_1^0 \frac{\partial \alpha_1^0}{\partial x} + \lambda^0 (u_2^1 - u_1^1) + \frac{\lambda^0}{\varepsilon} (u_2^0 - u_1^0) \quad (2.5)$$

$$\text{Avec, } p_1^0 = \frac{Z_2 p_1^0 + Z_1 p_2^0}{Z_1 + Z_2} + \text{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} (u_2^0 - u_1^0)$$

Pour $\varepsilon \rightarrow 0$, on a

$$\frac{\lambda^0}{\varepsilon} (u_2^0 - u_1^0) = 0$$

Ce qui donne immédiatement

$$u_1^0 = u_2^0 = u^0 \quad (2.6)$$

Cette relation est très importante car elle nous informe que la vitesse moyenne de chacune des phases est la même. En se servant de ce résultat dans l'équation (2.5), on obtient

$$\frac{\partial \alpha_1^0 \rho_1^0 u^0}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1^0 \rho_1^0 u^0{}^2 + \alpha_1^0 p_1^0}{\partial x} = p_1^0 \frac{\partial \alpha_1^0}{\partial x} + \lambda^0 (u_2^1 - u_1^1)$$

Pour la phase 2, le calcul est le même, et on a

$$\frac{\partial \alpha_2^0 \rho_2^0 u^0}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2^0 \rho_2^0 u^0{}^2 + \alpha_2^0 p_2^0}{\partial x} = -p_1^0 \frac{\partial \alpha_1^0}{\partial x} - \lambda^0 (u_2^1 - u_1^1)$$

En sommant les deux équations précédentes, on a

$$\frac{\partial \rho^0 u^0}{\partial t} + \frac{\partial \rho^0 u^{0^2} + p^0}{\partial x} = 0 \quad (2.7)$$

Avec,

$$\rho^0 = \alpha_1^0 \rho_1^0 + \alpha_2^0 \rho_2^0$$

$$u^0 = u_1^0 = u_2^0$$

A ce stade,

$$p^0 = \alpha_1^0 p_1^0 + \alpha_2^0 p_2^0$$

On retrouve sans surprise l'équation de quantité de mouvement du mélange.

Equation d'énergie

Les équations d'énergies s'écrivent

$$\frac{\partial(\alpha \rho E)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha(\rho E + p)u)_1}{\partial x} = p_1 u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda u_1'(u_2 - u_1) - \mu p_1'(p_1 - p_2)$$

$$\frac{\partial(\alpha \rho E)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha(\rho E + p)u)_2}{\partial x} = p_1 u_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda u_1'(u_2 - u_1) + \mu p_1'(p_1 - p_2)$$

On souhaite obtenir un modèle à une seule pression. Pour cela, on effectue le développement asymptotique des équations d'énergies.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1^0 \rho_1^0 E_1^0}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1^0 (\rho_1^0 E_1^0 + p_1^0) u_1^0}{\partial x} = \\ p_1^0 u_1^0 \frac{\partial \alpha_1^0}{\partial x} + \lambda^0 u^0 (u_2^1 - u_1^1) - \mu \frac{Z_2 p_1^1 + Z_1 p_2^1}{Z_1 + Z_2} (p_1^0 - p_2^0) - \mu p_1'^0 (p_1^1 - p_2^1) - \frac{\mu^0}{\varepsilon} p_1'^0 (p_1^0 - p_2^0) \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$\text{Avec, } u_1^0 = \frac{Z_1 u^0 + Z_2 u^0}{Z_1 + Z_2} + \text{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{p_2^0 - p_1^0}{Z_1 + Z_2} \text{ et } p_1'^0 = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2}$$

Pour $\varepsilon \rightarrow 0$, on a

$$\frac{\mu^0}{\varepsilon} p_1'^0 (p_1^0 - p_2^0) = 0, \text{ c'est-à-dire}$$

$$p_1^0 = p_2^0 = p^0 \quad (2.9)$$

On obtient un deuxième résultat très important. La pression moyenne de chacune des phases est la même.

En se servant de l'égalité des pressions (2.9) dans l'équation (2.8), on a

$$\frac{\partial \alpha_1^0 \rho_1^0 E_1^0}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1^0 (\rho_1^0 E_1^0 + p^0) u^0}{\partial x} = p_1^0 u_1^0 \frac{\partial \alpha_1^0}{\partial x} + \lambda^0 u^0 (u_2^1 - u_1^1) - \mu^0 p_1'^0 (p_1^1 - p_2^1)$$

Pour la phase 2, on obtient

$$\frac{\partial \alpha_2^0 \rho_2^0 E_2^0}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2^0 (\rho_2^0 E_2^0 + p^0) u^0}{\partial x} = -p_1^0 u_1^0 \frac{\partial \alpha_1^0}{\partial x} - \lambda^0 u^0 (u_2^1 - u_1^1) + \mu^0 p_1'^0 (p_1^1 - p_2^1)$$

En sommant ces deux équations, on obtient alors

$$\frac{\partial \rho^0 E^0}{\partial t} + \frac{\partial (\rho^0 E^0 + p^0) u^0}{\partial x} = 0 \quad (2.10)$$

On retrouve l'équation d'énergie du mélange.

Equation de fraction volumique

Dans le modèle de Baer and Nunziato (1986), l'équation de fraction volumique s'écrit

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} = \mu(p_1 - p_2)$$

$$\text{Avec, } u_1 = \frac{Z_1 u_1 + Z_2 u_2}{Z_1 + Z_2} + \text{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{p_2 - p_1}{Z_1 + Z_2}$$

En lui appliquant le développement asymptotique à l'ordre 0, et en se servant de l'égalité des vitesses (2.6) et de celle des pressions (2.9), on obtient

$$\frac{\partial \alpha_1^0}{\partial t} + u^0 \frac{\partial \alpha_1^0}{\partial x} = \mu^0 (p_1^1 - p_2^1) \quad (2.11)$$

Les termes de fluctuations de pression peuvent s'exprimer en faisant un développement asymptotique des équations de pressions, que l'on calcule.

La pression de chaque phase peut s'écrire comme une fonction de la densité et de l'entropie de cette phase : $p_k = p_k(\rho_k, s_k)$.

En calculant la différentielle de cette fonction (dans le cas de la phase 1), on a

$$\frac{d_1 p_1}{dt} = c_1^2 \frac{d_1 \rho_1}{dt} + \rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{d_1 s_1}{dt},$$

où $\Gamma_1 = (\gamma_1 - 1)$ est le coefficient de Grüneisen.

En utilisant l'équation de masse de la phase 1, on obtient

$$\frac{d_1 p_1}{dt} = \frac{c_1^2}{\alpha_1} \frac{d_1 \alpha_1 \rho_1}{dt} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} \frac{d_1 \alpha_1}{dt} + \frac{\Gamma_1 T_1}{\alpha_1} \left(\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1 u_1}{\partial x} \right).$$

En se servant maintenant de l'équation d'entropie de la phase 1, on a

$$\frac{d_1 p_1}{dt} = \frac{c_1^2}{\alpha_1} \frac{d_1 \alpha_1 \rho_1}{dt} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} \frac{d_1 \alpha_1}{dt} + \frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \left\{ \frac{Z_1}{(Z_1 + Z_2)^2} \left((p_2 - p_1) \text{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) + Z_2 (u_2 - u_1) \right)^2 \left| \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \right| \right. \\ \left. + \lambda \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1)^2 + \mu \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2} (p_1 - p_2)^2 \right\}.$$

Enfin, on utilise l'équation de fraction volumique pour faire apparaître le terme de relaxation de pression :

$$\frac{d_1 p_1}{dt} = \frac{c_1^2}{\alpha_1} \frac{d_1 \alpha_1 \rho_1}{dt} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} \mu (p_1 - p_2) + \frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \left\{ \frac{Z_1}{(Z_1 + Z_2)^2} \left((p_2 - p_1) \text{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) + Z_2 (u_2 - u_1) \right)^2 \left| \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \right| \right. \\ \left. + \lambda \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1)^2 + \mu \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2} (p_1 - p_2)^2 \right\}$$

Par un calcul analogue, on obtient pour la phase 2 :

$$\frac{d_2 p_2}{dt} = \frac{c_2^2}{\alpha_2} \frac{d_2 \alpha_2 \rho_2}{dt} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \mu (p_1 - p_2) + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \left\{ \frac{Z_2}{(Z_1 + Z_2)^2} \left((p_2 - p_1) \text{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial x}\right) + Z_1 (u_2 - u_1) \right)^2 \left| \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \right| \right. \\ \left. + \lambda \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1)^2 + \mu \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} (p_1 - p_2)^2 \right\}$$

Après développement asymptotique, ces équations deviennent :

Pour la phase 1 :

$$\frac{dp^0}{dt} = -\rho_1^0 c_1^{02} \frac{\partial u^0}{\partial x} - \frac{\rho_1^0 c_1^{02}}{\alpha_1^0} \mu^0 (p_1^1 - p_2^1)$$

Pour la phase 2 :

$$\frac{dp^0}{dt} = -\rho_2^0 c_2^{02} \frac{\partial u^0}{\partial x} + \frac{\rho_2^0 c_2^{02}}{\alpha_2^0} \mu^0 (p_1^1 - p_2^1)$$

Comme, $p_1^0 = p_2^0 = p^0$, on obtient finalement deux équations sur la pression de mélange qui font apparaître les termes de fluctuations de pression.

En calculant la différence de ces deux équations, on obtient finalement,

$$\mu^0 (p_1^1 - p_2^1) = \frac{\rho_2^0 c_2^{02} - \rho_1^0 c_1^{02}}{\frac{\rho_2^0 c_2^{02}}{\alpha_2^0} + \frac{\rho_1^0 c_1^{02}}{\alpha_1^0}} \frac{\partial u^0}{\partial x}.$$

L'équation de fraction volumique s'écrit donc finalement,

$$\frac{d\alpha_1^0}{dt} = \frac{\rho_2^0 c_2^{02} - \rho_1^0 c_1^{02}}{\frac{\rho_2^0 c_2^{02}}{\alpha_2^0} + \frac{\rho_1^0 c_1^{02}}{\alpha_1^0}} \frac{\partial u^0}{\partial x} \quad (2.12)$$

Résumé du modèle à 5 équations de Kapila et al. (2001)

Les équations établies ne font apparaître que les termes d'ordre 0. Pour simplifier l'écriture du modèle, on retire l'exposant 0 des variables. Le modèle de Kapila et al. (2001) s'écrit donc ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_1}{dt} &= \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} + \frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1}} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p)u}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Il admet les deux équations d'entropies

$$\begin{aligned} \frac{ds_1}{dt} &= 0 \\ \frac{ds_2}{dt} &= 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

On a ainsi un modèle diphasique à une vitesse et une pression.

Equation d'état de mélange

On ferme le modèle de Kapila et al. (2001) avec une loi d'état permettant de calculer la pression de mélange. Cette loi dépend de celles qui sont utilisées pour chacune des phases. On l'obtient à partir de l'expression de l'énergie interne de mélange :

$$\rho e = \alpha_1 \rho_1 e_1 + \alpha_2 \rho_2 e_2$$

Si la loi d'état utilisé par chacune des phases est stiffened-gaz, on a

$$\rho_k e_k = \frac{P_k - \gamma_k P_{\infty, k}}{\gamma_k - 1}, k = 1, 2.$$

Ainsi,

$$\rho e = \alpha_1 \frac{P_1 - \gamma_1 P_{\infty,1}}{\gamma_1 - 1} + \alpha_2 \frac{P_2 - \gamma_2 P_{\infty,2}}{\gamma_2 - 1} .$$

Comme les pressions des deux phases sont les mêmes, on obtient finalement

$$p(\rho, e, \alpha_1) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 P_{\infty,1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2 \gamma_2 P_{\infty,2}}{\gamma_2 - 1} \right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}} \quad (2.15)$$

Hyperbolicité

Le modèle de Kapila et al. (2001) peut s'écrire en variables primitives sous la forme suivante :

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

avec,

$$W = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ \alpha_1 \\ \rho \\ u \end{pmatrix} \quad A(W) = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 & -K \\ 0 & 0 & 0 & u & \rho \\ \frac{\alpha_1 \rho_1 \Gamma_1 T_1}{c_1^2} & \frac{\alpha_2 \rho_2 \Gamma_2 T_2}{c_2^2} & \frac{(\rho_2 - \rho_1)}{\rho \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right)} & \frac{1}{\rho \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right)} & u \end{pmatrix}$$

Ce modèle est hyperbolique et admet les vitesses d'ondes suivantes :

$$\lambda^- = u - c_w$$

$$\lambda = u \text{ de multiplicité } 3$$

$$\lambda^+ = u + c_w$$

Où c_w est la vitesse du son de Wood (1930)

$$\frac{1}{\rho c_w^2} = \frac{\alpha_1}{\rho_1 c_1^2} + \frac{\alpha_2}{\rho_2 c_2^2}$$

III. Résolution numérique

On résume dans ce paragraphe, la méthode de résolution numérique proposée par Saurel et al.(2009) pour résoudre le modèle de Kapila et al. (2001). Les idées de base de cette méthode seront largement utilisées par la suite pour la résolution des modèles d'interpénétration.

III.1 Difficultés de la résolution numérique du modèle de Kapila et al. (2001)

Du point de vue de la résolution numérique, le modèle diphasique à 5 équations de Kapila et al. (2001) pose quelques difficultés.

La première difficulté est liée à la vitesse du son de Wood (1930) : $\frac{1}{\rho c_w^2} = \frac{\alpha_1}{\rho_1 c_1^2} + \frac{\alpha_2}{\rho_2 c_2^2}$.

Cette vitesse du son de mélange n'est pas monotone par rapport à la fraction volumique (Figure 2.1). Or, la résolution numérique qui est adoptée entraîne la diffusion numérique de l'interface. Cette zone de mélange est purement artificielle et n'a pas de sens physique. Par conséquent, d'après l'allure de la vitesse du son de Wood (Figure 2.1), lorsqu'une onde va se propager dans cette zone de diffusion, sa vitesse sera nettement inférieure et un retard dans la transmission de l'onde sera enregistré.

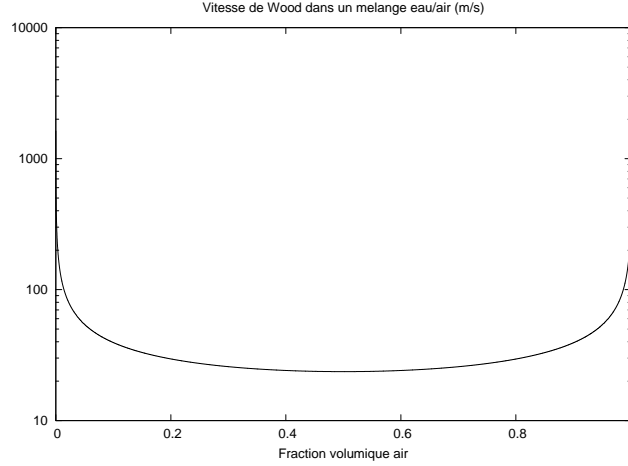


Figure 2.1 Vitesse du son dans un mélange eau/air. La vitesse du son de Wood a un comportement non monotone par rapport à la fraction volumique de l'air.

Ce modèle présente une deuxième difficulté non négligeable. En effet, dans l'équation sur la fraction volumique, le terme en $K \frac{\partial u}{\partial x}$ peut devenir très grand dans les chocs et dans les fortes détentes. D'un point de vue numérique, il est très difficile de garantir la positivité des fractions volumiques dans de telles situations. C'est la principale difficulté de ce modèle. Une première méthode permettant de résoudre ce problème a été présentée dans Saurel et al. (2007) et Petitpas et al. (2007). Cependant, cette méthode reste complexe et coûteuse. D'autres schémas ont été proposés par Murrone and Guillard (2005) et Abgrall and Perrier (2006), aucun des deux n'apportant de solution simultanée aux deux problèmes signalés au dessus. Une méthode de résolution efficace permettant de contourner ces difficultés est présentée dans Saurel et al. (2009) et est résumée ci-après.

III.2 Modèle à 6 équations (hors d'équilibre des pressions)

Le modèle à 5 équations est délicat à résoudre à cause des raisons mentionnées plus haut. Il est plus facile de résoudre le modèle en déséquilibre de pression. Celui-ci s'obtient par le même raisonnement que pour le modèle de Kapila (2001), c'est-à-dire par un développement asymptotique du modèle de Baer and Nunziato (1986), mais sans faire l'hypothèse d'un coefficient de relaxation des pressions infini. On obtient donc le modèle à 1 vitesse et 2 pressions constitué de 6 équations :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= \mu(p_1 - p_2) \\
 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 u}{\partial x} + \alpha_1 p_1 \frac{\partial u}{\partial x} &= -\mu p_1 (p_1 - p_2) \\
 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2 u}{\partial x} + \alpha_2 p_2 \frac{\partial u}{\partial x} &= \mu p_1 (p_1 - p_2) \\
 \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p) u}{\partial x} &= 0
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

Les équations d'entropies sont :

$$\alpha_1 \rho_1 T_1 \frac{ds_1}{dt} = \mu (p_1 - p_2)^2 \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2}$$

$$\alpha_2 \rho_2 T_2 \frac{ds_2}{dt} = \mu (p_1 - p_2)^2 \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2}$$

Ce modèle présente un premier avantage. Le terme non conservatif qui posait problème pour la positivité de la fraction de l'équation de fraction volumique a été remplacé par un terme de relaxation de pression. La solution du modèle à 6 équations (2.16) tend vers celle du modèle à 5 équations de Kapila (2001) (2.13) lorsque le paramètre de relaxation des pressions μ tend vers l'infini. L'idée de la résolution numérique est alors de résoudre le modèle à 6 équations (2.16) en deux étapes successives.

Premièrement, on résout le modèle (2.16) sans les termes de relaxation, c'est-à-dire avec $\mu=0$. Dans ce cas, la fraction volumique obéit à une simple équation de transport.

Ensuite, on résout les termes de relaxation de pressions en faisant tendre μ vers l'infini. La solution retourne alors à l'équilibre des pressions et correspond donc à celle du modèle de Kapila et al. (2001). Ces deux étapes seront détaillées par la suite. Avant cela, quelques remarques s'imposent sur les propriétés du Système (2.16) lorsque les effets de relaxation sont omis.

Hyperbolicité du modèle à 6 équations

On écrit le Système (2.16) en variables primitives afin d'étudier son hyperbolicité :

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = 0$$

$$\text{Avec, } \mathbf{A}(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 & 0 & 0 \\ \frac{p_1 - p_2}{\rho} & 0 & 0 & u & \frac{\alpha_1}{\rho} & \frac{\alpha_2}{\rho} \\ 0 & 0 & 0 & \rho_1 c_1^2 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_2 c_2^2 & 0 & u \end{pmatrix} \text{ et } \mathbf{W} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ s_1 \\ s_2 \\ u \\ p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}$$

Ce système est hyperbolique et admet les ondes

$$\lambda^- = u - c_f$$

$$\lambda = u \text{ de multiplicité 4}$$

$$\lambda^+ = u + c_f$$

$$\text{Avec, } c_f = Y_1 c_1 + Y_2 c_2 \quad (2.17)$$

$$\text{Où } Y_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho}, k = 1, 2$$

Les vitesses d'ondes dépendent maintenant de la vitesse du son figée c_f qui a un comportement très différent de la vitesse du son de Wood c_w . Contrairement à cette dernière, la vitesse du son figée a un comportement monotone par rapport à la fraction volumique, comme représenté sur la Figure 2.2, ce qui permet une meilleure transmission des ondes aux travers des interfaces diffuses.

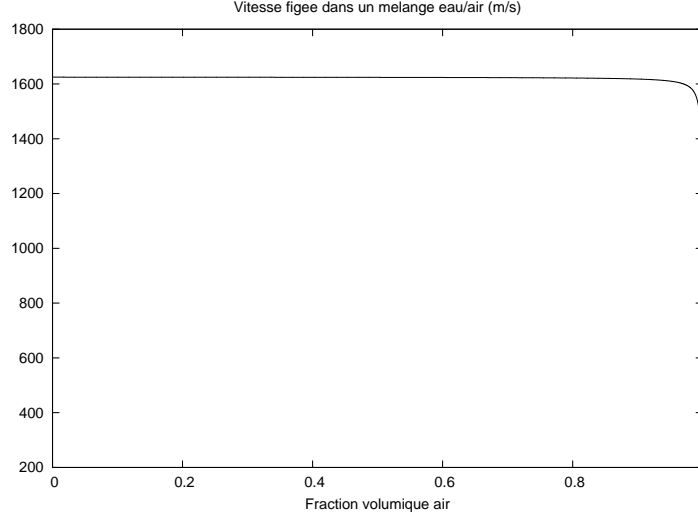


Figure 2.2 Vitesse du son figée en fonction de la fraction volumique d'air dans un mélange eau/air. Le comportement est monotone.

III.3 Méthode de résolution numérique

Ce système est résolu en deux étapes principales, suivies d'une troisième étape de réinitialisation, qui a aussi une grande importance. La première étape, décrite ci-après, consiste à résoudre le modèle à 6 équations, complété par l'équation d'énergie totale (7 équations en tout) en absence de termes de relaxation.

Etape hyperbolique

On doit donc résoudre dans un premier temps le système suivant :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 u}{\partial x} + \alpha_1 p_1 \frac{\partial u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2 u}{\partial x} + \alpha_2 p_2 \frac{\partial u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p) u}{\partial x} &= 0
 \end{aligned} \tag{2.18}$$

Où $p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$

Ce modèle est surdéterminé par la présence de l'équation d'énergie totale du mélange. Contrairement aux équations d'énergies des phases, celle-ci est sous forme conservative et donc sa résolution numérique sera exempte de défaut. Nous verrons par la suite que la résolution de cette équation permettra de calculer correctement la pression des phases et de corriger certaines approximations des équations d'énergie internes non-conservatives.

Dans ce paragraphe, on décrit une méthode de résolution du modèle (2.18). On utilise un schéma de type Godunov, mais pour cela on a besoin de calculer les flux sur chacun des bords de mailles. Pour chaque bord de mailles, on résout le problème de Riemann avec un solveur de type HLLC (Toro et al., 1994).

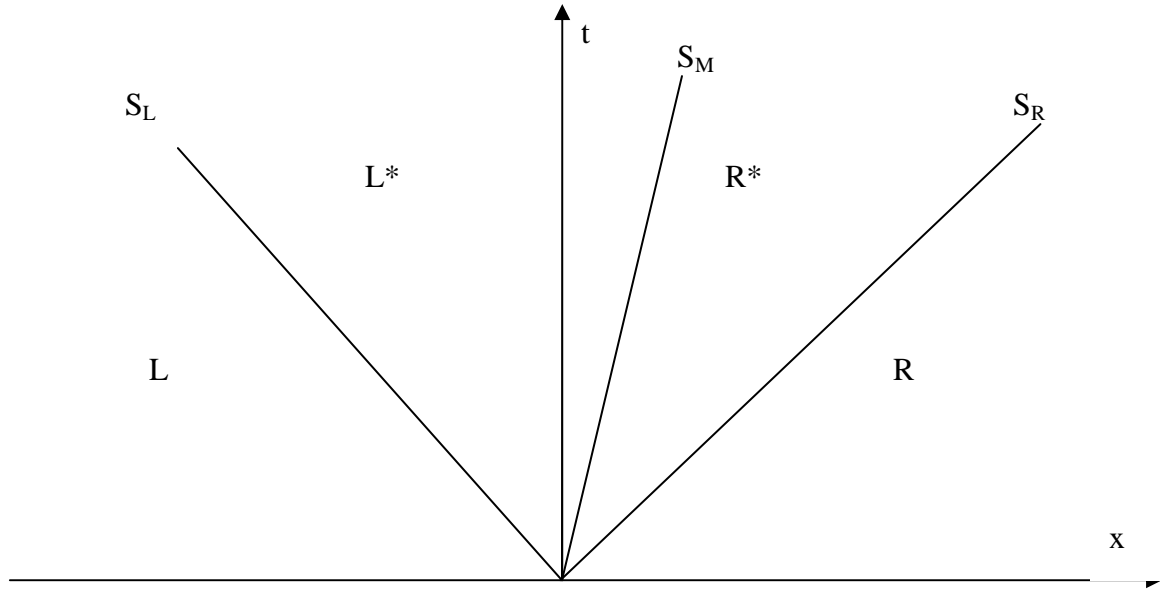


Figure 2.3 Problème de Riemann suivant l'approximation HLLC. On doit calculer l'état L^* et R^* à partir des états L et R .

Les vitesses des ondes de gauche S_L et de droite S_R sont calculées par l'approximation de Davis (1988) :

$$\begin{aligned} S_L &= \max(u_L + c_L, u_R + c_R), \\ S_R &= \min(u_L - c_L, u_R - c_R). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Où les vitesses du son c_L et c_R sont calculées par la relation (2.17)

A travers l'onde de contact, on doit vérifier la relation :

$$u_L^* = u_R^* = S_M. \quad (2.20)$$

Ainsi, la vitesse et la pression de mélange sont constantes au travers de l'onde de contact. Cela n'est pas surprenant car les équations de mélange forment le système d'équations d'Euler pour lequel ce résultat est déjà connu.

A l'aide de l'approximation HLL (Harten et al., 1983), il est possible de déterminer une estimation de ces grandeurs :

$$S_M = \frac{(\rho u^2 + p)_L - (\rho u^2 + p)_R - S_L(\rho u)_L + S_R(\rho u)_R}{(\rho u)_L - (\rho u)_R - S_L \rho_L + S_R \rho_R}. \quad (2.21)$$

Où $Z_L = \rho_L c_L$ et $Z_R = \rho_R c_R$

Par ailleurs, les fractions volumiques obéissent à une équation de transport à la vitesse u . De ce fait on a :

$$\alpha_{1,L}^* = \alpha_{1,L},$$

$$\alpha_{1,R}^* = \alpha_{1,R}.$$

Les équations de masse des phases nous donnent les relations de saut :

$$[\alpha_k \rho_k (u - S_{L,R})]_{S_{L,R}} = 0 \text{ avec } k=1,2 \text{ et}$$

En se servant de ces relations à travers les ondes extérieures, on écrit :

$$\rho_{k,L,R}^* = \rho_{k,L,R} \frac{u_{L,R} - S_{L,R}}{S_M - S_{L,R}}, \quad k=1,2 \quad (2.22)$$

Les équations d'énergies des phases ne permettent pas de déterminer des relations de passage car elles sont non conservatives. Cependant, on peut utiliser la relation d'Hugoniot pour chacune des phases :

$$e_{k,L,R}^* - e_{k,L,R} + \frac{p_{k,L,R}^* + p_{k,L,R}}{2} (v_{k,L,R}^* - v_{k,L,R}) = 0, k=1,2 \quad (2.23)$$

Dans le cas où l'on utilise l'équation d'état stiffened gas, on peut exprimer les pressions des phases :

$$p_{k,L,R}^* (\rho_{k,L,R}^*) = (p_{k,L,R} + p_{\infty,k}) \frac{(\gamma_k - 1)p_{k,L,R} - (\gamma_k + 1)p_{k,L,R}^*}{(\gamma_k - 1)p_{k,L,R}^* - (\gamma_k + 1)p_{k,L,R}} - p_{\infty,k}, k=1,2 \quad (2.24)$$

La pression de mélange s'en déduit par la relation suivante :

$$p_{L,R}^* = \alpha_{1,L,R}^* p_{1,L,R}^* + \alpha_{2,L,R}^* p_{2,L,R}^* \quad (2.25)$$

On calcule en plus l'énergie totale de mélange par les relations de passages données par l'équation d'énergie du mélange à travers les ondes extérieures :

$$E_{L,R}^* = \frac{\rho_{L,R} E_{L,R} (u_{L,R} - S_{L,R}) + p_{L,R} u_{L,R} - p^* S_M}{\rho_{L,R}^* (S_M - S_{L,R})} \quad (2.26)$$

Schéma numérique

Le schéma numérique utilisé est de type Godunov. Pour les variables obéissant à une équation sous forme conservative on utilise :

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F^*(U_i^n, U_{i+1}^n) - F^*(U_{i-1}^n, U_i^n)) \quad (2.27)$$

$$\text{Où } U = \begin{pmatrix} \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_2 \rho_2 \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix} \text{ et } F = \begin{pmatrix} \alpha_1 \rho_1 u \\ \alpha_2 \rho_2 u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho E + p)u \end{pmatrix}.$$

Avec F^* déterminé par la solution du problème de Riemann pour chaque bord de maille.

Pour l'équation d'évolution de la fraction volumique, on utilise la méthode de Godunov pour les équations d'advection, c'est-à-dire :

$$\alpha_{1,i}^{n+1} = \alpha_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((u\alpha_1)_{i+1/2}^* - (u\alpha_1)_{i-1/2}^* - \alpha_{1,i}^n (u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*) \right) \quad (2.28)$$

Cette méthode garantit la positivité de la fraction volumique.

Les équations d'énergies posent problème car elles sont non conservatives. En présence de choc, il n'est pas possible de les résoudre correctement (Hou and Le Floch, 1994). Cependant, on rappelle que, par la suite, on résoudra les termes de relaxations de pression qui interviennent notamment dans ces équations. Cette étape de relaxation apportera une première correction. Une deuxième correction interviendra en utilisant l'équation d'énergie totale du mélange qui obéit à une équation de conservation. Les erreurs introduites par équations d'énergies seront ainsi compensées. On utilise alors le schéma suivant :

$$(\alpha p e)_{k,i}^{n+1} = (\alpha p e)_{k,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\alpha p e u)_{k,i+1/2}^* - (\alpha p e u)_{k,i-1/2}^* + (\alpha p)_{k,i}^n (u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*) \right) \quad (2.29)$$

Etape de relaxation

Il reste maintenant à résoudre les termes de relaxations qui forment le système (2.30),

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \mu(p_1 - p_2) \\
 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} &= 0 \\
 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} &= 0 \\
 \frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\
 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} &= -\mu p_1 (p_1 - p_2) \\
 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} &= \mu p_1 (p_1 - p_2)
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

avec $p_I = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2}$ et $\mu \rightarrow \infty$

En se servant de l'équation d'évolution de la fraction volumique, les équations d'énergies peuvent s'écrire:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} &= -p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}, \\
 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} &= -p_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial t}.
 \end{aligned}$$

On les simplifie grâce aux équations de masse des phases :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial e_1}{\partial t} + p_1 \frac{\partial v_1}{\partial t} &= 0 \\
 \frac{\partial e_2}{\partial t} + p_1 \frac{\partial v_2}{\partial t} &= 0
 \end{aligned} \tag{2.31}$$

Où $v_k = \frac{1}{\rho_k}$, $k=1,2$ est le volume massique de la phase k .

On peut écrire les équations d'énergies (2.31) sous la forme intégrale,

$$\begin{aligned}
 e_k - e_k^0 + \hat{p}_{I,k} (v_k - v_k^0) &= 0 \\
 \text{avec } \hat{p}_{I,k} &= \frac{1}{(v_k - v_k^0)} \int_0^{\Delta t} p_I \frac{\partial v_k}{\partial t} dt
 \end{aligned}$$

Pour déterminer les $\hat{p}_{I,k}$, on somme les deux équations d'énergies :

$$Y_1 e_1 - Y_1 e_1^0 + Y_2 e_2 - Y_2 e_2^0 + \hat{p}_{I,1} (Y_1 v_1 - Y_1 v_1^0) + \hat{p}_{I,2} (Y_2 v_2 - Y_2 v_2^0) = 0 \tag{2.32}$$

L'équation de la masse du mélange, obtenue en sommant les équations de masse des phases s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0.$$

On peut aussi l'écrire :

$$\frac{\partial v}{\partial t} = 0,$$

avec $v = Y_1 v_1 + Y_2 v_2$.

En intégrant cette équation, on obtient :

$$\left(Y_1 v_1 - Y_1 v_1^0\right) + \left(Y_2 v_2 - Y_2 v_2^0\right) = 0$$

On peut alors simplifier l'équation (2.32) :

$$e - e^0 + Y_1 \left(\hat{p}_{I,1} - \hat{p}_{I,2}\right) \left(v_1 - v_1^0\right) = 0$$

L'équation d'énergie du mélange s'écrit en sommant les équations d'énergie des phases :

$$\frac{\partial e}{\partial t} = 0.$$

Donc, nécessairement, il en résulte que $e = e^0$, et l'équation (2.32) impose :

$$\hat{p}_{I,1} = \hat{p}_{I,2} = \hat{p}_I \quad (2.33)$$

Des estimations possibles sont $\hat{p}_I = p^0$ ou encore $\hat{p}_I = p^0$. Elles sont toutes les deux compatibles avec le second principe de la thermodynamique (Saurel et al., 2007a). Ces deux estimations donnent pratiquement les mêmes résultats (Saurel et al., 2009).

On revient aux équations d'énergies de chaque phase :

$$e_k(p, v_k) - e_k^0(p^0, v_k^0) + \hat{p}_I (v_k - v_k^0) = 0$$

On a 3 inconnues qui sont v_k ($k=1,2$) et p . On dispose déjà des deux équations d'énergies et on ferme le système avec la contrainte de saturation :

$$\sum_k \alpha_k = 1$$

Qui peut s'écrire aussi :

$$\sum_k (\alpha_k \rho_k) v_k = 1.$$

D'après les équations de masse, on a :

$$\alpha_k \rho_k = \alpha_k^0 \rho_k^0 \quad (2.34)$$

La contrainte de saturation devient donc :

$$\sum_k (\alpha \rho)_k^0 v_k = 1.$$

On a maintenant un système de 3 équations à 3 inconnues à résoudre qui est :

$$\begin{cases} e_k(p, v_k) - e_k^0(p^0, v_k^0) + \hat{p}_I (v_k - v_k^0) = 0, k = 1, 2 \\ \sum_k (\alpha \rho)_k^0 v_k = 1 \end{cases}$$

A l'aide de l'équation d'état stiffened-gas $p_k = (\gamma_k - 1) \rho_k e_k - \gamma p_{\infty, k}$, les équations d'énergies peuvent s'écrire

$$v_k(p) = v_k^0 \frac{p_k^0 + \gamma_k p_{\infty, k} + (\gamma_k - 1) \hat{p}_I}{p + \gamma_k p_{\infty, k} + (\gamma_k - 1) \hat{p}_I} \quad (2.35)$$

On obtient donc une équation à une seule inconnue qui est p :

$$\sum_k (\alpha \rho)_k^0 v_k(p) = 1$$

Dans le cas général, on peut résoudre cette équation numériquement avec un algorithme itératif de type Newton-Raphson. Cependant, dans le cas d'un écoulement diphasique il s'agit d'une équation du second degré. Une fois la pression de relaxation déterminée, on calcule les volumes spécifiques à l'aide des équations (2.35) et les fractions volumiques de chacune des phases à l'aide des équations (2.34).

Il est important de noter que la pression obtenue à la fin du processus de relaxation n'est pas nécessairement en accord avec la conservation de l'énergie. En effet, la pression de relaxation est calculée à partir des énergies internes qui ne sont pas correctement calculées à cause du schéma numérique utilisé (2.29). On doit donc corriger cette pression en recalculant correctement les énergies de chacune des phases.

Réinitialisation des énergies

L'équation d'énergie du mélange est résolue à partir d'un schéma conservatif. On obtient la pression du mélange grâce à la loi d'état de mélange (2.15). Le point essentiel à ce niveau est de remarquer que le calcul de la pression est basé sur l'énergie interne de mélange, elle-même déterminée à partir de l'équation d'énergie totale et de la fraction volumique, qui a été estimée lors de l'étape de relaxation des pressions.

On calcule ensuite sans difficulté les énergies de chacune des phases, en accord avec la pression du mélange, grâce à la loi d'état $e_k = e_k(p, \alpha_k \rho_k, \alpha_k)$. Ces énergies viennent remplacer celles évaluées lors de la résolution des deux équations d'énergie non-conservatives.

Résumé de la méthode de résolution numérique

Pour chaque pas de temps :

- Résoudre le problème de Riemann à chaque bord de mailles pour le modèle à (6+1) équations avec le solveur HLLC.
- Faire évoluer chacune des variables avec le schéma numérique (2.27)-(2.28)-(2.29)
- Déterminer la pression de relaxation puis en déduire les fractions volumiques des phases.
- Réinitialiser les énergies avec la pression de mélange calculée à partir de l'énergie de mélange et des fractions volumiques de l'étape précédente.

IV. Tests et validations

IV.1 Tube à choc Air-Hélium

Un tube à choc d'un mètre de long est divisé en deux chambres séparées par une interface à la position $x=0.5m$. On cherche à traiter une situation où l'air est initialement à gauche dans la chambre haute pression et l'hélium à droite dans la chambre basse pression.

La densité initiale de l'air est de 1 kg.m^{-3} et les paramètres de l'équation d'état stiffened gas sont $\gamma_{\text{air}}=1.4$ et $p_{\infty, \text{air}} = 0\text{Pa}$. La densité initiale de l'hélium est 0.2 kg.m^{-3} et les paramètres de l'équation d'état stiffened gas sont $\gamma_{\text{hélium}}=1.667$ et $p_{\infty, \text{hélium}} = 0\text{Pa}$. Les deux chambres sont remplies de gaz pratiquement purs. La chambre de gauche est à la pression initiale de 10 bars et contient une très faible fraction volumique d'hélium $\alpha_{\text{hélium}} = 10^{-6}$. La chambre de droite contient les mêmes gaz mais les fractions volumiques sont inversées. Sa pression initiale est de 1 bar. Dans tout le tube, la vitesse initiale du mélange est nulle.

On compare les solutions numériques du modèle de Kapila et al. (2001) calculées avec la méthode présentée dans ce chapitre avec la solution exacte des équations d'Euler. Le maillage utilisé comporte 1000 cellules. On montre les résultats au temps $t=272\mu s$.

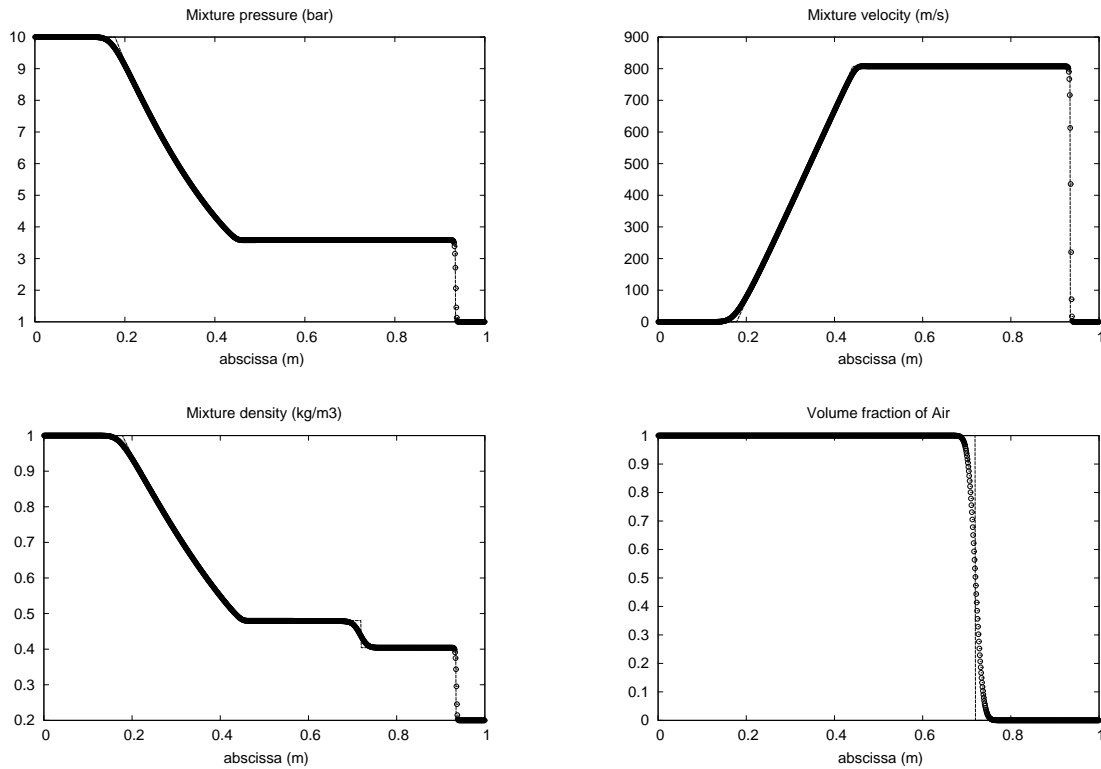


Figure 2.4 Pression, vitesse et densité du mélange et fraction volumique de l'air au temps $t=272\mu s$. Les résultats calculés avec le modèle de Kapila et al. (2001) sont représentés par des symboles. La solution exacte est représentée en traits pleins. Les résultats sont en excellent accord.

La précision des résultats peut être améliorée en étendant à des ordres supérieurs la méthode. Ceci a été réalisé dans Saurel et al. (2009).

IV.2 Tube à choc Eau-Air

On se place maintenant dans un cas plus difficile pour montrer la robustesse de la méthode numérique. Comme précédemment, un tube à choc d'un mètre de long est divisé en deux chambres séparées par une interface qui est maintenant à la position $x=0.75m$. La densité initiale de l'air est $1 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, et les paramètres de l'équation d'état stiffened gas sont $\gamma_{\text{eau}}=1.4$ et $p_{\infty,\text{air}}=0\text{Pa}$. La densité initiale de l'eau est $1000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, et les paramètres de l'équation d'état stiffened gas sont $\gamma_{\text{eau}}=1.667$ et $p_{\infty,\text{eau}}=6.10^8 \text{ Pa}$. La chambre de gauche contient une très faible fraction volumique d'air $\alpha_{\text{air}}=10^{-6}$ et sa pression initiale est de 1 GPa. La chambre de droite contient les mêmes gaz mais les fractions volumiques sont inversées, et sa pression initiale est de 1 bar soit 0.1MPa. Dans tout le tube, la vitesse initiale du mélange est nulle.

Encore une fois, on compare les solutions numériques du modèle de Kapila et al. (2001) avec la solution exacte des équations d'Euler. Le maillage utilisé comporte 1000 cellules. On montre les résultats au temps $t=240\mu s$.

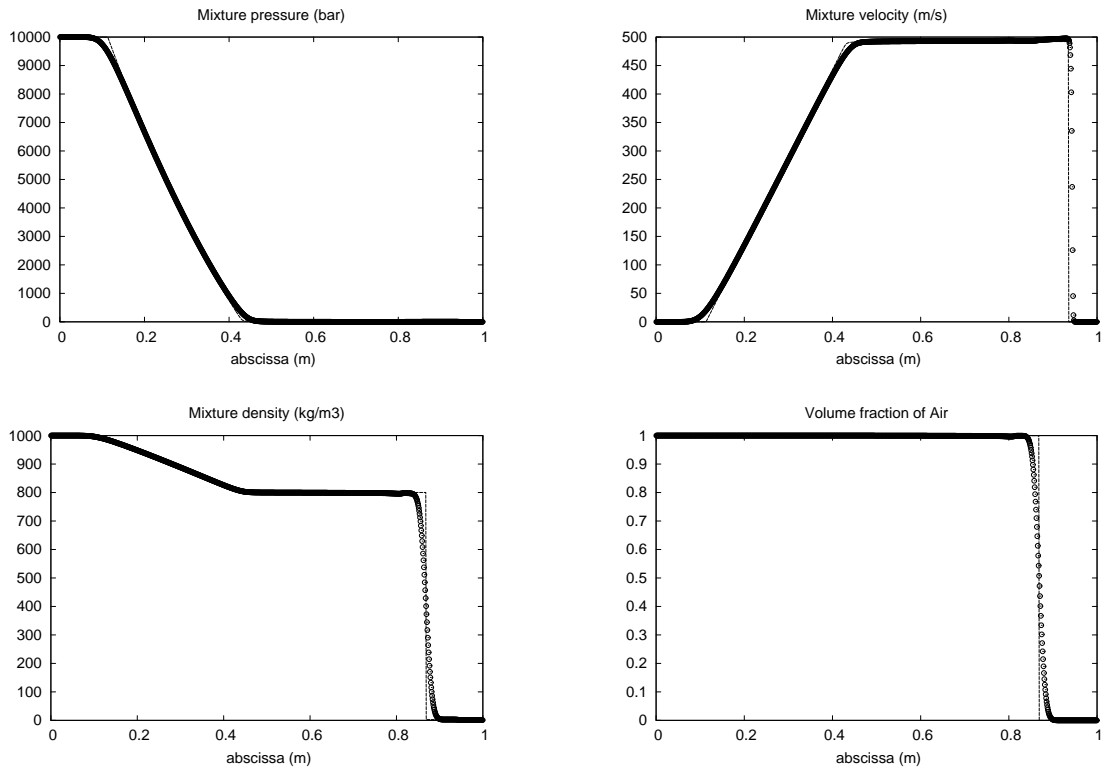


Figure 2.5 Pression, vitesse et densité du mélange et fraction volumique de l'air au temps $t=240\mu\text{s}$. Les résultats calculés avec le modèle de Kapila (2001) sont représentés par des symboles. La solution exacte est représentée en traits pleins. Les résultats sont en excellent accord.

V. Conclusion

Dans ce chapitre, le modèle de Kapila et al. (2001) a été établi en tant que limite asymptotique à l'ordre 0 du modèle de Baer and Nunziato (1986), dans la limite de très grands coefficients de relaxation des vitesses et des pressions.

On a aussi décrit dans ce chapitre une méthode de résolution numérique relativement simple et efficace. Elle est également robuste. Cette méthode consiste à résoudre dans un premier temps un modèle hors d'équilibre des pressions, puis de relaxer les pressions pour revenir à la solution du modèle en équilibre de pression. Des tests de validation sont présentés dans Saurel et al. (2009). Ils montrent que cette méthode de résolution donne de très bons résultats sur les problèmes à interfaces, mais aussi sur des problèmes à physique variée, tels que des écoulements cavitants ou des problèmes de propagation de choc dans les mélanges diphasiques.

Chapitre 3 : Modèle d'interpénétration de type Darcy

I. Introduction

The drift effect result of velocity differences between the two phases in the mixing layer. In this chapter, we introduce a first drift model. The idea is to use the same method as the Kapila et al. model (2001) building, but by retaining the velocity fluctuation terms. Recall that, each variable can be written as the sum of an average term and a fluctuation term by the Chapman-Enskog development (see Chen et al. (1994) and Natalini (1997) for details).

Restoration of drift effects in the Kapila et al. (2001) model has already been addressed by Guillard and Duval (2007) for barotropic fluids and Ambroso et al. (2008). We now address the non barotropic case. Pioneer work in this direction has been done by Labois (2008).

First, we begin with the asymptotic analysis that enables model's building. Drift effects in the non-barotropic case induce extra difficulties. These effects induce energy and entropy transport. In this frame a thermodynamically consistent formulation is mandatory, in particular with respect to the entropy inequality. To achieve such a construction, recent results in phase transition modelling are used (Saurel et al., 2008). Indeed, drift effects correspond to mass transfers that present under differential form. Generalized heat fluxes, due to the entropy transport are also present. By analysing the entropy production in each phase and in the mixture, Saurel et al. (2008) proposed closure relations for the volume fraction rate of change due to heat and mass transfer. An extension is done here for the modelling of differential mass transfer and generalized heat fluxes. This guarantees a thermodynamically consistent model.

Secondly, we present a numerical method for the resolution of the drift model. At the numerical level, extra difficulties are present. The new model is of hyperbolic-elliptic type and non-conservative terms are still present in the volume fraction equation. The non-conservative terms present in the Kapila et al. (2001) model have been addressed in a simple and efficient relaxation formulation recently (Saurel et al., 2009). This method, explained in the previous chapter, uses a 3-step strategy, based on an extended system with pressure non-equilibrium effects. Let us mention that improvement of this method was done in Petitpas et al. (2009) for the computation of shock in multiphase mixtures. The use of an extended system simplifies indeed numerical resolution. The same philosophy is reused here for drift terms, and another 3-step method is built for the treatment of interpenetration effects. The method remains simple and efficient.

Finally, we test the drift model with some classical problems processing exact solutions, showing the capabilities to solve interfacial flows and two velocities flows. Thereafter, we will check the model ability to reproduce the evolution of the mixing layer created by a shock wave interacting with an interface (Richtmyer-Meshkov instability).

II. Asymptotic analysis and drift model

The Kapila et al. (2001) model is a temperature non-equilibrium two phase flow model with a single velocity and pressure. It corresponds to the asymptotic limit at zero-order of the Baer and Nunziato (1986) model. A generalized formulation of this last model regarding the interfacial variables and relaxation parameter was given in Saurel et al. (2003). This last model consists in the starting point of the present analysis. This analysis is necessary to determine the drift force model, to be included in the Kapila et al. (2001) model.

II.1 Non equilibrium model

The Baer and Nunziato (1986) model consider each phase as compressible, evolving with its own velocity, temperature and pressure. The system is hyperbolic and involves 7 partial differential equations. It reads in 1D:

Phase 1

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho u)_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho u)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho u^2 + \alpha p)_1}{\partial x} &= p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda(u_2 - u_1) + \alpha_1 \rho_1 g \\
\frac{\partial(\alpha\rho E)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha(\rho E + p)u)_1}{\partial x} &= p_1 u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda u_1'(u_2 - u_1) - \mu p_1'(p_1 - p_2) + \alpha_1 \rho_1 u_1 g
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Phase 2

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho u)_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho u)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho u^2 + \alpha p)_2}{\partial x} &= p_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda(u_2 - u_1) + \alpha_2 \rho_2 g \\
\frac{\partial(\alpha\rho E)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha(\rho E + p)u)_2}{\partial x} &= p_1 u_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda u_1'(u_2 - u_1) + \mu p_1'(p_1 - p_2) + \alpha_2 \rho_2 u_2 g
\end{aligned}$$

Here mass transfer, heat exchanges and body forces have been omitted. The notations are conventional in multiphase flow literature. The α variable represents volume fraction, ρ represents density, u means velocity, p represents pressure, E means total energy with ($E = e + \frac{1}{2}u^2$) and e represents the internal energy.

Interfacial variables are modelled as (Saurel et al., 2003):

$$\begin{aligned}
u_1 &= \frac{Z_1 u_1 + Z_2 u_2}{Z_1 + Z_2} + \text{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{p_2 - p_1}{Z_1 + Z_2}, \\
p_1 &= \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2} + \text{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1),
\end{aligned}$$

where $Z_k = \rho_k c_k$ represents the acoustic impedance of phase k .

They correspond to velocity and pressure that exert at locations where volume fraction gradients are present. They play a particularly important role at material interface where the volume fraction is discontinuous. These formulas are only valid when waves of weak amplitude are present. When waves of strong amplitude appear, these estimates can be replaced by those of exact Riemann solvers for the Euler equations. It was shown in Abgrall and Saurel (2003) that when properly solved, non-conservative terms were responsible for the fulfilment of interface conditions (equal normal velocities and equal pressures) when two pure fluids were separated by an interface and modelled by this multi-velocity description (see Figures 12 and 13 of that reference). This remark is important for the present application where interpenetration effects at interfaces are under consideration. As shown in this reference, non-conservative terms are responsible for the respect of interface conditions and as a consequence they forbid phases interpenetration as soon as a volume fraction discontinuity separates two pure fluids.

Average interfacial pressure and velocity that exert in a two-phase control volume are given by:

$$\begin{aligned}
p_1' &= \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2} \\
u_1' &= \frac{Z_1 u_1 + Z_2 u_2}{Z_1 + Z_2}
\end{aligned}$$

The equilibrium state is reached with the help of relaxation processes controlled by rates:

- $\mu = \frac{A_I}{Z_1 + Z_2}$, pressure relaxation rate, where A_I represents the specific interfacial area

- $\lambda = \frac{1}{2}\mu Z_1 Z_2$, velocity relaxation rate

From System (3.1) phase's entropy equations are obtained:

$$\frac{\partial(\alpha\rho s)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho su)_1}{\partial x} = \frac{1}{T_1} \left\{ \frac{Z_1}{(Z_1 + Z_2)^2} \left((p_2 - p_1) \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial\alpha_1}{\partial x}\right) + Z_2(u_2 - u_1) \right)^2 \left| \frac{\partial\alpha_1}{\partial x} \right| \right. \\ \left. + \lambda \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1)^2 + \mu \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2} (p_1 - p_2)^2 \right\}$$

It appears that closure relations for u_1 , p_1 , u_1' and p_1' express entropy production in this phase. These expressions being symmetric, similar result is obtained for phase 2.

$$\frac{\partial(\alpha\rho s)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho su)_2}{\partial x} = \frac{1}{T_2} \left\{ \frac{Z_2}{(Z_1 + Z_2)^2} \left(Z_1(u_1 - u_2) - (p_2 - p_1) \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial\alpha_2}{\partial x}\right) \right)^2 \left| \frac{\partial\alpha_2}{\partial x} \right| \right. \\ \left. + \lambda \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1)^2 + \mu \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} (p_1 - p_2)^2 \right\}$$

Consequently, the mixture entropy inequality reads:

$$\frac{\partial(\alpha\rho s)_1 + (\alpha\rho s)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho su)_1 + (\alpha\rho su)_2}{\partial x} = \\ = \frac{1}{T_1} \left\{ \frac{Z_1}{(Z_1 + Z_2)^2} \left((p_2 - p_1) \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial\alpha_1}{\partial x}\right) + Z_2(u_2 - u_1) \right)^2 \left| \frac{\partial\alpha_1}{\partial x} \right| + \lambda \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1)^2 + \mu \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2} (p_1 - p_2)^2 \right\} \\ + \frac{1}{T_2} \left\{ \frac{Z_2}{(Z_1 + Z_2)^2} \left(Z_1(u_1 - u_2) - (p_2 - p_1) \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial\alpha_2}{\partial x}\right) \right)^2 \left| \frac{\partial\alpha_2}{\partial x} \right| + \lambda \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1)^2 + \mu \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} (p_1 - p_2)^2 \right\} \geq 0$$

System (3.1) is thus thermodynamically consistent. It can be shown that it is hyperbolic with seven wave's speeds: $u_k \pm c_k$, u_k and u_1 ($k=1,2$).

II.2 Stiff mechanical relaxation limit at zero order

From the preceding model, we intend to determine a flow model with single velocity and a single pressure, but two temperatures and entropies. Such reduced model was proposed by Kapila et al. (2001). Details for asymptotic reduction may be found for example in the precedent chapter and in Murrone and Guillard (2005).

Each flow variable f is assumed to obey first order expansion of the form $f = f^0 + \epsilon f^1$ where f^0 represents the equilibrium state and f^1 a small perturbation around it.

Contrarily to perturbations, both pressure and velocity relaxation are assumed stiff: $\mu = \frac{\mu_0}{\epsilon}$ and

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{\epsilon} \text{ with } \mu_0 = \frac{1}{Z_1 + Z_2}, \quad \lambda_0 = \frac{1}{2} \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} \text{ and } \epsilon^{-1} = A_1 \text{ that is supposed to tend to infinity.}$$

Inserting these expressions in System (3.1) the resulting zero-order reduced Kapila et al. (2001) model is obtained:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1^0}{\partial t} + u^0 \frac{\partial \alpha_1^0}{\partial x} &= \alpha_1^0 \alpha_2^0 \rho^0 c_w^{02} \left(\frac{1}{\rho_1^0 c_1^{02}} - \frac{1}{\rho_2^0 c_2^{02}} \right) \frac{\partial u^0}{\partial x} \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_1^0}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_1^0 u^0}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_2^0}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_2^0 u^0}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial (\rho u)^0}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + p)^0}{\partial x} &= \rho^0 g \\
\frac{\partial (\rho E)^0}{\partial t} + \frac{\partial u^0 (\rho E + p)^0}{\partial x} &= \rho^0 u^0 g
\end{aligned} \tag{3.2}$$

With the following definitions:

$\rho = (\alpha \rho)_1 + (\alpha \rho)_2$, mixture density,

$\rho E = (\alpha \rho)_1 e_1 + (\alpha \rho)_2 e_2 + \rho \frac{u^2}{2}$, mixture total energy.

$\frac{1}{\rho c_w^2} = \frac{\alpha_1}{\rho_1 c_1^2} + \frac{\alpha_2}{\rho_2 c_2^2}$, the non-monotonic Wood (1930) mixture sound speed.

At the order $\frac{1}{\varepsilon}$ the associated system reads:

$$\begin{aligned}
u_1^0 &= u_2^0 = u^0 \\
p_1^0 &= p_2^0 = p^0
\end{aligned} \tag{3.3}$$

This last relation closes System (3.2). For the sake of simplicity, let us assume that each fluid is governed by the stiffened gas (SG) equation of state (EOS):

$$p_k = (\gamma_k - 1) p_k e_k - \gamma_k p_{\infty k},$$

where each material is characterized by two thermodynamic parameters (γ and p_{∞}) (see for example Harlow and Amsden (1971), Le Metayer et al. (2003) for parameters determination). The resulting mixture EOS that closes System (3.2) reads:

$$p(\rho, e, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 p_{\infty 1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2 \gamma_2 p_{\infty 2}}{\gamma_2 - 1} \right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}} \tag{3.4}$$

The mixture equation of state (3.4) closes System (3.2). Obviously, the formulation is valid for any pure fluid convex EOS.

Let us mention that the volume fraction equation of System (3.2), when heat transfer and mass transfer are added to the relaxation processes reads (Saurel et al., 2008):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1^0}{\partial t} + u^0 \frac{\partial \alpha_1^0}{\partial x} &= \alpha_1^0 \alpha_2^0 \rho^0 c_w^{02} \left(\frac{1}{\rho_1^0 c_1^{02}} - \frac{1}{\rho_2^0 c_2^{02}} \right) \frac{\partial u^0}{\partial x} \\
&+ \rho^0 c_w^{02} \frac{\alpha_1^0 \alpha_2^0}{\rho_1^0 c_1^{02} \rho_2^0 c_2^{02}} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1^0} H_1 (T_1^0 - T_1^0) - \frac{\Gamma_2}{\alpha_1^0} H_2 (T_1^0 - T_2^0) \right) + \rho^0 c_w^{02} \frac{1}{\rho_1^0 \rho_2^0} \left(\frac{\alpha_1^0}{c_1^{02}} + \frac{\alpha_2^0}{c_2^{02}} \right) \dot{m}_1
\end{aligned} \tag{3.5}$$

where H_1 and H_2 , heat exchanges coefficients and \dot{m}_1 is the mass transfer term present in the

mass equation of phase 1: $\frac{\partial (\alpha \rho)_1^0}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_1^0 u^0}{\partial x} = \dot{m}_1$.

The opposite term is obviously present in the second mass equation. The structure of Equation (3.5) will be helpful to interpret the various terms which appear during interpenetration effects modelling.

The Kapila model (2001) is able to deal with material interfaces computation, without using any interface reconstruction scheme or front tracking technique. It also deals efficiently with mixtures of materials evolving with a unique velocity and unique pressure, in the presence of thermal disequilibrium. With the help of equation (3.5), it is able to deal with evaporation/cavitation fronts (Saurel et al., 2008) as well as detonation waves (Petitpas et al., 2009).

II.3 Drift force and velocity fluctuations

The phases' momentum equations resulting of the preceding asymptotic analysis read:

$$\begin{aligned}\alpha_1^0 \left(\rho_1^0 \frac{du^0}{dt} + \frac{\partial p^0}{\partial x} \right) &= \lambda_0 (u_2^1 - u_1^1) + \alpha_1^0 \rho_1^0 g \\ \alpha_2^0 \left(\rho_2^0 \frac{du^0}{dt} + \frac{\partial p^0}{\partial x} \right) &= -\lambda_0 (u_2^1 - u_1^1) + \alpha_2^0 \rho_2^0 g\end{aligned}\tag{3.6}$$

As only the mixture momentum equation is needed in System (3.2) these two equations are summed up and the fluctuation terms u_1^1 and u_2^1 vanish. Following Guillard and Duval (2007) determination of these fluctuations is however possible. Let us make the difference of these two equations:

$$u_2^1 - u_1^1 = \frac{1}{\lambda_0} \rho^0 Y_1^0 Y_2^0 \left(\frac{1}{\rho_1^0} - \frac{1}{\rho_2^0} \right) \frac{\partial p^0}{\partial x}\tag{3.7}$$

Where the mass fraction are defined by: $Y_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho}$.

In the following we will denote by $\mathbf{w} = \mathbf{u}_2^1 - \mathbf{u}_1^1$ the relative velocity.

We now express some conservation constraints. System (3.2) enables determination of variables: α_1^0 , $(\alpha \rho)_1^0$, $(\alpha \rho)_2^0$, $\rho^0 u^0$ and $\rho^0 E^0$. In the first-order model we are going to develop, we will determine the same variables with better accuracy. To do this, we ask that conservative mixture variables be strictly conserved between the model without approximation (3.1) and the first-order model. In other words, we ask:

$$\begin{aligned}\rho^r &= \rho \\ (\rho u)^r &= \rho u \\ (\rho E)^r &= \rho E\end{aligned}\tag{3.8}$$

The reduced variables are indexed by a 'r'.

System (3.8) can be understood in the following way. Variable on right of the sign '=' are those without approximation. Variable on the left will be those obtained with the first order reduced model. We ask strict equality between these variables for all variables that must conserve.

System (3.8) implies some constraints on the fluctuations:

$$\begin{aligned}\rho &= \rho^r + \varepsilon \rho^1, \text{ implying } \rho^1 = 0, \\ \rho u &= (\rho u)^r + \varepsilon (\rho u)^1, \text{ implying } u^1 = 0, \\ \rho E &= (\rho E)^r + \varepsilon (\rho E)^1, \text{ implying } E^1 = 0.\end{aligned}$$

Expanding the left hand side of the second condition, with the help of the mass conservation, this constraint yields:

$$\begin{aligned}\rho u &= \alpha_1 \rho_1 u_1 + \alpha_2 \rho_2 u_2 = \left((\alpha_1 \rho_1)^0 + \varepsilon (\alpha_1 \rho_1)^1 \right) (u_1^0 + \varepsilon u_1^1) + \left((\alpha_2 \rho_2)^0 + \varepsilon (\alpha_2 \rho_2)^1 \right) (u_2^0 + \varepsilon u_2^1) \\ &= \left((\alpha_1 \rho_1)^0 + (\alpha_2 \rho_2)^0 \right) u^0 + \varepsilon \left((\alpha_1 \rho_1)^0 u_1^1 + (\alpha_2 \rho_2)^0 u_2^1 \right) + \varepsilon^2 \left((\alpha_2 \rho_2)^1 u_2^1 + (\alpha_1 \rho_1)^1 u_1^1 \right)\end{aligned}$$

Neglecting the second order term and identifying with the momentum conservation constraint, the following identity is obtained:

$$(\alpha_1 \rho_1)^0 u_1^1 + (\alpha_2 \rho_2)^0 u_2^1 = 0,$$

Besides,

$$Y_1^0 u_1^1 + Y_2^0 u_2^1 = 0. \quad (3.9)$$

Combining (3.7) and (3.9), velocity fluctuations are obtained:

$$\begin{aligned} u_1^1 &= -Y_2^0 w \\ u_2^1 &= Y_1^0 w \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\text{With } w = \frac{1}{\lambda_0} \rho^0 Y_1^0 Y_2^0 \left(\frac{1}{\rho_1^0} - \frac{1}{\rho_2^0} \right) \frac{\partial p^0}{\partial x}.$$

These velocity fluctuations are now used for the building of the first order model, with interpenetration (or drift) effects.

III. Derivation of the flow model with interpenetration effects

The starting point of the following derivation corresponds to a system made of mass equations of System (3.1), associated mixture momentum and mixture energy equations:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho u)_1}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho u)_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\alpha\rho u)_1 + (\alpha\rho u)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho u^2 + \alpha p)_1 + (\alpha\rho u^2 + \alpha p)_2}{\partial x} &= \rho g \\ \frac{\partial(\alpha\rho E)_1 + (\alpha\rho E)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha(\rho E + p)u)_1 + (\alpha(\rho E + p)u)_2}{\partial x} &= ((\alpha\rho u)_1 + (\alpha\rho u)_2)g \end{aligned} \quad (3.11)$$

Using the expansion for the velocities ($u_1 = u^r + \epsilon u_1^1$, $u_2 = u^r + \epsilon u_2^1$) as well as the conservation constraints (3.8) and the equilibrium constraints (3.3) and neglecting second-order terms, the following first-order system is obtained:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} - \frac{\partial\epsilon\rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} + \frac{\partial\epsilon\rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial\rho u}{\partial t} + \frac{\partial\rho u^2 + p}{\partial x} &= \rho g \\ \frac{\partial\rho E}{\partial t} + \frac{\partial(\rho E + p)u}{\partial x} + \frac{\partial\epsilon\rho Y_1 Y_2 w(h_2 - h_1)}{\partial x} &= \rho u g \end{aligned} \quad (3.12)$$

Closure of this system requires an evolution equation for the volume fraction equation. Such volume fraction equation, when combined with System (3.12) has to be in agreement with the entropy inequality. This requirement will serve as a guide for the derivation.

III.1 Volume fraction and entropy equations

Following Saurel et al. (2008), determination of the entropy equations can be done on the basis of a system composed of:

- the mixture energy equation,
- the pressure equilibrium constraint.

Let us examine the mixture energy equation. Combination of mass, momentum and energy equation of System (3.12) yield the following equation:

$$\frac{de}{dt} + p \frac{dv}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial\epsilon\rho Y_1 Y_2 w(h_2 - h_1)}{\partial x} = 0$$

Masses equations can be written as:

$$\frac{dY_1}{dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x}$$

$$\frac{dY_2}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x}$$

The mixture energy thus becomes:

$$Y_1 T_1 \frac{ds_1}{dt} + Y_2 T_2 \frac{ds_2}{dt} + \varepsilon Y_1 Y_2 w \frac{\partial (h_2 - h_1)}{\partial x} = 0$$

It is worth to mention that this equation can also be written as:

$$Y_1 T_1 \frac{d_1 s_1}{dt} + Y_2 T_2 \frac{d_2 s_2}{dt} + \varepsilon Y_1 Y_2 w \left(\frac{\partial h_2}{\partial x} - T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} - \left(\frac{\partial h_1}{\partial x} - T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} \right) \right) = 0$$

Where $\frac{d_k}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_k \frac{\partial}{\partial x}$, $k = 0, 1, 2$.

Using, $\frac{1}{\rho_k} \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial h_k}{\partial x} - T_k \frac{\partial s_k}{\partial x}$ and $w = \frac{1}{\lambda_0} \rho Y_1 Y_2 \left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2} \right) \frac{\partial p}{\partial x}$, we get :

$$Y_1 T_1 \frac{d_1 s_1}{dt} + Y_2 T_2 \frac{d_2 s_2}{dt} = \frac{\varepsilon \lambda_0}{\rho} w^2 \quad (3.13)$$

On another hand, the pressure equilibrium constraint,

$$p_1(\rho_1, s_1) = p_2(\rho_2, s_2),$$

under differential form becomes:

$$c_1^2 \frac{d\rho_1}{dt} + \rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{ds_1}{dt} = c_2^2 \frac{d\rho_2}{dt} + \rho_2 \Gamma_2 T_2 \frac{ds_2}{dt},$$

with,

$$\left(\frac{\partial p_k}{\partial s_k} \right)_{\rho_k} = \rho_k \Gamma_k T_k \quad \text{and} \quad \left(\frac{\partial p_k}{\partial \rho_k} \right)_{s_k} = c_k^2.$$

With the help of the mass equations it becomes:

$$\rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{d_1 s_1}{dt} - \rho_2 \Gamma_2 T_2 \frac{d_2 s_2}{dt} = \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \times A \quad (3.14)$$

$$\text{With } A = \frac{d\alpha_1}{dt} - \rho c_w^2 \left[\alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{1}{\rho_1 c_1^2} - \frac{1}{\rho_2 c_2^2} \right) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} \right. \\ \left. + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 u_R T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right]$$

Determination of the entropy equations results in solving the system composed of equations (3.13) and (3.14):

$$Y_1 T_1 \frac{d_1 s_1}{dt} + Y_2 T_2 \frac{d_2 s_2}{dt} = \frac{\varepsilon \lambda_0}{\rho} w^2$$

$$\rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{d_1 s_1}{dt} - \rho_2 \Gamma_2 T_2 \frac{d_2 s_2}{dt} = \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \times A$$

It results in:

$$\alpha_1 \rho_1 \frac{d_1 s_1}{dt} = \frac{\Gamma}{T_1} \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \left\{ \varepsilon \lambda_0 w^2 + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \frac{1}{\rho c_w^2} \times A \right\}$$

$$\alpha_2 \rho_2 \frac{d_2 s_2}{dt} = \frac{\Gamma}{T_2} \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \left\{ \varepsilon \lambda_0 w^2 + \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \frac{1}{\rho c_w^2} \times A \right\}$$

$$\text{with } \frac{1}{\Gamma} = \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2}.$$

Therefore, the mixture entropy equation reads:

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1 + \alpha_2 \rho_2 s_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_1 \rho_1 s_1 + \alpha_2 \rho_2 s_2) u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w (s_2 - s_1)}{\partial x} =$$

$$\Gamma \left\{ \frac{\alpha_1}{\Gamma_1 T_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2 T_2} \right\} \varepsilon \lambda_0 w^2 + \Gamma \left\{ \frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_2} \right\} \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \frac{1}{\rho c_w^2} \times A$$

In order that the entropy inequality be fulfilled the term A must be positive or zero. Let us assume it is zero. The corresponding volume fraction equation reads:

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \rho c_w^2 \left[\begin{aligned} & \alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{1}{\rho_1 c_1^2} - \frac{1}{\rho_2 c_2^2} \right) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} \\ & + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \end{aligned} \right] \quad (3.15)$$

The right-hand side of this last equation has to be compared with Equation (II.5). Two terms need interpretation:

$$* \rho c_w^2 \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x}$$

$$* \rho c_w^2 \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right).$$

The first term is similar to the term $\rho c_w^2 \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \dot{m}_1$ in (3.5). This term represents the rate of volume fraction change in the presence of mass transfer. In the present model, the mass transfer appears in differential form $\left(\frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} \right)$, but the meaning of the multiplying factor is the same as in (3.5). It represents the inverse of an interfacial density. As detailed in Saurel et al. (2008) in the context of phase transition modelling, the mechanical relaxation process that occurs during mass transfer is isentropic. Indeed, mass transfer produces pressure fluctuations in the phases, inducing acoustic wave propagation, which is responsible for pressure equilibration. These acoustic waves being isentropic, the corresponding volume fraction change is an isentropic process.

The second term is the analogue of $\rho^0 c_w^{02} \frac{\alpha_1^0 \alpha_2^0}{\rho_1^0 c_1^{02} \rho_2^0 c_2^{02}} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1^0} H_1 (T_1^0 - T_1^0) - \frac{\Gamma_2}{\alpha_1^0} H_2 (T_1^0 - T_2^0) \right)$ in (3.5).

In the present context, the fluids are assumed inviscid and non heat conductive. Thus, conventional heat exchanges are absent. But, generalized heat fluxes $\varepsilon \rho Y_1 Y_2 u_R T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x}$ and $\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x}$ are present. They correspond to the heat transported by the relative motion,

producing phases' dilatation. The mechanical relaxation process that occurs during dilatation is also achieved, as previously by acoustic wave propagation. Therefore, it is isentropic too.

The assumption of vanishing coefficient A in the mixture entropy equation is thus justified on the basis of the acoustic processes that occur during pressure relaxation accompanying differential mass transfer and generalized heat fluxes.

The entropy equations become:

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1 u}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w s_1}{\partial x} = \frac{1}{T_1} \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 s_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 s_2 u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w s_2}{\partial x} = \frac{1}{T_2} \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2$$

And the mixture entropy agrees with the second law of thermodynamics:

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1 + \alpha_2 \rho_2 s_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_1 \rho_1 s_1 + \alpha_2 \rho_2 s_2) u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w (s_2 - s_1)}{\partial x} = \left(\frac{1}{T_1} \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} + \frac{1}{T_2} \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \right) \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2 \geq 0$$

Therefore, the overall system summarized hereafter is thermodynamically consistent:

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_1}{dt} &= \rho c_w^2 \left[\alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{1}{\rho_1 c_1^2} - \frac{1}{\rho_2 c_2^2} \right) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right] \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_1 u}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_2 u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} &= \rho g \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p) u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w (h_2 - h_1)}{\partial x} &= \rho u g \end{aligned} \tag{3.16}$$

$$\text{With } w = \frac{1}{\lambda_0} \rho Y_1 Y_2 \left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2} \right) \frac{\partial p}{\partial x} \text{ and } p(\rho, e, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 p_{\infty 1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2 \gamma_2 p_{\infty 2}}{\gamma_2 - 1} \right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}.$$

System (3.16) constitutes the interpenetration/drift model. This model can also be used to describe multiphase mixtures evolving in velocity and temperature disequilibrium. In this context, conventional heat exchanges, as well as mass transfer modelling have to be addressed. This extension is done in the Annex A.

System (3.16) is of mixed type. It contains hyperbolic contributions as well as elliptic ones. The hyperbolic type terms exactly correspond to the Kapila model (2001), that is to say the model presented in the previous chapter. Elliptic type terms appear as a consequence of the drift velocity w that involves a pressure gradient.

For the sake of numerical resolution, in particular regarding stability requirements, it is important to determine the pressure evolution equation.

III.2 Pressure equation

The mixture internal energy equation can be derived from System (3.16):

$$\frac{\partial (\alpha_1 \rho_1 e_1 + \alpha_2 \rho_2 e_2)}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_1 \rho_1 e_1 + \alpha_2 \rho_2 e_2) u}{\partial x} + p \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w (h_2 - h_1)}{\partial x} = 0$$

With the help of the mass equations it becomes:

$$\alpha_1 \rho_1 \frac{de_1}{dt} + \alpha_2 \rho_2 \frac{de_2}{dt} + p \frac{\partial u}{\partial x} + (e_1 - e_2) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w (h_2 - h_1)}{\partial x} = 0$$

Thus,

$$\left(\frac{\alpha_2}{\Gamma_2} + \frac{\alpha_1}{\Gamma_1}\right) \frac{dp}{dt} + \left(\left(\frac{\alpha_2 p}{\rho_2} - \frac{\alpha_2 c_2^2}{\Gamma_2}\right) \frac{d\rho_2}{dt} + \left(\frac{\alpha_1 p}{\rho_1} - \frac{\alpha_1 c_1^2}{\Gamma_1}\right) \frac{d\rho_1}{dt}\right) + p \frac{\partial u}{\partial x} + (e_1 - e_2) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w (h_2 - h_1)}{\partial x} = 0$$

Using once more the mass equations under the form:

$$\frac{d\rho_1}{dt} = \frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} - \frac{\rho_1}{\alpha_1} \frac{d\alpha_1}{dt} - \rho_1 \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$\frac{d\rho_2}{dt} = -\frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} - \frac{\rho_2}{\alpha_2} \frac{d\alpha_2}{dt} - \rho_2 \frac{\partial u}{\partial x}$$

We obtain :

$$\left(\frac{\alpha_2}{\Gamma_2} + \frac{\alpha_1}{\Gamma_1}\right) \frac{dp}{dt} + \left(\frac{c_2^2}{\Gamma_2} - \frac{c_1^2}{\Gamma_1}\right) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} + \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} - \frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2}\right) \frac{d\alpha_1}{dt} + \left(\frac{\alpha_2 \rho_2 c_2^2}{\Gamma_2} + \frac{\alpha_1 \rho_1 c_1^2}{\Gamma_1}\right) \frac{\partial u}{\partial x} + \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w \frac{\partial (h_2 - h_1)}{\partial x} = 0$$

Inserting the volume fraction equation it becomes:

$$\frac{dp}{dt} + \rho c_w^2 \frac{\partial u}{\partial x} + \rho c_w^2 (v_2 - v_1) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} + \Gamma \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w \left(\frac{\partial (h_2 - h_1)}{\partial x} + \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\Gamma_1} - \frac{\rho_2 c_2^2}{\Gamma_2}\right) \frac{\left(\frac{\Gamma_1 T_1}{\alpha_1} \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2 T_2}{\alpha_2} \frac{\partial s_2}{\partial x}\right)}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} \right) = 0$$

Using again $\frac{\partial h_k}{\partial x} = v_k \frac{\partial p}{\partial x} + T_k \frac{\partial s_k}{\partial x}$ and $w = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho \lambda_0} [\rho_2 - \rho_1] \frac{\partial p}{\partial x}$ we obtain:

$$\begin{aligned} & \frac{dp}{dt} + \rho c_w^2 \frac{\partial u}{\partial x} + \rho c_w^2 (v_2 - v_1) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} + \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w \rho c_w^2 \left(\frac{\Gamma_2 T_2}{\rho_2 c_2^2} \frac{\partial s_2}{\partial x} - \frac{\Gamma_1 T_1}{\rho_1 c_1^2} \frac{\partial s_1}{\partial x} \right) \\ & = \Gamma \frac{\varepsilon}{\lambda_0} \left(\rho Y_1 Y_2 (v_2 - v_1) \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) \right)^2 \end{aligned} \quad (3.17)$$

The term $\rho c_w^2 \frac{\partial u}{\partial x}$ is conventional in the Kapila et al. (2001) model and corresponds to the compressibility effects due to the velocity divergence.

The term $\rho c_w^2 (v_2 - v_1) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x}$ is analogous to the preceding term in zones of interpenetration.

The term $\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w \rho c_w^2 \left(\frac{\Gamma_2 T_2}{\rho_2 c_2^2} \frac{\partial s_2}{\partial x} - \frac{\Gamma_1 T_1}{\rho_1 c_1^2} \frac{\partial s_1}{\partial x} \right)$ corresponds to compression effects due to dilatation ones, induced by heat fluxes transported by the diffused mass : $\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_k \frac{\partial s_k}{\partial x}$.

The last term $\Gamma \frac{\varepsilon}{\lambda_0} \left(\rho Y_1 Y_2 (v_2 - v_1) \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) \right)^2$ is a creation one, due to interphase friction.

Hyperbolic character of the model appears in the term $\rho c_w^2 \frac{\partial u}{\partial x}$ while its diffusive character appears in $\rho c_w^2 (v_2 - v_1) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x}$. Time step restrictions will be linked to these two terms.

Extra terms are present and involve mixed products of first order derivatives. They will pose numerical difficulties. To circumvent them a relaxation strategy will be adopted. Such a strategy was proposed in Saurel et al. (2009) for the numerical approximation of the non-conservative

term $\rho c_w^2 \alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{1}{\rho_1 c_1^2} - \frac{1}{\rho_2 c_2^2} \right) \frac{\partial u}{\partial x}$ in the volume fraction equation. This method is also

summarized in the previous chapter. The same type of strategy will be adopted in the following for both hyperbolic and diffusive part of the equations. This method needs the phases internal energy equations that we are going to determine.

III.3 Internal energy equations

We start from a given phase entropy equation under the form:

$$\alpha_1 \rho_1 \frac{d_1 s_1}{dt} = \frac{1}{T_1} \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2$$

With the help of Gibbs identity it becomes:

$$\alpha_1 \rho_1 \left(\frac{d_1 e_1}{dt} - \frac{p}{\rho_1^2} \frac{d_1 \rho_1}{dt} \right) = \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2$$

The mass equation for phase 1 can be written as:

$$\frac{d_1 \rho_1}{dt} = - \frac{\rho_1}{\alpha_1} \left(\frac{d\alpha_1}{dt} - \varepsilon Y_2 w \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \right) - \rho_1 \frac{\partial (u - \varepsilon Y_2 w)}{\partial x}$$

The internal energy equation becomes:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\alpha \rho)_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_1 e_1 u}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w h_1}{\partial x} + \alpha_1 p \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho_1} (\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w) \frac{\partial p}{\partial x} \\ & = -p \frac{d\alpha_1}{dt} + \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2 \end{aligned}$$

Similarly for phase 2 we obtain:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\alpha \rho)_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_2 e_2 u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w h_2}{\partial x} + \alpha_2 p \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{\rho_2} (\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w) \frac{\partial p}{\partial x} \\ & = -p \frac{d\alpha_2}{dt} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2 \end{aligned}$$

(3.18)

It can be checked easily that the mixture total energy conservation is preserved.

Equations (3.18) will be particularly useful for the numerical approximation of System (3.16).

IV. Numerical method

The system to solve can be written as:

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_1 e_1 u}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w h_1}{\partial x} + \alpha_1 p \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho_1} (\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w) \frac{\partial p}{\partial x} = -p \frac{d\alpha_1}{dt} + \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_2 e_2 u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w h_2}{\partial x} + \alpha_2 p \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{\rho_2} (\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w) \frac{\partial p}{\partial x} = -p \frac{d\alpha_2}{dt} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_1 u}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_2 u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} = \rho g$$

(3.19)

The right hand side of the internal energy equations can be expanded with the help of the volume fraction equation:

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \rho c_w^2 \left[\alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{1}{\rho_1 c_1^2} - \frac{1}{\rho_2 c_2^2} \right) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \frac{\partial \epsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} \right. \\ \left. + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \epsilon \rho Y_1 Y_2 w T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \epsilon \rho Y_1 Y_2 w T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right]$$

However, as we will see later, such expansion is not convenient.

An extra equation results of System (3.19), as a consequence of internal energy equations and mixture momentum one:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p)u}{\partial x} + \frac{\partial \epsilon \rho Y_1 Y_2 w (h_2 - h_1)}{\partial x} = \rho u g$$

System (3.19) is consequently over-determined by the total energy equation. This last equation will be helpful especially to solve non-conservative terms and terms involving products of first order derivatives.

The method to solve System (3.19) deals with operator splitting. Hyperbolic transport is first solved, followed by a diffusion step.

IV.1 Hydrodynamic step

During this step, the aim is to solve:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\alpha \rho)_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_1 e_1 u}{\partial x} + \alpha_1 p \frac{\partial u}{\partial x} &= -p \frac{d\alpha_1}{dt} \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_2 e_2 u}{\partial x} + \alpha_2 p \frac{\partial u}{\partial x} &= -p \frac{d\alpha_2}{dt} \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_1 u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho)_2 u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \tag{3.20}$$

With:

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \rho c_w^2 \alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{1}{\rho_1 c_1^2} - \frac{1}{\rho_2 c_2^2} \right) \frac{\partial u}{\partial x},$$

and,

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p)u}{\partial x} = 0.$$

System (3.20) is precisely the Kapila et al. (2001) model. Its numerical approximation has been addressed by Murrone and Guillard (2005), Abgrall and Perrier (2006) and Saurel et al. (2009). We summarize hereafter the method of this last reference, as the same strategy will be used for both hyperbolic and diffusion steps.

The main difficulty with System (3.20) comes from the non conservative term in the volume fraction equation. To circumvent this difficulty, an extended system is used where the non conservative term is replaced by a relaxation one.

Extended system

System (3.20) is replaced by the following extended system:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 u}{\partial x} + \alpha_1 p_1 \frac{\partial u}{\partial x} &= -p_1 \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2 u}{\partial x} + \alpha_2 p_2 \frac{\partial u}{\partial x} &= p_1 \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u}{\partial x} = 0 \quad \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2)}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p)u}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{3.21}$$

with $p_1 = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2}$.

The solutions of (3.20) will be reached by considering that the relaxation parameter tends to infinity: $\mu \rightarrow +\infty$. The asymptotic limit of (3.21) in the limit $\mu \rightarrow +\infty$ corresponds indeed to (3.20) (see for example Saurel et al., 2009).

The extended system (3.21) is solved with a 3-step strategy:

- **Hyperbolic step:** Relaxation terms are removed and the hyperbolic System (3.21) is solved with a Godunov type method, with HLLC type Riemann solver (Toro et al., 1994). The details are given in Saurel et al., (2009) or in the previous chapter.
- **Pressure relaxation step:** Relaxation terms are restored and associated differential system is solved in the limit $\mu \rightarrow +\infty$. It consists in solving:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} &= -p_1 \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} &= p_1 \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} &= 0
\end{aligned}$$

Combination of the volume fraction equation, internal energy equations and mass equations results in internal energy ordinary differential equations that can be integrated between the end of the hyperbolic step to the pressure relaxed state. These equations read:

$$e_k(p, v_k) - e_k^0(p_k^0, v_k^0) + p(v_k - v_k^0) = 0, \quad k = 1, 2 \tag{3.22}$$

Where the state with superscript '0' corresponds to the hyperbolic step solution.

System (3.22) involves 3 unknowns, v_k ($k=1,2$) and p . Its closure is achieved using the saturation constraint, $\sum_k \alpha_k = 1$, or $\sum_k (\alpha p)_k v_k = 1$.

Here the $(\alpha\rho)_k$ are constants during the relaxation process. This system can be replaced by a single equation with a single unknown (p). With the help of the SG EOS,

$$p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k e_k - \gamma_k p_{\infty k},$$

Equations (3.4) become:

$$v_k(p) = v_k^0 \frac{p^0 + \gamma_k p_{\infty k} + (\gamma_k - 1)p_1^0}{p + \gamma_k p_{\infty k} + (\gamma_k - 1)p_1^0},$$

and thus the only equation to solve (for p) is:

$$\sum_k (\alpha\rho)_k v_k(p) = 1, k = 1, 2 \quad (3.23)$$

- Reset step

Solving equation (3.23) provides the relaxed pressure as well as volume fractions at mechanical equilibrium. Using these volume fractions, the pressure can be recomputed with the help of the mixture energy conservation equation and mixture equation of state (3.4):

$$p(\rho, e, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 p_{\infty 1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2 \gamma_2 p_{\infty 2}}{\gamma_2 - 1} \right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}.$$

This pressure is slightly different from the relaxed one obtained at the preceding relaxation step. The reason is that there is no hope to have accurate resolution of the non-conservative terms

$\alpha_k \rho_k \frac{\partial u}{\partial x}$ in the internal energy equations of System (3.21), particularly when shocks are present. Internal energy equations in the hyperbolic step are used just to predict the solution before pressure relaxation. The pressure relaxation step allows determination of volume fractions from this predicted solution. Correction of the solution is done with the mixture equation of state, based on mixture energy coming from the mixture total energy conservation law, solved unambiguously even when shocks are present.

Once the mixture pressure is determined from (3.4) the internal energies of the phases are reset with the help of their respective EOS before going to the next time step:

$$e_k = e_k(p, \alpha_k \rho_k, \alpha_k)$$

This 3-step algorithm is particularly efficient for interface problems (multifluid computations). It is able to predict dynamic appearance of interfaces, that result of strong expansion (cavitation effect). It has been extended to the computation of evaporation fronts in Saurel et al. (2008). Computation of shock propagation in multiphase mixtures as well as detonation waves in heterogenous materials has been addressed in Petitpas et al. (2009). Elastic solid-fluid coupling in extreme interface deformations has been addressed in Favrie et al. (2009) following the same strategy.

We now examine extension of the algorithm for the treatment of drift effects.

IV.2 Drift step

In this step, the aim is to solve:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\alpha\rho)_1 e_1}{\partial t} - \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w h_1}{\partial x} + \frac{1}{\rho_1} (\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w) \frac{\partial p}{\partial x} &= -p \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\alpha}{\Gamma_1} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w h_2}{\partial x} - \frac{1}{\rho_2} (\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w) \frac{\partial p}{\partial x} &= -p \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} - \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0
\end{aligned} \tag{3.24}$$

With,

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \rho c_w^2 \left[\frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right]$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w (h_2 - h_1)}{\partial x} = 0$$

and,

$$w = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho \lambda_0} [\rho_2 - \rho_1] \frac{\partial p}{\partial x}.$$

As seen previously with System (3.20) during the hydrodynamic step, the present system contains difficulties, due to the formulation of the drift velocity w that involves a pressure gradient. This term being multiplied by other pressure and entropy gradients, numerical difficulties appear.

The resolution method follows the same three steps as previously:

- Diffusion step and solution prediction.
During this step the various diffusion terms are considered but only part of the volume fraction equation is solved:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} - \rho c_w^2 \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} = 0 \tag{3.25}$$

- Pressure relaxation step
Remaining volume fraction equation terms are addressed with a relaxation method.
- Reset step and solution correction
Correction is done to preserve mixture total energy.

The two last steps are quite the same as those used during the hyperbolic step.

Diffusion step

The subsystem considered during this step reads:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= -\rho c_w^2 \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \frac{\partial -\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial -\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w h_1}{\partial x} - \frac{1}{\rho_1} (-\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w) \frac{\partial p}{\partial x} &= -p \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w h_2}{\partial x} - \frac{1}{\rho_2} (\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w) \frac{\partial p}{\partial x} &= -p \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial -\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial -\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w (h_1 - h_2)}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{3.26}$$

With, $w = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho \lambda_0} [\rho_2 - \rho_1] \frac{\partial p}{\partial x}$.

With the help of the mass equation the energy equation of phase 1 becomes:

$$(\alpha \rho)_1 \frac{\partial e_1}{\partial t} + -\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w \frac{\partial e_1}{\partial x} + p \frac{\partial -\frac{1}{\rho_1} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} = -p \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}$$

The mass equation can also be written as:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = -\frac{\alpha_1}{\rho_1} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x}$$

Thus the internal energy equation becomes:

$$(\alpha \rho)_1 \left(\frac{\partial e_1}{\partial t} - \frac{p}{\rho_1^2} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} \right) + (-\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w) \left(\frac{\partial e_1}{\partial x} - \frac{p}{\rho_1^2} \frac{\partial \rho_1}{\partial x} \right) = 0 \tag{3.27}$$

Or,

$$\frac{\partial s_1}{\partial t} - \frac{\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{(\alpha \rho)_1} \frac{\partial s_1}{\partial x} = 0 \tag{3.28}$$

And for the phase 2, we have

$$\frac{\partial s_2}{\partial t} + \frac{\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{(\alpha \rho)_1} \frac{\partial s_1}{\partial x} = 0 \tag{3.29}$$

The entropies equations are thus transport equations.

Mass equations

Explicit space and time integration is considered. Let's consider the mass equation for phase 1:

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial -\varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} = 0$$

With:

$$w = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho \lambda_0} [\rho_2 - \rho_1] \frac{\partial p}{\partial x}$$

Let us denote the mass flux by:

$$q_1 = \beta \frac{\partial p}{\partial x} \quad \text{with} \quad \beta = -\frac{\varepsilon}{\lambda_0} Y_1 Y_2 \alpha_1 \alpha_2 [\rho_2 - \rho_1]$$

Space and time integration of the mass equation becomes:

$$(\alpha\rho)_{1,i}^{n+1} = (\alpha\rho)_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{1,i+1/2}^* - q_{1,i-1/2}^*)$$

Where the mass fluxes at cell boundaries $i \pm 1/2$ have to be determined. The following conditions are used.

At a given cell boundary flux conservation must be preserved: $q_1^{*-} = q_1^{*+} = q_1^*$.

The diffusive character of the mass equation guarantees continuity of the pressure: $p^{*-} = p^{*+} = p^*$.

Expressed at cell boundary $i - 1/2$ the first condition reads:

$$\beta_L \frac{p^* - p_{i-1}}{\frac{\Delta x}{2}} = \beta_R \frac{p_i - p^*}{\frac{\Delta x}{2}}$$

It results in the intercell pressure determination:

$$p_{i-1/2}^* = \frac{\beta_R p_i + \beta_L p_{i-1}}{\beta_L + \beta_R} \quad (3.30)$$

And the corresponding flux is readily obtained:

$$q_{1,i-1/2}^* = \frac{2\beta_L \beta_R}{\beta_L + \beta_R} \frac{p_i - p_{i-1}}{\Delta x} \quad (3.31)$$

The pressure difference appearing in this formula uses the pressures determined at the end of the hydrodynamic step, composed of three sub-steps.

The mass equation for phase 2 is updated with:

$$(\alpha\rho)_{2,i}^{n+1} = (\alpha\rho)_{2,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (- (q_{1,i+1/2}^* - q_{1,i-1/2}^*))$$

Energy equations

Let us consider the internal energy equation for phase 1. It reads:

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial(-\varepsilon\rho Y_1 Y_2 w h_1)}{\partial x} - \frac{1}{\rho_1} (-\varepsilon\rho Y_1 Y_2 w) \frac{\partial p}{\partial x} = -p \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}$$

The entropy equation (3.28) is particularly interesting. It means that when the intercell pressure p^* is determined from (3.30) and when the mass flux q_1^* is determined from (3.31), the entropy is also determined at the cell boundary. At cell boundary $i-1/2$ it reads:

$$s_{1,i-1/2}^* = \begin{cases} s_{1,i-1} & \text{if } q_{1,i-1/2}^* \geq 0 \\ s_{1,i} & \text{otherwise} \end{cases}$$

In the context of the stiffened gas EOS it becomes:

$$\rho_{1,i-1/2}^* = \begin{cases} \rho_{1,i-1} \left(\frac{p_{i-1/2}^* + p_{\infty 1}}{p_{i-1} + p_{\infty 1}} \right)^{\frac{1}{\gamma_1}} & \text{if } q_{1,i-1/2}^* \geq 0 \\ \rho_{1,i} \left(\frac{p_{i-1/2}^* + p_{\infty 1}}{p_i + p_{\infty 1}} \right)^{\frac{1}{\gamma_1}} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.32)$$

From the intercell pressure and density, there is no difficulty to determine the remaining thermodynamic variables $e_{1,i-1/2}^*$ and $h_{1,i-1/2}^*$.

For the second phase, symmetric calculations are done with the help of the mass flux $q_{2,i-1/2}^*$. Let us remark that $q_2 = -q_1$.

$$\rho_{2,i-1/2}^* = \begin{cases} \rho_{2,i-1} \left(\frac{p_{i-1/2}^* + p_{\infty 2}}{p_{i-1} + p_{\infty 2}} \right)^{\frac{1}{\gamma_1}} & \text{if } q_{1,i-1/2}^* \leq 0 \\ \rho_{2,i} \left(\frac{p_{i-1/2}^* + p_{\infty 2}}{p_i + p_{\infty 2}} \right)^{\frac{1}{\gamma_1}} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.33)$$

The total energy evolution is thus approximated by:

$$(\rho E)_{1,i}^{n+1} = (\rho E)_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{1,i+1/2}^* (h_{1,i+1/2}^* - h_{2,i+1/2}^*) - q_{1,i-1/2}^* (h_{1,i-1/2}^* - h_{2,i-1/2}^*))$$

The internal energy equations contain extra terms that cannot be expressed under divergence form. Their accurate integration is thus an issue. The same type of issue was present with the non-conservative terms of the internal energy equations during the hydrodynamic step. The simplest approximation was retained for these terms, keeping in mind that these equations were just used to predict the solution. We adopt here the same strategy with the following simple approximation based on (3.27) and the volume fraction equation of (3.26). They read:

$$\alpha_{1,i}^{n+1} = \alpha_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\rho c_w^2 \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \right)_i^n (q_{1,i+1/2}^* - q_{1,i-1/2}^*)$$

$$\begin{aligned} (\alpha \rho e)_{1,i}^{n+1} &= (\alpha \rho e)_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{1,i+1/2}^* e_{1,i+1/2}^* - q_{1,i-1/2}^* e_{1,i-1/2}^*) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x} p_i^n \left(\frac{q_{1,i+1/2}^*}{\rho_{1,i+1/2}^*} - \frac{q_{1,i-1/2}^*}{\rho_{1,i-1/2}^*} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\rho \rho c_w^2 \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \right)_i^n (q_{1,i+1/2}^* - q_{1,i-1/2}^*) \end{aligned}$$

Similar approximation is done for the second phase.

$$\begin{aligned} (\alpha \rho e)_{2,i}^{n+1} &= (\alpha \rho e)_{2,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{2,i+1/2}^* e_{2,i+1/2}^* - q_{2,i-1/2}^* e_{2,i-1/2}^*) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x} p_i^n \left(\frac{q_{2,i+1/2}^*}{\rho_{2,i+1/2}^*} - \frac{q_{2,i-1/2}^*}{\rho_{2,i-1/2}^*} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\rho \rho c_w^2 \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \right)_i^n (q_{2,i+1/2}^* - q_{2,i-1/2}^*) \end{aligned}$$

The evolution during the diffusion step is thus achieved by:

$$\alpha_{1,i}^{n+1} = \alpha_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\rho c_w^2 \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \right)_i^n (q_{1,i+1/2}^* - q_{1,i-1/2}^*)$$

$$(\alpha \rho)_{1,i}^{n+1} = (\alpha \rho)_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{1,i+1/2}^* - q_{1,i-1/2}^*)$$

$$(\alpha \rho)_{2,i}^{n+1} = (\alpha \rho)_{2,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{1,i+1/2}^* - q_{1,i-1/2}^*)$$

$$\begin{aligned} (\alpha \rho e)_{1,i}^{n+1} &= (\alpha \rho e)_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{1,i+1/2}^* e_{1,i+1/2}^* - q_{1,i-1/2}^* e_{1,i-1/2}^*) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x} p_i^n \left(\frac{q_{1,i+1/2}^*}{\rho_{1,i+1/2}^*} - \frac{q_{1,i-1/2}^*}{\rho_{1,i-1/2}^*} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\rho \rho c_w^2 \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \right)_i^n (q_{1,i+1/2}^* - q_{1,i-1/2}^*) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\alpha \rho e)_{2,i}^{n+1} &= (\alpha \rho e)_{2,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{2,i+1/2}^* e_{2,i+1/2}^* - q_{2,i-1/2}^* e_{2,i-1/2}^*) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x} p_i^n \left(\frac{q_{2,i+1/2}^*}{\rho_{2,i+1/2}^*} - \frac{q_{2,i-1/2}^*}{\rho_{2,i-1/2}^*} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\rho \rho c_w^2 \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \right)_i^n (q_{2,i+1/2}^* - q_{2,i-1/2}^*) \end{aligned}$$

$$(\rho E)_{1,i}^{n+1} = (\rho E)_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{1,i+1/2}^* (h_{1,i+1/2}^* - h_{2,i+1/2}^*) - q_{1,i-1/2}^* (h_{1,i-1/2}^* - h_{2,i-1/2}^*))$$

With:

$$\begin{aligned}
p_{i-1/2}^* &= \frac{\beta_R p_i + \beta_L p_{i-1}}{\beta_L + \beta_R}, \\
w_i^n &= \left(\frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho \lambda_0} [\rho_2 - \rho_1] \right)_i^n \frac{p_{i+1/2}^* - p_{i-1/2}^*}{\Delta x}, \\
\beta &= -\frac{\varepsilon}{\lambda_0} Y_1 Y_2 \alpha_1 \alpha_2 [\rho_2 - \rho_1], \\
q_{1,i-1/2}^* &= \frac{2\beta_L \beta_R}{\beta_L + \beta_R} \frac{p_i - p_{i-1}}{\Delta x}, \\
\rho_{1,i-1/2}^* &= \begin{cases} \rho_{1,i-1} \left(\frac{p_{i-1/2}^* + p_{\infty 1}}{p_{i-1} + p_{\infty 1}} \right)^{\frac{1}{\gamma_1}} & \text{if } q_{1,i-1/2}^* \geq 0 \\ \rho_{1,i} \left(\frac{p_{i-1/2}^* + p_{\infty 1}}{p_i + p_{\infty 1}} \right)^{\frac{1}{\gamma_1}} & \text{otherwise} \end{cases},
\end{aligned}$$

and corresponding $e_{1,i-1/2}^*$ and $h_{1,i-1/2}^*$.

The two entropy production terms $\frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2$ and $\frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2$ have been added in the discrete internal energy equations as these terms are present in (3.24).

From the pressure evolution equation (3.17) the following stability criterion is obtained:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{\text{Max}_i (\rho c_w^2 (v_2 - v_1) \beta)_i}.$$

As only part of the full volume fraction equation is solved during this step, pressures become out of equilibrium at the end of the time step.

Pressure relaxation and reset steps

It now remains to solve:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \rho c_w^2 \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_1 e_1}{\partial t} &= -p \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_2 e_2}{\partial t} &= -p \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} &= 0
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Under the constraint $p_1 = p_2$. System (3.34) resolution is the same as those used during the pressure relaxation step of the hyperbolic step. The resolution procedure is exactly the same. The same remark holds for the reset step.

The present method thus contains two pressure relaxation steps and two resets steps based on mixture energy conservation and mixture equation of state.

IV.3 Gravity step

When gravity effects are considered, we have to solve now this system:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial(\alpha\rho)_1 e_1}{\partial t} &= 0 \\
 \frac{\partial(\alpha\rho)_2 e_2}{\partial t} &= 0 \\
 \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} &= 0 \\
 \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} &= 0 \\
 \frac{\partial\rho u}{\partial t} &= \rho g
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

The mixture energy equation is:

$$\frac{\partial\rho E}{\partial t} = \rho u g$$

Time integration of the momentum and energy equations becomes:

$$\begin{aligned}
 (\rho u)_i^{n+1} &= (\rho u)_i^n + \Delta t (\rho)_i^n g \\
 (\rho E)_i^{n+1} &= (\rho E)_i^n + \Delta t (\rho u)_i^n g.
 \end{aligned}$$

V. Test problems

We address in this section model and method validation with academic test problems having exact solutions. Both single velocity and multi velocities test problems are considered.

V.1. Fluid separation under gravity

Situations involving interpenetration effects are considered by taking $\epsilon > 0$ in System (3.16). The first test problem considers phase separation under gravity effects. Let's consider a tube filled with mixed air and water. The tube is vertical and closed on top and bottom. Its length is 1 m and the mesh has 100 cells. At initial time, the volume fraction of each phase is uniform and is equal to 0.5. The initial velocity is 0 m/s, the initial pressure of both phases is 10^5 Pa. The air density is $\rho_{\text{air}} = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, that of water is $\rho_{\text{water}} = 1000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. At $t=0$, we set up the gravity ($g = 10 \text{ m s}^{-2}$) so that the heavy fluid falls down, and the light one moves up. At steady state, the tube should be filled with pure air in the upper half domain and with water on the remaining half tube. We show in Figure 3.1 the volume fraction at time 2 seconds, then at time 8 seconds, 32s and last at time 250 seconds. The pressure field is also shown at last time 250s (Figure 3.2).

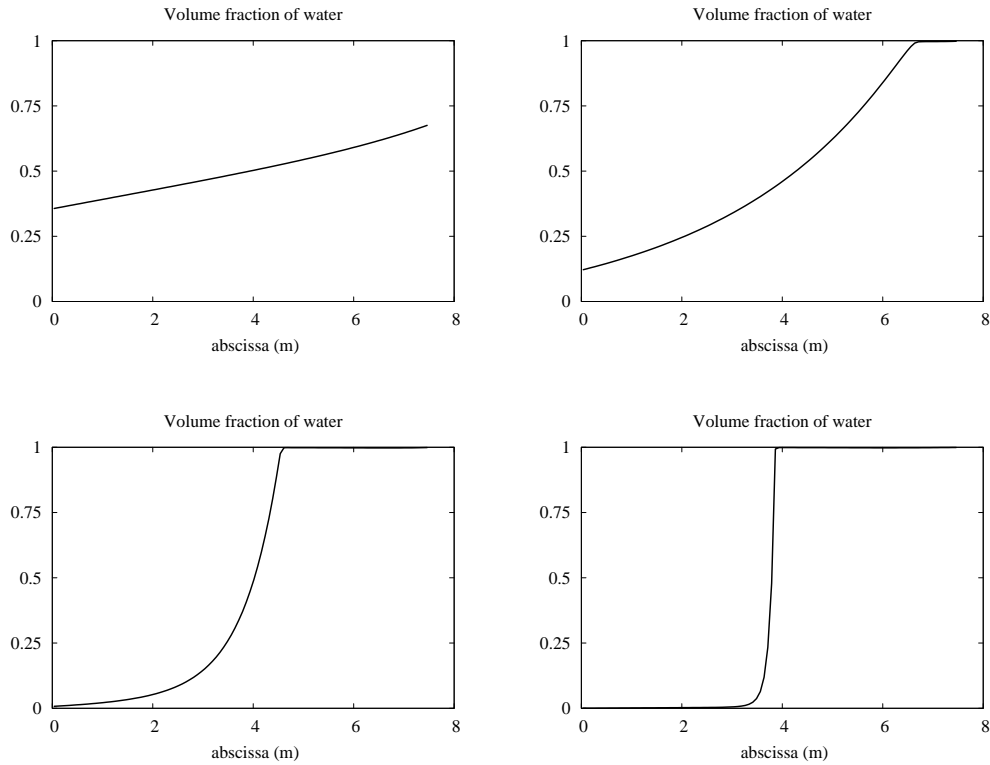


Figure 3.1 Sedimentation test. Computed volume fraction is shown at times 2, 8, 32 and 250 seconds and. These results show that the method is able to separate fluids under body forces and fulfils interface conditions when steady state is reached, starting from an ideal mixture.

Obviously, sedimentation effects occur very slowly than in real situations. A larger ϵ parameter should be used for more realistic results, but the computation time would be very long. The aim of this test is only to observe model's capability to separate fluids under gravity.

Gravity effects result in a pressure gradient as shown in the next figure:

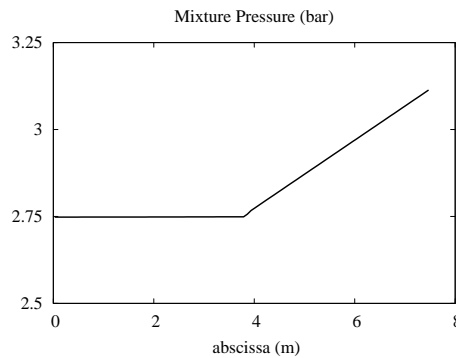


Figure 3.2 Sedimentation test. Pressure field at time 250 seconds

V.2. Water faucet

The water faucet problem consists in a 12 m length vertical tube. The top has a fixed liquid velocity (10 m/s) and a liquid volume fraction of 0.8. The bottom of the tube is opened to atmospheric conditions. Inlet and outlet pressures are set to the atmospheric one. Initially, the tube is filled with a uniform column of liquid water at a velocity of 10 m/s surrounded by a gas whose volume fraction is 0.2. From these initial conditions, gravity effects are considered and provoke liquid jet lengthening. The gas and liquid are treated as compressible fluids with the same parameters and equation of state as for the liquid-gas shock tube test problem. Approximate exact solution (3.36) and numerical results are shown in the Figure 3.3.

Several computations are done. First interpenetration effects are removed ($\epsilon = 0$) and the solution is shown as very different of the exact one. Then drift effects are increased successively: $\epsilon = 0.1$, $\epsilon = 1$ and $\epsilon = 10$. With increasing values of the interpenetration coefficient, the results become closer to the exact solution. This is not surprising as in the water faucet problem the drag force is very weak, the flow being stratified. Indeed, when ϵ increases, the drag force decreases and drift increases.

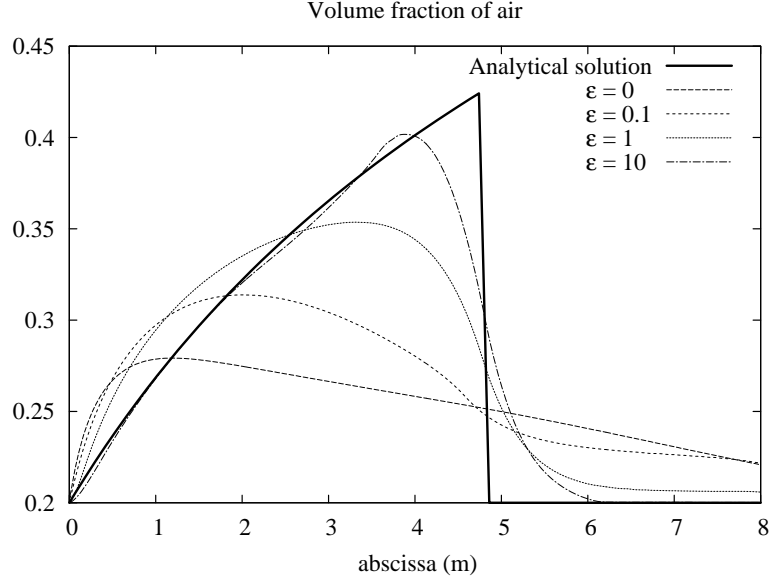


Figure 3.3 Water faucet test problem. The exact solution is shown with full lines and numerical solution with increasing values for the interpenetration coefficient are shown with symbols: $\epsilon = 0$, $\epsilon = 0.1$, $\epsilon = 1$ and $\epsilon = 10$. A 400 cells mesh is used and high order extension of the model (hydrodynamic step) is used with a Minmod Limiter. We observe results at time $t=0.4s$.

The ‘exact’ solution under the approximation of incompressible fluids is given by:

$$\alpha_{\text{air}} = \begin{cases} 1 - \frac{(1 - \alpha_{\text{air,inlet}})u_{\text{inlet}}}{\sqrt{2gx + u_{\text{inlet}}^2}} & \text{if } x \leq u_{\text{inlet}}t + \frac{g t^2}{2} \\ 0.2 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (3.36)$$

where u_{inlet} and $\alpha_{\text{air,inlet}}$ are respectively the inlet velocity (10 m/s) and the inlet air volume fraction (0.2).

The numerical solution shows excellent agreement with the exact one even if the fluid compressibility necessitates the use of small time steps. Under mesh refinement, the solution converges to the exact one, contrarily to models involving pressure equality between phases and having a conditional domain of hyperbolicity. To illustrate this behaviour, the drift parameter is kept constant ($\epsilon = 1$) and meshes involving increasing numbers of cells are considered in the Figure 3.4.

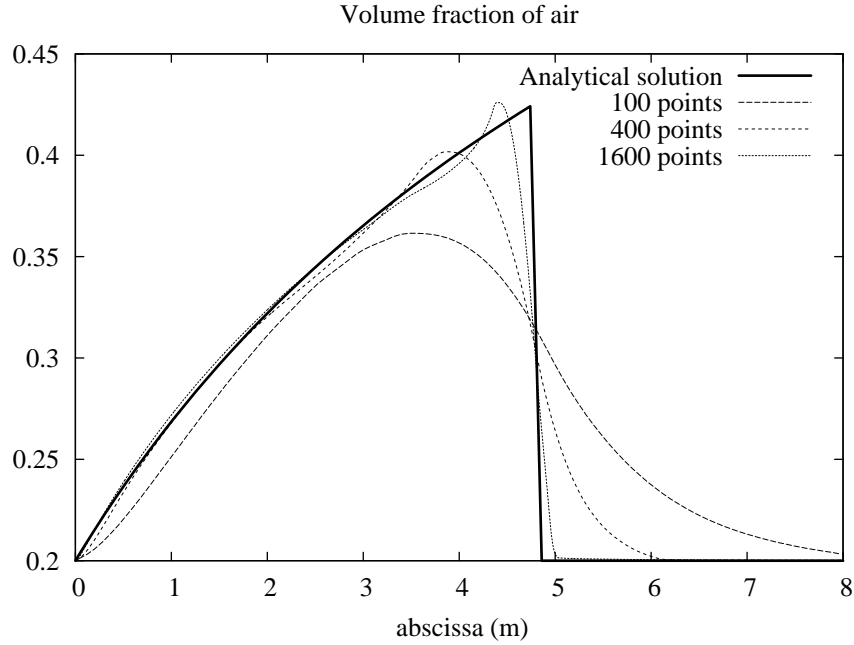


Figure 3.4. Mesh convergence study for the water faucet problem. Interpenetration parameter ϵ is set equal to 1. The exact solution is shown with full lines and numerical solutions with increasing mesh points (100, 400 and 1600) are shown with symbols. The numerical solution tends to the exact one. High order extension of the model (hydrodynamic step) is used with the Minmod limiter. We results are shown at time $t=0.4s$.

It is worth to mention that for the two preceding test problems, the interpenetration flow model (3.16) produces accurate results. This is also the case for the total non-equilibrium flow model (3.1) as shown in Abgrall and Saurel (2003). This remark no longer holds for the next test problems, involving interface instabilities and mixing zones.

VI. Unstable interface in a shock tube

We now address difficult test problems of compressible turbulent mixing induced by hydrodynamic instabilities such as Richtmyer-Meshkov instability (RMI). The considered flow situations are of major interest in the turbulent flows community, and have important applications in specific situations occurring in combustion and astrophysics. RMI occurs when perturbations on an interface separating two different gases grow due to the acceleration by a shock wave. Commonly, shock tube experiments are effective tools to provide a database for validation of such a situation. In the present work, we use results issued from shock tube experiments undertaken in our laboratory. Experiments were performed in 7 m horizontal shock tube with a $20 \times 20 \text{cm}^2$ square cross section. It was coupled with a high speed laser sheet device (1 frame = $100 \mu\text{s}$) which allowed a 2D visualization of the interface. The imaging technique was based on the Mie scattering of a copper vapour laser light source (532 nm) by small smoke particles seeded in one of the two test gases (air). To achieve experimentally the materialization of the initial interface, a thin nitrocellulosic membrane ($0.5 \mu\text{m}$ thick) was deposited on a stereolithographed grid support, computer-aided designed and constructed with chosen shape and dimensions. Generally, sinusoidal shape is adopted in order to have well defined initial conditions. The experimental device was described in more details in the papers of Houas et al. (2003) and Mariani et al. (2008).

A shock tube containing a light fluid (air) on the left and a heavy one (Sulphur hexafluoride - SF6) on the right, separated by a perturbed interface is considered, as shown in the Figure 3.5.

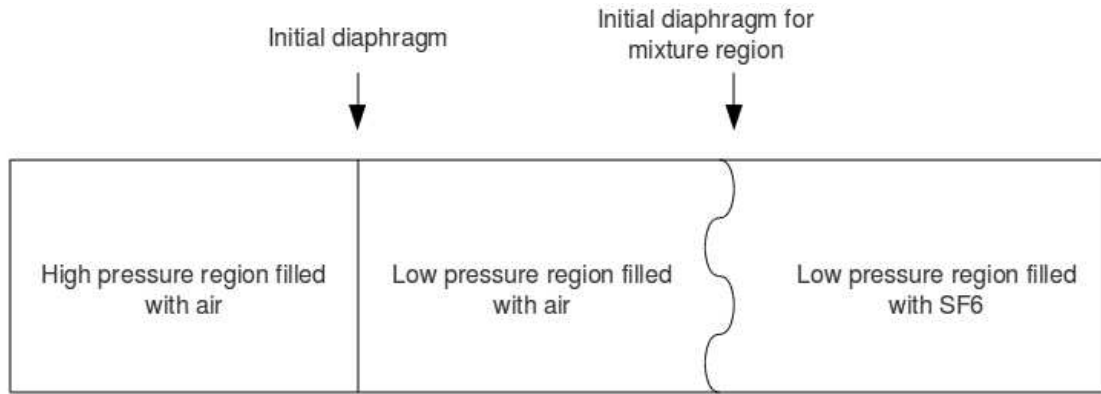


Figure 3.5 A shock tube containing a light fluid on the left and a heavy one on the right is considered. The two fluids are separated by a perturbed interface having a sinusoidal shape.

The light gas (air seeded with smoke of incense) and the heavy gas (Sulfur hexafluoride - SF6) were introduced on each side of the membrane by a constant circulation. The initial perturbation imposed by the grid was a sine line of wavelength 80 mm and amplitude 3 mm. RMI was produced by the interaction of a weak shock wave ($M=1.15$ in air) with the air/SF6 interface. When the shock wave interacts with the interface, a mixing zone is produced, as shown in the Figure 3.6.

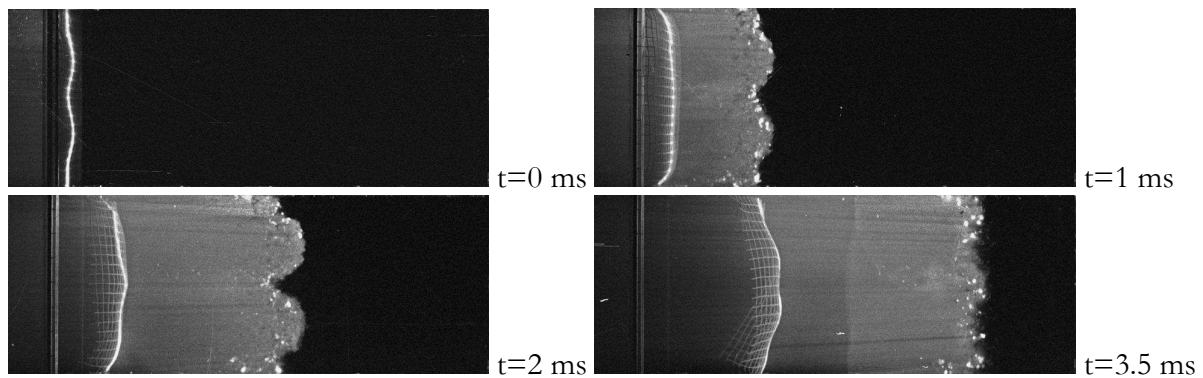


Figure 3.6 Laser sheet pictures showing the interaction of a shock wave ($M=1.15$), moving from left to right, with a stereolithographed sinusoidal interface ($\lambda_0 = 80\text{mm}$ and $\eta_0 = 3\text{mm}$) in the light/heavy configuration (air on the left and SF6 on the right).

The aim of the present test is to examine model capability for the computation of this mixture zone. Our goal is not to perform multi-D computations but to reproduce this mixing layer with a one-dimensional model, summarizing multi-dimensional interpenetration effects. The same goal was attempted by several research groups: Besnard and Harlow (1988), Youngs (1989), Chen et al. (1996), Glimm et al. (1999), Saurel et al. (2003) to cite a few.

To do this, experimental mixing layer width is recorded versus time and model predictions are compared with experimental data.

The experimental configuration consists in a shock tube with a high pressure chamber filled with air at the pressure of 4.78 atm and density 5.69kg/m^3 . The low pressure chamber is divided in two parts separated by the sinusoidal membrane. The left part is filled with air ($\gamma=1.4$) at the pressure of 1 atm and at density 1.19kg/m^3 . The right part is filled with SF6 ($\gamma=1.09$) at the same pressure and at density 5.99kg/m^3 . The sinusoidal membrane is located at 48 cm from the tube end.

The shock-interface interaction sets to motion the interface that thickens. The shock reflects on the tube end and part of this reflected wave is transmitted through the mixing zone, another part being reflected. The corresponding wave diagram is schematized in the Figure 3.7.

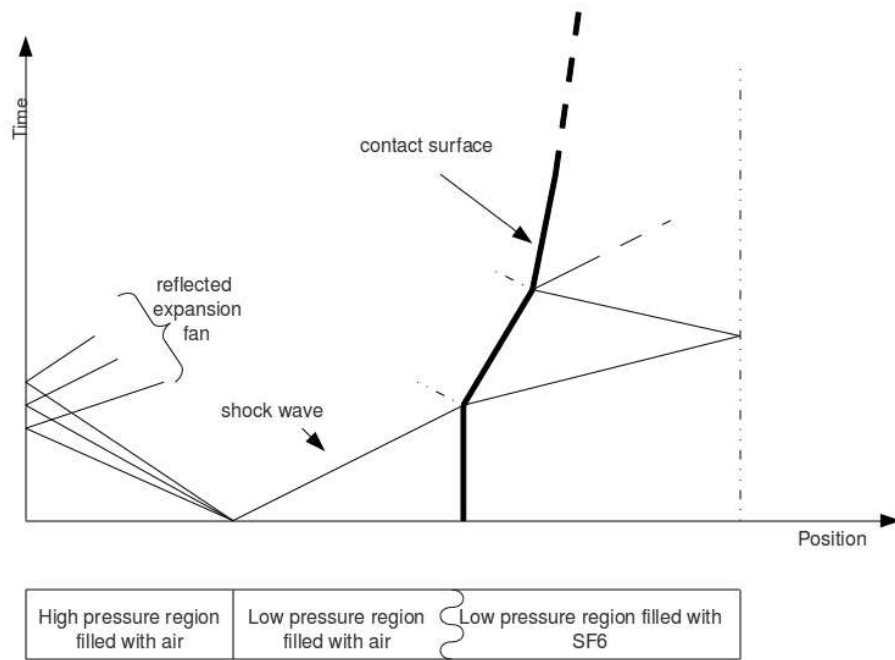


Figure 3.7 Wave diagram for the heavy-light fluid shock tube configuration.

In order to simplify, we consider a linear volume fraction evolution in the initial mixing zone. Several computations are done by varying the drift parameter (ϵ). The corresponding results are shown in the Figure 3.8.

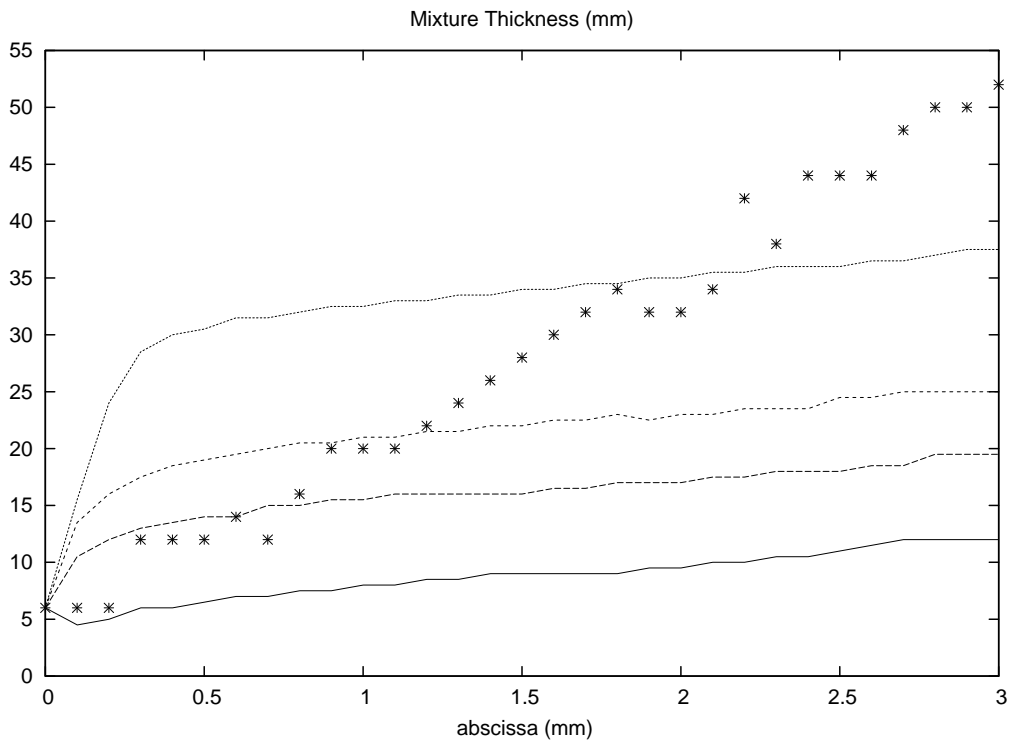


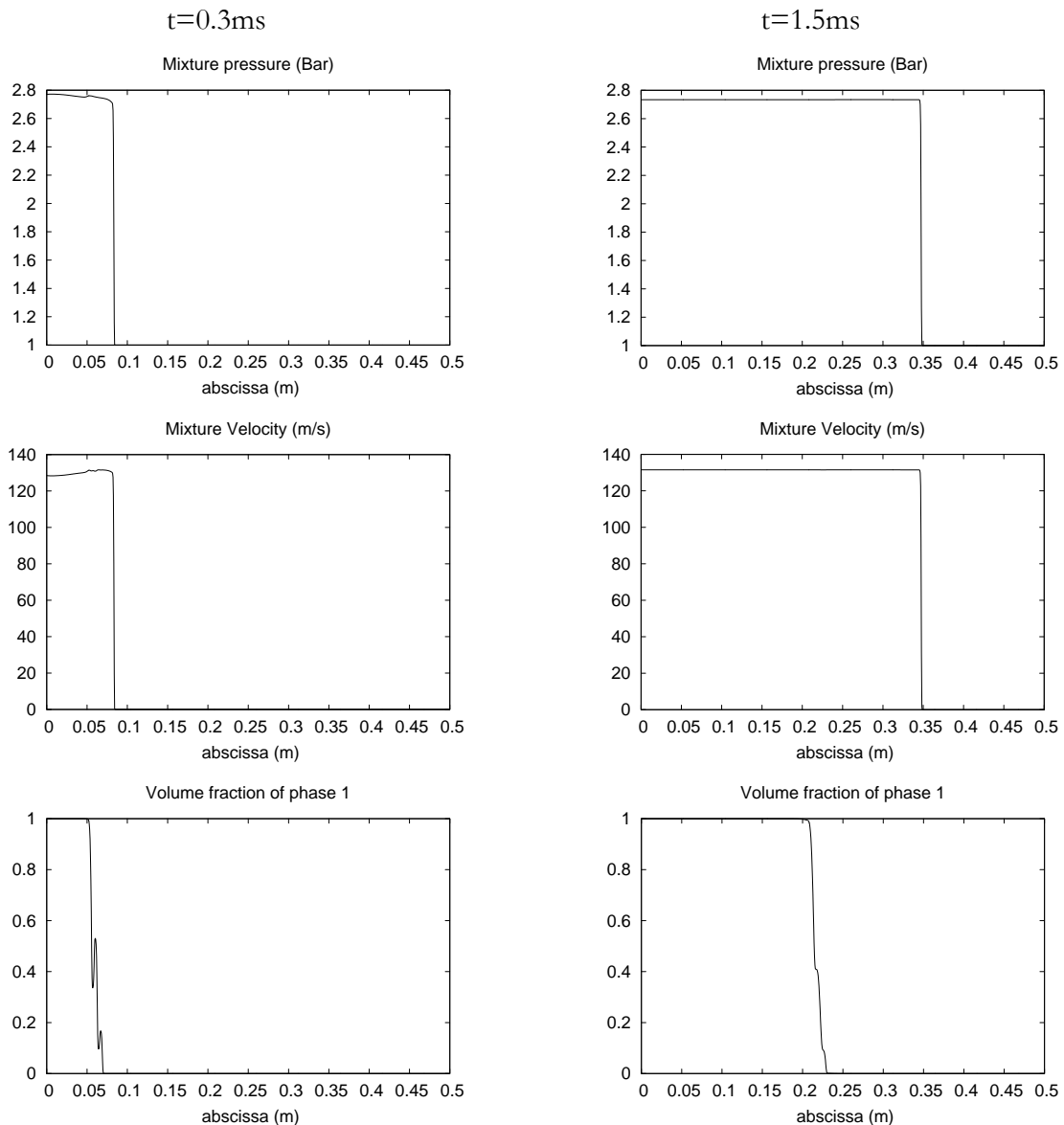
Figure 3.8 Experimental (crosses) and numerical (dash line) interface thickness versus time. The parameter ϵ is set equal to 1.10^{-2} , $1.25.10^{-2}$ and then $1.5.10^{-2}$. The results without drift ($\epsilon=0$) but with numerical diffusion are shown in solid line. A mesh with 1000 cells is used with higher order extension of the method.

We observe that the mixture zone thickness increases with ϵ . But, the numerical and experimental dynamics are very different. Indeed, the interface thickness in the experiments grows almost linearly, whereas the thickness of the numerical mixing layer first grows very fast and decreases dramatically

later. In fact, during the slow growth stage, the interface thickness growth matches the numerical diffusion one. Thus, drift effects are zero during the second stage. Examining the relative velocity definition, we understand it is zero in the pure phases as a consequence of the two volume fraction product presence. In addition, the pressure gradient must be non zero in order that the relative velocity be non zero too. So, the relative velocity is non zero only in the mixing layer when it is crossed by the shock wave. This corresponds to the stiff growth stage.

The relative velocity definition does not consider the fluids inertial effects. The model is thus incomplete. It must be completed in order to correctly calculate the mixing layer thickening in the RMI problem.

The computed variables are shown in the Figure 3.9 at two instants. The first instant, $t=0.3\text{ms}$, is just after the passage of the shock wave through the mixing zone. At the second instant, $t=1.5\text{ms}$, the shock wave is far from the mixing zone.



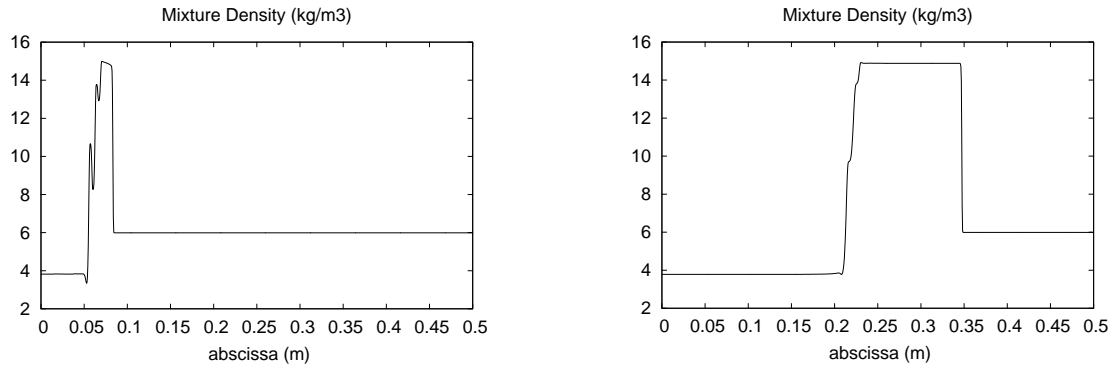


Figure 3.9 Pressure, velocity, volume fraction and mixture density computed profiles at times 0.3 ms 1.5 ms. The phase 1 corresponds to the air.

Comparison with results computed with the Kapila et al. (2001) model are shown at time $t=0.3\text{ms}$ in the Figure 3.10.

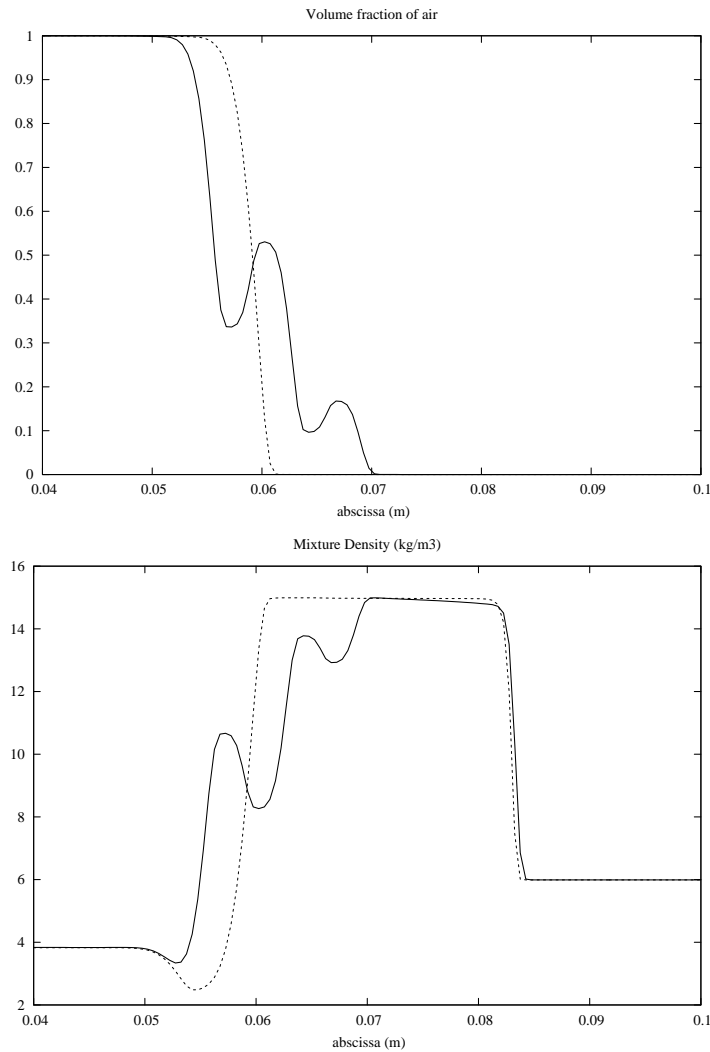


Figure 3.10 Volume fraction and density profiles at times 0.3 ms. The computation with $\epsilon=1.25$ is shown in solid line, the one without drift is shown in dash line. The mixing layer is thicker when it's computed with the interpenetration model but irregularities are observed.

VII. Conclusion

The model with interpenetration effects of Darcy type is able to reproduce some drift effects, but is unable to reproduce Richtmyer-Meshkov type mixing layers. After the shock wave crossing, the pressure gradient goes to zero and the relative velocity vanishes. Thus, interface thickening stops, while in the experiments it grows linearly. Another model has to be built, considering inertial drift effects.

Chapitre 4 : Modèle d'interpénétration par déséquilibre de vitesses

I. Introduction

In the drift model of the previous chapter, the relative velocity was nonzero only when the pressure gradient was nonzero in the mixing zone. That is to say, the drift effects had no inertia. Consequently, in the Rychmyer-Meshkov test problem, the mixing layer thickness didn't grow with the correct dynamics. So the relative velocity must be nonzero even after the shock wave passage through the mixing layer.

A new model is built, on the basis of the non-equilibrium Baer and Nunziato (1986) model and asymptotic reduction, but with slight changes compared to the model of the previous section.

II. Conventional two-phase hyperbolic model

The Baer and Nunziato (1986) model is a total non-equilibrium two-phase flow model. As previously, it corresponds to the starting point of the present analysis, as the new model will be a reduction, in the limit of stiff pressure relaxation of Baer-Nunziato one.

II.1 Non equilibrium model

Baer and Nunziato (1986) model consider each phase as compressible, evolving with its own velocity, temperature and pressure. It reads:

$$\begin{aligned}
 & \text{Phase 1} \\
 & \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} = \mu(p_1 - p_2) \\
 & \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u)_1}{\partial x} = 0 \\
 & \frac{\partial (\alpha \rho u)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u^2 + \alpha p)_1}{\partial x} = p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda(u_2 - u_1) \\
 & \frac{\partial (\alpha \rho E)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha (\rho E + p) u)_1}{\partial x} = p_1 u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \lambda u_1' (u_2 - u_1) - \mu p_1' (p_1 - p_2) \tag{4.1} \\
 & \text{Phase 2} \\
 & \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u)_2}{\partial x} = 0 \\
 & \frac{\partial (\alpha \rho u)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha \rho u^2 + \alpha p)_2}{\partial x} = p_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda(u_2 - u_1) \\
 & \frac{\partial (\alpha \rho E)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha (\rho E + p) u)_2}{\partial x} = p_1 u_1 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} - \lambda u_1' (u_2 - u_1) + \mu p_1' (p_1 - p_2)
 \end{aligned}$$

Interfacial variables are modelled as (Saurel et al., 2003):

$$\begin{aligned}
 u_1 &= \frac{Z_1 u_1 + Z_2 u_2}{Z_1 + Z_2} + \text{sgn} \left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \right) \frac{p_2 - p_1}{Z_1 + Z_2}, \\
 p_1 &= \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2} + \text{sgn} \left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \right) \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} (u_2 - u_1),
 \end{aligned}$$

where $Z_k = \rho_k c_k$ represents the acoustic impedance of phase k.

The equilibrium state is reached with the help of relaxation processes controlled by rates:

* $\mu = \frac{\Lambda_1}{Z_1 + Z_2}$, pressure relaxation rate, where Λ_1 represents the specific interfacial area,

* $\lambda = \frac{1}{2} \mu Z_1 Z_2$, velocity relaxation rate,

II.2 Supplementary equations

The following equations are important for the derivation of the new model. System (4.1) implies conservation equations for mixture variables, such as mixture mass, mixture momentum and mixture energy.

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\alpha\rho)_1 + (\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha\rho u)_1 + (\alpha\rho u)_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha\rho u)_1 + (\alpha\rho u)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha\rho u^2 + \alpha p)_1 + (\alpha\rho u^2 + \alpha p)_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha\rho E)_1 + (\alpha\rho E)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha(\rho E + p)u)_1 + (\alpha(\rho E + p)u)_2}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

It is more convenient to express this system with the following variables:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + p + p_t)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \left((\rho E + p + p_t)u + m \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right) \right)}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \quad (4.3)$$

where,

$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$ is the mixture density,

$p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$ is the mixture pressure,

$p_t = \rho Y_1 Y_2 w^2$ is the ‘turbulent’ pressure,

$u = Y_1 u_1 + Y_2 u_2$ is the mixture velocity,

$E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + e_t + \frac{1}{2} u^2$, is the mixture total energy,

$e_t = \frac{1}{2} Y_1 Y_2 w^2 = \frac{p_t}{2\rho}$ is the ‘turbulent’ energy,

$h_k = e_k + \frac{p_k}{\rho_k}$, is the enthalpy for phase k,

$w = u_1 - u_2$, is the relative velocity, implying $\begin{cases} u_1 = u + Y_2 w \\ u_2 = u - Y_1 w \end{cases}$,

$m = \rho Y_1 Y_2 w$, is the relative mass flow rate,

and,

$Y_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho}$, are the mass fractions, $Y_1 + Y_2 = 1$.

The ‘turbulent’ energy and pressure are associated to relative motion. There is no assumption made in System (4.3). Turbulent terms appear just as a consequence of relative velocity consideration.

With these notations, the mass equations of the phases can be written as:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha\rho)_1 u}{\partial x} + \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha\rho)_2 u}{\partial x} - \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (4.4)$$

Taking the difference of the two momentum equations of System (4.1) an evolution equation for the relative velocity is readily obtained:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho[(Y_1 - Y_2)u - 2Y_1 Y_2 w]}{\partial t} + \frac{\partial \rho[(Y_1 - Y_2)u^2 + (Y_2 - Y_1)Y_1 Y_2 w^2 - 4Y_1 Y_2 wu]}{\partial x} \\ & + \frac{\partial \alpha_1 p_1 - \alpha_2 p_2}{\partial x} = 2p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} - 2\lambda w \end{aligned} \quad (4.5)$$

System (4.3)-(4.5) thus involves 5 equations and two pressures. Closure of System (4.3)-(4.5) can be achieved by the volume fraction equation of System (4.1) and one entropy or energy equation for a given phase.

III. Reduced model in pressure equilibrium

From the preceding model, we intend to determine a flow model with a single pressure, but two velocities and temperatures. To do this, an asymptotic analysis is carried out in the limit of stiff

pressure relaxation: $\mu = \frac{\mu_0}{\varepsilon}$ with $\mu_0 = \frac{1}{Z_1 + Z_2}$, $\varepsilon^{-1} = \Lambda_1$ that is supposed to tend to infinity.

The zero-order corresponding limit system reads:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} + \frac{\partial\rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} = 0, \\ & \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} - \frac{\partial\rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} = 0, \\ & \frac{\partial\rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + p_t)}{\partial x} = 0, \\ & \frac{\partial\rho[(Y_1 - Y_2)u + 2Y_1 Y_2 w]}{\partial t} + \frac{\partial\rho[(Y_1 - Y_2)u^2 + (Y_2 - Y_1)Y_1 Y_2 w^2 + 4Y_1 Y_2 wu]}{\partial x} \\ & + \frac{\partial(\alpha_1 - \alpha_2)p}{\partial x} = 2p_1 \frac{\partial\alpha_1}{\partial x} - 2\lambda w \\ & \frac{\partial\rho E}{\partial t} + \frac{\partial\left((\rho E + p + p_t)u + m\left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2}(Y_2 - Y_1)w^2\right)\right)}{\partial x} = 0, \end{aligned} \quad (4.6)$$

under the constraint $p_1 = p_2 = p$ and with $E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + e_t + \frac{1}{2}u^2$.

Associated entropy equations read:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\alpha\rho s)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho s u)_1}{\partial x} = \frac{1}{T_1} \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} \Lambda w^2, \\ & \frac{\partial(\alpha\rho s)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho s u)_2}{\partial x} = \frac{1}{T_2} \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2} \Lambda w^2, \end{aligned} \quad (4.7)$$

with $w = u_1 - u_2$, $u = Y_1 u_1 + Y_2 u_2$, $u_1 = u + Y_2 w$ and $u_2 = u - Y_1 w$.

The extended drag coefficient reads:

$$\Lambda = \lambda + \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} \left| \frac{\partial\alpha_1}{\partial x} \right|$$

Taking the momentum equations difference of System (4.6), each equation being expressed in terms of velocity evolution and considering the pressure equilibrium limit, an alternative form of the relative momentum equation is obtained as:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left[\left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w + u \right) w \right]}{\partial x} + (v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x} = - \frac{\Lambda}{\rho Y_1 Y_2} w,$$

where $v_k = \frac{1}{\rho_k}$.

Thermodynamic compatibility of the entropy equations and System (4.6) is demonstrated in Annex B.

Closure of System (4.6) can be achieved with one of the entropy equations (4.7) or with the volume fraction evolution equation determined hereafter.

Volume fraction equation

The volume fraction equation is obtained by differentiating the pressure equilibrium condition ($p_1(\rho_1, s_1) = p_2(\rho_2, s_2)$) along the mixture mass trajectory:

$$\frac{dp_1(\rho_1, s_1)}{dt} = \frac{dp_2(\rho_2, s_2)}{dt}$$

With the help of sound speed and Grüneisen coefficient definitions,

$$c_k^2 = \left. \frac{\partial p}{\partial \rho_k} \right|_{s_k}, \quad \left. \frac{\partial p}{\partial s_k} \right|_{\rho_k} = \rho_k \Gamma_k T_k,$$

it becomes:

$$c_1^2 \frac{d\rho_1}{dt} + \rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{ds_1}{dt} = c_2^2 \frac{d\rho_2}{dt} + \rho_2 \Gamma_2 T_2 \frac{ds_2}{dt}$$

Using mass and entropy equations of Systems (4.1) and (4.2), the volume fraction equation is readily obtained:

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\left(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2 \right) \frac{\partial u}{\partial x} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial m}{\partial x} - m \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right) + \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1 Z_1} - \frac{\Gamma_2}{\alpha_2 Z_2} \right) \frac{Z_1 Z_2 \Lambda}{Z_1 + Z_2} w^2, \quad (4.8)$$

where the Wood (1930) sound speed is defined by:

$$\frac{1}{\rho c_w^2} = \frac{\alpha_1}{\rho_1 c_1^2} + \frac{\alpha_2}{\rho_2 c_2^2}$$

This evolution equation can be compared with the one of Saurel et al. (2008) where mass transfer effects are considered in the pressure equilibrium model of Kapila et al. (2001) and with Saurel et al. (2010) where gas permeation effects obeying Darcy's law are considered in a pressure equilibrium model. The new evolution equation (4.8) is in perfect analogy.

In the right hand side of (4.8), the three first terms were already obtained in the previous chapter model:

- $\left(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2 \right) \frac{\partial u}{\partial x}$ expresses volume fraction variations in zones where the velocity divergence is non-zero, typically in pressure waves,
- $\left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial m}{\partial x}$ expresses volume fraction variations in locations where the 'differential mass transfer' $\left(\frac{\partial m}{\partial x} \right)$ is present,
- $m \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right)$ expresses also phase dilatation due to heat transport,

- the term (which is new) $\left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1 Z_1} - \frac{\Gamma_2}{\alpha_2 Z_2} \right) \frac{Z_1 Z_2 \Lambda}{Z_1 + Z_2} w^2$ expresses dilatation effects due to interfacial friction.

Summary

The velocity non-equilibrium flow model can be summarized as follows,

$$\begin{aligned}
\frac{d\alpha_1}{dt} &= \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\left(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2 \right) \frac{\partial u}{\partial x} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial m}{\partial x} - m \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right) \\
&\quad + \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1 Z_1} - \frac{\Gamma_2}{\alpha_2 Z_2} \right) \frac{Z_1 Z_2 \Lambda}{Z_1 + Z_2} w^2 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0, \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0, \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + p_t)}{\partial x} &= 0, \\
\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left[\left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w + u \right) w \right]}{\partial x} + (v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x} &= - \frac{\Lambda}{\rho Y_1 Y_2} w \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \left((\rho E + p + p_t) u + m \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right) \right)}{\partial x} &= 0,
\end{aligned} \tag{4.9}$$

With the following definitions,

- mixture density $\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$,
- mixture velocity $u = Y_1 u_1 + Y_2 u_2$,
- mixture total energy $E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + e_t + \frac{1}{2} u^2$,
- relative velocity $w = u_1 - u_2$,
- relative mass flow rate $m = \rho Y_1 Y_2 w$,
- phase k enthalpy $h_k = e_k + \frac{p_k}{\rho_k}$,
- phase k mass fraction $Y_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho}$,
- 'turbulent' energy $e_t = \frac{1}{2} Y_1 Y_2 w^2 = \frac{p_t}{2\rho}$
- 'turbulent' pressure $p_t = \rho Y_1 Y_2 w^2$.

And the following extended drag coefficient:

$$\Lambda = \lambda + \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} \left| \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \right|,$$

where λ is the product of the conventional drag coefficient by the interfacial area.

Compared to the non-equilibrium system (4.1), System (4.6) requires the same closure relations (phases equations of state and drag correlation), except regarding the interfacial velocity (u_1) and

pressure relaxation coefficient μ , that are no longer needed. The mixture evolving under pressure equilibrium, a mixture equation of state is needed.

The most important difference between this new interpenetration model and that of the previous chapter is the presence of a partial differential equation for the relative velocity linking:

- $\frac{\partial w}{\partial t}$, the inertial term, previously absent.
- $(v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x}$ a creation term, present in the model of the previous chapter.
- $\frac{\partial \left[\left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w + u \right) w \right]}{\partial x}$ a transport term.
- $-\frac{\Lambda}{\rho Y_1 Y_2} w$ a drag relaxation term.

When the gradient pressure is zero, this equation still has a flux term and keeps inertia. Consequently, the relative velocity can be non-zero even if the gradient pressure is zero.

Thermodynamic closure

For the sake of simplicity, let us assume that each fluid is governed by the stiffened gas (SG) equation of state (EOS):

$$p_k = (\gamma_k - 1) \rho_k e_k - \gamma_k p_{\infty k},$$

where each material is characterized by two thermodynamic parameters (γ and p_{∞}) (see for example Harlow and Amsden (1971), Le Metayer et al. (2004) for parameters determination). The resulting mixture EOS that closes System (4.9) reads:

$$p(\rho, e, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 p_{\infty 1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2 \gamma_2 p_{\infty 2}}{\gamma_2 - 1} \right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}, \quad (4.10)$$

It is obtained from the resolution of an algebraic system composed of:

- The mixture energy definition: $\rho e = \alpha_1 \rho_1 e_1(\rho_1, p_1) + \alpha_2 \rho_2 e_2(\rho_2, p_2)$.
- The pressure equilibrium condition: $p_1 = p_2$.

This algebraic system can be solved for any pair of convex EOS.

IV. Hyperbolic subsystems

System (4.9) is split in two subsystems, as done currently with Strang (1968) or Yanenko (1971) splitting. The two subsystems must respect the entropy inequality and be hyperbolic, as far as possible.

Subsystem 1: Interface dynamics

The first system is obtained by imposing vanishing relative mass flow rate ($m = 0$). The system reads:

$$\begin{aligned}
\frac{d\alpha_1}{dt} &= \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \frac{\partial u}{\partial x} \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial\rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + p_t)}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial w u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial\rho E}{\partial t} + \frac{\partial(\rho E + p + p_t)u}{\partial x} &= 0,
\end{aligned} \tag{4.11}$$

This system is closed with an equation of state for each phase, such as the stiffened-gas EOS. Entropies equation of system (4.11) read

$$\frac{ds_k}{dt} = 0, k=1,2$$

so this system is isentropic for each phase.

The mixture total energy definition remains unchanged ($E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + e_t + \frac{1}{2} u^2$), as well as the turbulent energy and turbulent pressure definitions.

System (4.11) can be expressed alternatively in the following form, more convenient to determine wave's speeds:

$$\begin{aligned}
\frac{dY_1}{dt} &= 0 \\
\frac{dw}{dt} + w \frac{\partial u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{d\alpha_1}{dt} &= \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \frac{\partial u}{\partial x} \\
\frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{du}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + Y_1 Y_2 w \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{1}{\rho} w^2 Y_1 Y_2 \frac{\partial \rho}{\partial x} + (Y_2 - Y_1) w^2 \frac{\partial Y_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{dp}{dt} + \rho c_w^2 \frac{\partial u}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Therefore, System (4.12) can be expressed in reduced form as:

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

with,

$$W = (Y_1, w, \alpha_1, \rho, u, p)^T$$

and,

$$A(W) = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 & \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u & \rho & 0 & 0 \\ (Y_2 - Y_1)w^2 & Y_1 Y_2 w & 0 & \frac{1}{\rho} w^2 Y_1 Y_2 & u & \frac{1}{\rho} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho c_w^2 & 0 & u \end{pmatrix}$$

Corresponding wave's speeds are $\lambda_{1-4} = u$ and $\lambda_{5,6} = u \pm \sqrt{c_w^2 + 2 \frac{P_t}{\rho}}$.

Therefore System (4.11) is hyperbolic and isentropic.

Subsystem 2: Interpenetration

The second subsystem is obtained by taking the difference of Systems (4.9) and (4.11):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= -\alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial m}{\partial x} + m \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right) \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0, \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w^2 \right)}{\partial x} + (v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial m \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \tag{4.13}$$

Under the constraint $\rho_1 = \rho_2 = \rho$.

This system admits the following entropy equations:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\alpha \rho s)_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w s_1}{\partial x} &= 0 \text{ i.e. } \frac{\partial s_1}{\partial t} + Y_2 w \frac{\partial s_1}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho s)_2}{\partial t} - \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w s_2}{\partial x} &= 0 \text{ i.e. } \frac{\partial s_2}{\partial t} - Y_1 w \frac{\partial s_2}{\partial x} = 0 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Thermodynamic compatibility of System (4.13)-(4.14) can be demonstrated following the same method as the one used previously in Annex B. However, this system is not hyperbolic and the volume fraction equation is rather complex. Therefore the following pressure non-equilibrium system is considered:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho s)_1}{\partial t} + \frac{\partial m s_1}{\partial x} &= \theta \frac{\mu(p_1 - p_2)^2}{T_1} \\
\frac{\partial(\alpha\rho s)_2}{\partial t} - \frac{\partial m s_2}{\partial x} &= (1 - \theta) \frac{\mu(p_1 - p_2)^2}{T_2} \\
\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w^2 \right)}{\partial x} + v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Where parameter θ must fulfil the condition: $0 \leq \theta \leq 1$.

This system is supplemented by the mixture total energy conservation equation.

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial m \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} = 0$$

System (4.15) is thermodynamically compatible as shown in Annex C and in agreement with the entropy inequality. As will be shown later, there is no need to know precisely parameters θ and μ as stiff pressure relaxation is considered ($\mu \longrightarrow +\infty$). Also, in the limit of stiff pressure relaxation System (4.15) has for asymptotic limit System (4.13) (see Annex D for the details). As shown hereafter, this system is hyperbolic under certain conditions. Let us chose the following set of variables: $\mathbf{W} = (\alpha_1, \rho, u, s_1, s_2, Y_1, w)^T$. With these variables, System (4.15) expresses as:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial \rho}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial u}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial s_1}{\partial t} + Y_2 w \frac{\partial s_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial s_2}{\partial t} - Y_1 w \frac{\partial s_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial Y_1}{\partial t} + w(Y_2 - Y_1) \frac{\partial Y_1}{\partial x} + Y_1 Y_2 \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{w Y_1 Y_2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial w}{\partial t} + w(Y_2 - Y_1) \frac{\partial w}{\partial x} + \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 \right) \frac{\partial Y_1}{\partial x} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} + \frac{1}{\rho} (c_1^2 - c_2^2) \frac{\partial \rho}{\partial x} \\
+ \Gamma_1 T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} - \Gamma_2 T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{4.16}$$

In condensed form, this system reads, $\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \Lambda(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = 0$ with:

$$A(W) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Y_2 w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -Y_1 w & 0 & 0 \\ 0 & \frac{w Y_1 Y_2}{\rho} & 0 & 0 & 0 & w(Y_2 - Y_1) & Y_1 Y_2 \\ -\left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2}\right) & \frac{1}{\rho}(c_1^2 - c_2^2) & 0 & \Gamma_1 T_1 & -\Gamma_2 T_2 & \frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 & w(Y_2 - Y_1) \end{pmatrix}.$$

Therefore, the wave's speeds are:

$$\lambda_{1-3} = 0$$

$$\lambda_4 = Y_2 w$$

$$\lambda_5 = -Y_1 w$$

$$\lambda_6 = w(Y_2 - Y_1) - \sqrt{Y_1 Y_2 \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 \right)}$$

$$\lambda_7 = w(Y_2 - Y_1) + \sqrt{Y_1 Y_2 \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 \right)}$$

System (4.15) is hyperbolic if the relative velocity fulfils the following condition:

$$\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} > w^2$$

For most applications with multiphase mixtures, this condition is not very restrictive.

Moreover, the waves are ordered from the minimum speed to the maximum one if the following condition is satisfied:

$$\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} > w^2 \text{Max} \left(\frac{1}{Y_1}, \frac{1}{Y_2} \right)$$

In order that both conditions be fulfilled, it is sufficient that:

$$\begin{aligned} c_1 &> |w| \\ c_2 &> |w| \end{aligned} \tag{4.17}$$

Therefore, if the relative flow velocity is subsonic with respect to both phases sound speed, System (4.15) is hyperbolic.

The solution thus evolves with the help of Systems (4.11) and (4.13). To assess model's validity with comparisons against exact and experimental solutions, a numerical scheme is needed to solve these two systems.

V. Numerical approximation

Two solvers have to be built, one for System (4.11) and another one for System (4.13).

V.1 Interface dynamics solver

In this section we address numerical resolution of System (4.11). This system is very close to the Kapila et al. (2001) model for which simple and efficient scheme has been proposed in Saurel et al. (2009). The method is also presented in Chapter 2. We adopt here the same strategy, based on three successive steps.

Extended system

System (4.11) is replaced by the following extended system:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial wu}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 u}{\partial x} + \alpha_1 \rho_1 \frac{\partial a_1}{\partial x} &= -\rho_1 \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2 u}{\partial x} + \alpha_2 \rho_2 \frac{\partial a_2}{\partial x} &= \rho_2 \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2)}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p + p_t)u}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{4.18}$$

with $p_1 = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2}$ and $E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + e_t + \frac{1}{2} u^2$.

The solutions of (4.11) will be reached by considering that the relaxation parameter tends to infinity: $\mu \rightarrow +\infty$. The asymptotic limit of (4.18) in the limit $\mu \rightarrow +\infty$ corresponds indeed to (4.11) (see for example Saurel et al., 2009).

The extended system (4.18) is solved with a 3-step strategy:

a) Hyperbolic step: Relaxation terms are removed and the hyperbolic system (4.18) is solved with a Godunov type method, using HLLC type Riemann solver (Toro et al., 1994). The details are given in Saurel et al., (2009), and in chapter 2. The only difference compared to the system considered in that reference rely in the total energy definition, the extra equation for the relative velocity and the sound speed that appear in the HLLC speeds, now based on $\sqrt{c_f^2 + 2 \frac{p_t}{\rho}}$ with $c_f^2 = Y_1 c_1^2 + Y_2 c_2^2$.

b) Pressure relaxation and reset steps: They are exactly the same as those of the chapter 2.

V.2 Interpenetration solver

We now address numerical resolution of System (4.15). As shown previously, this system is strictly hyperbolic if $|w| < \text{Min}(c_1, c_2)$. In the following, we assume this condition is satisfied.

The subsequent method follows the same 3-step strategy as the one used previously for System (4.18), the hyperbolic step requiring special care, as detailed below. Two approximation methods are examined, the first one being based on the HLL solver while the second is based on a quasi-exact solver.

a) Hyperbolic step with HLL solver

The Riemann problem is solved under the HLL approximation (Harten et al., 1983), based on wave's speeds:

$$\begin{aligned}
\lambda^+ &= w(Y_1 - Y_2) + \sqrt{Y_1 Y_2 \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 \right)}, \\
\lambda^- &= w(Y_1 - Y_2) - \sqrt{Y_1 Y_2 \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 \right)}.
\end{aligned}$$

System (4.15) is expressed in the absence of source terms under the following form:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\phi} Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial \hat{\phi} Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial (\alpha \rho s)_1}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\phi} Y_1 Y_2 w s_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial (\alpha \rho s)_2}{\partial t} - \frac{\partial \hat{\phi} Y_1 Y_2 w s_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 + h_1 - h_2 \right)}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w \left((h_1 - h_2) + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Compared to system (4.15) some changes have been done:

- The volume fraction and mixture momentum equations have been expressed as conservation laws by the addition of a zero flux. This extension is done for a convenient use of the HLL formulas.
- The relative velocity equation has been expressed in conservation form instead of,

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w^2 \right)}{\partial x} + v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} = 0,$$

or,

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 + h_1 - h_2 \right)}{\partial x} - T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} = 0.$$

Indeed, across extreme left and right facing waves (λ^- and λ^+) under HLL approximation there is a unique solution state. Thus there is no entropy gradient in the HLL solution state. Therefore, the last formulation of the relative velocity equation corresponds to the one used in System (4.19). This is true only for the Riemann problem solution under HLL approximation.

It is also important to note that the mixture energy equation is redundant with the entropy equations. But as done previously with System (4.11), we are going to use this supplementary equation to do corrections to the approximate Riemann problem solution.

System (4.19) can be written as:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0$$

With,

$$\mathbf{U} = (\alpha_1, (\alpha \rho)_1, (\alpha \rho)_2, \rho u, (\alpha \rho s)_1, (\alpha \rho s)_2, w, \rho E)^T.$$

At a given cell boundary separating a left (L) state and a right (R) state, the waves speeds are computed with Davis (1988) estimates:

$$S_L = \text{Min}(\lambda_L^-, \lambda_R^-),$$

$$S_R = \text{Max}(\lambda_L^+, \lambda_R^+).$$

The approximate Riemann problem solution is obtained as:

$$\mathbf{U}^* = \frac{\mathbf{F}_R - \mathbf{F}_L + S_L \mathbf{U}_L - S_R \mathbf{U}_R}{S_L - S_R} \tag{4.20}$$

We thus have in hand: α_k^* , ρ_k^* , Y_k^* , s_k^* , w^* , ρ^* , E^* ($k=1,2$).

But we have to complete this state by the determination of the phases' pressure, internal energies and enthalpies.

As the entropy equations can be written as,

$$\frac{\partial s_1}{\partial t} + Y_2 w \frac{\partial s_1}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial s_2}{\partial t} - Y_1 w \frac{\partial s_2}{\partial x} = 0,$$

The phases' pressure is determined with the help of isentropic paths.

If $w^* > 0$ the phases pressure are computed as,

$$p_1^* = \left(\frac{\rho_1^*}{\rho_{1L}} \right)^{\gamma_1} (p_{1L} + p_{\infty 1}) - p_{\infty 1}$$

$$p_2^* = \left(\frac{\rho_2^*}{\rho_{2R}} \right)^{\gamma_2} (p_{2R} + p_{\infty 2}) - p_{\infty 2}.$$

Otherwise,

$$p_1^* = \left(\frac{\rho_1^*}{\rho_{1R}} \right)^{\gamma_1} (p_{1R} + p_{\infty 1}) - p_{\infty 1},$$

$$p_2^* = \left(\frac{\rho_2^*}{\rho_{2L}} \right)^{\gamma_2} (p_{2L} + p_{\infty 2}) - p_{\infty 2}.$$

Then the internal energies $e_1^*(p_1^*, \rho_1^*)$, $e_2^*(p_2^*, \rho_2^*)$ and the enthalpies $h_1^*(p_1^*, \rho_1^*)$, $h_2^*(p_2^*, \rho_2^*)$ are readily deduced from the equations of state.

With the help of the Riemann problem solution, the following Godunov type scheme is used to update the solution at computational cells.

Godunov type scheme

The entropy equations of System (V.4) are replaced by internal energy equations and the following system is solved:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w e_1}{\partial x} + p_1 \frac{\partial \alpha_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} - \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w e_2}{\partial x} - p_2 \frac{\partial \alpha_2 Y_1 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w^2 \right)}{\partial x} + v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w \left((h_1 - h_2) + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \tag{4.21}$$

Internal energy equations are preferred to entropy ones as they avoid spurious pressure oscillations in flows evolving in uniform pressure and uniform relative velocity fields (see Saurel et al. 2009, in the context of a slightly different flow model).

The conservative part of System (4.21) is updated with the conventional Godunov scheme:

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{F}^*(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_{i+1}^n) - \mathbf{F}^*(\mathbf{U}_{i-1}^n, \mathbf{U}_i^n) \right), \quad (4.22)$$

where

$$\mathbf{U} = (\alpha_1, \rho u, (\alpha\rho)_1, (\alpha\rho)_2, \rho E)^T,$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \left(0, 0, \rho Y_1 Y_2 w, -\rho Y_1 Y_2 w, \rho Y_1 Y_2 w \left((h_1 - h_2) + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right) \right)^T.$$

The numerical fluxes in (4.22) are obtained as solutions of the Riemann problem under HLL approximation:

$$\mathbf{F}^* = \frac{S_L \mathbf{F}_R - S_R \mathbf{F}_L - S_L S_R (\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L)}{S_L - S_R}. \quad (4.23)$$

The zero fluxes used in the first two equations of (4.21) thus have the same numerical viscosity as the others, in particular the same as the mass equations.

The non-conservative equations are evolved with:

$$\mathbf{V}_i^{n+1} = \mathbf{V}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{F}^*(\mathbf{V}_i^n, \mathbf{V}_{i+1}^n) - \mathbf{F}^*(\mathbf{V}_{i-1}^n, \mathbf{V}_i^n) \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \mathbf{H}(\mathbf{U}, \mathbf{V})$$

where,

$$\mathbf{V} = ((\alpha p e)_1, (\alpha p e)_2, w)^T,$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{V}) = \left(\rho Y_1 Y_2 w e_1, -\rho Y_1 Y_2 w e_2, \left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w^2 \right) \right)^T.$$

Here, the mass flux $\rho Y_1 Y_2 w$ is computed with (4.23) as previously. Let us note that there is two expressions for calculate $m = \rho Y_1 Y_2 w$:

$$\text{with the phase 1: } m_1^* = \frac{S_L m_R - S_R m_L - S_L S_R ((\alpha_1 \rho_1)_R - (\alpha_1 \rho_1)_L)}{S_L - S_R}$$

$$\text{with the phase 2: } m_2^* = \frac{S_L m_R - S_R m_L - S_L S_R ((\alpha_2 \rho_2)_R - (\alpha_2 \rho_2)_L)}{S_L - S_R}.$$

The problem is $m_1^* \neq m_2^*$. For the computation of the energies flux we use m_1^* for the phase 1 and m_2^* for the phase 2. Then, the internal energies (e_1^* , e_2^*) and relative velocity (w^*) are computed with the procedure described previously, based on (4.19)-(4.20). The non-conservative terms are computed with the following approximation,

$$\mathbf{H}(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \left(\begin{array}{c} p_{1,i}^n \left[(\alpha_1^* Y_2^* w^*)_{i+1/2} - (\alpha_1^* Y_2^* w^*)_{i-1/2} \right] \\ - p_{2,i}^n \left[(\alpha_2^* Y_1^* w^*)_{i+1/2} - (\alpha_2^* Y_1^* w^*)_{i-1/2} \right] \\ v_{1,i}^n (p_{1,i+1/2}^* - p_{1,i-1/2}^*) - v_{2,i}^n (p_{2,i+1/2}^* - p_{2,i-1/2}^*) \end{array} \right),$$

where the 'star' variables are again issued from (4.19)-(4.20).

This method can be extended to higher order with conventional ingredients. See for example Toro (1997) or Saurel et al. (2009) in the context of a non-conservative flow model.

The use of the preceding Godunov type scheme in conjunction with the approximate Riemann solver, using alternatively formulations (4.19) and (4.21), allows the update of the pressure non-equilibrium hyperbolic System (4.21). It is then followed by two extra steps: pressure relaxation and reset steps.

Nevertheless, some inaccuracies appeared as well as lack of robustness. It is why a more sophisticated solver is built hereafter.

b) Quasi-exact Riemann solver

A Riemann solver involving all five waves is considered. The corresponding wave pattern is schematized hereafter:

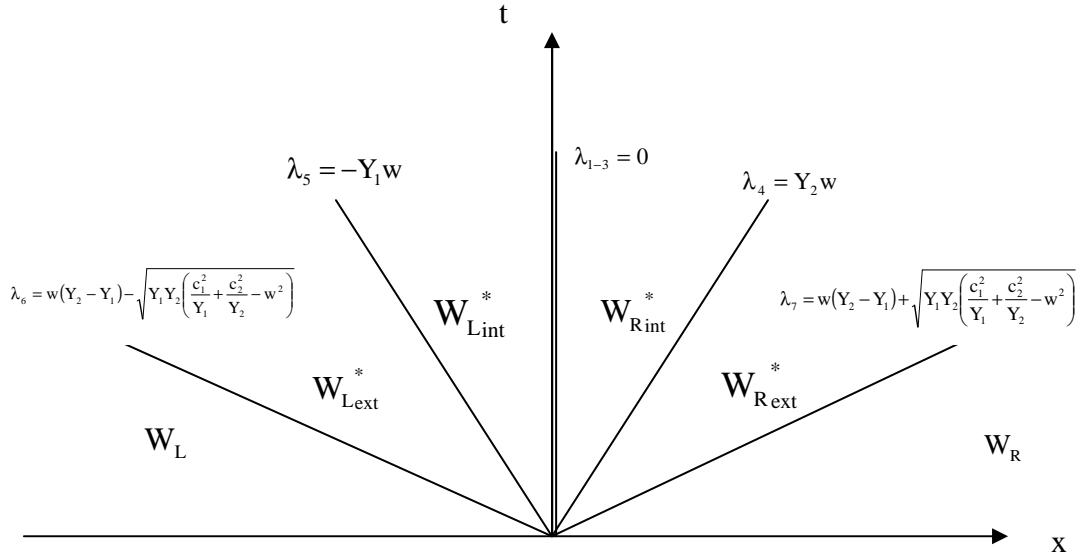


Figure 4.1 Wave pattern for the Riemann problem solution of the interpenetration subsystem (V.5). The states W_L and W_R are separated by an initial discontinuity that splits in 5 waves, creating 4 new states W_{L*ext} , W_{L*int} , W_{R*ext} , W_{R*int} .

The presence of 5 waves instead of 3 in most fluid mechanics flow solvers does not represent a major difficulty as linearized Riemann solver can be used in many applications (Andrianov et al., 2003). Here, extra difficulties are present:

- One of the waves is steady and it is well known that major difficulties appear in such circumstance, see for example Greenberg and Leroux (1996). The steady wave λ_{1-3} here plays a major rule as the relative mass flow rate ($\rho Y_1 Y_2 w$) and the total enthalpy difference $\left((h_1 - h_2) + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)$ have to be preserved. These two jump conditions are direct consequences of formulation (4.21).
- According to the sign of the relative velocity w , the waves λ_4 and λ_5 can be in reverse order. This feature is important when the relative velocity changes sign.

System (4.21) is considered again under the form:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} - Y_2 w \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \varphi_2}{\partial t} + Y_1 w \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial Y_1}{\partial t} - \frac{Y_1 Y_2 w}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} + (Y_1 - Y_2)w \frac{\partial Y_1}{\partial x} - Y_1 Y_2 \frac{\partial w}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{c_2^2 - c_1^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} - \rho_1^{\gamma_1-1} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + \rho_2^{\gamma_2-1} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} - \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 \right) \frac{\partial Y_1}{\partial x} + (Y_1 - Y_2)w \frac{\partial w}{\partial x}$$

$$\text{with } \phi_1 = \frac{p_1}{\rho_1^{\gamma_1}} \text{ and } \phi_2 = \frac{p_2}{\rho_2^{\gamma_2}}.$$

The entropy equations have been expressed with these variables, the extension to more sophisticated equations of state being possible.

In the left and right half planes of Figure 4.1, as $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$, $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ and $\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = 0$, the flow variables

u , ρ and α_1 are constant in each half plane.

The following system is thus considered in each half plane:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_1}{\partial t} - Y_2 w \frac{\partial \phi_1}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \phi_2}{\partial t} + Y_1 w \frac{\partial \phi_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial Y_1}{\partial t} + (Y_1 - Y_2)w \frac{\partial Y_1}{\partial x} - Y_1 Y_2 \frac{\partial w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \rho_1^{\gamma_1-1} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} - \rho_2^{\gamma_2-1} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} - \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 \right) \frac{\partial Y_1}{\partial x} + (Y_1 - Y_2)w \frac{\partial w}{\partial x} &= 0. \end{aligned} \quad (4.24)$$

The left and right subsystems are coupled at the vertical discontinuity by the non-linear relations

$$\rho Y_1 Y_2 w = \text{cst} \text{ and } h_2 - h_1 + \frac{1}{2}(Y_1 - Y_2)w^2 = \text{cst}.$$

Subsystem (4.24) can be written as:

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

$$\text{with } \mathbf{W} = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ Y_1 \\ w \end{pmatrix} \text{ and } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} -Y_2 w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & Y_1 w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (Y_1 - Y_2)w & -Y_1 Y_2 \\ -\rho_1^{\gamma_1-1} & \rho_2^{\gamma_2-1} & -\left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 \right) & (Y_1 - Y_2)w \end{pmatrix}.$$

It obviously has the following eigenvalues:

$$\lambda_1 = (Y_1 - Y_2)w - \sqrt{Y_1 Y_2 \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 \right)}$$

$$\lambda_2 = -Y_2 w$$

$$\lambda_3 = Y_1 w$$

$$\lambda_4 = (Y_1 - Y_2)w + \sqrt{Y_1 Y_2 \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 \right)}$$

The left eigenvectors read:

$$\mathbf{L}_1 = \left(-\frac{\rho_1^{\gamma_1-1}}{Y_1 w - Y_1 Y_2 Z} ; -\frac{\rho_2^{\gamma_2-1}}{Y_2 w + Y_1 Y_2 Z} ; Z ; 1 \right),$$

$$\mathbf{L}_2 = (1 \ 0 \ 0 \ 0),$$

$$L_2 = (0 \quad 1 \quad 0 \quad 0),$$

$$L_4 = \left(-\frac{\rho_1^{\gamma_1-1}}{Y_1 w + Y_1 Y_2 Z}; \quad -\frac{\rho_2^{\gamma_2-1}}{(Y_2 w - Y_1 Y_2 Z)}; \quad -Z; \quad 1 \right),$$

$$\text{with the 'acoustic impedance' } Z = \frac{1}{Y_1 Y_2} \sqrt{Y_1 Y_2 \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} - w^2 \right)}.$$

The associated linearized Riemann invariants read:

$$X_1 = -\frac{\rho_1^{\gamma_1-1}}{Y_1 w - Y_1 Y_2 Z} \phi_1 - \frac{\rho_2^{\gamma_2-1}}{Y_2 w + Y_1 Y_2 Z} \phi_2 + Z Y_1 + w$$

$$X_2 = \phi_1$$

$$X_3 = \phi_2$$

$$X_4 = -\frac{\rho_1^{\gamma_1-1}}{Y_1 w + Y_1 Y_2 Z} \phi_1 - \frac{\rho_2^{\gamma_2-1}}{(Y_2 w - Y_1 Y_2 Z)} \phi_2 - Z Y_1 + w$$

Two instances have now to be considered, according to the the relative velocity sign.

Case $w > 0$

Determination of the Riemann problem solution consists in solving the following set of algebraic equations.

Jump relations at left:

$$w_{L\text{ext}}^* - w_L - Z_L (Y_{1L\text{ext}}^* - Y_{1L}) = 0,$$

$$w_{L\text{int}}^* - w_L - Z_L (Y_{1L\text{int}}^* - Y_{1L}) - \frac{\rho_{1L}^{\gamma_1-1}}{Y_{1L} w_L + Y_{1L} Y_{2L} Z_L} (\phi_{1R} - \phi_{1L}) = 0,$$

$$w_{L\text{int}}^* - w_{L\text{ext}}^* + Z_L (Y_{1L\text{int}}^* - Y_{1L\text{ext}}^*) - \frac{\rho_{1L}^{\gamma_1-1}}{Y_{1L} w_L - Y_{1L} Y_{2L} Z_L} (\phi_{1R} - \phi_{1L}) = 0.$$

Jump relations at right:

$$w_{R\text{ext}}^* - w_R + Z_R (Y_{1R\text{ext}}^* - Y_{1R}) = 0,$$

$$w_{R\text{int}}^* - w_R + Z_R (Y_{1R\text{int}}^* - Y_{1R}) - \frac{\rho_{2R}^{\gamma_2-1}}{Y_{2R} w_R + Y_{1R} Y_{2R} Z_R} (\phi_{2L} - \phi_{2R}) = 0,$$

$$w_{R\text{int}}^* - w_{R\text{ext}}^* - Z_R (Y_{1R\text{int}}^* - Y_{1R\text{ext}}^*) - \frac{\rho_{2R}^{\gamma_2-1}}{(Y_{2R} w_R - Y_{1R} Y_{2R} Z_R)} (\phi_{2L} - \phi_{2R}) = 0.$$

Jump relations across the steady discontinuity:

$$\rho_L Y_{1L\text{int}}^* (1 - Y_{1L\text{int}}^*) w_{L\text{int}}^* = \rho_R Y_{1R\text{int}}^* (1 - Y_{1R\text{int}}^*) w_{R\text{int}}^*,$$

$$h_{2L\text{int}}^* - h_{1L\text{int}}^* + \frac{1}{2} (2Y_{1L\text{int}}^* - 1) w_{L\text{int}}^{*2} = h_{2R\text{int}}^* - h_{1R\text{int}}^* + \frac{1}{2} (2Y_{1R\text{int}}^* - 1) w_{R\text{int}}^{*2}.$$

It forms a set of 8 equations with 8 unknowns: $Y_{1L\text{ext}}^*$, $Y_{1L\text{int}}^*$, $Y_{1R\text{int}}^*$, $Y_{1R\text{ext}}^*$, $w_{L\text{ext}}^*$, $w_{L\text{int}}^*$, $w_{R\text{int}}^*$ and $w_{R\text{ext}}^*$. Its solution is obtained with the Newton-Raphson method as detailed in the Annex E.

Case $w < 0$

Another set of equations has to be solved.

Jump relations at left:

$$w_{L\text{ext}}^* - w_L - Z_L (Y_{1L\text{ext}}^* - Y_{1L}) = 0,$$

$$w_{L\text{int}}^* - w_L - Z_L (Y_{1L\text{int}}^* - Y_{1L}) - \frac{\rho_{2L}^{\gamma_2-1}}{Y_{2L} w_L - Y_{1L} Y_{2L} Z_L} (\phi_{2R} - \phi_{2L}) = 0,$$

$$w_{L\text{int}}^* - w_{L\text{ext}}^* + Z_L (Y_{1L\text{int}}^* - Y_{1L\text{ext}}^*) - \frac{\rho_{2L}^{\gamma_2-1}}{Y_{2L} w_L + Y_{1L} Y_{2L} Z_L} (\phi_{2R} - \phi_{2L}) = 0.$$

Jump relations at right:

$$w_{\text{Re xt}}^* - w_{\text{R}} + Z_{\text{R}}(Y_{1\text{Re xt}}^* - Y_{1\text{R}}) = 0,$$

$$w_{\text{R int}}^* - w_{\text{R}} + Z_{\text{R}}(Y_{1\text{R int}}^* - Y_{1\text{R}}) - \frac{\rho_{1\text{R}}^{\gamma_1 - 1}}{Y_{1\text{R}} w_{\text{R}} + Y_{1\text{R}} Y_{2\text{R}} Z_{\text{R}}} (\phi_{1\text{L}} - \phi_{1\text{R}}) = 0,$$

$$w_{\text{R int}}^* - w_{\text{Re xt}}^* - Z_{\text{R}}(Y_{1\text{R int}}^* - Y_{1\text{Re xt}}^*) - \frac{\rho_{1\text{R}}^{\gamma_1 - 1}}{(Y_{1\text{R}} w_{\text{R}} - Y_{1\text{R}} Y_{2\text{R}} Z_{\text{R}})} (\phi_{1\text{L}} - \phi_{1\text{R}}) = 0.$$

The jump relations across the steady discontinuity are unchanged:

$$\rho_{\text{L}} Y_{1\text{L int}}^* (1 - Y_{1\text{L int}}^*) w_{\text{L int}}^* = \rho_{\text{R}} Y_{1\text{R int}}^* (1 - Y_{1\text{R int}}^*) w_{\text{R int}}^*,$$

$$h_{2\text{L int}}^* - h_{1\text{L int}}^* + \frac{1}{2} (2Y_{1\text{L int}}^* - 1) w_{\text{L int}}^{*2} = h_{2\text{R int}}^* - h_{1\text{R int}}^* + \frac{1}{2} (2Y_{1\text{R int}}^* - 1) w_{\text{R int}}^{*2}.$$

The corresponding system of 8 equations with 8 unknowns is solved again with the Newton-Raphson. Details are given in Appendix D.

Godunov type scheme

It now remains to update the numerical solution of System (VI.6). It is considered under the form:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho \phi)_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 \phi_1 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho \phi)_2}{\partial t} - \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 \phi_2 w}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w^2 \right)}{\partial x} + v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w \left((h_1 - h_2) + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (4.25)$$

It contains both conservative and a non conservative equation.

The two first equations,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0, \end{aligned}$$

do not need any update as the steady wave is now present in the Riemann solver. More precisely,

$$\begin{aligned} \alpha_{i_i}^{n+1} &= \alpha_{i_i}^n, \\ (\rho u)_i^{n+1} &= (\rho u)_i^n. \end{aligned}$$

Then, three conservative equations are updated:

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial\rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho\phi)_1}{\partial t} + \frac{\partial\rho Y_1 Y_2 \phi_1 w}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho\phi)_2}{\partial t} - \frac{\partial\rho Y_1 Y_2 \phi_2 w}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial\rho E}{\partial t} + \frac{\partial\rho Y_1 Y_2 w \left((h_1 - h_2) + \frac{1}{2}(Y_2 - Y_1)w^2 \right)}{\partial x} = 0$$

The conventional Godunov method is used:

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F^*(U_i^n, U_{i+1}^n) - F^*(U_{i-1}^n, U_i^n) \right),$$

with,

$$U = \left((\alpha\rho)_1 \quad (\alpha\rho)_2 \quad (\alpha\rho\phi)_1 \quad (\alpha\rho\phi)_2 \quad \rho E \right)^T,$$

and,

$$F(U) = \left(\rho Y_1 Y_2 w \quad -\rho Y_1 Y_2 w \quad \rho Y_1 Y_2 \phi_1 w \quad -\rho Y_1 Y_2 \phi_2 w \quad \rho Y_1 Y_2 w \left((h_1 - h_2) + \frac{1}{2}(Y_2 - Y_1)w^2 \right) \right)^T.$$

These fluxes are sampled without difficulty along the time axis of Figure 1 as the mass flux, the energy fluxes and entropies are constant across the steady wave.

It remains to update the non-conservative equation:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w^2 \right)}{\partial x} + v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} = 0$$

The Riemann problem is solved at each cell boundary and two waves are entering the computational cell from each boundary, as shown in the Figure 4.2.

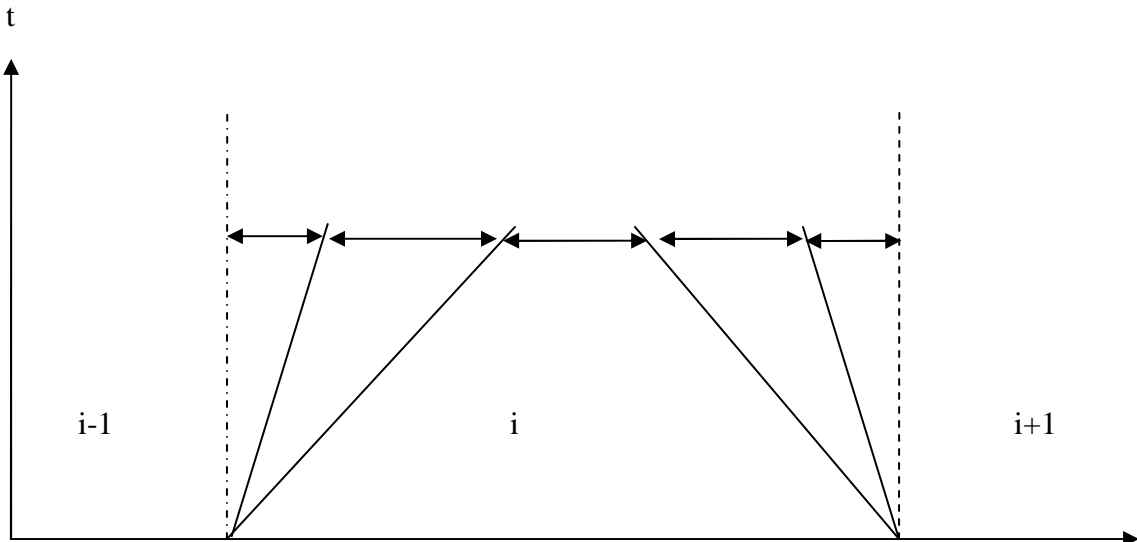


Figure 4.2 Two waves emerge from each cell boundary delimiting five sub-volumes used for cell average of the non-conservative equation.

From the Riemann problem solution at each cell boundary there is no difficulty to compute the wave speeds as well as the 5 sub-volumes of Figure 4.2.

The solution of the relative velocity equation is then updated by the following average:

$$w_i^{n+1} = \frac{1}{\Delta x_i} \sum_{k=1}^5 L_k w_k^*,$$

where L_k denote the sub-volume length and w_k^* the state in the corresponding sub-volume. Except regarding the center sub-volume in which $w_3^* = w_i^n$, the other states are issued for the Riemann problem solutions.

b) Pressure relaxation

System (4.21) has now to be complemented by the relaxation terms of System (4.18). As the transport part has already been considered during the hyperbolic step, the remaining system to solve is:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \mu(p_1 - p_2) \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho e)_1}{\partial t} &= -p_1 \mu(p_1 - p_2) \\ \frac{\partial (\alpha \rho e)_2}{\partial t} &= p_1 \mu(p_1 - p_2) \\ \frac{\partial w}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} &= 0 \end{aligned} \tag{4.26}$$

Where $p_1 = \frac{Z_2 p_1 + Z_1 p_2}{Z_1 + Z_2}$. System (4.26) being exactly the same as previously, the relaxation procedure described in Section V.1 is used a second time.

c) Reset step

Again, the same procedure as in Section V.1 applies.

V.3 Test of the interpenetration solver

In this test, only the frozen interpenetration System (4.21) is considered. We want to observe the waves propagation of the hyperbolic interpenetration system (4.21).

A 1 m long shock tube divided in two chambers is filled with air and helium. The initial volume fractions of helium and air are 0.5 in all the tube. The initial density is $\rho_{Helium} = 0.2 \text{ kg.m}^{-3}$ and the stiffened gas EOS parameters are $\gamma_{helium} = 1.667$ and $p_{\infty, helium} = 0 \text{ Pa}$. The initial density of air is $\rho_{air} = 1 \text{ kg.m}^{-3}$ and EOS parameters are $\gamma_{air} = 1.4$ and $p_{\infty, air} = 0 \text{ Pa}$. The initial pressure of the left chamber is set equal to 0.15 MPa, and the pressure of the right one to 0.1 MPa. In both chambers, the initial velocity is equal to 0. We observe the pressure, and the relative velocity at time $t=0.3\text{ms}$. A 500 cells mesh is used.

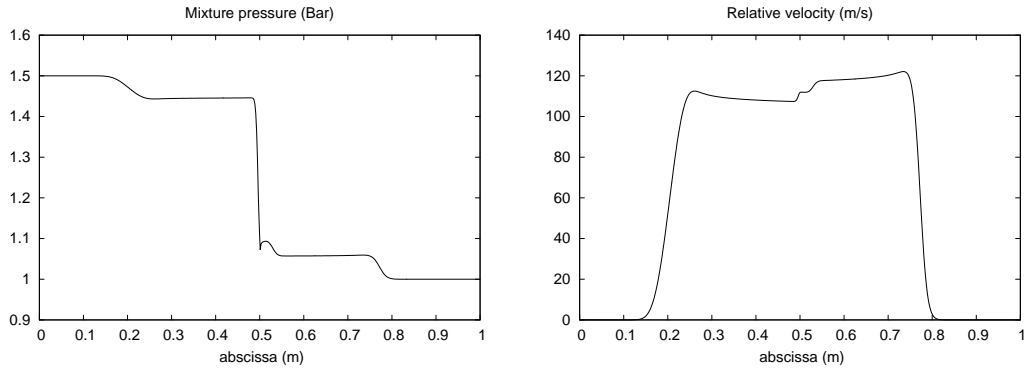


Figure 4.3 Gas/Gas shock tube with the frozen interpenetration system only. Mixture pressure and relative velocity at time $t=0.3\text{ms}$.

Recall that the interpenetration model owns five waves. In the above figure, the external waves λ_+ and λ_- are clearly highlighted. In order to see distinctly the three other waves, pressure and relative velocity profiles are shown at time $t=4\text{ms}$.

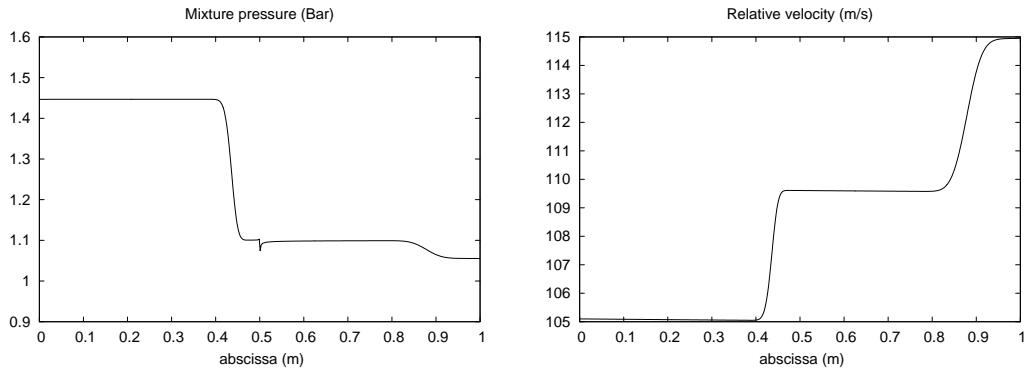


Figure 4.4 Gas/Gas shock tube with the frozen interpenetration system only. Mixture pressure and relative velocity profiles at time $t=4\text{ms}$.

The waves propagating at speeds $-Y_1w, Y_2w$ and the stationary wave (in the mixture pressure graph at $x=0.5\text{m}$) are visible. We observe in Figure 4.5 that the relative mass flow rate is constant through the stationary wave.

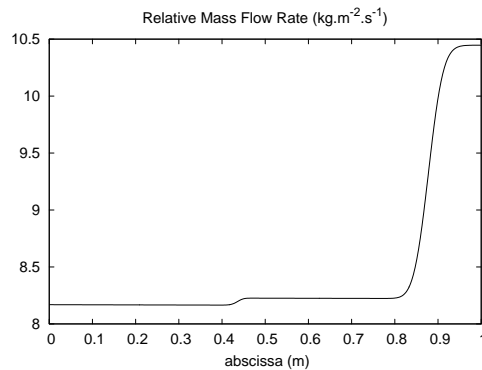


Figure 4.5 Gas/Gas shock tube with the frozen interpenetration system only. Relative mass flow rate at time $t=4\text{ms}$.

In order to observe better the stationary wave, the same test is performed by changing the volume fraction of the gas in order to have a volume fraction discontinuity between the two chambers. Now,

in the left chamber the volume fraction of air is set equal to 0.3 and the helium one to 0.7. In the right one, they are reversed.

The conclusions are the same as in the previous test, we observe the waves propagation, but now the stationary wave is highlighted.

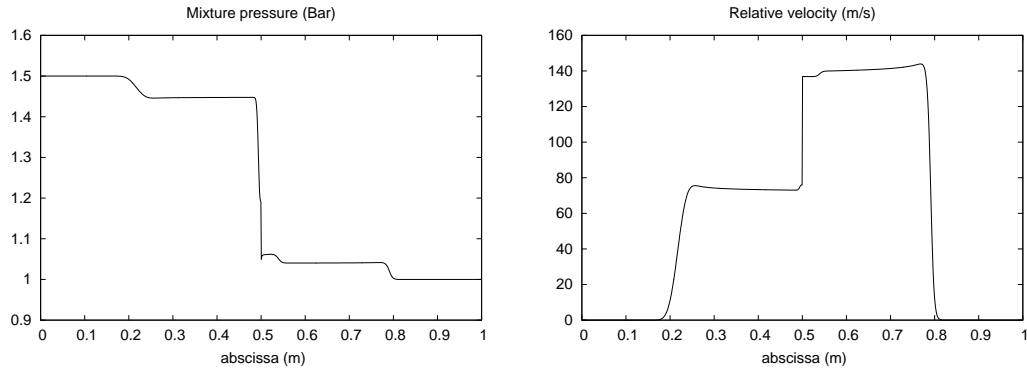


Figure 4.6 Gas/Gas shock tube with the frozen interpenetration system only. Mixture pressure and relative velocity at time $t=0.3\text{ms}$.

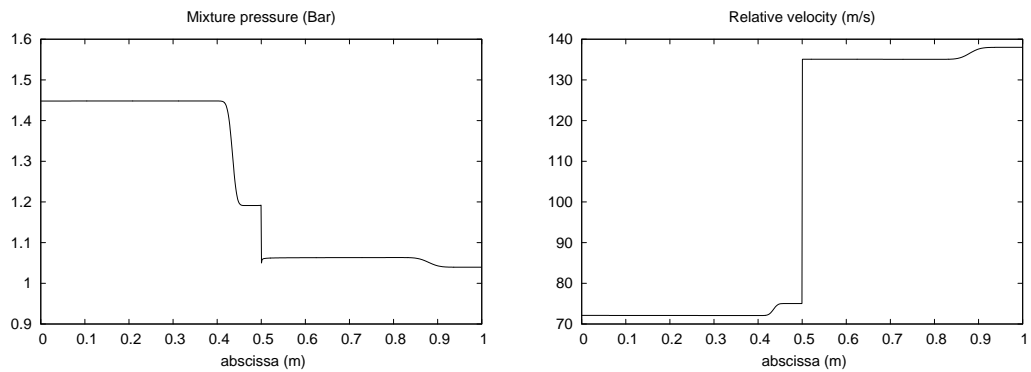


Figure 4.7 Gas/Gas shock tube with the frozen interpenetration system only. Mixture pressure and relative velocity at time $t=3\text{ms}$.

The relative mass flow rate stays constant through the stationary wave.

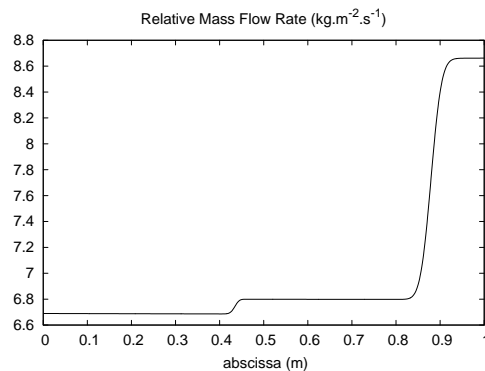


Figure 4.8 Gas/Gas shock tube with the frozen interpenetration system only. Relative mass flow rate at time $t=3\text{ms}$.

VI. Test problems

We address in this section model (4.9) and method validation, first with academic test problems having exact solutions. Then, comparisons with results of the pressure non equilibrium system (4.1) resolution, in the case of infinite pressure relaxation coefficient, are presented.

For all of the test problems, the pressure non-equilibrium interpenetration subsystem (4.19) is solved by the quasi-exact Riemann solver.

VI.1. Fluid separation under gravity

This test problem is the same as in the previous chapter, but with two gases: helium (phase 1) and air (phase 2). The tube is still vertical and closed on top and bottom. Its length is 10 m and the mesh has 100 cells. High order extension of the method is used with Superbee limiter. The air density is $\rho_{\text{air}} = 1 \text{ kg.m}^{-3}$, that of water is $\rho_{\text{helium}} = 0.2 \text{ kg.m}^{-3}$. At $t=0$, gravity ($g = 100 \text{ m.s}^{-2}$) is set up. High gravity acceleration is used in order to fasten computations. At steady state, the tube should be filled with pure helium in the upper half domain and with air in the lower half. We show in Figure 2 the volume fraction at time 0.1s, 0.3s, 0.5s and 2 s. The pressure field is also shown at time 2 s.

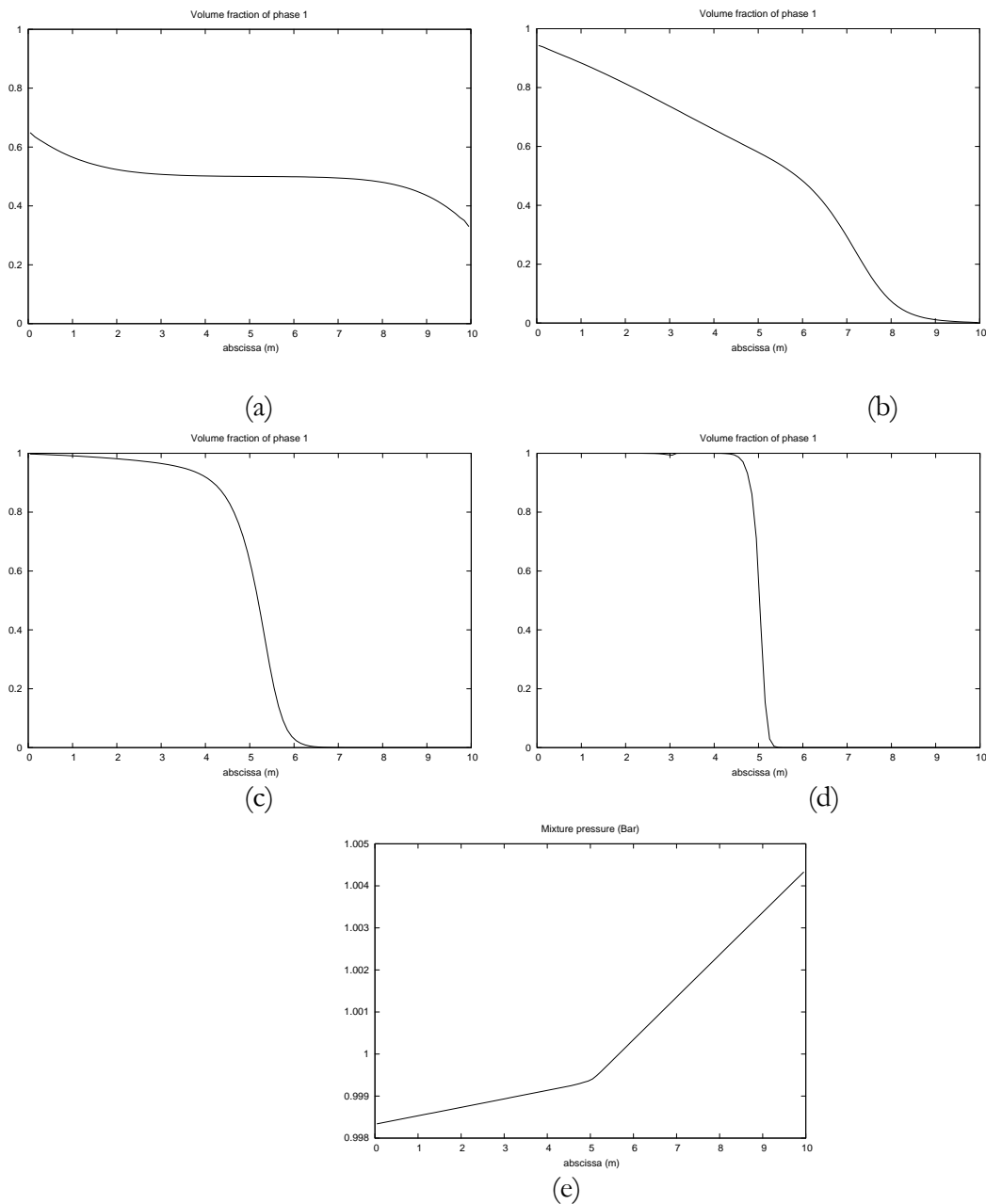


Figure 4.9 Sedimentation test. Computed volume fraction is shown at times 0.1 s (a), 0.3 s (b), 0.5 s (c) and 2 s (d). The pressure profile at final time is shown in graph (e). These results show that the method is able to separate fluids under body forces and fulfils interface conditions when steady state is reached, starting from an ideal mixture.

VI.2. Water faucet

The test is described in the previous chapter. Several computations are done. First, we compare solutions when drift effects are omitted and when they are considered.

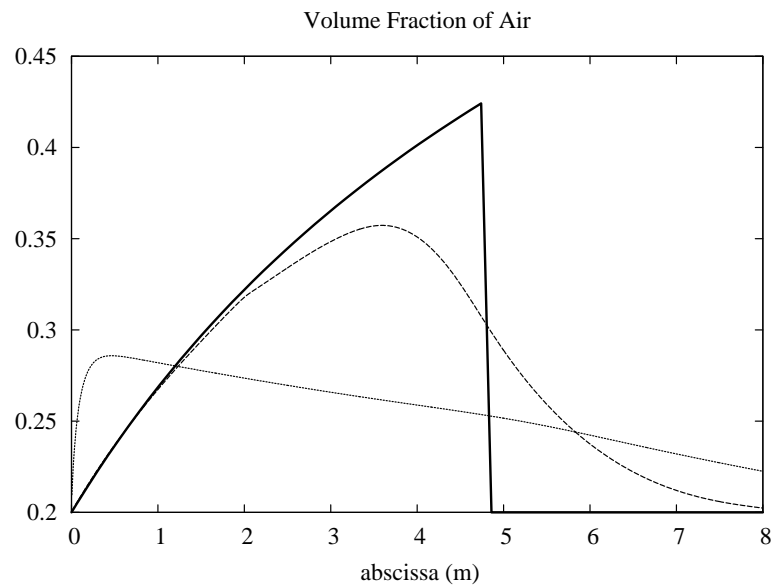


Figure 4.10 Water faucet test. The numerical solution is shown with symbols in two limit cases while the exact one is shown with full lines. The numerical solution with drift is shown with points, and the numerical solution without drift is shown with dashed lines. All solutions are shown at time 0.4s. A computational mesh involving 1000 cells is used.

The numerical solution with drift effects is in better agreement with the exact one than the one without drift. Solution convergence is studied by mesh refinement. Results are shown in the Figure 4.11.

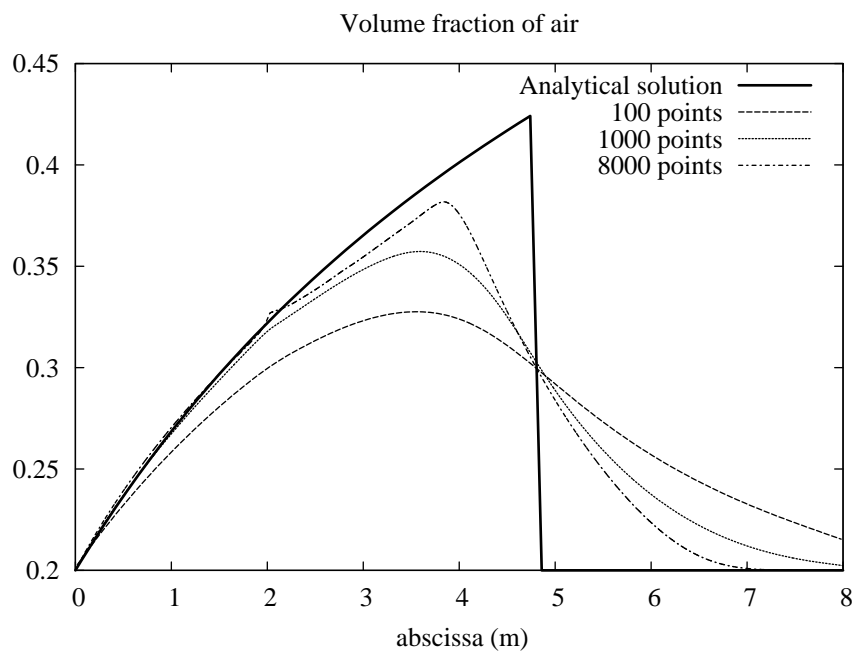


Figure 4.11 Mesh convergence for the water faucet problem. The exact solution is shown with full lines and numerical solutions are shown with dashed lines successively with 200, 1000 and 8000 computational cells.

When the mesh is refined, the numerical solution seems to have convergence difficulties. Instabilities appear for the 8000 cells mesh. It is not obvious to treat correctly the injection boundary condition at the tube inlet as 5 waves are present in the Riemann problem. For this reason, the same test is performed by solving the pressure non equilibrium interpenetration (4.19) with the HLL solver. Results are shown in Figure 4.12.

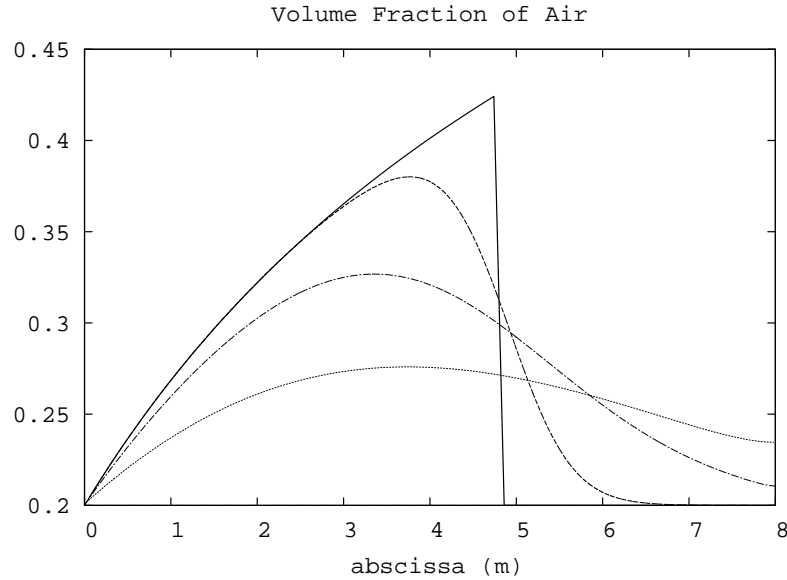


Figure 4.12 Mesh convergence for the water faucet problem with HLL solver. The exact solution is shown with full lines and numerical solutions are shown with dashed lines successively with 200, 1000 and 8000 computational cells. The numerical solution tends to converge to the exact one.

As mentioned before, the total non-equilibrium model (4.1) is also able to address these two first test problems.

VI.3 Comparison with the DEM on two-phase shock tube test problems

We now compare the results of the interpenetration model with those of the non-equilibrium model (4.1), that is to say the Baer and Nunziato model (1986), solved with a discrete equations method (DEM). This method is detailed in Abgrall and Saurel (2003). Compared to previous tests, the subsequent ones involve intense pressure waves.

A preliminary discussion is needed regarding the non-conservative term $\frac{\Lambda}{\rho Y_1 Y_2} w$ in the relative velocity equation of System (4.9). This term was obtained with the interfacial pressure definition:

$$p_I = p - \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} w$$

But there is some freedom in this variable modelling. Indeed, if

$$p_I = p - a \cdot \operatorname{sgn}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial x}\right) \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} w \quad \text{with } 0 \leq a \leq 1, \quad (4.27)$$

the entropy inequality remains fulfilled.

We now examine the interpenetration model behaviour in the two limit cases of $a = 0$ and $a = 1$ and compare corresponding solutions with the DEM, where System (4.1) is solved with no freedom for the choice of this parameter. Indeed, the DEM imposes $a = 1$ (Saurel et al., 2003).

A 1 m long shock tube containing two chambers separated by an interface at the location $x = 0.7 \text{ m}$ is considered. Both chambers contain two separated phases, helium and air. The initial density of helium is $\rho_{\text{helium}} = 0.2 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ and the stiffened gas EOS parameters are $\gamma_{\text{helium}} = 1.667$ and

$p_{\infty, \text{helium}} = 0 \text{ Pa}$. The initial density of air is $\rho_{\text{air}} = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ and EOS parameters are $\gamma_{\text{air}} = 1.4$ and $p_{\infty, \text{air}} = 0 \text{ Pa}$. The left chamber contains a volume fraction of air $\alpha_{\text{hel}} = 0.999999$ and the initial pressure is set equal to 0.2 MPa. The right chamber contains the same fluids but the volume fractions are reversed. The initial pressure is set equal to 0.1 MPa. In both chambers the fluids are initially at rest.

In the first numerical experiment, the parameter ‘a’ is set to 1 and the new model solution is compared to the Baer and Nunziato model (4.1) solution at time $t=500 \mu\text{s}$ in Figure 4.13.

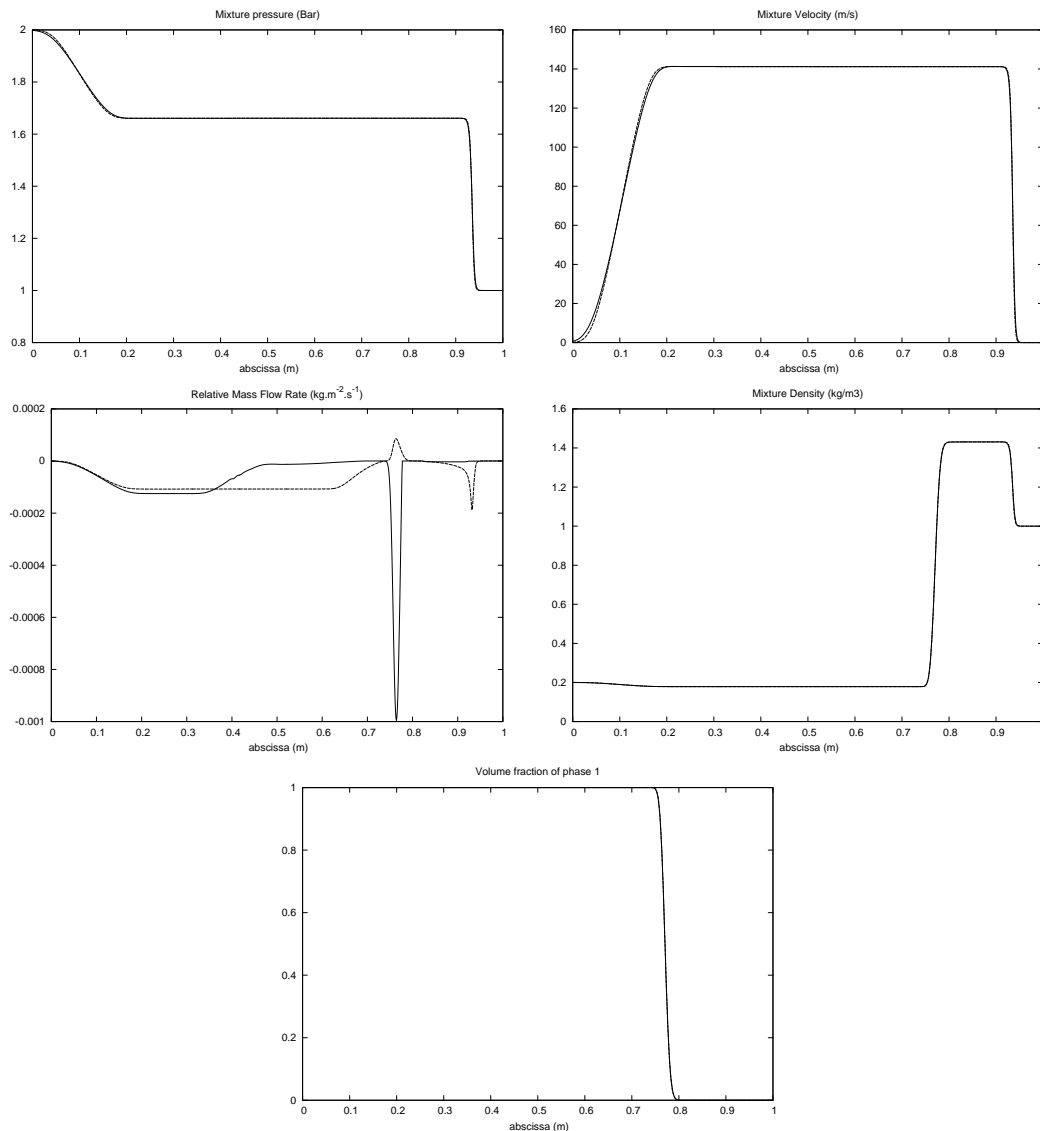


Figure 4.13 Helium/Air shock tube. The interpenetration model results are shown with full lines and the Baer and Nunziato model (1986) results are shown with dash lines. A 1000 cell mesh is used. Parameter ‘a’ of the interfacial pressure model is set to 1 in the interpenetration model.

It is worth to note that the two models are very different, but the solutions are in perfect agreement. The most important remark is related to the relative mass flow rate behaviour that is almost zero at the interface.

We now consider the opposite limit case with parameter ‘a’ taken equal to zero. Corresponding results are shown in Figure 4.14 at the same time with the same mesh.

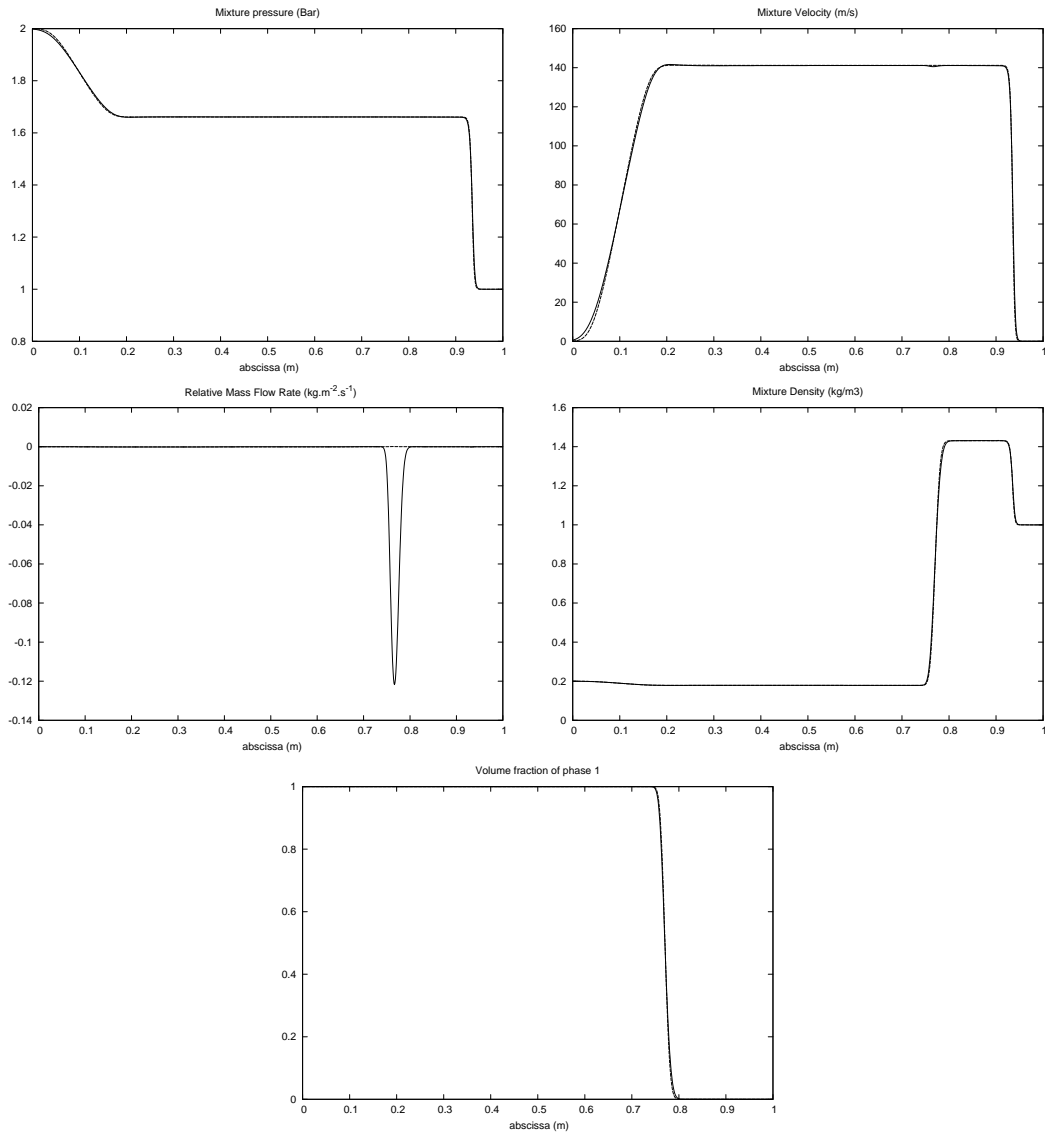


Figure 4.14 Helium/Air shock tube. The interpenetration model results are shown with full lines and the Baer and Nunziato model (1986) results are shown with dash lines. A 1000 cell mesh is used. Parameter 'a' of the interfacial pressure model is set to 0 in the interpenetration model. Results are now very different.

The main difference lies in the relative mass flow rate that is now non-zero at the volume fraction discontinuity. It is small because there is no mixture zone, the interface being initially stiff. Thus, when $a=1$, interpenetration across the interface is forbidden while when $a < 1$, interpenetration occurs. In the remaining we will call 'a' the interpenetration parameter.

We now consider the same test, but with a mixing zone between the two pure phases. In the mixing zone, the volume fraction is a linear function of the position (x) defined to be continuous with the two pure phases. The others variables are initialised as previously.

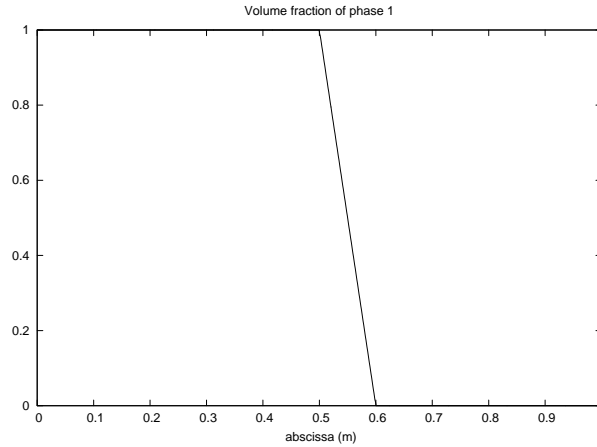


Figure 4.15 Helium/Air shock tube. Initial volume fraction of helium.

We observe the results a time $t=0.5\text{ms}$ with two different values of interpenetration parameter 'a', set to 0 in the Figure 4.16 and set to 1 in the Figure 4.17.

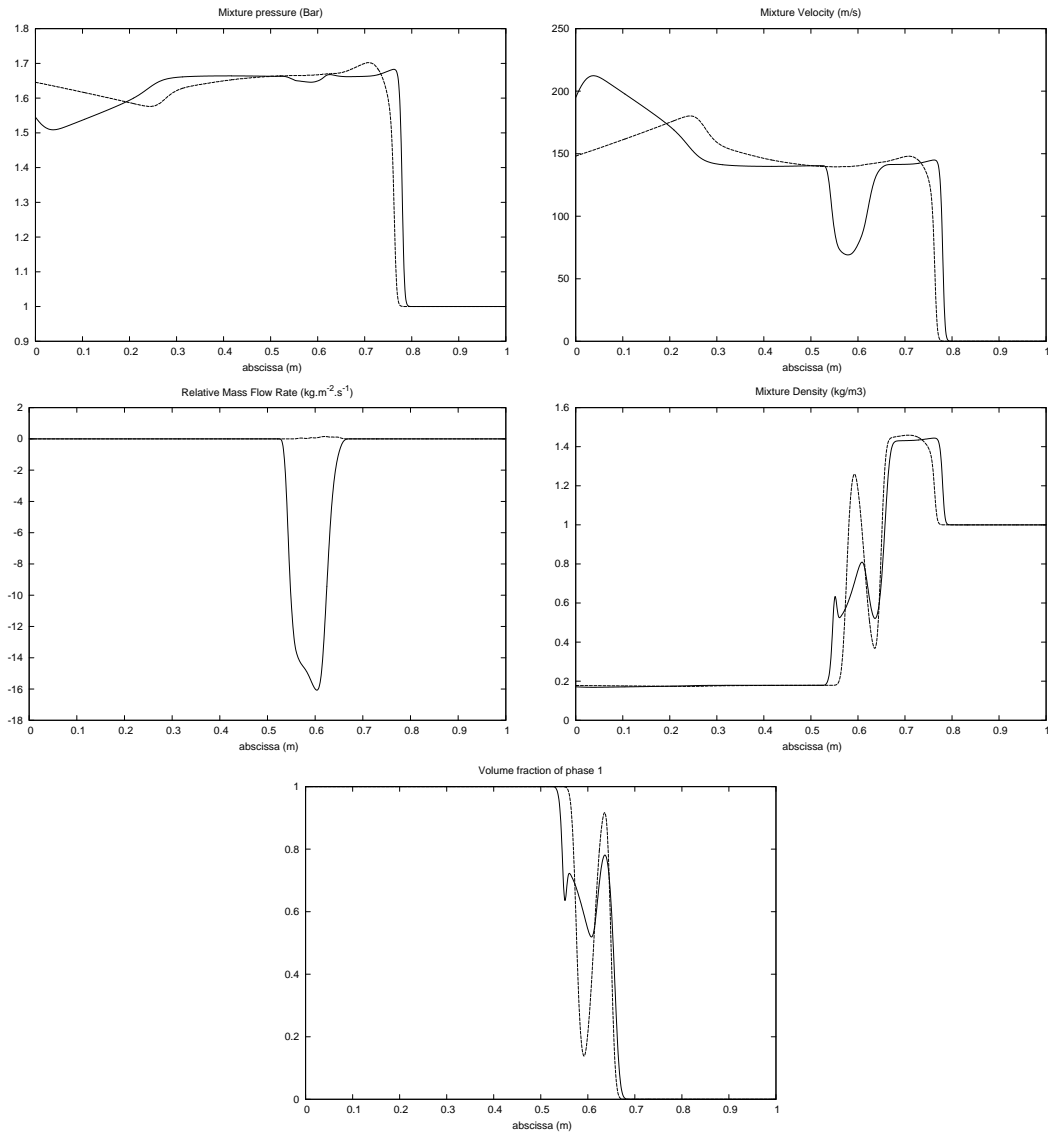


Figure 4.16 Helium/Air shock tube. The interpenetration model results are shown with full lines and the Baer and Nunziato model (1986) results are shown with dash lines. A 1000 cell mesh is used. Parameter 'a' of the interfacial pressure model is set to 0 in the interpenetration model.

The relative mass flow rate is zero in the Baer and Nunziato model (4.1), and not for the interpenetration model. That is why the interface is more diffused with the interpenetration model than with the Baer and Nunziato one.

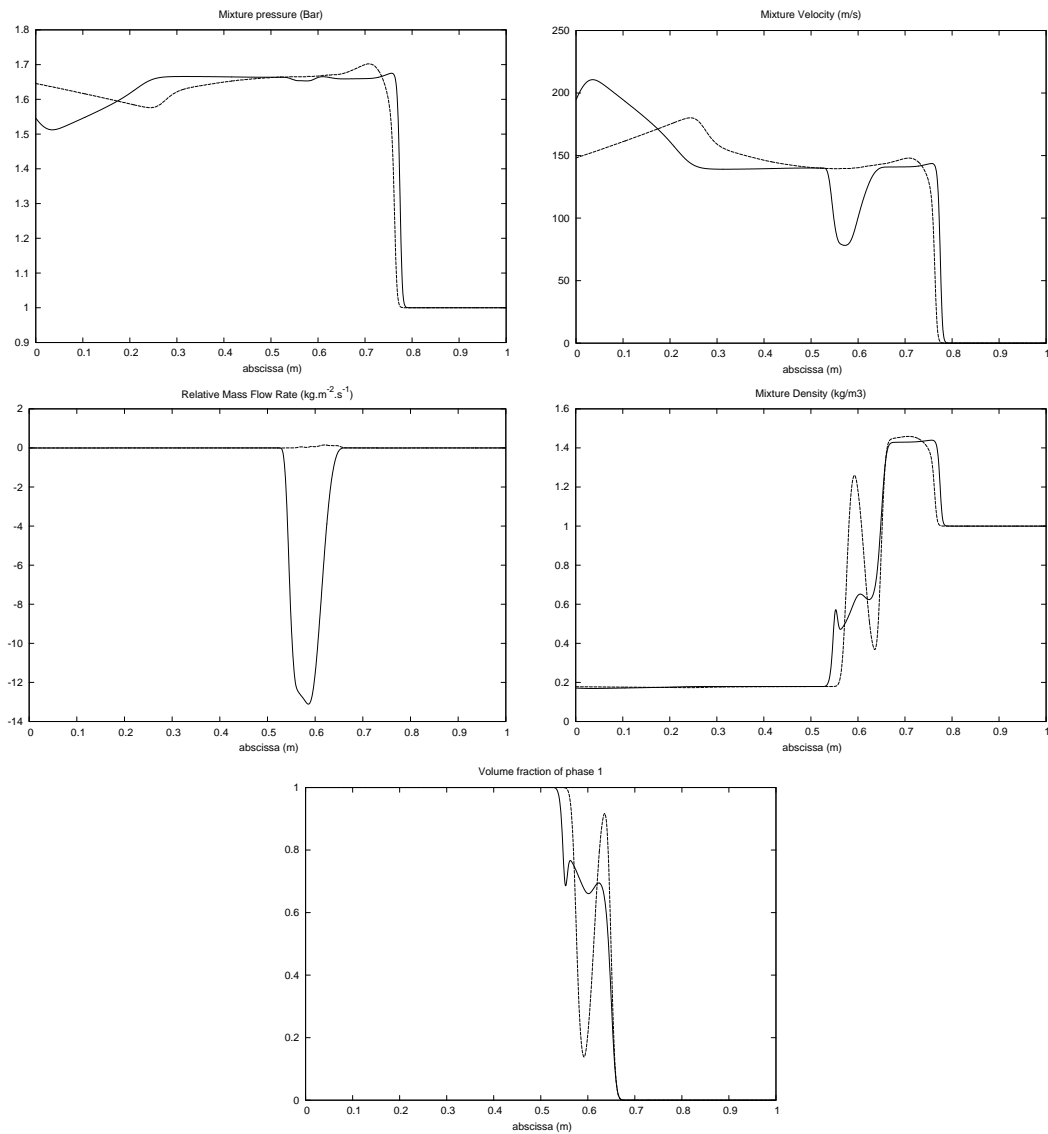


Figure 4.17 Helium/Air shock tube. The interpenetration model results are shown with full lines and the Baer and Nunziato model (1986) results are shown with dash lines. A 1000 cell mesh is used. Parameter 'a' of the interfacial pressure model is set to 1 in the interpenetration model.

When 'a' is set equal to 1, the relative mass flow rate is smaller, but not zero like the Baer and Nunziato model (1986).

Now, the helium volume fraction is set equal to 0.5 in all the tube. The pressure of the left chamber is 0.13 MPa, and the pressure of the right one is 0.1 MPa. The others variables are the same as in the previous test. Results are shown in Figure 4.18 at time $t=0.5\text{ms}$.

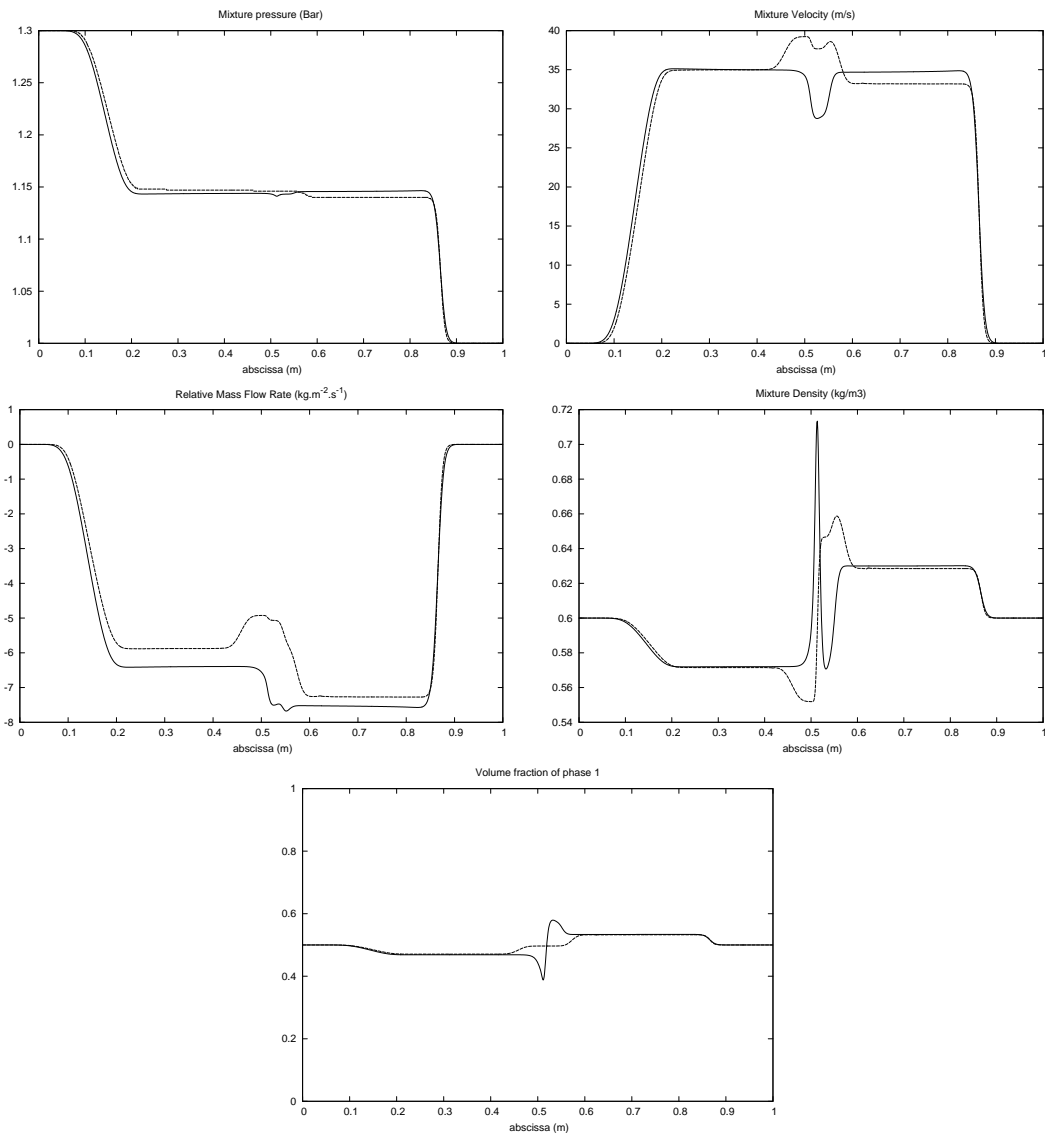


Figure 4.18 Helium/Air shock tube. The interpenetration model results are shown with full lines and the Baer and Nunziato model results are shown with dash lines. A 1000 cell mesh is used. Parameter ‘a’ of the interfacial pressure model is set to 0 in the interpenetration model.

Results are in good agreement for the shocks. But, differences can be observed at the middle of the tube.

To conclude, the interpenetration parameter ‘a’ in the interface pressure definition (4.27) allows controlling the interpenetration phases rate. Nevertheless, the model needs the presence of an initial mixing layer as the relative mass flow rate $m = \rho Y_1 Y_2 w$ involves the product $Y_1 Y_2$. Indeed, in the case of an interface separated by two pure fluids, $Y_1 Y_2$ is nearly zero in each cell, so that the relative mass flow rate is nearly zero too. Contrarily, when an initial mixing layer is present, $Y_1 Y_2$ is not zero in the mixing zone, and if w is non zero interpenetration occurs.

VII. Unstable interface in a shock tube

VII.1. Light/heavy fluid configuration

The description is given in the previous chapter.

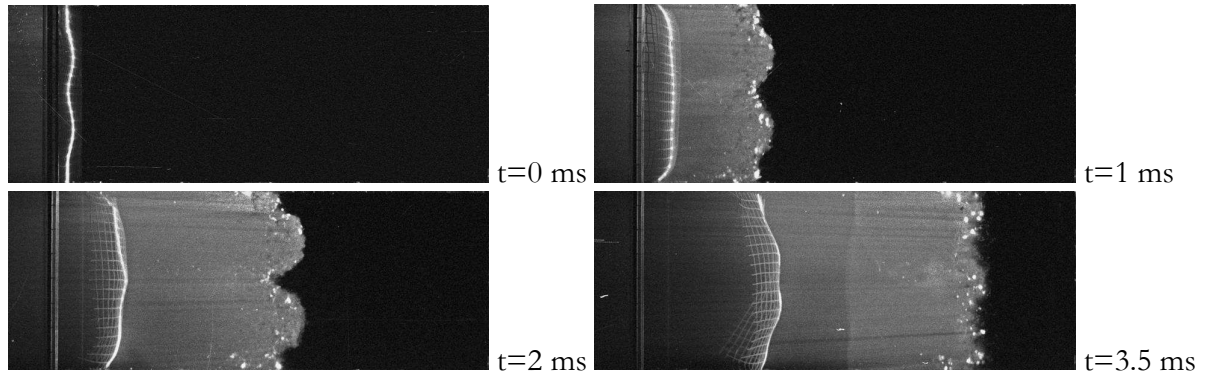


Figure 4.19 Laser sheet pictures showing the interaction of a shock wave ($M=1.15$), moving from left to right, with a stereolithographed sinusoidal interface ($\lambda_0 = 80\text{mm}$ and $\eta_0 = 3\text{mm}$) in the light/heavy configuration (air on the left and SF6 on the right).

In this case, the interface grows significantly in the shock propagation direction. Then the shock wave is reflected from the tube end wall. Its interaction with the mixing layer leads to the beginning of a reversal phase (not shown hereafter).

We only examine the interface growth before the interaction with the reflected wave.

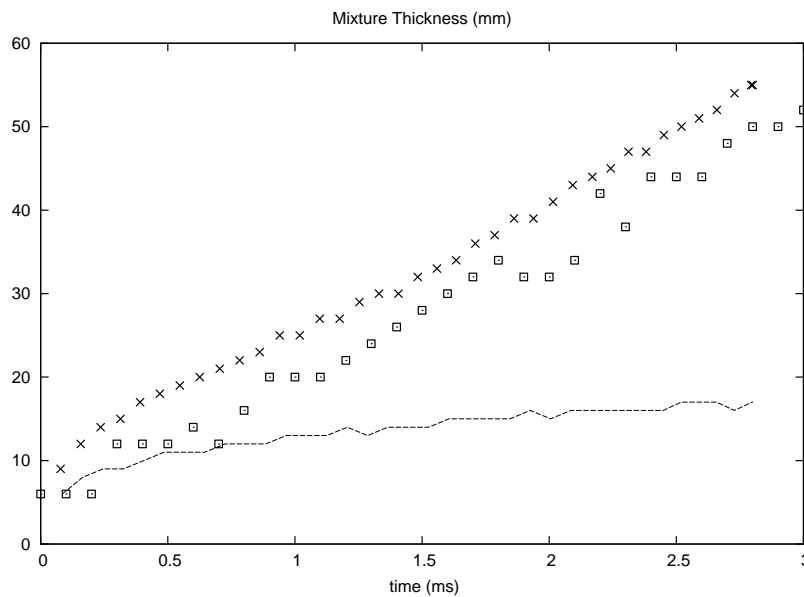


Figure 4.20 Experimental (squares) and numerical interface thickness versus time. Excellent agreement is obtained with the interpenetration parameter “a” set to 0 (crosses). The numerical diffusion is shown in dash line. The mesh has 500 cells and high order extension of the method is used with Van Leer limiter.

The interpenetration parameter “a” is set equal to 0 in order to considering that the interface is permeable. In order to control the relative velocity production, we use the following relaxation function:

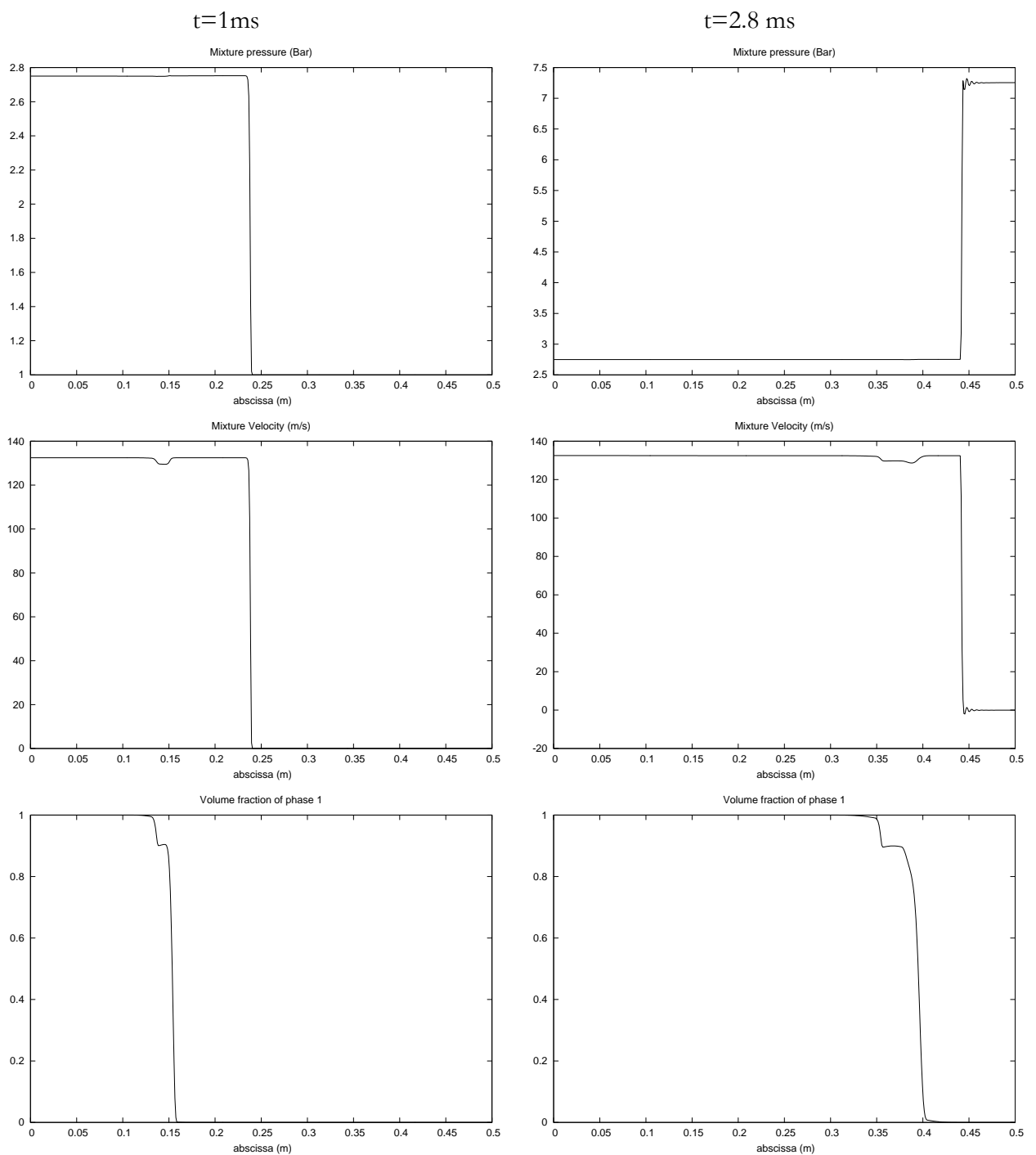
$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\lambda w \quad \text{with} \quad \lambda = \frac{\lambda_0}{\rho Y_1 Y_2} \quad \text{when the incident shock wave is in the mixture zone, and}$$

$\lambda = 0$ otherwise. For this test, λ_0 is set equal to 10000 s^{-1} .

The interface thickness is not a consequence of numerical diffusion as shown by the bottom curve of Figure 4.20, corresponding to results obtained with the interface model in absence of interpenetration effects. This is a consequence of the fine mesh that has been used (500 cells for 50 cm) and second order algorithm (Saurel et al., 2009) with van Albada et al. (1982) limiter.

It is worth to mention that for such test problem, conventional multi-velocity flow models (Saurel et al., 2003) fail to reproduce dynamic appearance of such mixing layer. Non-conservative terms $u_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}$ and $p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}$ present in System (4.1) are responsible for the fulfilment of non-permeable interface conditions ($u = \text{cst.}, p = \text{cst.}$) when the volume fraction varies from zero to one, forbidding interpenetration. The effects of these terms, when correctly solved in the presence of large volume fraction discontinuities are explained in Abgrall and Saurel (2003), Figures 12 and 13 of that reference.

The computed flow variables are shown in the Figure 4.21 at two instants, 1 ms and 2 ms, both after shock interface interaction. The pressure, velocity, volume fraction and mixture density profiles are reported. The volume fraction field appears more and more diffused, as expected.



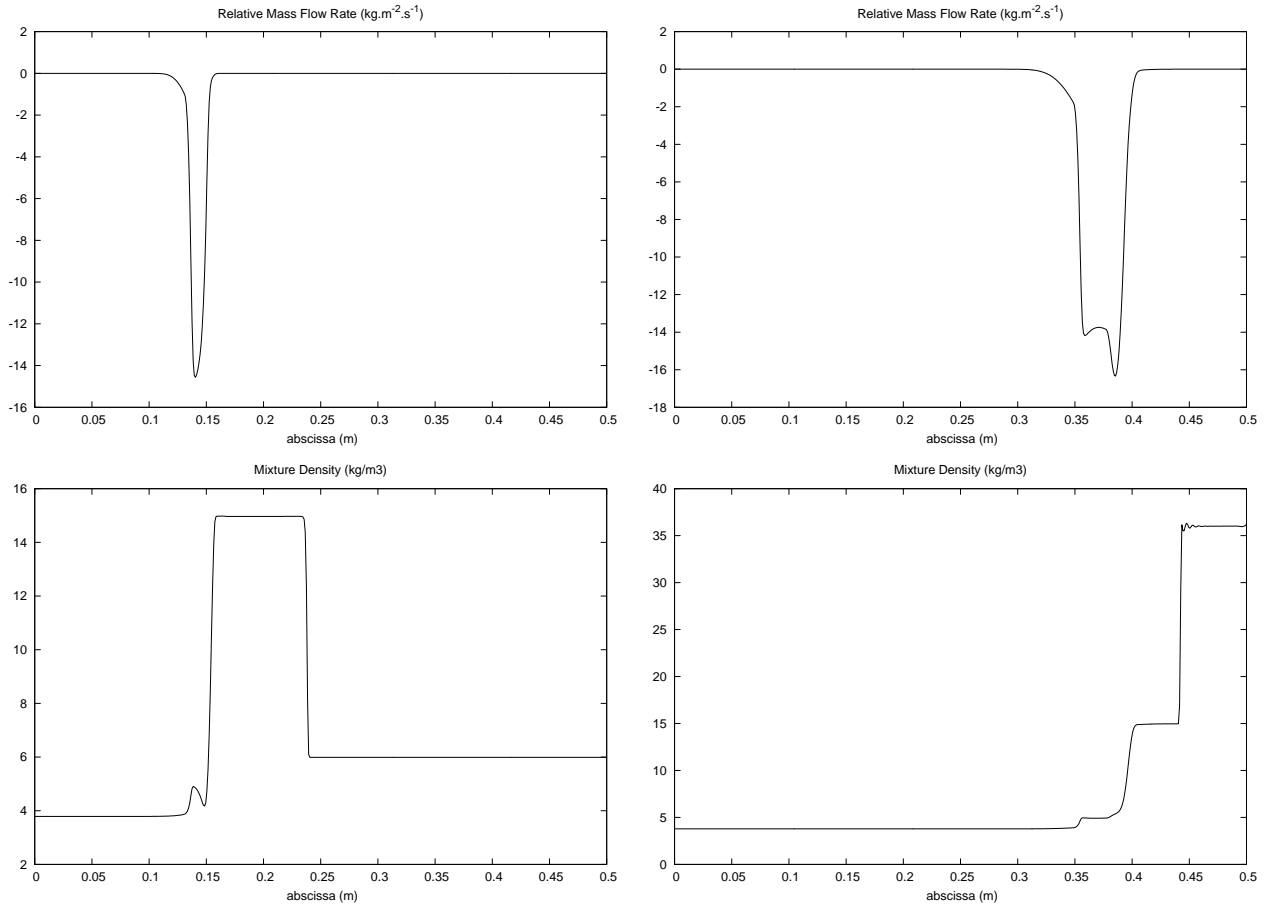


Figure 4.21 Pressure, velocity, volume fraction and mixture density computed profiles at times 1 ms and 2.8 ms. The phase 1 is air.

In the light/heavy case, the one-dimensional interpenetration model reproduces the mixing layer with a well chosen relaxation parameter. The mixing layer thickness grows and a volume fraction plateau appears. With this model, inertia drift effects are correctly taken into account, allowing the mixing layer thickness to evolve correctly.

VII.2. Heavy/light fluid configuration

In the present configuration, we consider a shock tube containing a heavy fluid (air) on the left and a light one (Helium - He) ($\gamma=1.4$) on the right at density 0.164 kg/m^3 , separated by a sinusoidal perturbed interface, as shown in the Figure 4.22. Experimentally, the same protocol as the previous configuration was used. Furthermore, in order to keep the incident shock wave Mach number constant, air was conserved on the left, and another gas (He) lighter than air was used on the right.

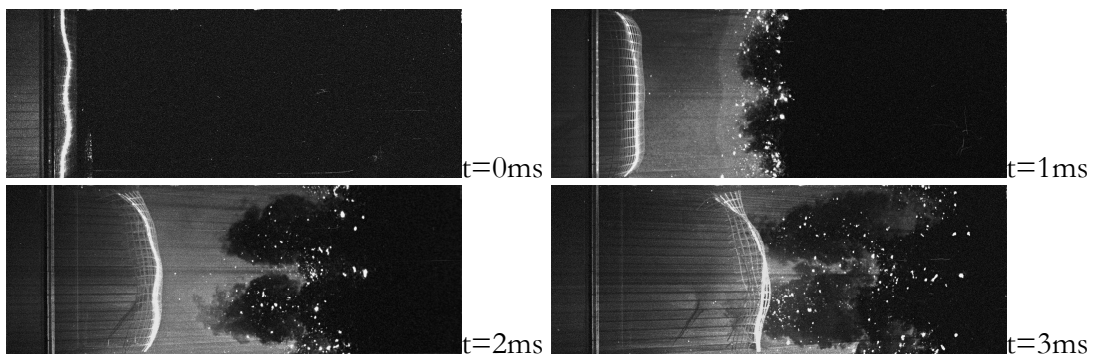


Figure 4.22 Laser sheet pictures showing the interaction of a shock wave ($M=1.15$), moving from left to right, with a stereolithographed sinusoidal interface ($\lambda_0 = 80\text{mm}$ and $\eta_0 = 3\text{mm}$) in the heavy/light configuration (air on the left and He on the right).

As we can see in the present configuration, the heavy/light interface overturns immediately following the incident shock acceleration. Later, we observe a quick distortion of the interface into mushroom structures.

In this case, the interface perturbations decreases and then grows significantly in the shock propagation direction, even after the coming back of the reflected shock wave from the shock tube end wall (not shown hereafter). Here also, we only examine the interface growth before the interaction with the reflected wave.

The interpenetration model is unable to deal with the interface inversion phenomenon. Indeed, with the one-dimensional model, information is missing. The model first sharpens the interface, as predicted in the experiments, then the product $Y_1 Y_2$ goes to zero everywhere. Interpenetration is thus interrupted by the inversion process.

To restore interpenetration, the relative velocity $w = -18 \text{ m.s}^{-1}$ is set everywhere in the tube at latter time $t = 1.10^{-4} \text{ s}$.

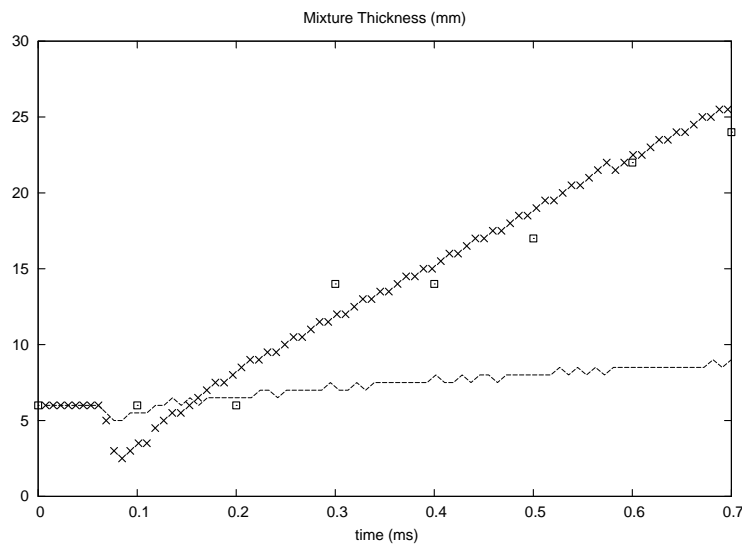
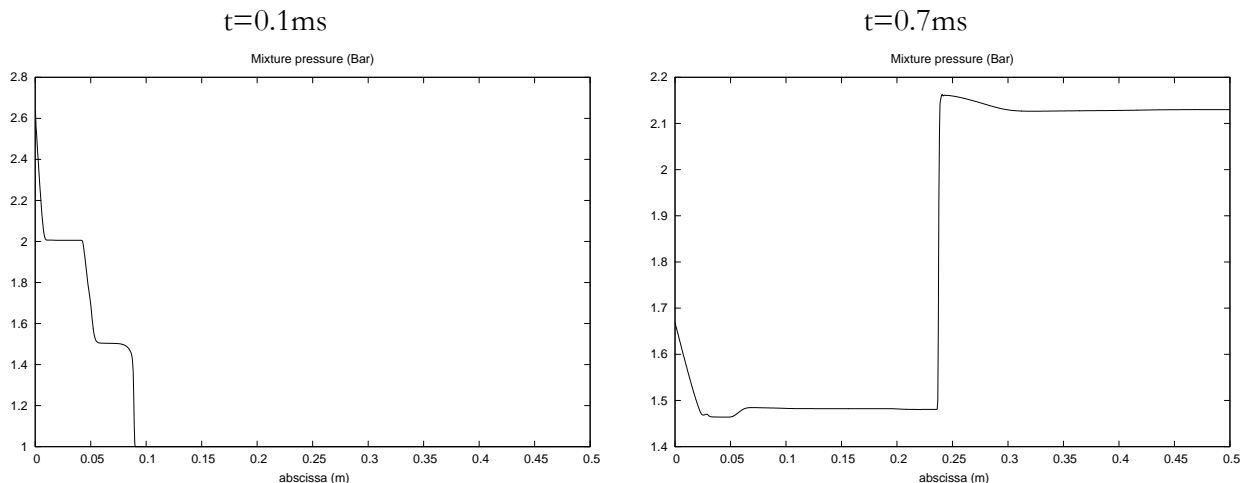


Figure 4.23 Experimental (squares) and numerical interface thickness versus time. Excellent agreement is obtained with the interpenetration parameter “a” set to 0 (crosses). The numerical diffusion is shown in dash line. The mesh has 1000 cells and high order extension of the method is used with Van Leer limiter. At time $t = 1.10^{-4} \text{ s}$, the relative velocity is set arbitrarily to $w = -18 \text{ m.s}^{-1}$ everywhere.

The computed flow variables are shown in the Figure 4.24 at two instants, 0.1 ms and 0.7 ms, both after shock interface interaction, and after the overturning of the interface. The pressure, velocity, volume fraction and mixture density profiles are reported. The volume fraction field appears more and more diffused.



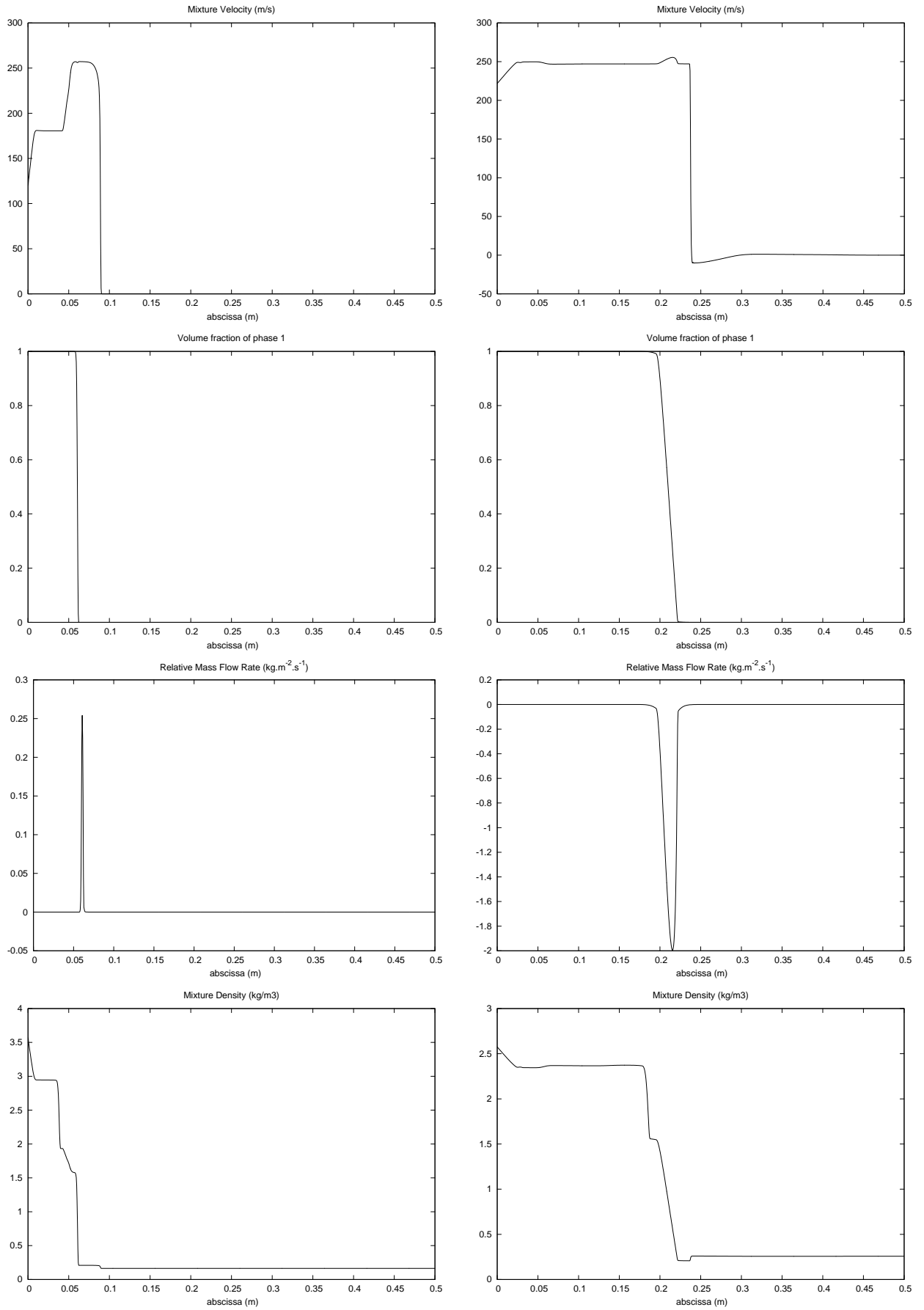


Figure 4.24 Pressure, velocity, volume fraction and mixture density computed profiles at times 0.1 ms and 0.7 ms. The phase 1 is air.

VIII. Conclusion

A multiphase hyperbolic flow model for stable and unstable fluid-fluid interfaces has been built. Compared to existing two-phase flow models, the new model is able to predict dynamic creation of multidimensional mixing zones with a one-dimensional approach. The model presents some nice features:

- it fits the frame of diffuse interface modelling,
- it is able to model multi-velocity mixtures.

However, at present, the algorithm used for the second system (interpenetration) is not robust enough to consider explosion situations that involve strong pressure waves and large density ratios. Another fundamental difficulty is related to the limited range of hyperbolicity ($|w| < \text{Min}(c_1, c_2)$) that poses computational difficulties. But the most important difficulty lies in the model limitation to reproduce the interfaces inversion phenomenon in the heavy-light case. In the next chapter, we introduce another approach to overcome this difficulty.

Chapitre 5 : Modèle de diffusion d'interface

I. Introduction

Dans les chapitres précédents, deux modèles permettant de résoudre des problèmes à deux vitesses (sédimentation par exemple) ont été présentés. Le premier modèle (Chapitre 3) est cependant incapable de reproduire correctement l'épaississement d'une interface traversée par une onde de choc. Il n'épaissit l'interface qu'au passage de l'onde. Cela est dû à l'absence de termes d'inertie dans l'équation sur la vitesse relative. Le second modèle (Chapitre 4), prenant en compte cette inertie, est capable de simuler cet épaississement, mais uniquement dans la configuration fluide léger / fluide lourd. En effet, dans le cas lourd/léger, au passage de l'onde de choc, la forme de l'interface s'inverse et une description monodimensionnelle est insuffisante pour rendre compte de ce phénomène. Ces modèles à deux vitesses présentent donc des défauts pour un traitement efficace de l'interpénétration.

Dans ce chapitre, on introduit un modèle d'interpénétration par diffusion artificielle. Pour établir ce modèle et s'assurer de sa compatibilité avec la seconde loi de la thermodynamique, on part du modèle à deux vitesses du chapitre précédent que l'on transforme progressivement. Ce modèle est d'abord modifié de manière à ce qu'il devienne inconditionnellement hyperbolique. On examine ensuite sa formulation discrète et on montre, qu'en présence de relaxation rapide de la vitesse relative, le modèle limite associé contient des termes diffusifs supplémentaires dont on se servira pour modéliser l'épaississement de l'interface. Les effets d'interpénétration sont alors modélisés au travers d'une viscosité artificielle qui résumerait les effets multidimensionnels apparaissant durant l'évolution instable de l'interface. La détermination du paramètre de diffusion est traitée dans le prochain chapitre.

II. Etablissement d'un modèle d'interpénétration simplifié

Dans le chapitre précédent, le modèle suivant a été obtenu

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left((\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \frac{\partial u}{\partial x} + \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial m}{\partial x} + \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1 Z_1} - \frac{\Gamma_2}{\alpha_2 Z_2} \right) \frac{Z_1 Z_2 \Lambda}{Z_1 + Z_2} w^2 - m \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right)$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} + \frac{\partial m}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} - \frac{\partial m}{\partial x} = 0 \tag{5.1}$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + p_t)}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left[\left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w + u \right) w \right]}{\partial x} + (v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x} = - \frac{\Lambda}{\rho Y_1 Y_2} w$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \left((\rho E + p + p_t) u + m \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right) \right)}{\partial x} = 0$$

Avec

$$m = \rho Y_1 Y_2 w$$

$$E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2 + e_t$$

$$e_t = \frac{1}{2} Y_1 Y_2 w^2$$

$$p_t = \rho Y_1 Y_2 w^2$$

$$\Lambda = \lambda + a^0 \frac{Z_1 Z_2}{Z_1 + Z_2} \left| \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} \right|$$

On va considérer dans la suite que a^0 est nul.

On a vu que ce système peut se décomposer en deux sous-systèmes. Le premier correspond à l'évolution du champ d'écoulement moyen. Les phases se déplacent alors à la même vitesse.

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_1}{dt} &= \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2 (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2)}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial\rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + p_t)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial w u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial\rho E}{\partial t} + \frac{\partial(\rho E + p + p_t)u}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (5.2)$$

Le second sous-système correspond à l'interpénétration, c'est-à-dire qu'il tient compte de la différence de vitesse entre les deux phases. Dans le cas d'un problème à interfaces, cela revient à se placer dans le référentiel de l'interface et observer le transfert de masse des deux phases au travers de celle-ci. On peut écrire ce système de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial\rho u}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial(\alpha\rho s)_1}{\partial t} + \frac{\partial m s_1}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\alpha\rho s)_2}{\partial t} - \frac{\partial m s_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial\left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w^2\right)}{\partial x} + (v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x} &= -\frac{\lambda}{\rho Y_1 Y_2} w \end{aligned} \quad (5.3)$$

Avec $m = \rho Y_1 Y_2 w$

L'équation d'énergie totale du mélange s'écrit

$$\frac{\partial\rho E}{\partial t} + \frac{\partial m \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} = 0$$

On rappelle que $E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2 + \frac{1}{2} Y_1 Y_2 w^2$

On va dégrader le sous-système (5.3), pour obtenir un nouveau sous-système d'interpénétration qui devra :

- respecter les principes de conservation,
- respecter l'inégalité d'entropie,
- être inconditionnellement hyperbolique,
- permettre l'ajustement du modèle par rapport aux expériences avec le minimum de paramètres (un seul en l'occurrence).

Cette nouvelle approche va être décrite ci-après.

Dans la suite, on omet volontairement les termes de relaxations de vitesse par soucis de simplification. On les rajoutera par la suite.

II.1 Modèle en équilibre de pression

Le sous-système d'interpénétration (5.3), en absence d'équation d'évolution sur l'écart de vitesses, s'écrit:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\
 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1}{\partial t} + \frac{\partial m s_1}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 s_2}{\partial t} - \frac{\partial m s_2}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial m H}{\partial x} &= 0
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

Où, $E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2 + e_t$.

Avec,

$$\begin{aligned}
 m &= \rho Y_1 Y_2 w \\
 H &= h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \\
 e_t &= \frac{1}{2} Y_1 Y_2 w^2
 \end{aligned}$$

La fermeture du système est assurée par les lois d'états des fluides, et en donnant les expressions de m , H et e_t . Cette formulation respecte les principes de conservation.

On propose dans un premier temps, les simplifications suivantes:

$$\begin{aligned}
 m &= \rho a w \\
 H &= (h_1 - h_2) \\
 e_t &= \frac{1}{2} a w^2
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

où 'a' est une constante réelle dont on ne précise pas le signe pour l'instant, qui remplace le produit $Y_1 Y_2$ dans le flux de masse du modèle (5.3).

On a retiré le terme $\frac{\partial m (Y_2 - Y_1) w^2}{\partial x}$ de l'équation d'énergie du système (5.3) car on sait qu'il est responsable de l'hyperbolicité conditionnelle du système.

Equation de vitesse relative

On détermine la nouvelle équation de vitesse relative à partir de l'équation d'énergie totale du mélange:

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 + \alpha_2 \rho_2 e_2 + \frac{1}{2} \rho u^2 + \frac{1}{2} \rho a w^2}{\partial t} + \frac{\partial \rho a w (h_1 - h_2)}{\partial x} = 0$$

A l'aide des équations d'entropies et des équations de masse, on peut écrire les équations d'énergie de chacune des phases.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial m h_1}{\partial x} - m v_1 \frac{\partial p}{\partial x} + p \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} - \frac{\partial m h_2}{\partial x} + m v_2 \frac{\partial p}{\partial x} - p \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= 0 \end{aligned} \quad (5.6)$$

On soustrait ces deux équations à l'équation d'énergie totale de mélange et après développement on obtient.

$$\frac{\partial w}{\partial t} + (v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \quad (5.7)$$

Le terme de flux $\frac{\partial \left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w^2 \right)}{\partial x}$ n'apparaît plus dans l'équation de vitesse relative. Seul le terme de création $(v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x}$ reste présent.

Equation de fraction volumique

On détermine l'équation de fraction volumique, à l'aide de la condition d'équilibre des pressions des phases: $p_1(\rho_1, s_1) = p_2(\rho_2, s_2)$.

En différenciant cette identité, on obtient :

$$c_1^2 \frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{\partial s_1}{\partial t} = c_2^2 \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \rho_2 \Gamma_2 T_2 \frac{\partial s_2}{\partial t}$$

Et en utilisant les équations de masse et d'entropie, on obtient alors

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = - \frac{\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2}}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} \frac{\partial m}{\partial x} - \frac{m \left(\frac{\Gamma_1 T_1}{\alpha_1} \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2 T_2}{\alpha_2} \frac{\partial s_2}{\partial x} \right)}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} \quad (5.8)$$

Résumé du modèle simplifié

Le système s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1}{\partial t} + \frac{\partial m s_1}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 s_2}{\partial t} - \frac{\partial m s_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial w}{\partial t} + (v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (5.9)$$

Ce système n'est pas hyperbolique. C'était déjà le cas dans le modèle complet d'interpénétration (5.3). On va alors proposer un modèle hors d'équilibre de pression avec le même raisonnement que dans les chapitres précédents.

II.2 Modèle hors d'équilibre de pression

Le sous-système d'interpénétration hors d'équilibre des pressions s'écrit :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial u}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1}{\partial t} + \frac{\partial m s_1}{\partial x} &= \theta \frac{\mu(p_1 - p_2)^2}{T_1} \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 s_2}{\partial t} - \frac{\partial m s_2}{\partial x} &= (1 - \theta) \frac{\mu(p_1 - p_2)^2}{T_2} \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial m H}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Où le paramètre θ doit vérifier la condition : $0 \leq \theta \leq 1$. Les définitions de m , H et e_i sont celles de (5.5).

Equation sur la vitesse relative

Les équations d'énergies internes s'écrivent maintenant :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial m h_1}{\partial x} - m v_1 \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \theta \mu (p_1 - p_2)^2 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} - \frac{\partial m h_2}{\partial x} + m v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} - p_2 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= (1 - \theta) \mu (p_1 - p_2)^2
\end{aligned} \tag{5.11}$$

On somme ces deux équations,

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 + \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial m (h_1 - h_2)}{\partial x} + m \left(v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} - v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} \right) + (p_1 - p_2) \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \mu (p_1 - p_2)^2.$$

Et en utilisant l'équation de la fraction volumique, l'équation devient

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 + \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial m (h_1 - h_2)}{\partial x} + m \left(v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} - v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} \right) = 0.$$

On substitue cette équation à l'équation d'énergie totale et on obtient l'équation de vitesse relative suivante :

$$\frac{\partial w}{\partial t} + v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} = 0 \tag{5.12}$$

Résumé du modèle hors d'équilibre des pressions

Le système hors d'équilibre des pressions s'écrit donc :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \mu(\rho_1 - \rho_2) \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho s)_1}{\partial t} + \frac{\partial ms_1}{\partial x} &= \theta \frac{\mu(\rho_1 - \rho_2)^2}{\Gamma_1} \\
\frac{\partial(\alpha\rho s)_2}{\partial t} - \frac{\partial ms_2}{\partial x} &= (1 - \theta) \frac{\mu(\rho_1 - \rho_2)^2}{\Gamma_2} \\
\frac{\partial w}{\partial t} + v_1 \frac{\partial \rho_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial \rho_2}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{5.13}$$

Ce système peut s'écrire, en omettant les termes de relaxation, en variables primitives,

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = 0.$$

Avec,

$$\mathbf{W} = (\alpha_1, u, s_1, s_2, \rho_1, \rho_2, w)^T,$$

et

$$\mathbf{A}(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{aw}{Y_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{aw}{Y_2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{(\rho_1 - \rho_2)aw}{\alpha_1} & 0 & 0 & 0 & aw & \frac{\alpha_2}{\alpha_1} aw & \frac{\rho a}{\alpha_1} \\ -\frac{(\rho_1 - \rho_2)aw}{\alpha_2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\alpha_1}{\alpha_2} aw & -aw & -\frac{\rho a}{\alpha_2} \\ 0 & 0 & \Gamma_1 T_1 & -\Gamma_2 T_2 & \frac{c_1^2}{\rho_1} & -\frac{c_2^2}{\rho_2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Ce système est hyperbolique et admet pour vitesses d'ondes:

$$\lambda_1 = -\sqrt{a \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} \right)}$$

$$\lambda_2 = -a \frac{w}{Y_2}$$

$$\lambda_{3-5} = 0$$

$$\lambda_6 = a \frac{w}{Y_1}$$

$$\lambda_7 = \sqrt{a \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} \right)}.$$

Le système est hyperbolique à condition que le paramètre 'a' soit positif. Mais il n'y a plus aucune

condition sur la valeur de la vitesse relative.

II.3 Sous-système pour le champ d'écoulement moyen

Définition de la pression turbulente

On a fixé l'expression de l'énergie turbulente e_t , mais il reste à déterminer l'expression de la pression turbulente p_t . Cette dernière n'apparaît pas dans le sous-système d'interpénétration mais uniquement dans le sous-système utilisé pour le champ d'écoulement moyen (5.14). On revient donc sur ce sous-système. On cherche à exprimer p_t de manière à ce que pour que le sous-système hydrodynamique (5.14) reste isentropique et hyperbolique.

$$\begin{aligned}
 \frac{d\alpha_1}{dt} &= \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2 (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2)}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \frac{\partial u}{\partial x} \\
 \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial\rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + p_t)}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial w u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial\rho E}{\partial t} + \frac{\partial(\rho E + p + p_t)u}{\partial x} &= 0
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

On réécrit le système (5.14) en remplaçant les équations de vitesse relative et de fraction volumique par les deux équations d'entropie, on obtient le système (5.15). On détermine l'expression de p_t de manière à ce que le système (5.15) soit strictement équivalent au sous-système (5.14). C'est-à-dire que l'on cherche à retrouver exactement l'équation de vitesse relative et l'équation de fraction volumique. De cette manière, le sous-système hydrodynamique (5.14) respectera l'inégalité s'entropie.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{ds_1}{dt} &= 0 \\
 \frac{ds_2}{dt} &= 0 \\
 \frac{\partial\rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + p_t)}{\partial x} &= 0 \\
 \frac{\partial\rho E}{\partial t} + \frac{\partial(\rho E + p + p_t)u}{\partial x} &= 0
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

L'équation sur la fraction volumique s'obtient à partir de l'égalité des pressions et des équations d'entropies. On retrouve alors ,

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2 (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2)}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \frac{\partial u}{\partial x},$$

mais le calcul ne fait intervenir ni l'expression de l'énergie ni celle de la pression turbulente.

Il reste à retrouver l'équation de vitesse relative.

Grâce à l'identité de Gibbs et des équations d'entropie, on écrit :

$$\frac{de_k}{dt} + p \frac{dv_k}{dt} = 0, k=1,2.$$

À l'aide des équations de masse on obtient :

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k e_k}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_k \rho_k e_k u}{\partial x} + p \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + p \frac{\partial \alpha_k u}{\partial x} = 0.$$

Et en sommant les deux équations d'énergie, on a :

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1 u}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 e_2 u}{\partial x} + p \frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

On soustrait cette équation à l'énergie totale :

$$\frac{\partial \frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e_t + p + p_t \right) u}{\partial x} - p \frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

Enfin, à l'aide de l'équation sur la vitesse du mélange on obtient :

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho e_t u}{\partial x} + p_t \frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

Cette équation doit donc être équivalente à l'équation de vitesse relative. On a alors une relation entre l'énergie et la pression turbulente.

On remplace e_t par son expression, c'est-à-dire $e_t = \frac{1}{2} a w^2$:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial w u}{\partial x} - w \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{p_t}{\rho a w} \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

En posant, $p_t = \rho a w^2$, on retrouve l'équation de vitesse relative du système (5.14) :

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial w u}{\partial x} = 0$$

Le premier sous-système (5.14) respecte le second principe de la thermodynamique avec les définitions :

$$\begin{aligned} m &= \rho a w \\ H &= (h_1 - h_2) \\ e_t &= \frac{1}{2} a w^2 \\ p_t &= \rho a w^2 \end{aligned} \tag{5.16}$$

Ses vitesses d'ondes sont alors :

$$\lambda_1 = u - \sqrt{c_w^2 + 3a w^2}$$

$$\lambda_{2-4} = u$$

$$\lambda_5 = u + \sqrt{c_w^2 + 3a w^2}$$

II.4 Résumé du modèle simplifié

Le modèle d'interpénétration s'écrit donc comme la somme du sous-système hydrodynamique (5.14) et du sous-système d'interpénétration (5.4). On insère aussi le terme de relaxations des vitesses (traînée) dans l'équation de vitesse relative.

$$\begin{aligned}
\frac{d\alpha_1}{dt} &= \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left((\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \frac{\partial u}{\partial x} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial m}{\partial x} - m \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right) \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \hat{p}u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + p_t)}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial wu}{\partial x} + (v_1 - v_2) \frac{\partial \hat{p}}{\partial x} &= -\frac{\lambda}{\rho Y_1 Y_2} w \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial((\rho E + p + p_t)u + m(h_1 - h_2))}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{5.17}$$

A l'exception de l'équation sur la vitesse relative et de celle sur la fraction volumique, les équations sont sous forme conservative. Ce modèle présente en outre deux paramètres, 'a' et λ .

Sa structure s'éloignant peu de celle du modèle du Chapitre 4, le problème de l'inversion d'interfaces subsistera (cas lourd/léger des instabilités de Richtmyer-Meshkov). En effet, pour cela il faudrait que la vitesse relative change de signe au moment de cette inversion, ce qui ne semble pas possible avec le Système (5.17).

En raison de ces difficultés, on va chercher à réduire ce modèle afin d'atteindre les deux objectifs suivants :

- traitement du phénomène d'inversion,
- obtention d'un modèle à un seul paramètre.

III. Limites asymptotiques

La réduction du modèle (5.17) va être entreprise par analyse asymptotique. Cependant, nous allons voir que selon la méthode utilisée, deux modèles limites distincts peuvent être obtenus. Le premier modèle limite est obtenu par la méthode classique d'analyse asymptotique. Le second modèle est obtenu par une analyse semi-discrète et conduit à un modèle limite très différent.

III.1 Limite asymptotique 'classique'

On considère la limite $\lambda \rightarrow +\infty$ et on examine la limite asymptotique de l'équation sur la vitesse relative du Système (5.17).

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial wu}{\partial x} + (v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{\lambda}{\rho Y_1 Y_2} w$$

Par soucis de simplification, on pose $\kappa = \frac{\lambda}{\rho Y_1 Y_2}$, et on considère la limite $\kappa \rightarrow +\infty$

On pose $\kappa = \frac{\kappa^0}{\varepsilon}$ et $w = w^0 + \varepsilon w^1$. On obtient

$$\frac{\partial(w^0 + \varepsilon w^1)}{\partial t} + \frac{\partial(w^0 + \varepsilon w^1)u}{\partial x} + (v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x} = -\kappa^0 \frac{(w^0 + \varepsilon w^1)}{\varepsilon}$$

C'est à dire

$$\frac{\partial w^0}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial w^1}{\partial t} + \frac{\partial w^0 u}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial w^1 u}{\partial x} + (v_2 - v_1) \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{1}{\varepsilon} \kappa^0 w^0 - \kappa^0 w^1$$

A l'ordre $\frac{1}{\varepsilon}$ on obtient $w_0 = 0$.

A l'ordre ε on obtient: $\frac{\partial w^1}{\partial t} + \frac{\partial w^1 u}{\partial x} = 0$

A l'ordre 0 on obtient : $(v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x} = -\kappa^0 w^1$

Ainsi, $w = w_0 + \varepsilon w^1 = \frac{\varepsilon}{\kappa^0} (v_2 - v_1) \frac{\partial p}{\partial x}$.

Le modèle limite correspondant s'écrit donc

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\begin{array}{l} (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \frac{\partial u}{\partial x} \\ - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\varepsilon}{\kappa^0} \rho a (v_2 - v_1) \frac{\partial p}{\partial x} \\ - \frac{\varepsilon}{\kappa^0} \rho a (v_2 - v_1) \frac{\partial p}{\partial x} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \end{array} \right)$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\varepsilon}{\kappa^0} \rho a (v_2 - v_1) \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \quad (5.18)$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\varepsilon}{\kappa^0} \rho a (v_2 - v_1) \frac{\partial p}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \left((\rho E + p) u + \frac{\varepsilon}{\kappa^0} \rho a (v_2 - v_1) (h_1 - h_2) \frac{\partial p}{\partial x} \right)}{\partial x} = 0$$

Maintenant, l'énergie totale est définie par :

$$E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2$$

En effet, l'énergie turbulente fait intervenir un terme en ε^2 , qui devient négligeable. La pression turbulente a disparu pour les mêmes raisons.

Ainsi le modèle limite (5.17) n'est rien d'autre que le système d'interpénétration de type Darcy déjà établi dans le Chapitre 3 (le produit $Y_1 Y_2$ a été remplacé par le paramètre 'a'). On a déjà vu que ce modèle ne permet pas de simuler correctement le phénomène d'interpénétration car il ne prend pas en compte les effets d'inertie.

Cependant, bien que cette limite mathématique soit correcte, on peut trouver une autre limite, admissible par rapport à la seconde loi de la thermodynamique, qui sera plus adaptée au traitement du phénomène d'interpénétration.

III.2 Limite asymptotique 'discrète'

On s'intéresse maintenant à la limite semi-discrète produite par un schéma numérique classique procédant par un découpage d'opérateurs (méthode de 'splitting'), basée sur la résolution des sous systèmes hyperboliques d'une part et celle des sous systèmes de relaxation d'autre part. Il est ainsi nécessaire d'entrer un peu plus dans le détail des formulations discrètes associées.

A chaque pas de temps, on calculera le terme de relaxation de vitesse présent dans l'équation de vitesse relative :

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\lambda}{\rho Y_1 Y_2} w$$

Si on considère cette équation dans le cadre de la limite $\lambda \rightarrow +\infty$, on obtient en tout point et à chaque instant $w(x,t)=0$.

III.2.1 Sous-système hydrodynamique pour le champ d'écoulement moyen

Si la condition initiale pour la résolution du système (5.17) est telle que $w=0$ en tout point, alors ce système se réduit au modèle de Kapila (2001) dont la méthode de résolution numérique est décrite en détail dans le Chapitre 2 et dans Saurel et al. (2009). Nous ne revenons donc pas plus en détail sur la résolution de l'écoulement moyen.

III.2.2 Système d'interpénétration

On doit maintenant résoudre le second sous-système :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial m}{\partial x} + m \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right) &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \hat{\phi} u}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial w}{\partial t} + (v_1 - v_2) \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial m (h_1 - h_2)}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \tag{5.19}$$

avec,

$$E = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 + \frac{1}{2} u^2 + e_t.$$

L'équation sur la fraction volumique étant complexe, on préfère considérer le système hors d'équilibre des pressions:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \mu (p_1 - p_2) \\ \frac{\partial (\alpha_1 \rho_1)}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha_2 \rho_2)}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \hat{\phi} u}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial w}{\partial t} + v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial (\alpha_1 \rho_1 s_1)}{\partial t} + \frac{\partial m s_1}{\partial x} &= 0 \frac{\mu (p_1 - p_2)^2}{T_1} \\ \frac{\partial (\alpha_2 \rho_2 s_2)}{\partial t} - \frac{\partial m s_2}{\partial x} &= (1-0) \frac{\mu (p_1 - p_2)^2}{T_2} \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial m (h_1 - h_2)}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \tag{5.20}$$

Avec la même définition de l'énergie totale. Le système (5.20) contient des redondances, puisque 8 équations sont présentes au lieu de 7, mais nous savons qu'une formulation surdéterminée du

système peut être utile pour la résolution numérique (Saurel et al., 2009), en particulier lors de l'étape de réinitialisation des énergies.

Comme d'habitude on résout ce système en deux étapes : étape hyperbolique (sans les termes de relaxation) puis étape de relaxation des pressions.

Etape hyperbolique

On considère le système suivant :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial w}{\partial t} + v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1}{\partial t} + \frac{\partial m s_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 s_2}{\partial t} - \frac{\partial m s_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial m(h_1 - h_2)}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{5.21}$$

On résout le Système (5.21) par un schéma de Godunov classique (5.22) avec un solveur à deux ondes (5.23) (Harten et al., 1983) :

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n) \tag{5.22}$$

Avec,

$$F_{i+1/2} = \frac{S_{R,i+1/2} F_i - S_{L,i+1/2} F_{i+1} + S_{L,i+1/2} S_{R,i+1/2} (U_{i+1} - U_i)}{S_{R,i+1/2} - S_{L,i+1/2}} \tag{5.23}$$

où $U = (\alpha_1, \alpha_1 \rho_1, \alpha_2 \rho_2, \rho u, \alpha_1 \rho_1 s_1, \alpha_2 \rho_2 s_2, \rho E)^T$ et $F = (0, m, -m, 0, m s_1, -m s_2, \rho a w (h_1 - h_2))^T$.

Les vitesses d'ondes sont :

$$S_L = -\sqrt{a \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} \right)} \text{ et } S_R = +\sqrt{a \left(\frac{c_1^2}{Y_1} + \frac{c_2^2}{Y_2} \right)}.$$

Sous forme condensée, ce système s'écrit :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0,$$

avec,

$$U = (\alpha_1, \alpha_1 \rho_1, \alpha_2 \rho_2, \rho u, \alpha_1 \rho_1 s_1, \alpha_2 \rho_2 s_2, \rho E)^T$$

et ,

$$F = (0, m, -m, 0, m s_1, m s_2, m(h_1 - h_2))^T.$$

Si on considère maintenant la limite $w=0$ en tout point, l'expression des flux (5.23) sur chaque bord de maille se réduit alors à :

$$F_{i+1/2} = S_{L,i+1/2} S_{R,i/2} \frac{(U_{i+1} - U_i)}{S_{R,i+1/2} - S_{L,i+1/2}} \tag{5.24}$$

Il ne reste donc plus que les termes liés à la diffusion numérique du schéma.

Comme la vitesse d'onde contient le paramètre d'interpénétration 'a', on peut choisir ce paramètre tel que :

$$S_{i+1/2} = S_{i-1/2} = S^{\text{ref}}$$

La vitesse d'onde S^{ref} pourra être choisie constante durant tout le calcul pour tout point, ou variable en fonction du temps si nécessaire et éventuellement aussi en fonction de l'espace. Pour des raisons de simplicité, on considère S^{ref} comme une constante pure. Le schéma de Godunov devient :

$$U_i^{n+1} = U_i^n + \frac{S^{\text{ref}} \Delta t}{2\Delta x} (U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n)$$

On peut présenter cette formule de la façon suivante,

$$U_i^{n+1} = U_i^n + \frac{\Delta x S^{\text{ref}}}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n).$$

Cette expression montre que nous avons en fait résolu un système de diffusion avec le coefficient de diffusion $D = \frac{\Delta x S^{\text{ref}}}{2}$.

Le modèle limite continu s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 s_2}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 s_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho E}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \tag{5.25}$$

La solution du système d'interpénétration est donc obtenue par un schéma de viscosité artificielle dont la diffusion est contrôlée par S^{ref} . Cette viscosité artificielle est bien évidemment différente de celle utilisée pour le solveur hyperbolique, qui utilise des vitesses d'ondes physiques.

Malheureusement dans le système (5.25), les équations d'entropies ne sont pas compatibles à l'équation d'énergie totale. Pour assurer la compatibilité du système, il est nécessaire de travailler avec les énergies totales des phases plutôt que les entropies.

On va donc reprendre le raisonnement, mais en travaillant avec d'autres variables. Le système (5.21) est strictement équivalent au système suivant dans lequel on a remplacé les équations d'entropies par les équations d'énergies totales.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \varphi u}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial w}{\partial t} + v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} + \frac{\partial m H_1}{\partial x} - m \frac{\partial \left(h_1 + \frac{u^2}{2} \right)}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial t} - \frac{\partial m H_2}{\partial x} + m \frac{\partial \left(h_2 + \frac{u^2}{2} \right)}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial m (h_2 - h_1)}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{5.26}$$

Avec $E_k = e_k + \frac{u^2}{2} + aw^2$ et $H_k = h_k + \frac{u^2}{2} + aw^2$

En se plaçant dans le cadre de la limite $\lambda \rightarrow +\infty$, la relaxation de vitesse décrit par l'équation

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\lambda}{\rho Y_1 Y_2} w$$

entraînera que $w=0$ et donc $m=0$.

Les termes non conservatifs des équations d'énergies des phases disparaissent. On est donc ramené à considérer le système :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \varphi u}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} + \frac{\partial m H_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial t} - \frac{\partial m H_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial m (h_2 - h_1)}{\partial x} &= 0
\end{aligned}$$

Avec $E_k = e_k + \frac{u^2}{2}$

On montre par le même raisonnement que précédemment que la résolution numérique de ce système avec le solveur de Rusanov, en considérant la limite $w=0$, revient à résoudre :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho E}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{5.27}$$

Avec le schéma numérique $U_i^{n+1} = U_i^n + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n)$

Où $U = (\alpha_1, \alpha_1 \rho_1, \alpha_2 \rho_2, \rho u, \alpha_1 \rho_1 E_1, \alpha_2 \rho_2 E_2, \rho E)$

Cette fois-ci, le système est compatible. En effet, il suffit de sommer les équations d'énergies des deux phases pour retrouver l'équation d'énergie du mélange.

On discute maintenant de l'accord du Système (5.27) avec le second principe de la thermodynamique. Il n'est pas possible de montrer à partir des équations d'entropies relatives à ce système que la seconde loi est respectée *localement*. Cependant, il est important de se rappeler que le Système (5.27) est une limite du sous-système d'interpénétration, hors d'équilibre des vitesses, présenté en début de chapitre. Or, il a été démontré que celui respecte la seconde loi de la thermodynamique. Par conséquent, on est assuré que le système de diffusion (5.27) est lui aussi en accord avec cette loi, au moins *globalement*.

Etape de relaxation des pressions

Il reste ensuite à résoudre le système de relaxation des pressions :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \mu(p_1 - p_2) \\ \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1}{\partial t} &= \theta \mu \frac{(p_1 - p_2)^2}{T_1} \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 s_2}{\partial t} &= (1 - \theta) \mu \frac{(p_1 - p_2)^2}{T_2}\end{aligned}\tag{5.28}$$

Il s'agit du système de relaxation de pression habituel dont la résolution est détaillée au Chapitre 2 de ce manuscrit. On voit très clairement qu'il respecte le second principe de la thermodynamique.

IV. Modèle de diffusion d'interface

Le sous modèle d'interpénétration (ou de diffusion d'interface) ayant maintenant été obtenu, il est intéressant de déterminer le modèle complet qui est réellement résolu.

Dans un premier temps, on revient sur le sous-système d'interpénétration qui a été considéré en deux étapes :

- diffusion,
- relaxation des pressions.

Déterminons d'abord le système assemblant ces deux sous-systèmes, qui ne sont pas écrits dans le même jeu de variables.

IV.1 Sous-système d'interpénétration hors d'équilibre des pressions

On calcule les équations d'énergies totales du système de relaxation des pressions (5.28) à partir des équations d'entropies. Le calcul est détaillé pour la phase 1 :

$$\frac{\partial s_1}{\partial t} = \theta \mu \frac{(p_1 - p_2)^2}{T_1}$$

En utilisant la relation de Gibbs on a :

$$\frac{\partial e_1}{\partial t} + p_1 \frac{\partial v_1}{\partial t} = \theta \mu (p_1 - p_2)^2$$

Grâce à l'équation de masse on obtient :

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \theta \mu (p_1 - p_2)^2$$

On simplifie avec l'équation de fraction volumique :

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} = \theta \mu p_2 (p_1 - p_2)$$

Les vitesses étant constantes durant cette étape, on a :

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} = \mu ((\theta - 1)p_1 - \theta p_2) (p_1 - p_2)$$

Par analogie, on a pour la phase 2 :

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial t} = \mu (-(\theta - 1)p_1 + \theta p_2) (p_1 - p_2)$$

Avec, $E_k = e_k + \frac{u^2}{2}$, $k=1,2$

Ainsi, le système d'interpénétration hors d'équilibre des pressions s'obtient en ajoutant les termes de relaxation de pressions au système (5.26):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1}{\partial x} &= \mu(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial x} &= \mu((\theta - 1)p_1 - \theta p_2)(p_1 - p_2) \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial x} &= -\mu((\theta - 1)p_1 - \theta p_2)(p_1 - p_2)
\end{aligned} \tag{5.29}$$

Il admet comme équation d'énergie totale du mélange,

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho E}{\partial x} = 0.$$

IV.2 Sous-système en équilibre de pression

Le modèle hors d'équilibre de pression (5.29) est résolu en faisant tendre le coefficient de relaxation des pressions μ vers l'infini. On veut savoir quel est le modèle correspondant à cette limite. On obtient alors le modèle suivant (les détails sont donnés en Annexe F):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} &= \frac{1}{\left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right)} \Theta \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0 \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho E}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{5.30}$$

$$\text{Avec } \Theta = \left(\begin{array}{l} \left(\frac{\Gamma_1 H_1 - c_1^2}{\alpha_1} \right) \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial x} - \left(\frac{\Gamma_2 H_2 - c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial x} \\ + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial x} - \frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial x} \\ + \frac{(\rho_2 \Gamma_2 - \rho_1 \Gamma_1)}{\rho} u^2 \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{(\rho_2 \Gamma_2 - \rho_1 \Gamma_1)}{\rho} u \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho u}{\partial x} \end{array} \right)$$

C'est ainsi le système (5.30) qui est effectivement résolu pour modéliser l'interpénétration. En d'autres termes, résoudre le système d'interpénétration simplifié (5.9), en faisant tendre le coefficient de relaxation des vitesses λ vers l'infini, par le schéma numérique de Rusanov revient à résoudre le système (5.30).

L'équation sur la fraction volumique est assez complexe, mais on ne la résout jamais sous cette forme. Il faut se rappeler qu'elle est équivalente à l'égalité des pressions : $p_1 = p_2 = p$ (voir Annexe F).

Les équations de masse des phases, de la quantité de mouvement du mélange, et de l'énergie totale du mélange sont de simples équations de diffusion.

Pour les mêmes raisons qui ont été données pour le Système (5.27), ce modèle est en accord global avec la seconde loi de la thermodynamique.

IV.3 Modèle complet d'interpénétration par diffusion d'interface

Le modèle complet est obtenu en sommant le sous-système hydrodynamique (Kapila et al. (2001)), et le sous-système d'interpénétration. On obtient alors :

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_1}{dt} &= \frac{1}{\left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right)} \left((\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \frac{\partial u}{\partial x} + \Theta \right) \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u}{\partial x} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 u}{\partial x} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + p}{\partial x} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p)u}{\partial t} + \frac{\partial D}{\partial x} \frac{\partial \rho E}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \tag{5.31}$$

V. Résumé de la résolution numérique

L'analyse semi-discrète décrite dans le Paragraphe III a permis de préciser l'essentiel du schéma numérique, que l'on résume ci-après.

Etape hydrodynamique

Il s'agit de résoudre le modèle de Kapila (2001). Sa méthode de résolution est décrite dans le Chapitre 2 et dans Saurel et al. (2009).

Etape d'interpénétration

On doit ensuite résoudre le système d'interpénétration (5.30). Pour cela, on résout le système hors d'équilibre des pressions correspondant (5.29) en faisant tendre le coefficient de relaxation des pressions μ vers l'infini. Ceci est réalisé en deux étapes :

- On résout d'abord le système sans termes de relaxation des pressions (5.27).
- On résout ensuite les termes de relaxation de pression (5.28), puis on réinitialise les énergies. Ces deux étapes suivent la même stratégie que celle décrite dans le Chapitre 2 et Saurel et al. (2009).

Si un schéma explicite est employé pour la résolution du système d'interpénétration, le pas de temps doit vérifier la condition $\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D}$. Cette restriction fait intervenir une dépendance au carré du pas d'espace. Pour éviter de travailler avec des pas de temps trop petits, on utilise un schéma implicite, comme décrit dans l'Annexe G.

Par ailleurs, l'interpénétration diffusive ne doit être présente qu'au niveau de l'interface. En effet, on ne veut pas ajouter de viscosité artificielle sur les ondes de choc et de détente. Il faut donc utiliser un coefficient de diffusion variable de sorte qu'il soit maximum dans la zone de mélange et très faible dans les phases pures. On propose alors $D = Y_1 Y_2 D_0$.

VI. Illustrations sur les expériences en tube à choc

On s'intéresse à nouveau au cas test de l'épaississement d'une interface traversée par une onde de choc. Ce test est décrit en détail au Chapitre 3. On rappelle qu'il y a deux configurations possibles :

- Le cas léger/lourd : l'onde de choc passe du gaz léger au gaz lourd. La zone de mélange s'épaissit dès le passage du choc. Ce cas avait été simulé correctement par le modèle du chapitre précédent.
- Le cas lourd/léger : l'onde de choc passe du gaz lourd au gaz léger. Au passage de l'onde de choc, l'épaisseur de la zone de mélange diminue jusqu'à être nulle puis augmente. L'interface subit ainsi une inversion. Les modèles des chapitres précédents se sont avérés incapables de traiter ce cas.

Configuration léger/lourd

On fixe le coefficient de diffusion à $D_0=0.2 \text{ m}^2/\text{s}$. On observe l'épaississement de l'interface sur la Figure 5.1.

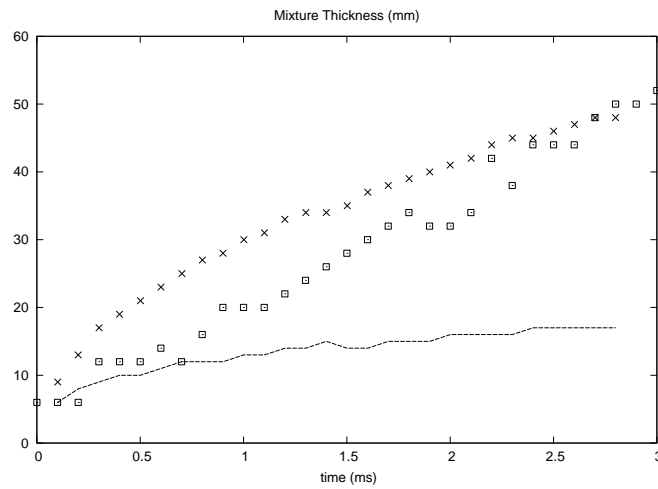
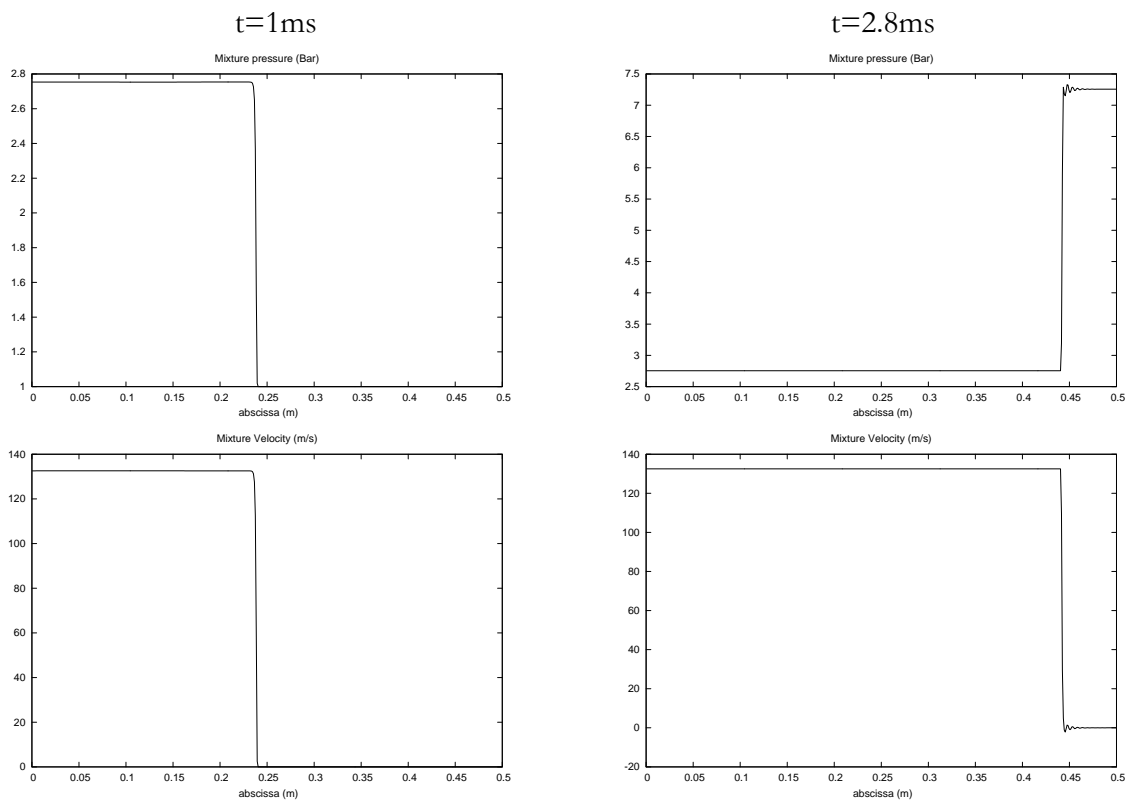


Figure 5.1 Epaisseur expérimentale (carrés) et numérique (croix) en fonction du temps. L'épaississement dû à la diffusion numérique de la partie hydrodynamique est représenté en ligne discontinue (courbe du bas). Le coefficient de diffusion étant fixé à $D_0=0.2 \text{ m}^2/\text{s}$.

Numériquement, le taux d'épaississement de l'interface ralentit légèrement en fonction du temps alors qu'expérimentalement il reste constant. Cependant, l'accord est très correct. Les variables de l'écoulement sont représentées sur la Figure 5.2.



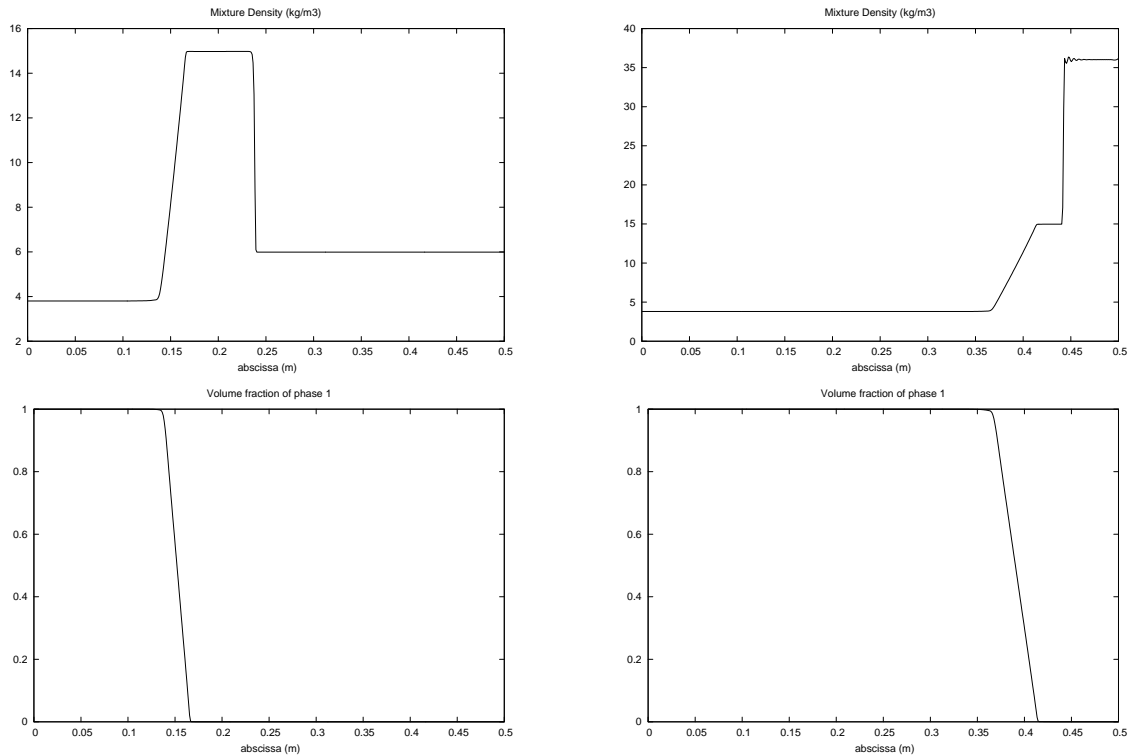


Figure 5.2 Profils de pression, vitesse, fraction volumique de l'air et densité du mélange calculés au temps 1 ms et 2.8 ms. La phase 1 est l'air.

On voit nettement que la fraction volumique est diffusée.

Le modèle de diffusion convient donc très bien dans cette configuration. On observe maintenant les résultats dans la configuration lourd/léger.

Configuration lourd/léger

On étudie maintenant le cas d'une onde de choc traversant une interface dans le sens lourd/léger. On rappelle que les modèles présentés dans les chapitres précédents n'étaient pas capables de reproduire l'épaississement de la zone de mélange. On présente l'évolution de l'épaisseur de la zone de mélange sur la Figure 5.3.

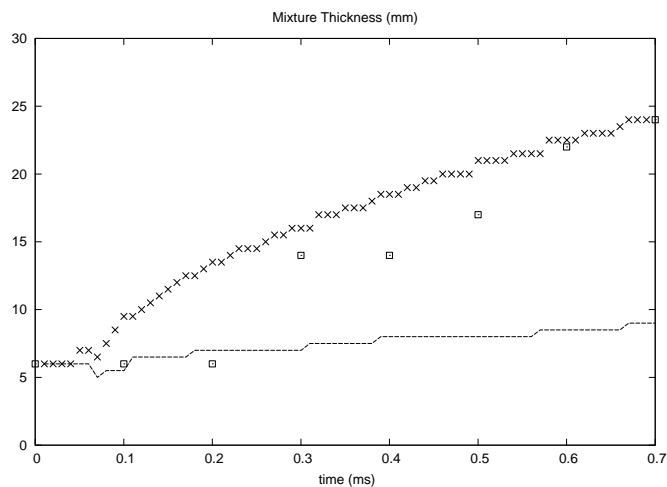


Figure 5.3 Epaisseur expérimentale (carrés) et numérique (croix) en fonction du temps. L'épaississement dû à la diffusion numérique de la partie hydrodynamique est représenté en lignes discontinues (courbe du bas). Le coefficient de diffusion est fixé à $D_0=0.2 \text{ m}^2/\text{s}$.

Le modèle de diffusion épaisse l'interface sans passer par la phase d'amincissement. Il ne reproduit pas l'inversion de l'interface. Comme dans la configuration précédente, on s'aperçoit que numériquement l'épaississement de l'interface a tendance à ralentir. Cela pourrait se corriger en utilisant un coefficient de diffusion variable, mais les résultats sont déjà très satisfaisants. On observe les variables de l'écoulement sur la Figure 5.4.

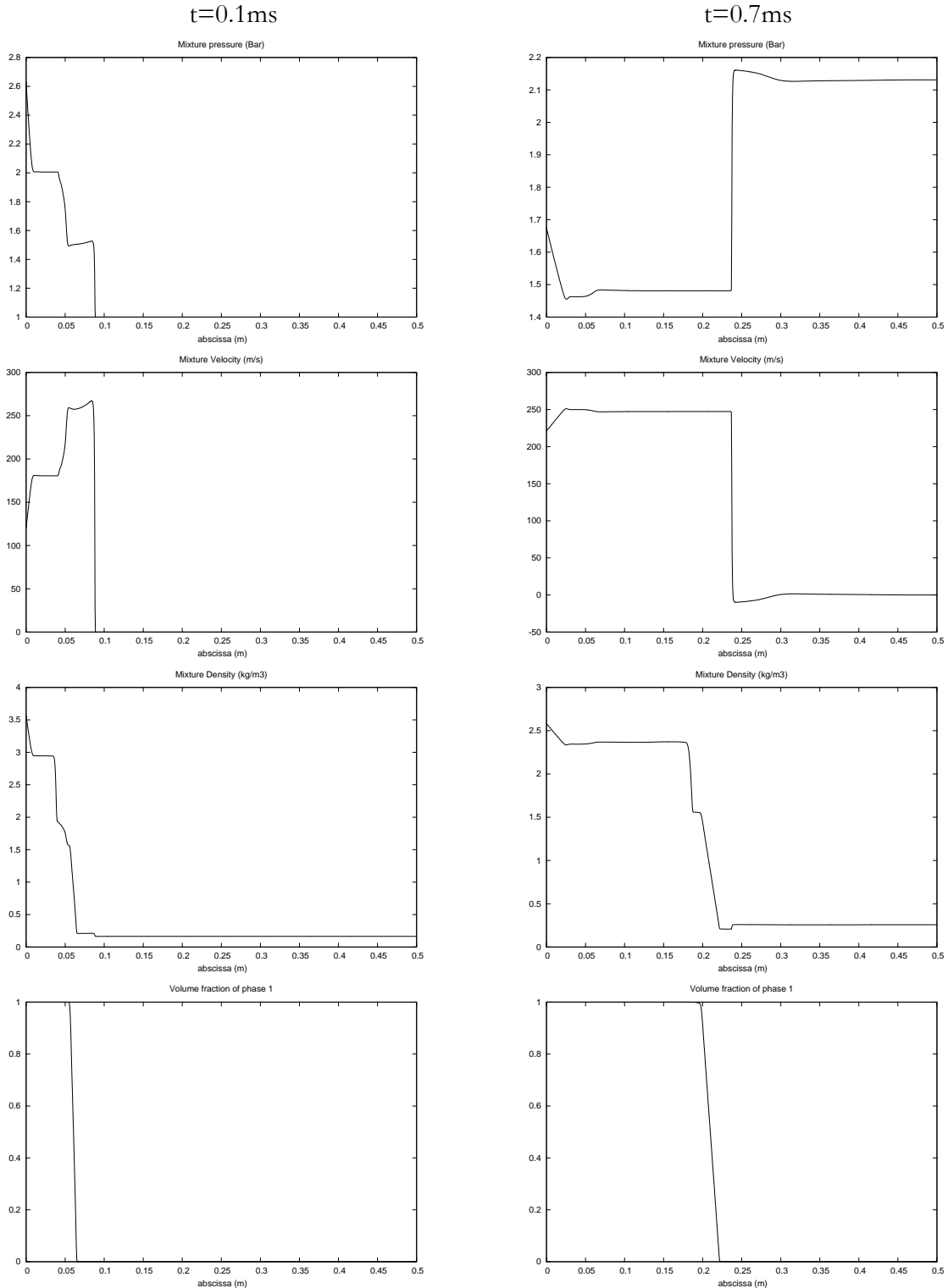


Figure 5.4 Profils de pression, vitesse, fraction volumique de l'air et densité du mélange calculés au temps 0.1ms et 0.7ms. La phase 1 est l'air.

Ainsi, le modèle de diffusion est capable de simuler correctement l'épaississement d'une interface

traversée par une onde de choc aussi bien dans la configuration léger/lourd que dans la configuration lourd/léger. Cependant, il est important de noter que contrairement aux modèles d'interpénétration des chapitres précédents, l'épaississement de l'interface n'est pas déclenché par le passage de l'onde de choc. La diffusion prend effet lieu dès le début du calcul.

IX. Conclusion

Dans ce chapitre, une méthode de diffusion artificielle de l'interface a été décrite. Sa résolution numérique est relativement simple et présente comme avantage de contourner le problème de l'inversion de la forme de l'interface pour le cas lourd/léger des instabilités de Richtmyer-Meshkov. On est donc maintenant en mesure de simuler l'épaississement d'une interface traversée par une onde de choc dans n'importe quelle configuration.

Cependant, la diffusion du modèle est régie par un paramètre. Sa valeur ne peut être connue que si l'on dispose des données expérimentales permettant d'ajuster les résultats numériques. Il s'est avéré que le même paramètre a été utilisé pour les deux configurations léger/lourd et lourd/léger, mais cela ne permet pas de présumer que cette valeur demeure valide dans d'autres cas.

Dans le chapitre suivant, on utilise ce modèle de diffusion pour traiter des problèmes plus complexes d'explosions sphériques. On reviendra dans ce dernier chapitre sur la détermination du paramètre de diffusion.

Chapitre 6 : Explosions sphériques

I. Introduction

Le modèle d'interpénétration par diffusion d'interface a été testé sur des problèmes à interface dans des tubes à choc dans lesquels le rapport de pression est faible (de l'ordre de 2 à 5). Dans ce chapitre, on veut s'assurer que ce modèle est capable de traiter le phénomène d'interpénétration sur des applications plus concrètes d'explosions sphériques pour lesquels le rapport de pression est plutôt de l'ordre de 10^5 .

Lors d'une explosion (de TNT par exemple), les produits de détonation réagissent chimiquement avec l'air. C'est ce que l'on appelle la post-combustion. On détaille dans ce chapitre une méthode permettant de modéliser cette réaction de post combustion.

Les variations des variables d'état (pressions, densités) des gaz intervenant dans l'explosion varient considérablement, en particulier au centre de l'explosion où l'onde de détente est réfléchiée.

On observera aussi que l'équation d'état des gaz parfait n'est pas précise pour traiter ce type d'écoulement, et que l'équation d'état JWL (Lee, Hornig and Kury, 1968) est bien plus adaptée.

On dispose de données expérimentales d'explosion de TNT et de HMX fournies par Laurent Munier (CEA, Gramat). On validera donc le modèle d'interpénétration par diffusion d'interface en comparant les résultats numériques aux résultats expérimentaux.

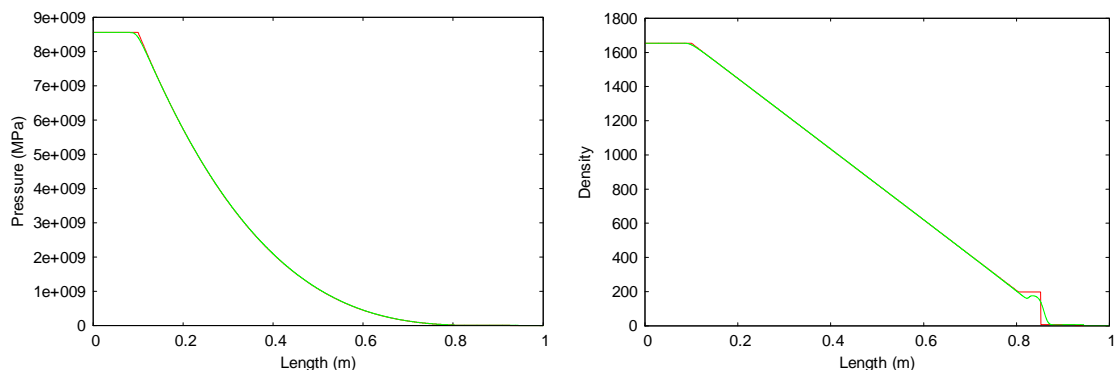
II. Résultats et illustrations

La méthode permettant de résoudre le modèle d'interpénétration par diffusion d'interface a été utilisée pour traiter des problèmes d'écoulements en tubes à choc dans lesquels le différentiel de pression est relativement faible. Afin de s'assurer de son aptitude à traiter des écoulements dans des situations d'explosions de matériaux hautement énergétiques, une série de cas tests de difficultés croissantes est réalisée.

II.1 Tube à choc TNT-Air en l'absence d'interpénétration

Le code Cheetah 2.0 prédit pour une explosion à volume constant de TNT la pression initiale de 85 578 atm à la densité de 1654 kg/m^3 . Les produits de détonation du TNT sont considérés comme un gaz parfait à $\gamma = 3$. L'air est traité également comme un gaz parfait à $\gamma = 1.4$ et à la densité initiale de 1 kg/m^3 . L'interface séparant ces deux matériaux est positionnée initialement en $x=0.5 \text{ m}$. Comme le modèle diphasique est résolu en tout point par le même schéma numérique, chaque chambre contient un fluide majoritaire et un volume infime de l'autre phase (fraction volumique initiale égale à 10^{-6}).

La solution numérique sur un maillage à 7000 points est comparée à la solution exacte sur les graphes suivants à l'instant 0.1015 ms (Figure 6.1) Un maillage de finesse analogue sera utilisé pour les cas sphériques qui suivront.



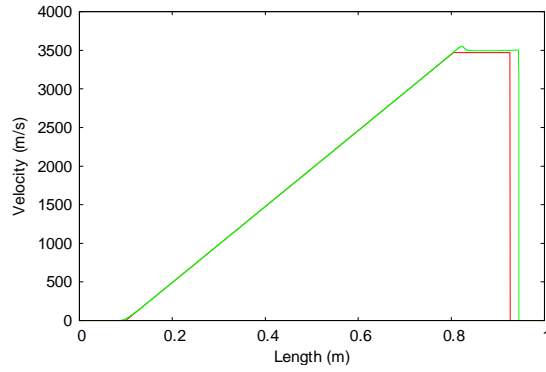
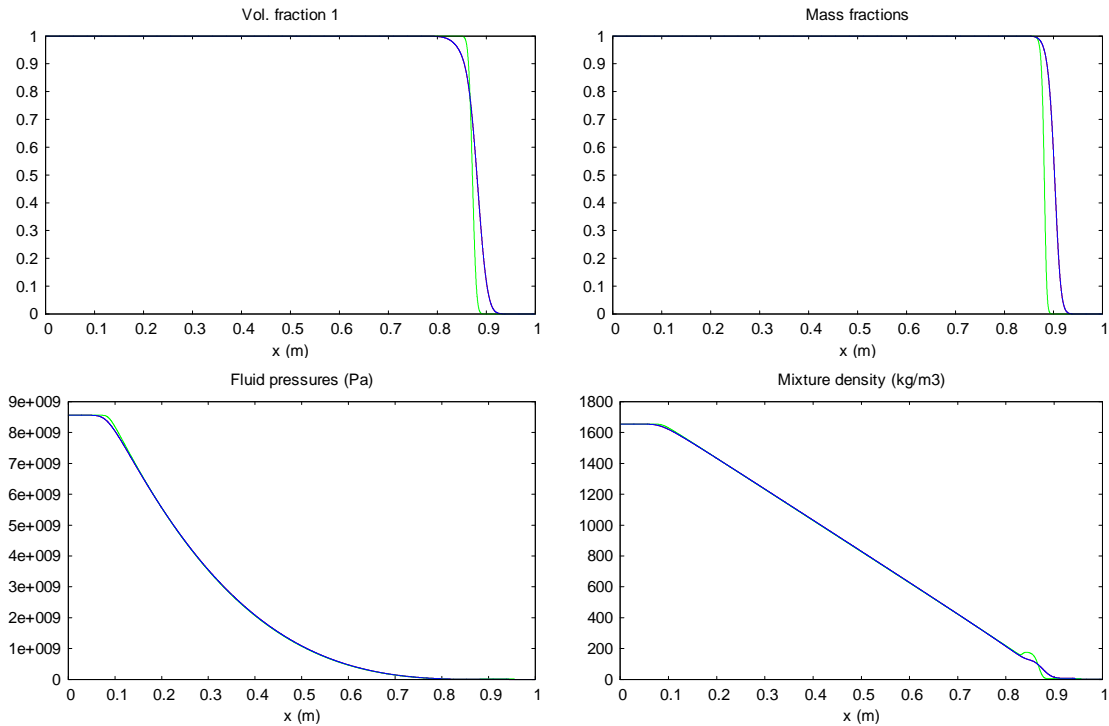


Figure 6.1 Tube à choc TNT-Air sans interpénétration. Les courbes en traits rouges correspondent à la solution exacte et celles en traits verts à la solution numérique. On observe un parfait calcul de la détente ainsi que le respect des conditions d'interface (égalité des vitesses et des pressions). Cependant la vitesse du choc est légèrement surestimée comme l'illustre le dernier graphe. Ceci est une conséquence de l'extrême rapport de densité initial.

Ce test illustre les difficultés numériques de ce type de simulation. Cependant, l'imprécision sur la dynamique du choc ne semble pas préjudiciable pour la présente application.

II.2 Tube à choc TNT-Air avec interpénétration

On renouvelle le même test que précédemment en tenant compte cette fois des effets d'interpénétration. Le coefficient de diffusion a été pris égale à $D = \frac{5}{7} \text{ m}^2 / \text{s}$. Il est constant dans tout le domaine de calcul.



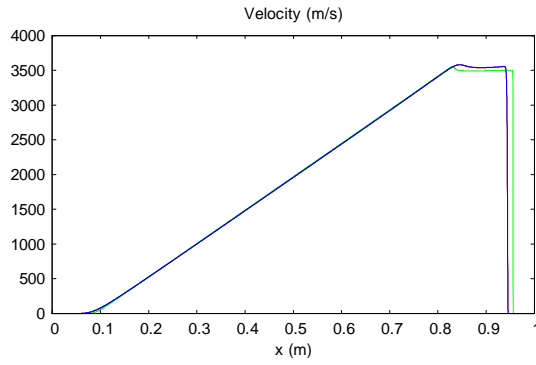


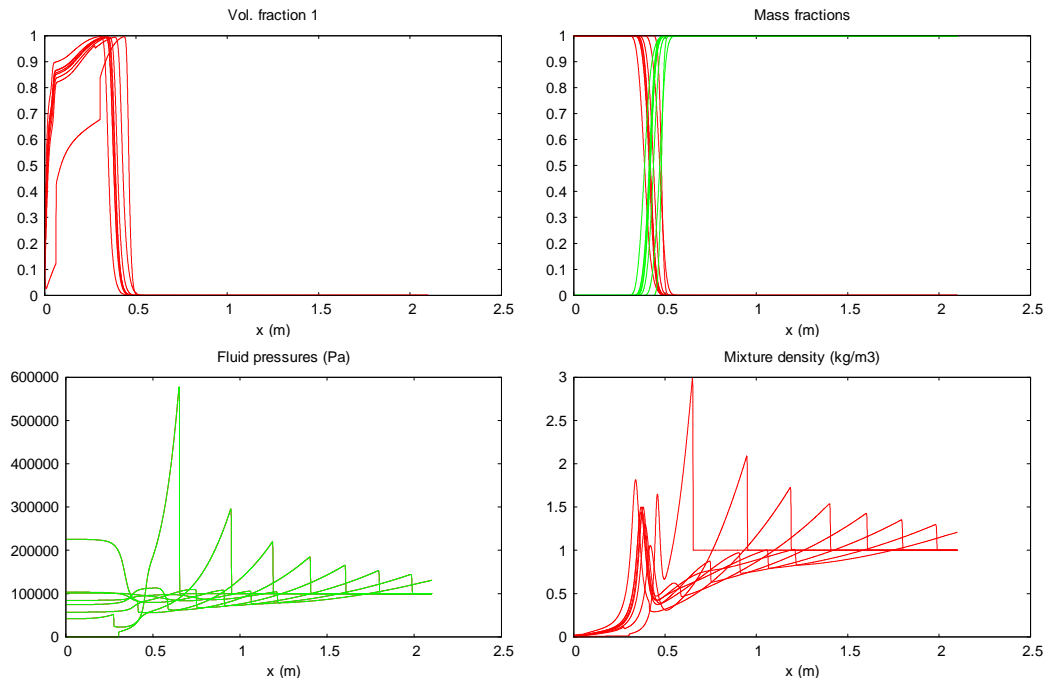
Figure 6.2 Tube à choc TNT-air avec interpénétration. Les courbes en traits verts correspondent à la solution numérique en l'absence d'interpénétration tandis que les courbes en traits bleus correspondent à la prise en compte de ces effets.

Les champs de vitesse et pression sont peu modifiés. La densité de mélange subit de plus importantes modifications, essentiellement aux abords de l'interface. Les fractions massiques et volumiques sont davantage diffusées.

II.3 Explosion sphérique TNT-Air sans interpénétration

On se penche maintenant sur des problèmes d'explosions sphériques. Les schémas numériques permettant de résoudre le modèle d'interpénétration en géométrie sphériques sont détaillés en Annexe H.

Les mêmes données que précédemment pour le TNT et l'air sont utilisées. Un maillage à 7000 points est utilisé. Le rayon initial de la charge est de 7.5 cm, et la pression initiale est toujours 85 578 atm et la densité de 1654 kg/m^3 . Les champs de pression, vitesse, densité de mélange ainsi que la fraction volumique du TNT et sa fraction massique sont représentés ci-après en fonction de l'espace à 8 instants équi-répartis entre 0 et 3.36 ms.



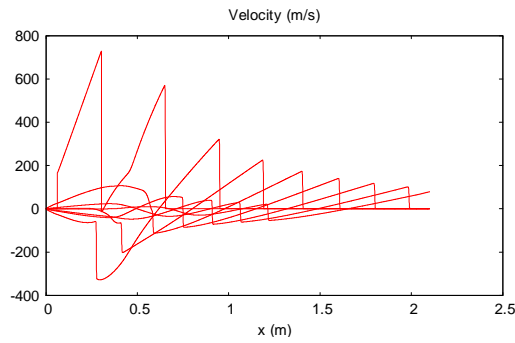


Figure 6.3 Explosion sphérique TNT-Air sans interpénétration.

On observe une atténuation du choc très rapide. Les profils de fraction volumique du TNT dans les produits de détonation montrent un gonflement mécanique de l'air pourtant en proportion faible initialement ($\alpha_{\text{air}} = 10^{-6}$). Un phénomène de type 'cavitation' apparaît dans les produits de détonation proche de l'axe.

On peut représenter la position de l'interface produits de détonation – air à l'aide de la fraction massique du TNT dans le plan r/R_0 en abscisse et t/R_0 en ordonnée, R_0 étant le rayon initial de la charge, c'est-à-dire 7.5 cm dans notre cas.

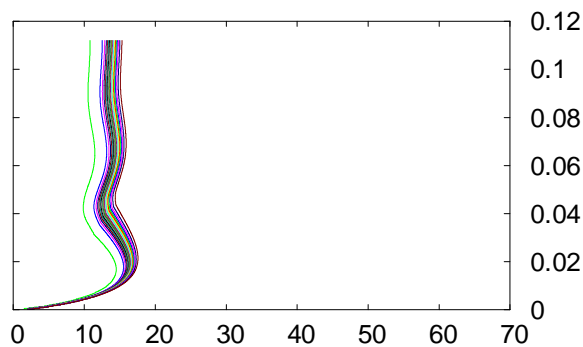
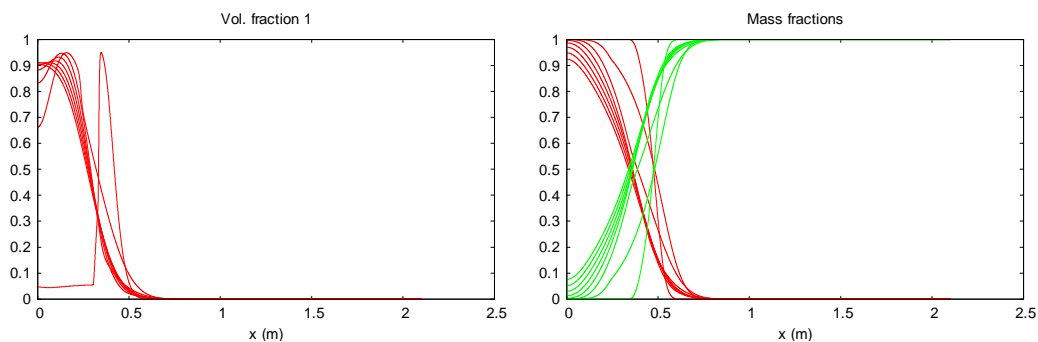


Figure 6.4 Evolution de l'interface sans interpénétration dans le plan ($R=r/R_0, T=t/R_0$). Le temps t est en secondes, et les rayons r et R_0 en mètres. Chaque courbe (40 au total) représente une ligne de niveau de la fraction massique des produits de détonation.

L'interface est bien sur diffusée ici, puisque le schéma de résolution est Eulérien.

II.4 Explosion sphérique TNT-Air avec interpénétration

On réalise strictement le même test que précédemment mais en rajoutant l'interpénétration. Le coefficient de diffusion est fixé à $D = \frac{5}{7} \text{ m}^2 / \text{s}$.



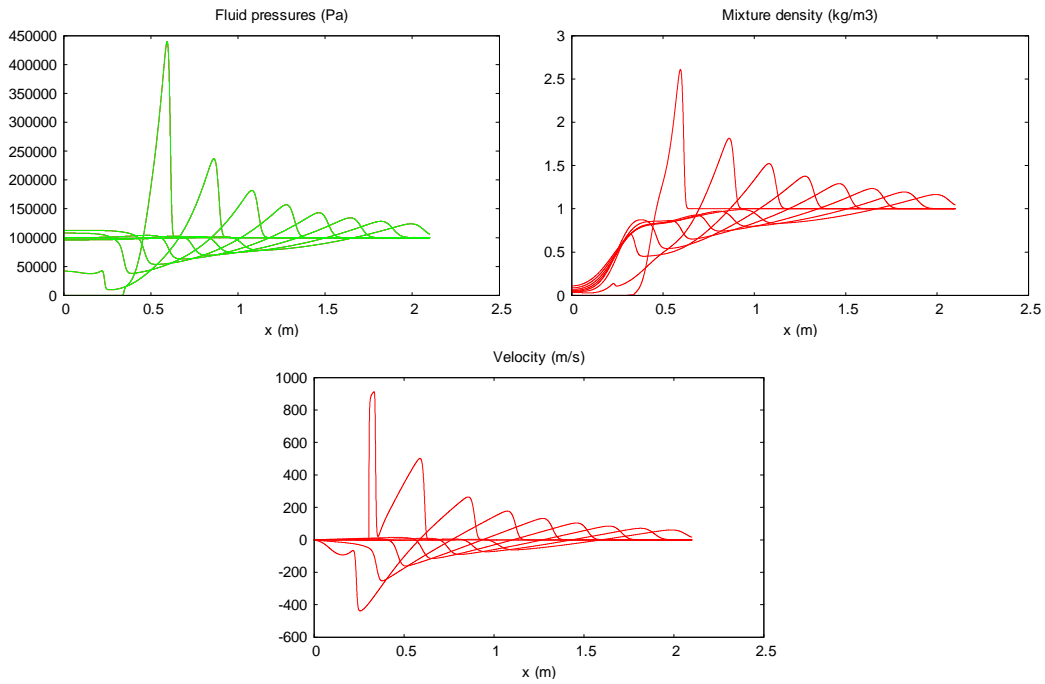


Figure 6.5 Explosion sphérique TNT-Air avec interpénétration.

Le graphe des fractions massiques met en évidence le phénomène d'interpénétration. Les champs de vitesse et de pression présentent peu de variations par rapport au cas précédent à l'exception d'effets excessifs de diffusion numérique du choc.

On peut de nouveau représenter la position de l'interface produits de détonation – air (ici une zone de mélange) à l'aide de la fraction massique du TNT dans le plan r/R_0 en abscisse et t/R_0 en ordonnée.

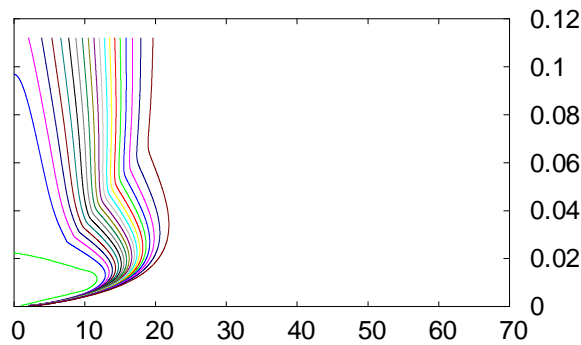


Figure 6.6 Evolution de l'interface (qui devient une zone de mélange) avec interpénétration dans le plan ($R=r/R_0, T=t/R_0$). Le temps t est en secondes, et les rayons r et R_0 en mètres.

L'interface a nettement dépassé l'abscisse adimensionnée de 20, alors qu'elle était en retrait précédemment. Ce dernier graphe montre clairement l'épaississement de la zone de mélange.

Afin de ne pas préjudicier à la capture du choc tout en autorisant l'épaississement de la zone de mélange, le coefficient d'interpénétration a été modifié en faisant intervenir le produit des fractions massiques : $D = Y_1 Y_2 D_0$.

Les résultats correspondants sont représentés ci-après.

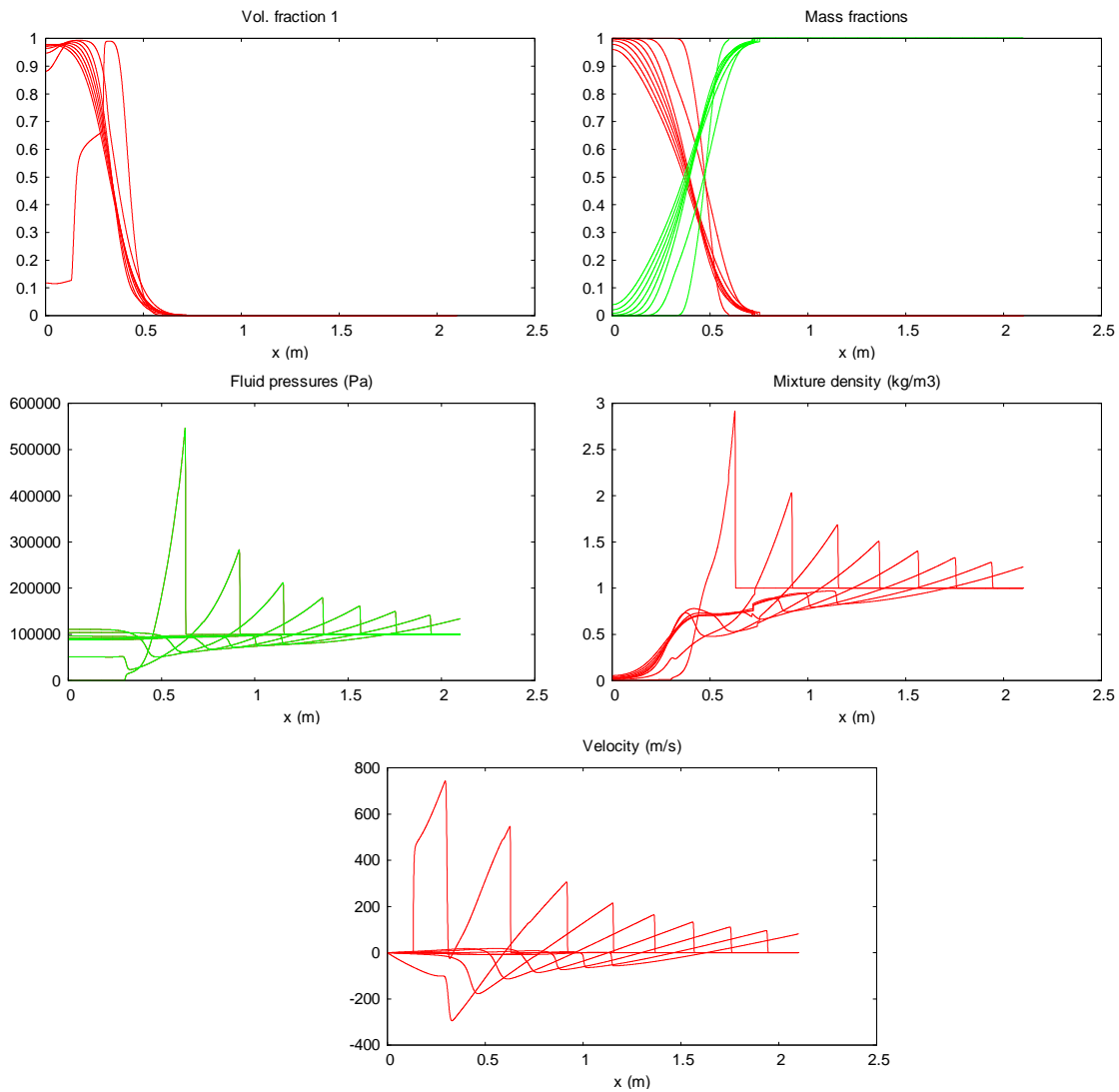


Figure 6.7 Explosion sphérique TNT-Air avec interpénétration (coefficient de diffusion D variable).

La capture du choc ne subit ainsi plus aucune détérioration, tandis que l'interface subit toujours une importante diffusion, ce que nous pouvons vérifier sur le graphe suivant.

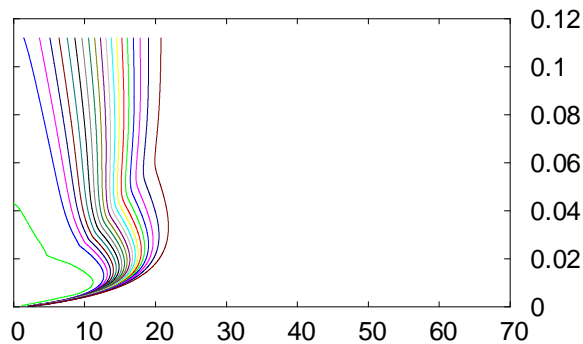
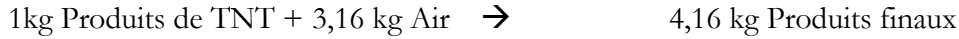


Figure 6.8 Evolution de l'interface (qui devient une zone de mélange) avec interpénétration dans le plan ($R=r/R_0, T=t/R_0$). Le temps t est en secondes et les rayons r et R_0 en mètres.

III. Modélisation de la post combustion

Le mélange des produits de détonation avec l'air permet une réaction de post-combustion. D'après Munier (2011), cette réaction s'écrit :



Cette réaction libère la quantité de chaleur q égale à 9,963 MJ/kg de TNT.

On note par les indices :

1 = produits de TNT

2 = mélange de gaz contenant l'air et les produits finaux.

A l'issue des étapes hyperboliques et interpénétration, on aura à considérer le système suivant :

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = - \frac{\frac{c_1^2}{\rho_1 c_1^2} + \frac{c_2^2}{\rho_2 c_2^2}}{\frac{\alpha_1}{\rho_1 c_1^2} + \frac{\alpha_2}{\rho_2 c_2^2}} \dot{m}_1$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} = -\dot{m}_1$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} = \dot{m}_1$$

Cependant, la phase 2 contient maintenant plusieurs espèces chimiques (air et produits finaux) et la réaction n'est possible que si les produits de TNT et l'air sont en proportions suffisantes. Plusieurs équations de masse sont donc nécessaires pour décrire les évolutions des concentrations du mélange de gaz dans la phase 2 :

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2 y_{\text{air}}}{\partial t} = -3.16\dot{\omega}$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2 y_{\text{produits TNT}}}{\partial t} = \dot{m}_1 - \dot{\omega}$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2 y_{\text{produits finaux}}}{\partial t} = 4.16\dot{\omega}$$

Où $\dot{\omega}$ est le taux de disparition du réactif.

Dans cette modélisation, les produits de TNT (réactif) ont d'abord été transférés dans le mélange de gaz, puis une réaction de combustion entre l'air et ces produits est réalisée avec le taux $\dot{\omega}$.

En supposant cette réaction infiniment rapide, les produits de TNT dans le mélange de gaz seront toujours absents : $y_{\text{produits TNT}} = 0$. En d'autres termes, dès que le réactif est transféré au mélange de gaz contenant l'air, la réaction se produit instantanément.

On en déduit :

$$\dot{\omega} = \dot{m}_1.$$

Le suivi de deux concentrations est alors suffisant dans le mélange de gaz :

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2 y_{\text{air}}}{\partial t} = -3.16\dot{m}_1$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2 y_{\text{produits finaux}}}{\partial t} = 4.16\dot{m}_1$$

La somme de ces deux équations est bien compatible avec l'équation de masse du mélange de gaz :

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} = \dot{m}_1.$$

Le modèle de post-combustion se résume alors à :

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = - \frac{\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2}}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} \dot{m}_1$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_1}{\partial t} = -\dot{m}_1$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_2}{\partial t} = \dot{m}_1$$

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_2 y_{\text{air}}}{\partial t} = -3.16 \dot{m}_1$$

Une possibilité, efficace sur le plan numérique consiste à considérer que la réaction est instantanée entre le réactif et l'air.

Pour ce faire, on compare les masses de réactif et d'air dans chaque maille pour déterminer quelle est le milieu chimique limitant dans la réaction de post-combustion :

- Si $(\alpha \rho)_1 > (\alpha \rho)_2 y_{\text{air}} / 3.16$, l'air est le milieu limitant, donc
 $dm = (\alpha \rho)_2 y_{\text{air}} / 3.16$
- Sinon, les produits de TNT sont limitant, donc
 $dm = (\alpha \rho)_1$

On fait évoluer les masses de la façon suivante :

$$(\alpha \rho)_1^{\text{new}} = (\alpha \rho)_1^{\text{old}} - dm$$

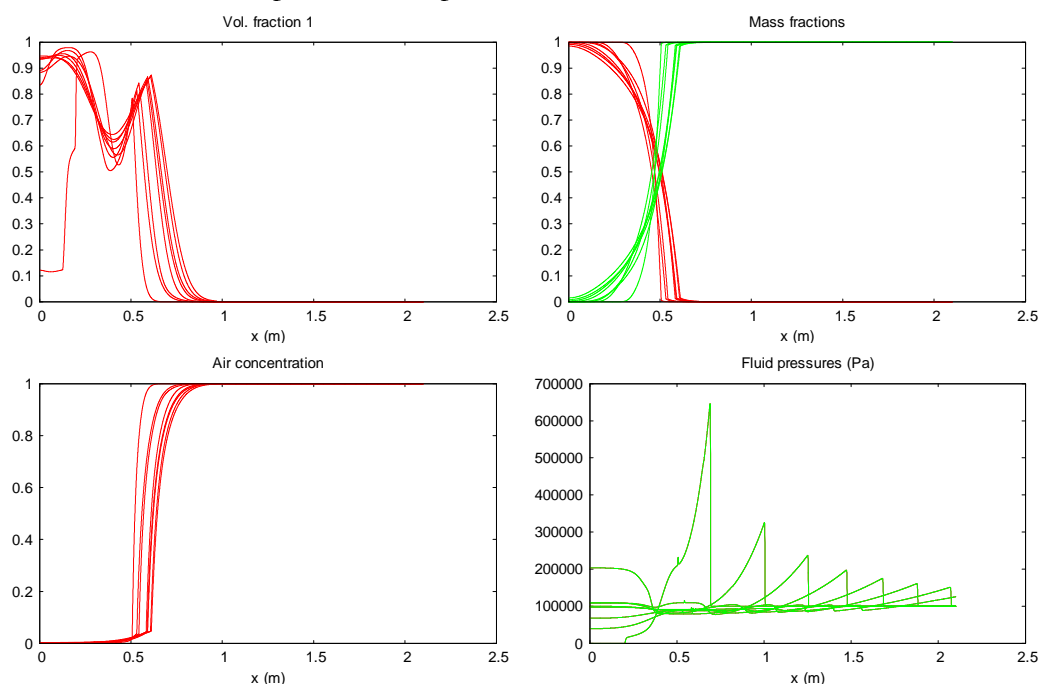
$$(\alpha \rho)_2^{\text{new}} = (\alpha \rho)_2^{\text{old}} + dm$$

$$((\alpha \rho)_2 y_{\text{air}})^{\text{new}} = ((\alpha \rho)_2 y_{\text{air}})^{\text{old}} - 3.16 dm$$

Cette étape d'évolution des masses des phases et des constituants est suivie d'une étape de relaxation des pressions pour déterminer la nouvelle fraction volumique.

Cette méthode présente deux avantages : elle est robuste et elle ne présente pas de cinétique réactionnelle. La post-combustion est ainsi gouvernée uniquement par l'interpénétration des phases.

Le précédent test d'explosion sphérique avec interpénétration et post-combustion a ainsi été reconsidéré. Les résultats sont présentés ci-après.



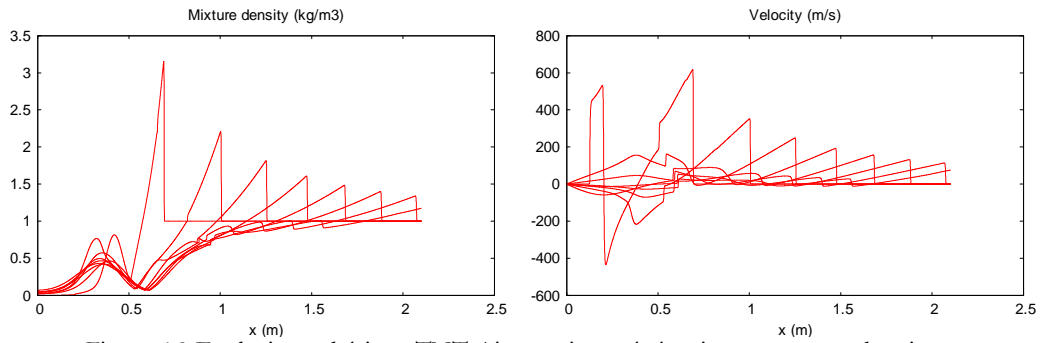
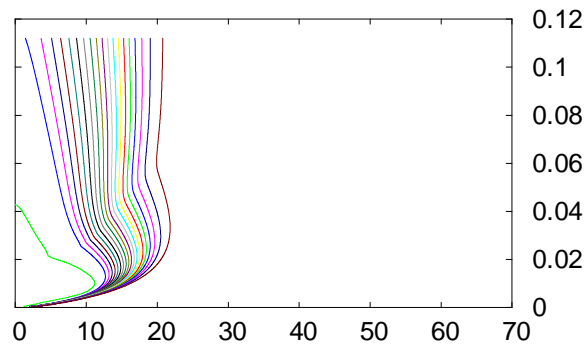


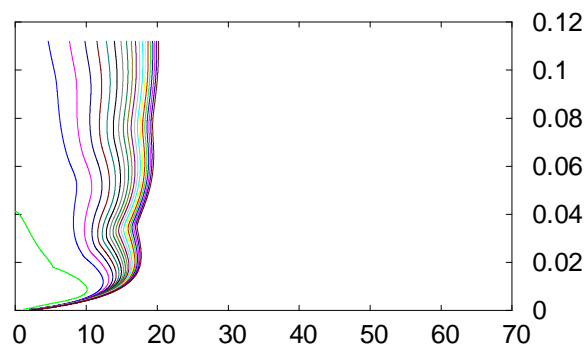
Figure 6.9 Explosion sphérique TNT-Air avec interpénétration et post-combustion.

Il apparaît clairement que l'onde de choc incidente est plus intense. Les pics de pression sont supérieurs aux cas précédents en raison de l'énergie libérée par la post-combustion dans la zone de mélange.

On compare ci-après la dynamique de la zone de mélange, avec interpénétration et sans post-combustion, puis avec interpénétration et post-combustion



Sans post-combustion



Avec post-combustion

Figure 6.10 Evolution de l'interface avec interpénétration et post-combustion dans le plan ($R=r/R_0, T=t/R_0$). Le temps t est en secondes, et les rayons r et R_0 en mètres.

Les contours de fraction massique du TNT sont plus raides en raison de la consommation de cette variable au contact de l'air.

IV. Résultats qualitatifs

On représente sur les graphes suivants :

- la position de l'interface au cours du temps,
- les signaux de pression calculés et enregistrés par 7 capteurs Eulériens, positionnés à 10, 20, 30, 40, 50, 60 et 70 rayons de charge.

IV.1 Calcul sans interpénétration et sans post-combustion

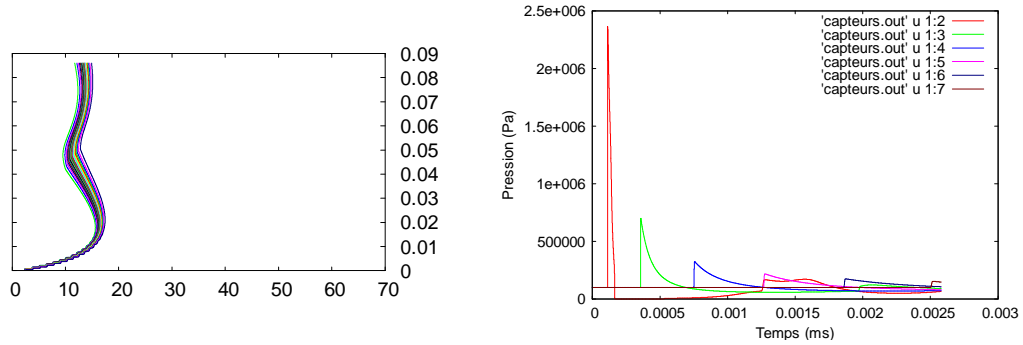


Figure 6.11 A gauche, évolution de l'interface dans le plan $(R=r/R_0, T=t/R_0)$, le temps t est en secondes, et les rayons r et R_0 en mètres. A droite, signaux de pressions en fonction du temps.

Ici, l'interface atteint la position max de 17 à 18 R_0 avant de se contracter, pour un pic de pression sur le premier capteur d'environ 24 bars. Ce cas test correspond à la situation de référence par rapport aux cas qui vont suivre.

IV.2 Calculs avec interpénétration et sans post-combustion

Plusieurs simulations sont réalisées avec des paramètres d'interpénétration croissants. On utilise un coefficient de diffusion de la forme $D = Y_1 Y_2 D_0$ afin qu'il soit maximum au niveau de l'interface et quasi-nul dans les phases pures. Cela permet de ne pas faire diffuser les ondes de choc et de détente comme on l'a vu précédemment.

- $D_0 = 1$

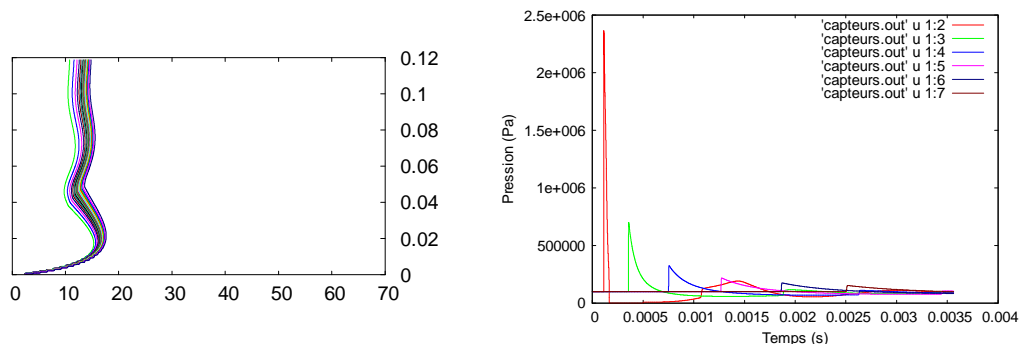


Figure 6.12 A gauche, évolution de l'interface dans le plan $(R=r/R_0, T=t/R_0)$, le temps t est en secondes, et les rayons r et R_0 en mètres. A droite, signaux de pressions en fonction du temps.

Les résultats diffèrent peu du cas de référence.

- $D_0 = 10$

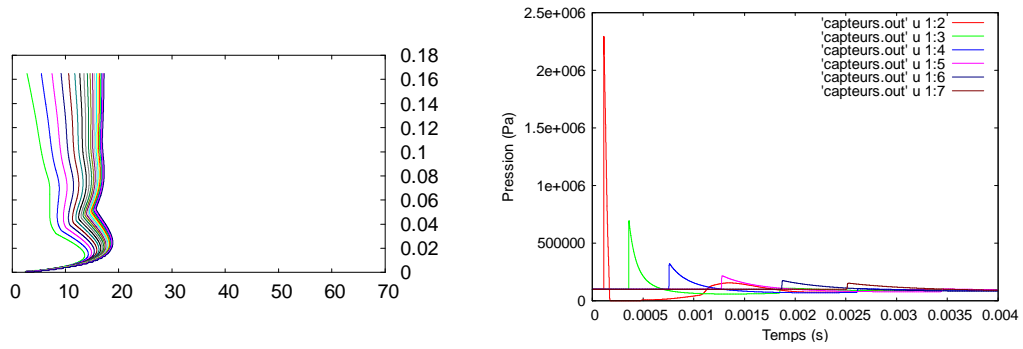


Figure 6.13 A gauche, évolution de l'interface dans le plan ($R=r/R_0, T=t/R_0$), le temps t est en secondes, et les rayons r et R_0 en mètres. A droite, signaux de pressions en fonction du temps.

Le premier pic de pression apparaît ici comme légèrement atténué, mais surtout le recul de l'interface est considérablement réduit. Celle-ci se stabilise aux alentours de $17-18 R_0$, sa position maximale avoisinant les $20 R_0$.

- $D_0 = 100$

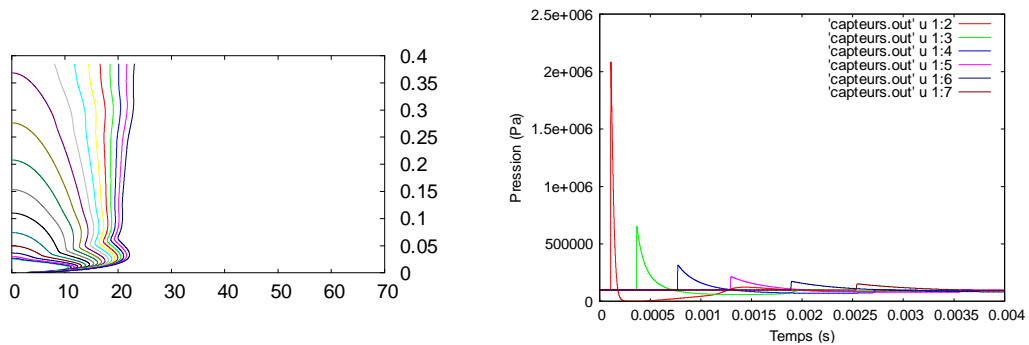


Figure 6.14 A gauche, évolution de l'interface dans le plan ($R=r/R_0, T=t/R_0$), le temps t est en secondes, et les rayons r et R_0 en mètres. A droite, signaux de pressions en fonction du temps.

Le premier pic de pression est de nouveau un peu plus atténué. L'interface devient maintenant une zone de mélange prononcée dont l'extrémité dépasse $20 R_0$ et croît légèrement avec le temps. On observe maintenant les effets de la post combustion pour ces trois valeurs du paramètre d'interpénétration.

IV.3 Calculs avec interpénétration et post-combustion

- $D_0 = 1$

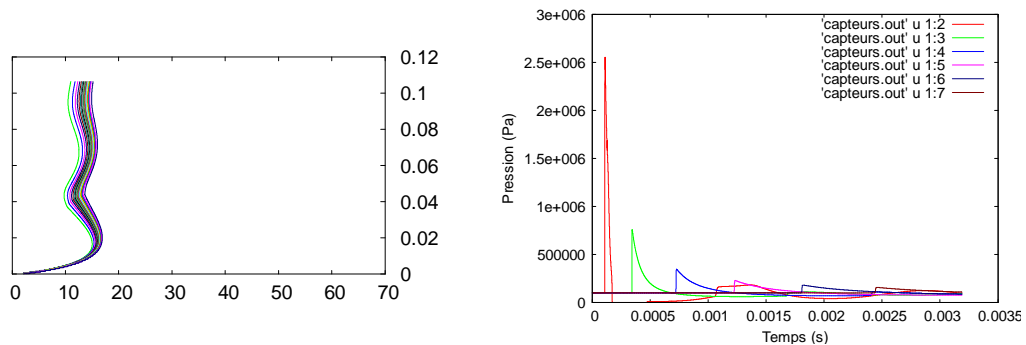


Figure 6.15 A gauche, évolution de l'interface dans le plan ($R=r/R_0, T=t/R_0$), le temps t est en secondes, et les rayons r et R_0 en mètres. A droite, signaux de pressions en fonction du temps.

Par rapport au cas précédent où la post combustion était absente, la dynamique de l'interface a peu varié. Le premier pic de pression est passé de 24 bars à 25 bars à cause de l'énergie dégagée par la post-combustion.

- $D_0 = 10$

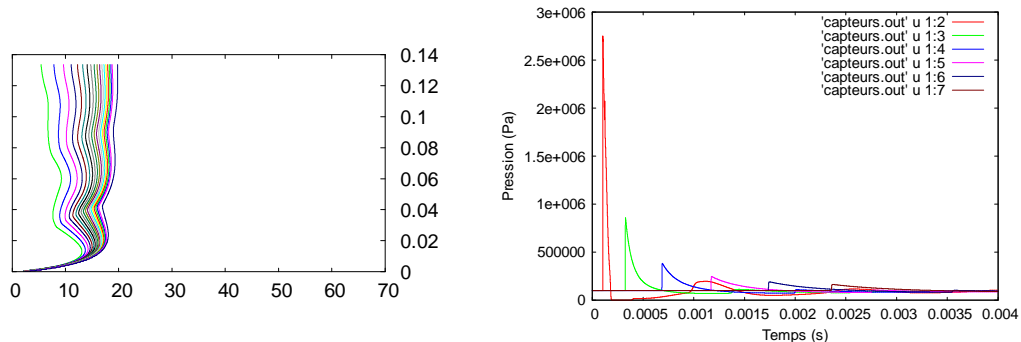


Figure 6.16 A gauche, évolution de l'interface dans le plan $(R=r/R_0, T=t/R_0)$, le temps t est en secondes, et les rayons r et R_0 en mètres. A droite, signaux de pressions en fonction du temps.

Le premier pic de pression avoisine maintenant les 28 bars. En effet, la post-combustion est favorisée par une interpénétration de l'air et des produits de détonation du TNT plus importante. L'énergie libérée est donc plus grande.

Pour le même coefficient d'interpénétration, l'interface se stabilisait précédemment aux alentours de 17-18 R_0 . Elle atteint maintenant les 20 R_0 . L'énergie dégagée par la post-combustion entraîne une augmentation de l'intensité du choc, et par conséquent une plus grande diffusion de l'interface.

- $D_0 = 100$

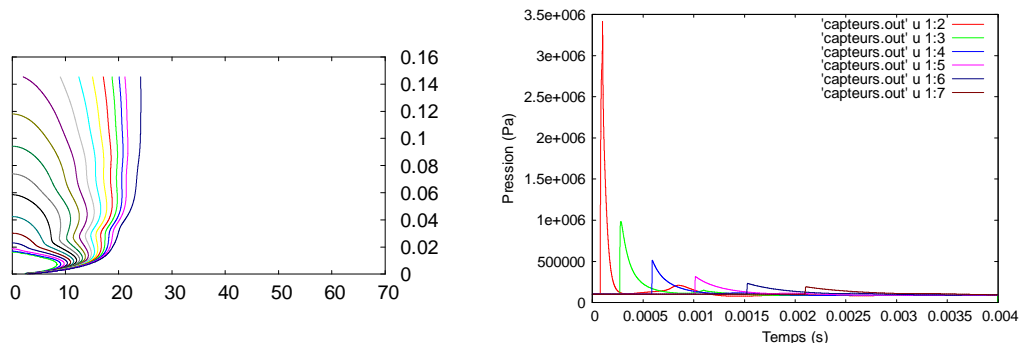


Figure 6.17 A gauche, évolution de l'interface dans le plan $(R=r/R_0, T=t/R_0)$, le temps t est en secondes, et les rayons r et R_0 en mètres. A droite, signaux de pressions en fonction du temps.

Le premier pic de pression atteint maintenant pratiquement 35 bars. On rappelle qu'il était d'environ 24 bars pour le premier capteur lorsque ni l'interpénétration, ni la post-combustion n'étaient considérés. L'interface atteint maintenant un rayon quasi-stationnaire d'environ 25 R_0 , à comparer aux 15 R_0 résultant du premier calcul, sans interpénétration ni post combustion.

Les effets liés à la post combustion sont donc considérables, autant en ce qui concerne la taille de la boule de feu que les signaux de pressions.

V. Comparaison avec les expériences

On réalise maintenant des tests de comparaisons avec des résultats expérimentaux d'explosions de TNT et de HMX. Ces expériences ont été réalisées au Centre d'Etude de Gramat (CEG) par Laurent Munier. Les données expérimentales fournies sont le rayon de l'explosion en fonction du temps et les signaux de pressions mesurées par 3 capteurs disposés à 3 distances différentes de la charge

explosive. Pour valider le modèle d'interpénétration, il faut ajuster le paramètre de diffusion D_0 permettant d'avoir des résultats numériques les plus proches possibles des résultats expérimentaux aussi bien au niveau du rayon de l'explosion que des signaux des pressions.

Les rayons maxima des boules de feu observées varient entre 23 et 26 fois le rayon de la charge initiale.

Pour l'instant, on se focalise sur l'étude du TNT, qui pose déjà un certain nombre de questions. On examinera plus tard le cas du HMX.

V.1 Conditions initiales

Toutes les simulations réalisées par la suite et comparées aux expériences utilisent une condition initiale correspondant à la propagation d'une détonation CJ (Chapman-Jouguet) sphérique divergente. Les conditions de pression dans l'état CJ et la vitesse du front associé sont obtenues à l'aide d'un code thermo-chimique tel que Cheatah 2.0 par exemple qui prédit la pression de 85 578 bars au point CJ pour une charge de TNT de densité initiale 1645 kg/m^3 .

Pour calculer correctement les profils initiaux, on utilise l'algorithme publié par Massoni et al. (2006) que l'on décrit dans l'Annexe K. Il s'agit d'une méthode de 'suivi de détonation' en coordonnées sphériques. Les profils de pression, vitesse et densité correspondants sont représentés ci-après. Le rayon de la charge est de 75 mm.

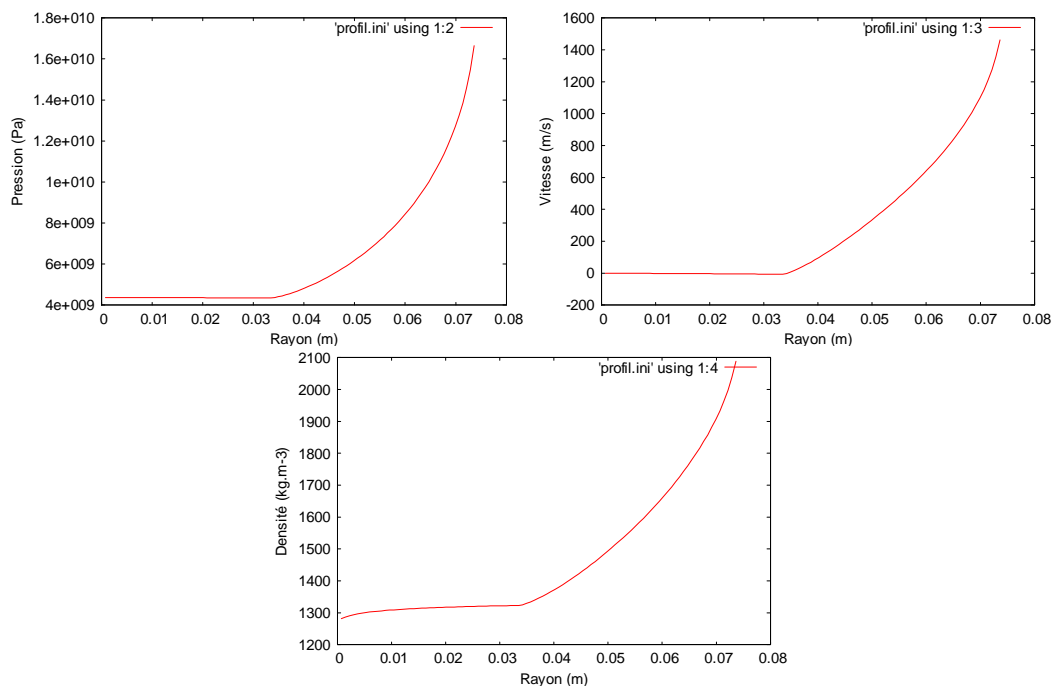


Figure 6.18 Profil initiaux de pression, vitesse et densité dans une charge de 75 mm de TNT. L'équation d'état utilisée est celle des gaz parfaits.

L'équation d'état qui a été employée ici est celle du gaz parfait, avec le coefficient polytropique calculé au point CJ, c'est-à-dire $\gamma=3$.

V.2 TNT traité en gaz parfait, sans interpénétration et sans post combustion

On compare tout d'abord les résultats du code d'explosion sphérique avec les résultats expérimentaux en n'utilisant aucun effet d'interpénétration ni de post-combustion.

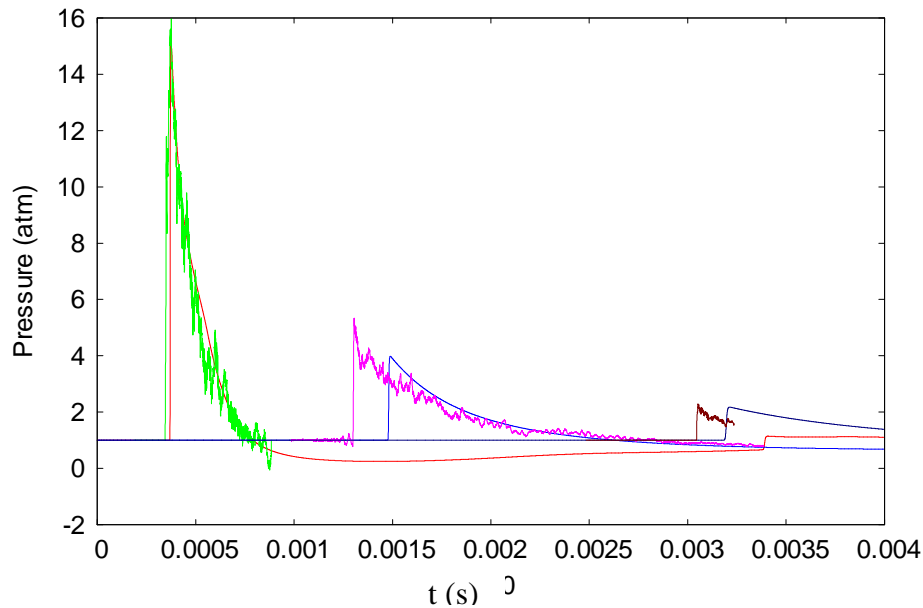


Figure 6.19 Comparaisons des signaux de pressions expérimentaux et simulés sans interpénétration à 3 distances différentes du centre de la charge. Le premier est à 1m (résultat numériques en rouge, résultats expérimentaux en vert), le second à 2m (numérique en bleu, expérimental en rose), et le troisième à 3m (numérique en bleu foncé, expérimental en marron). Les signaux expérimentaux sont faciles à repérer car les profils sont bruités tandis que ceux calculés ont des profils lisses.

Pour le premier capteur, l'accord est excellent. Pour le deuxième capteur, le signal simulé est retardé et présente une amplitude insuffisante. Pour le troisième capteur, l'accord est correct mais l'arrivée du choc est retardée.

On compare maintenant l'évolution du rayon de l'explosion calculée numérique aux résultats expérimentaux.

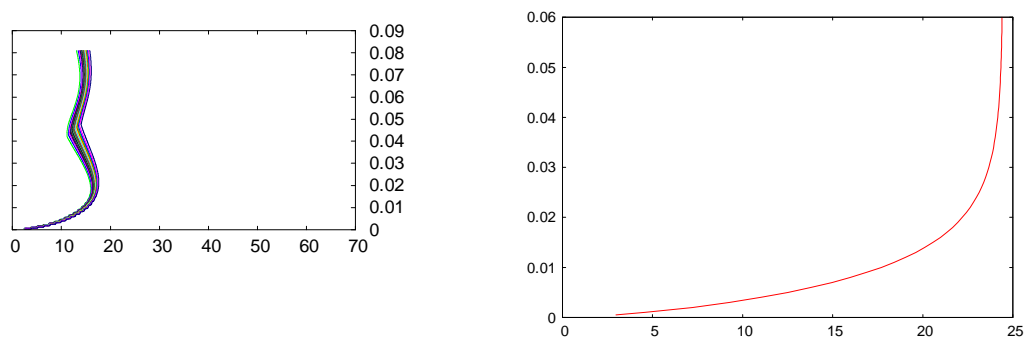


Figure 6.20 A gauche, évolution de l'interface dans le diagramme (X,T) calculée numériquement. L'explosion atteint un rayon max d'environ 18R0. A droite, rayon expérimental de l'explosion dans le diagramme (X,T). Le maximum du rayon est 24 R0. Il n'est pas surprenant que le rayon maximal simulé soit bien inférieur au rayon maximal expérimental.

On rajoute maintenant à notre simulation l'interpénétration ainsi que la post-combustion. On s'attend à ce que les résultats sur le rayon de l'explosion soient meilleurs, et que les quelques différences sur les signaux de pressions soient corrigées.

V.3 TNT traité en gaz parfait avec interpénétration et post combustion

On rappelle qu'un seul paramètre est utilisé dans le modèle d'interpénétration Il s'agit du paramètre de diffusion D_0 . On choisit ce paramètre de manière à obtenir un rayon maximal de l'explosion proche de celui qui est mesuré expérimentalement.

Sur le graphe suivant on représente le rayon de la boule de feu avec et sans effet d'interpénétration.

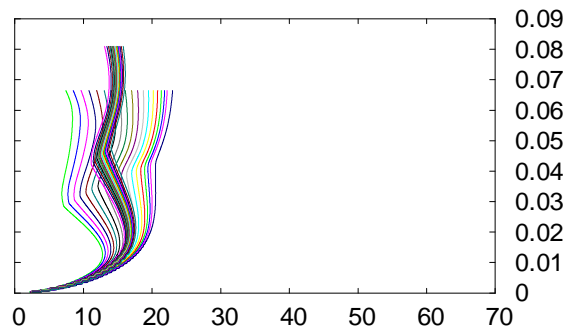


Figure 6.21 Evolution de l'interface dans le diagramme (X,T) avec et sans interpénétration. Le rayon maximal de l'explosion avec interpénétration (23 R0) est plus proche du rayon maximal mesuré expérimentalement (24 R0).

Avec D_0 fixé à 100, on parvient à modéliser correctement l'évolution du rayon de l'explosion. On s'intéresse maintenant aux signaux de pression.

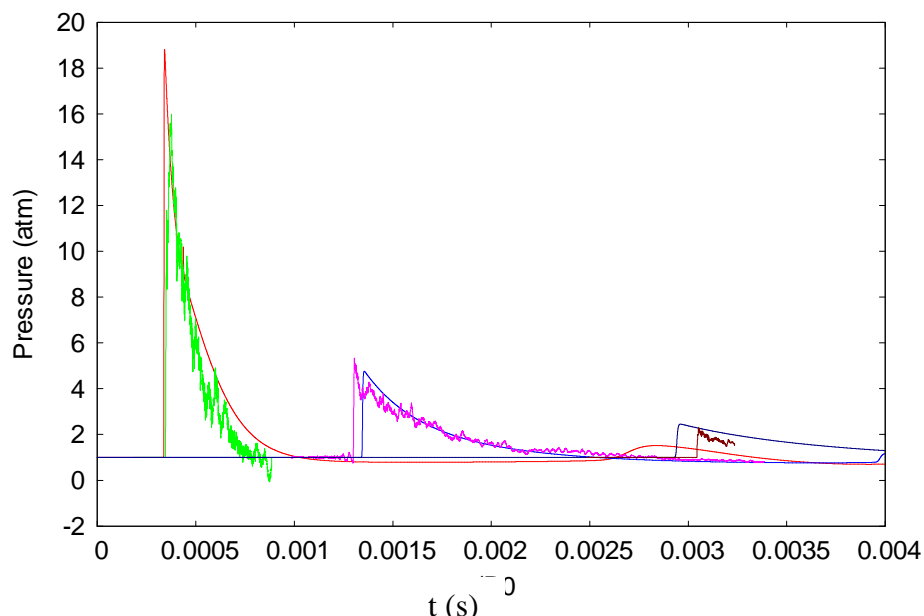


Figure 6.22 Comparaisons des signaux de pressions expérimentaux et simulés avec interpénétration à 3 distances différentes du centre de la charge. Le premier est à 1m (résultat numériques en rouge, résultats expérimentaux en vert), le second 2m (numérique en bleu, expérimental en rose), et le troisième à 3m (numérique en bleu foncé, expérimental en marron). Les signaux expérimentaux sont faciles à repérer car les profils sont bruités tandis que ceux calculés ont des profils lisses.

On remarque que le pic de pression calculé au niveau du second capteur présente un accord nettement meilleur avec les résultats expérimentaux que précédemment. En revanche, au niveau du premier capteur, la pression dépasse la valeur expérimentale mais reste dans l'erreur de mesure. En effet, le signal expérimental ne présente pas une montée franche. Sur le troisième capteur, l'onde de pression calculée, légèrement trop forte, est trop rapide par rapport à celle mesurée.

Ceci est peut être une conséquence du paramètre d'interpénétration qui est pris constant durant toute la simulation et qui conduit à des réactions retardées assez intenses. On peut aussi imaginer que la réaction de post-combustion doit être interrompue lorsque le mélange de gaz présente une température inférieure à un certain seuil. Le calcul d'une température de gaz réaliste avec une équation d'état simplifiée n'étant pas trivial, ce problème a été laissé de coté pour l'instant.

Si on revient sur le premier capteur, on peut noter que la décroissance de pression est assez nettement au dessus de la mesure. On peut donc penser que la post combustion augmente trop

fortement la pression mesurée sur le premier capteur et vient ainsi améliorer les prédictions sur le deuxième capteur.

Ces remarques nous amènent aux conclusions suivantes : Les effets d'interpénétration et de post-combustion permettent de calculer convenablement le rayon de l'explosion, mais la précision est peut être perfectible en ce qui concerne les signaux de pression.

On peut alors remettre en question le choix de l'utilisation de l'équation d'état des gaz parfaits pour les produits de détonation du TNT. Dans le paragraphe suivant, on utilise l'équation d'état de Jones-Wilkins-Lee (Lee, Hornig, and Kury, 1968) plus adaptée pour traiter des problèmes d'explosions (Annexes I et J)

V.4 TNT traité avec l'équation d'état JWL sans interpénétration ni post combustion

L'utilisation de l'équation d'état JWL est délicate pour les raisons suivantes :

- L'écoulement que l'on modélise est diphasique.
- Les solveurs de relaxation de pressions doivent être adaptées (on rappelle que jusqu'à présent ils ont été construits en utilisant l'équation d'état stiffened-gas). De plus, l'équation d'état JWL doit être prolongée en dehors de son domaine de validité pour ne pas conduire à un blocage lors de l'emploi de la méthode de Newton utilisée dans la relaxation des pressions.
- La modélisation du transfert de masse a du être adaptée, car l'équation d'état JWL contient des fonctions de la densité qui transfèrent (ou retranchent) artificiellement de l'énergie lors du transfert de masse.

En préalable, la condition initiale a été recalculée avec la méthode décrite dans Massoni et al. (2006), cette fois en tenant compte de l'équation d'état JWL. Les graphes sont présentés sur la Figure 6.23.

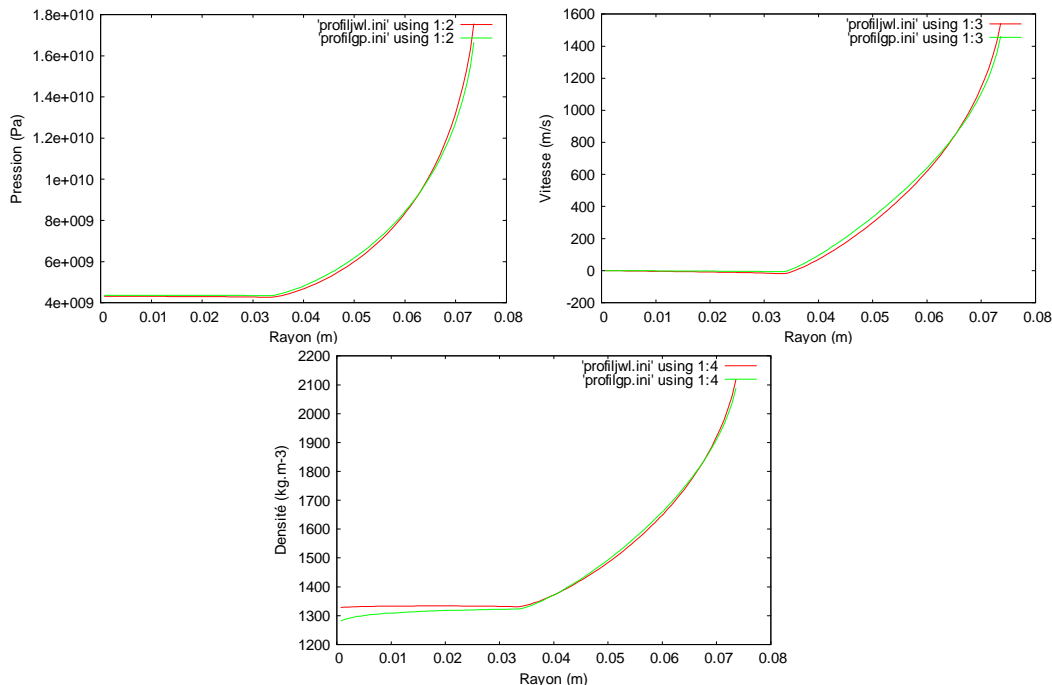


Figure 6.23 Profil initiaux de pression, vitesse et densité dans une charge de 75 mm de TNT, en utilisant deux équations d'états différentes : JWL en rouge, gaz parfait en vert. On constate que les différences sont infimes.

On simule maintenant la détonation et on trace l'évolution du rayon de la boule de feu. Les résultats sont représentés ci-après :

Gaz parfait

JWL

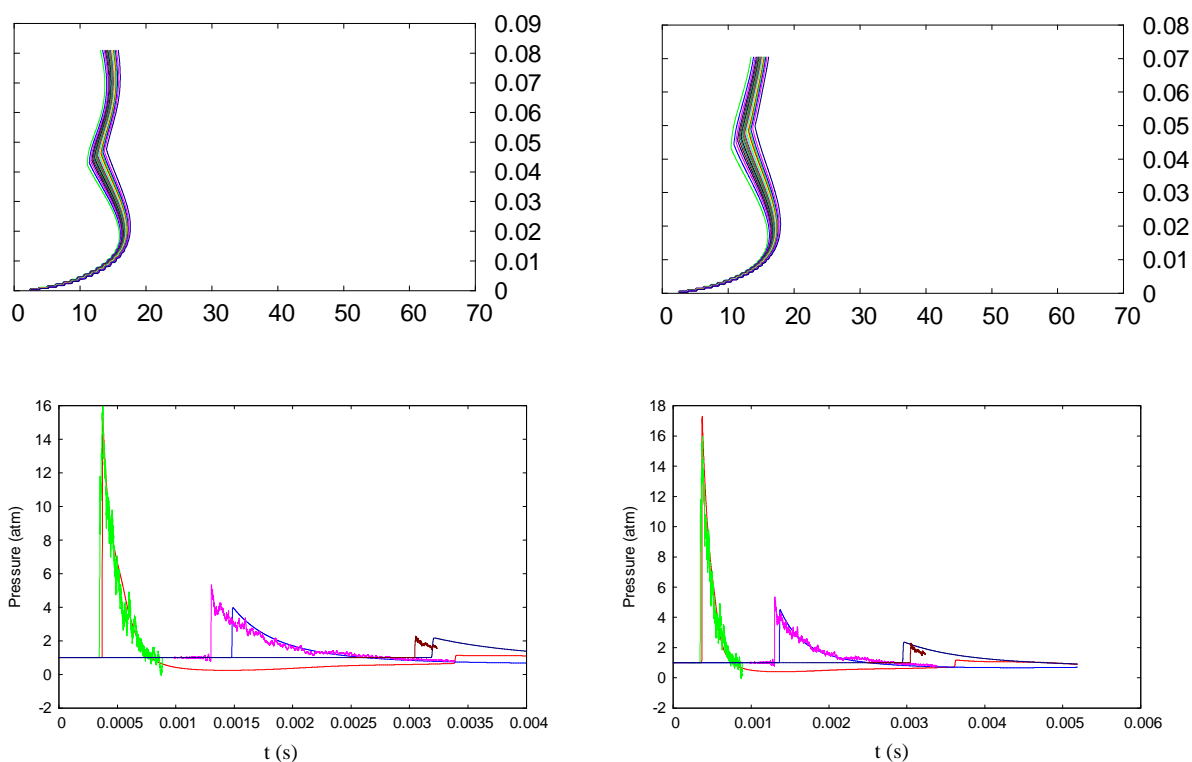


Figure 6.24 En haut, évolution de l'interface dans le diagramme (X,T) en utilisant l'équation d'état des gaz parfait à gauche et JWL à droite. En bas, comparaisons des signaux de pressions expérimentaux et simulés sans interpénétration ni post-combustion à 3 distances différentes du centre de la charge. Le premier est à 1m (résultat numériques en rouge, résultats expérimentaux en vert), le second 2m (numérique en bleu, expérimental en rose), et le troisième à 3m (numérique en bleu foncé, expérimental en marron). A gauche, on a utilisé l'équation d'état des gaz parfait, à droite l'équation d'état JWL. Cette dernière donne de bien meilleurs résultats.

Le premier signal de pression est maintenant parfaitement reproduit avec l'équation d'état JWL. Le deuxième signal est reproduit avec un très bon niveau de fidélité. Le troisième signal est un peu trop rapide.

Un désaccord subsiste toujours sur le troisième capteur, y compris avec l'équation d'état JWL, mais cette dernière ne peut pas être considérée comme une équation d'état parfaite.

Cependant, on rappelle que la post-combustion n'était pas considérée, et en observant les résultats calculés avec l'équation d'état JWL, il semble que la post-combustion ne doive rien apporter.

On compare le rayon de l'explosion calculé avec l'équation d'état JWL avec les données expérimentales (Figure 6.25).

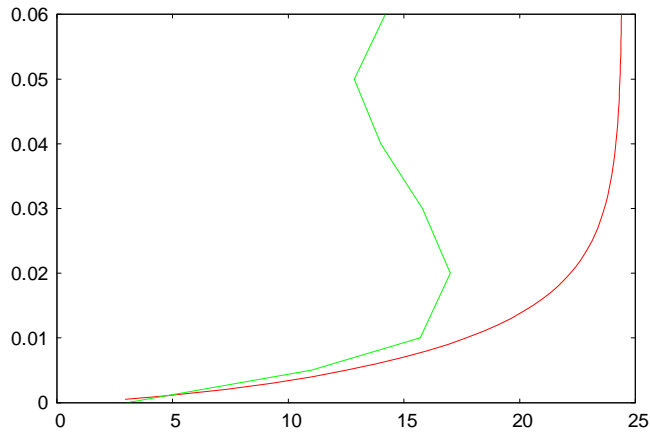


Figure 6.25 Rayon expérimental (en rouge) et simulé sans interpénétration, sans post-combustion et avec l'équation d'état JWL (en vert) de l'explosion dans le diagramme (X,T).

Les deux trajectoires du rayon de l'explosion (Figure 6.25) sont quasiment confondues sur la durée $0 - 0.01 t/R_0$. Ceci signifie que sur cette durée, l'interpénétration est absente. Par conséquent, la post combustion ne peut s'y produire.

En revenant aux graphes de pressions, on s'aperçoit que les pics de pressions apparaissent à des temps bien inférieur à $0.01 t/R_0$: le temps maximum des observations est de l'ordre de la moitié de ce temps. Cela signifie que durant la durée totale d'observation des signaux de pression, l'interpénétration est absente. Si un effet doit se produire sur les signaux de pression, il se produira sur des échelles de temps nettement supérieures.

Pour confirmer cette conclusion, on réalise le même test en ajoutant maintenant les effets d'interpénétration et de post-combustion.

V.5 TNT traité en JWL avec interpénétration et post combustion

On renouvelle la simulation avec interpénétration et post-combustion, de nouveau avec l'équation d'état JWL ainsi que le profil de détonation initial approprié. Le paramètre de diffusion D_0 est toujours pris égal à 100, comme pour la simulation en gaz parfaits.

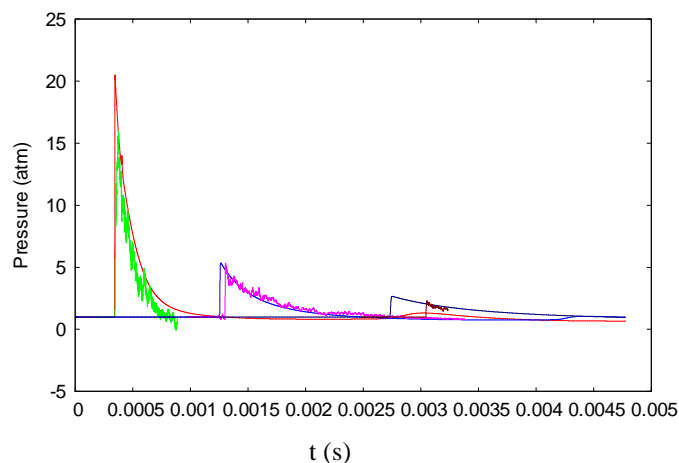


Figure 6.26 Comparaisons des signaux de pressions expérimentaux et simulés avec interpénétration et post-combustion à 3 distances différentes du centre de la charge. Le premier est à 1m (résultat numériques en rouge, résultats expérimentaux en vert), le second 2m (numérique en bleu, expérimental en rose), et le troisième à 3m (numérique en bleu foncé, expérimental en marron).

Le signal sur le premier capteur de pression présente un pic et une décroissance largement surestimés. Le deuxième signal est en bon accord et le troisième en très mauvais accord.

On voit donc très clairement les effets de la post combustion sur le premier capteur. Cependant, ces effets non négligeables ne sont pas ceux observés expérimentalement. Par contre, l'interface présente une trajectoire en meilleur accord avec les expériences, du moins au temps longs. Ci-après, sont comparées les trajectoires numériques avec et sans interpénétration (et post combustion).

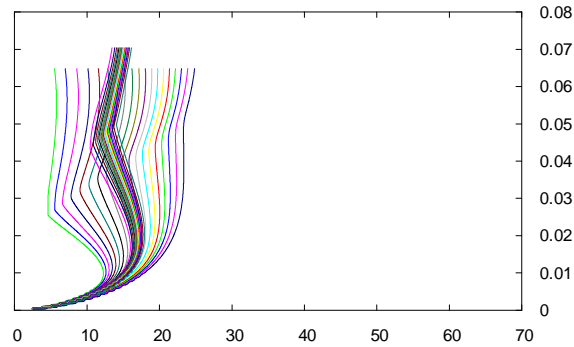


Figure 6.27 Evolution de l'interface dans le diagramme (X,T) avec et sans interpénétration.

Il est clair que les effets d'interpénétration sont favorables. On compare l'évolution du rayon de l'explosion simulée avec les données expérimentales.

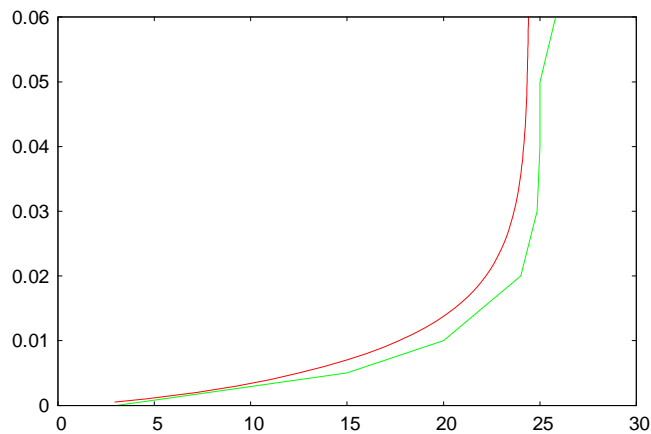


Figure 6.28 Rayon expérimental (en rouge) et simulé avec interpénétration, post-combustion et avec JWL (en vert) de l'explosion dans le diagramme (X,T).

On s'aperçoit qu'avec le paramètre de diffusion D_0 fixé à $100 \text{ m}^2/\text{s}$, l'expansion de l'explosion est surestimée sur les temps courts ($<0.01t/R_0$), mais est correcte sur les temps longs. En d'autres termes, l'interpénétration est exagérée aux temps courts alors qu'elle est correcte aux temps longs.

On rappelle que sur les temps courts, lorsqu'on utilise l'équation d'état JWL, on n'a pas besoin de l'interpénétration et de la post-combustion pour reproduire correctement le premier pic de pression (Figure 6.24). Il semble donc qu'on ne doit pas utiliser un paramètre de diffusion D_0 constant. Pour vérifier ce scénario, on n'active l'interpénétration (et donc la post-combustion) qu'à partir du temps $0.01 t/R_0$ c'est-à-dire 0.75ms .

V.6 TNT en JWL avec interpénétration et post combustion au-delà de $0.01 t/R_0$

Les trois figures caractéristiques sont représentées ci-après :

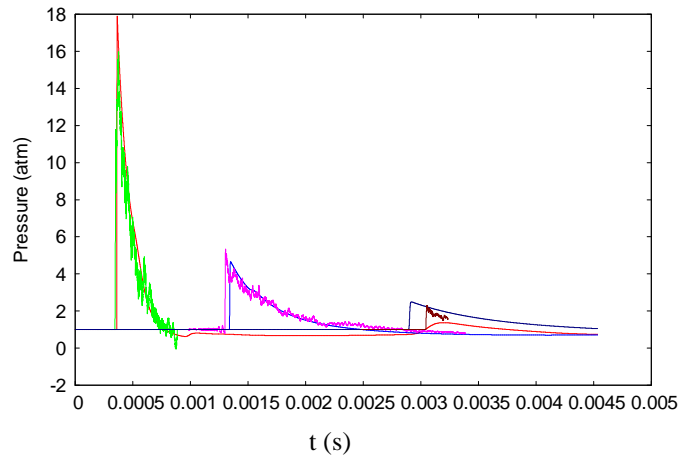


Figure 6.29 Comparaisons des signaux de pressions expérimentaux et simulés avec interpénétration et post-combustion (à partir de $t/R_0=0.01$) à 3 distances différentes du centre de la charge. Le premier est à 1m (résultat numériques en rouge, résultats expérimentaux en vert), le second 2m (numérique en bleu, expérimental en rose), et le troisième à 3m (numérique en bleu foncé, expérimental en marron).

L'accord est excellent sur les deux premiers capteurs. L'erreur sur le troisième capteur semble être un problème de loi d'état JWL aux basses densités.

La trajectoire de la zone de mélange est comparée au cas sans interpénétration ci-après :

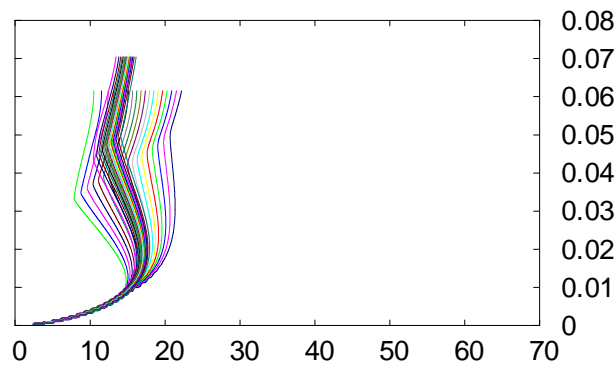


Figure 6.30 Evolution de l'interface dans le diagramme (X,T) avec et sans interpénétration.

Durant la période 0-0.01 t/R_0 , les deux trajectoires sont confondues. Au delà, le modèle d'interpénétration produit une zone de mélange.

On compare enfin les trajectoires expérimentales et numériques :

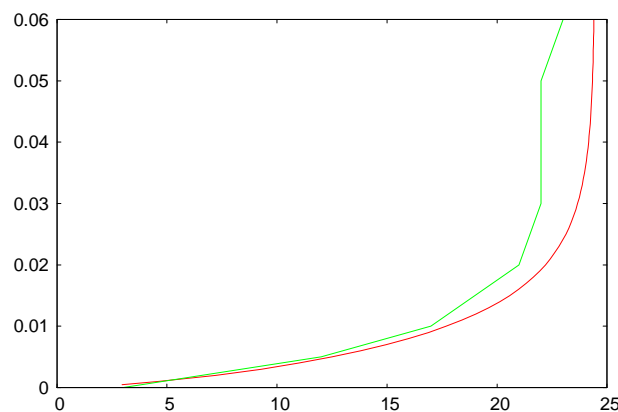


Figure 6.31 Rayon expérimental (en rouge) et simulé avec interpénétration, post-combustion et avec JWL (en vert) de l'explosion dans le diagramme (X,T). L'accord est très acceptable.

V.7 Conclusions sur le TNT

Les précédentes analyses sur le cas de l'explosion de TNT nous conduisent aux conclusions suivantes :

- Une équation d'état de gaz réel doit être utilisée. JWL est une option, mais sa formulation est mal adaptée aux modèles multiphasiques. Par ailleurs, elle semble manquer de précision aux basses densités. Une procédure de fitting des paramètres JWL utilisant un nombre de points beaucoup plus important pourrait être utile pour ce dernier défaut.
- Le profil initial de la détonation doit être calculé (Massoni et al., 2006)
- L'interpénétration ne peut pas être introduite tant que le mouvement de l'interface est accéléré. En effet, le fluide lourd à l'intérieur de la charge est séparé du fluide léger à l'extérieur par une interface stable au sens de Rayleigh-Taylor. L'interpénétration n'a pas lieu lorsque l'onde de choc franchit l'interface dans le sens lourd-léger. En revanche, l'onde de détente réfléchie entraîne l'accélération de l'interface dans le sens léger-lourd, et ce n'est pas qu'à partir de cet instant que l'interpénétration (et par conséquent la post-combustion), entre en jeu.

Les effets de post-combustion peuvent résulter en quelque effet de souffle, au même titre qu'une déflagration gazeuse. Ils résultent assurément en une expansion de la boule de feu.

VI. Vérification du scénario sur le HMX

Dans cette partie, nous allons vérifier que les conclusions sur le TNT sont aussi valables pour un autre explosif : le HMX. On utilise donc l'équation d'état JWL et on calcule les profils initiaux de détonation sphérique. Le code Cheetah 2.0 prédit pour une explosion à volume constant de TNT la pression initiale de 171 900 atm à la densité de 1905 kg/m³. Les produits de détonation du TNT sont considérés comme un gaz parfait à $\gamma = 3.2414$. La charge sphérique a un rayon initial $R_0 = 63$ mm.

VI.1 Simulation sans interpénétration et sans post-combustion

On commence par simuler l'explosion sans considérer l'interpénétration, ni la post-combustion. Des capteurs de pression sont disposés à 31,72 R₀ et 47,27 R₀.

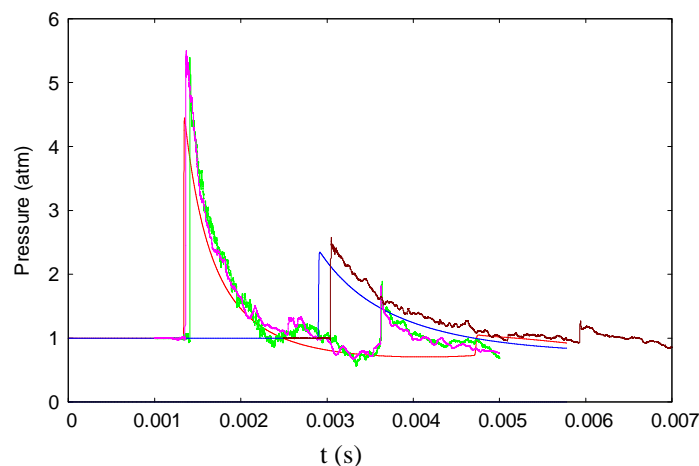


Figure 6.32 Comparaisons des signaux de pressions expérimentaux et simulés sans interpénétration ni post-combustion. Deux signaux expérimentaux sont fournis pour le premier capteur (vert et rose) et un pour le second capteur (marron). La pression simulée du premier capteur est en rouge, celle du second capteur est en bleu.

Pour le premier capteur, il apparaît que la pression simulée est inférieure à la mesure. Il en est de même pour le deuxième capteur, où la courbe bleue est inférieure à la mesure.

Le choc secondaire, mesuré par le premier capteur à 0.0037 t/R₀ environ est obtenu avec une amplitude plus faible et est assez retardé, puisqu'il apparaît à environ 0.0048 t/R₀.

La position de l'interface est représentée sur la figure suivante. Elle atteint un maximum de 19 R0 alors que la mesure expérimentale dépasse 25 R0.

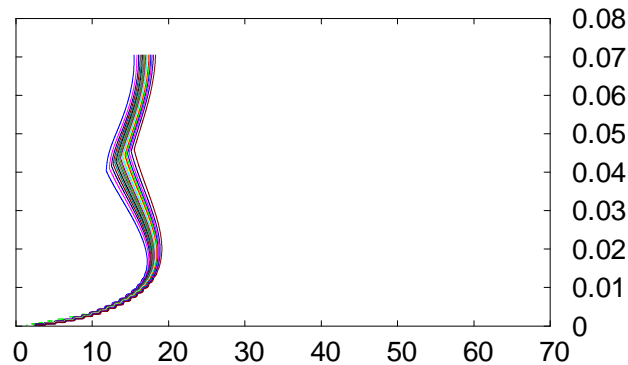


Figure 6.33 Evolution de l'interface dans le diagramme (X,T) avec et sans interpénétration.

VI.2 HMX avec interpénétration et post combustion

On effectue maintenant les mêmes simulations, mais en tenant compte de l'interpénétration et de la post-combustion dès le début de la simulation. Le coefficient de diffusion D_0 est fixé à $100 \text{ m}^2/\text{s}$. La réaction de post-combustion s'écrit maintenant :

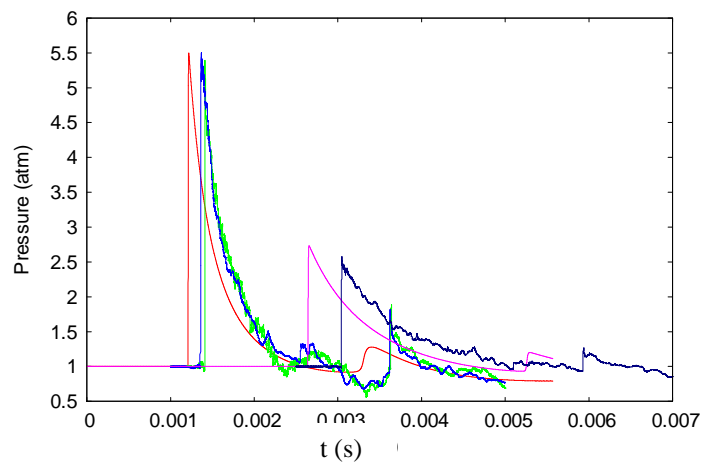
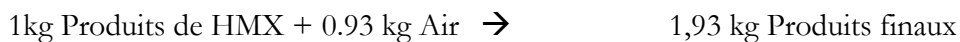


Figure 6.34 Comparisons des signaux de pressions expérimentaux et simulés avec interpénétration et post-combustion.

L'amplitude du premier signal de pression semble maintenant parfaite, mais on observe toutefois que le pic de pression est légèrement en avance. Le choc secondaire enregistré par le premier capteur est maintenant davantage en phase, mais il est maintenant lui aussi en avance.

Le deuxième signal est encore plus précoce que le premier et son amplitude est exagérée par rapport aux mesures.

On observe l'évolution de l'interface au cours du temps.

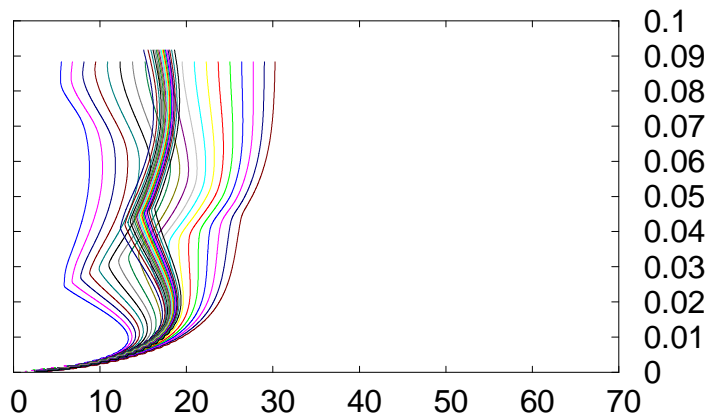


Figure 6.35 Evolution de l'interface dans le diagramme (X,T) avec et sans interpénétration.

Les effets de l'interpénétration sont nets. Cependant, la position maximale de l'interface est exagérée, car elle atteint un rayon adimensionné de l'ordre de 30, ce qui signifie que le paramètre d'interpénétration a été surestimé. Cela importe peu pour la suite.

VI.3 Analyse des résultats du HMX

Les signaux de pressions qui viennent d'être obtenus semblent en meilleur accord lorsque la post-combustion est considérée que lorsqu'elle ne l'est pas. Ceci vient contredire les conclusions établies lors de l'étude du TNT.

Cependant, la position des capteurs dans les deux tests ne permet pas de comparer les résultats pour les deux explosifs (TNT et HMX). On rappelle que les positions des capteurs de pression pour le TNT sont 13.58 R0, 27.16R0 et 40.75 R0 alors que celles des capteurs pour le HMX sont 31.72R0 et 47.27R0.

Ainsi, le premier capteur du HMX se situe entre le deuxième et le troisième du TNT. Le deuxième capteur du HMX est encore plus loin. Or, dans le cas du TNT, on a observé pour les capteurs éloignés un manque de précision certainement du aux limites de l'équation d'état dans les basses densités.

Pour comparer les résultats du HMX à ceux du TNT, on reproduit les signaux expérimentaux du HMX sur la figure suivante ainsi que ceux calculés en l'absence de post-combustion. On ajoute sur ce graphe le signal de pression du premier capteur du TNT. Ce signal devrait être assez proche de celui mesuré pour le HMX puisque cet explosif est plus énergétique que le TNT et la masse de la charge légèrement inférieure.

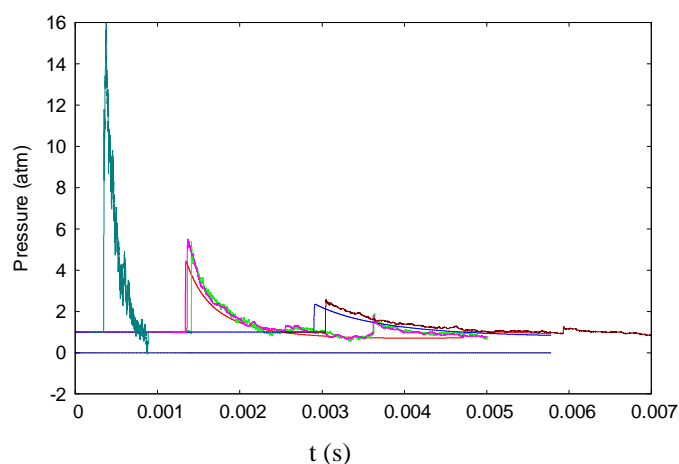


Figure 6.36 Comparaisons des signaux de pressions expérimentaux et simulés avec interpénétration et post-combustion.

Sur cette échelle, on voit ainsi que les erreurs commises sur le HMX ne sont pas si grandes. Elles sont de l'ordre de grandeurs de celles observées pour les signaux de pressions du TNT.

Pour s'en assurer, on compare les résultats obtenus précédemment pour le TNT avec ceux du HMX. L'accord obtenu pour les capteurs 2 et 3 du TNT est proche de celui obtenu pour les capteurs 1 et 2 du HMX.

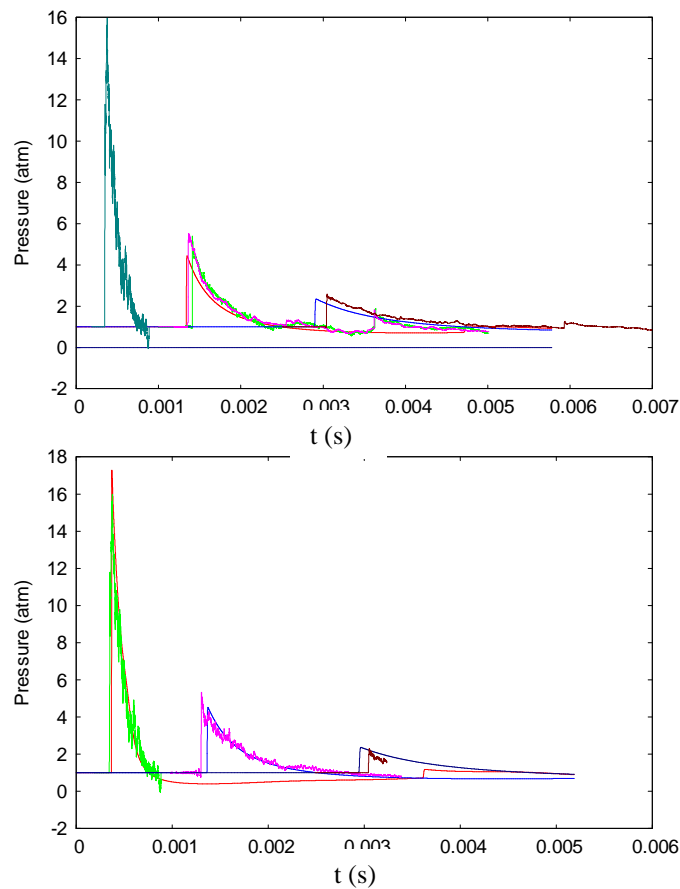


Figure 6.37 Comparisons des signaux de pressions expérimentaux et simulés avec interpénétration et post-combustion. En haut, l'explosif est le HMX, en bas, c'est le TNT.

Ainsi, il semble que l'amélioration de ces simulations, si elle est nécessaire, passe avant tout par l'amélioration de la loi d'état et plus accessoirement par l'introduction d'effets physiques supplémentaires.

VII. Loi empirique pour le coefficient de diffusion

Nous avons vu que, pour les deux exemples d'explosions sphériques traités, le paramètre d'interpénétration D_0 est de l'ordre de $100 \text{ m}^2/\text{s}$. Le rapport de pression est de l'ordre de 100 000. Dans le chapitre précédent, pour les deux cas des instabilités de Richtmyer-Meshkov, le paramètre D_0 était de l'ordre de $0.1 \text{ m}^2/\text{s}$. Le rapport de pression entre les chambres 'haute pression' et 'basse pression' dans cette expérience est de 4,35 pour le cas lourd/léger et 4,78 pour le cas léger/lourd.

On retient donc que pour des rapports de pression initiaux de l'ordre de 4 à 5, le coefficient d'interpénétration est de l'ordre de 0.1. Lorsque le rapport de pression est de l'ordre de 100 000, ce même coefficient est de l'ordre de 100. On déduit de ces quelques tests la loi suivant sur le coefficient d'interpénétration :

$$D = Y_1 Y_2 0.03 \left(\frac{P_{HP}}{P_{BP}} \right)^{0.7}$$

VIII. Conclusion

Le mélange des produits de détonation avec l'air et les effets de post-combustion ont été traités avec succès à l'aide d'un modèle innovant comportant un seul paramètre, contrôlant la taille de la zone d'interpénétration. Une loi générale a été obtenue pour ce paramètre, sur la base d'expériences en tube à choc et sur des explosions sphériques aériennes. Cette loi pourra être améliorée avec d'autres tests d'explosions sphériques.

Ce modèle a été obtenu grâce à une nouvelle interprétation de la viscosité artificielle, couramment employée dans les méthodes de capture de discontinuités dans les écoulements compressibles. Nous avons démontré que les méthodes de viscosité artificielle étaient cohérentes par rapport à la seconde loi de la thermodynamique, ceci grâce à l'utilisation d'un système hyperbolique augmenté.

Conclusion générale

Le phénomène d'interpénétration de deux fluides au niveau d'une interface est dû aux instabilités multidimensionnelles qui se développent à son voisinage. Un modèle unidimensionnel a été recherché pour traduire l'effet d'interpénétration au travers du déséquilibre de vitesse de ces phases. A partir de cette considération, trois modèles d'interpénétration ont été construits avec pour point de départ le modèle diphasique de Baer and Nunziato (1986).

Le premier modèle (Chapitre 3) de type Darcy est obtenu par un développement asymptotique à l'ordre 1 du modèle de Baer and Nunziato (1986) dans la limite des forts coefficients de relaxation des pressions et des vitesses. Il possède un seul paramètre et permet de reproduire l'épaississement d'une interface. Cependant, celle-ci doit se situer dans un gradient de pression. Sur le plan numérique la présence des termes de diffusion conduit à de fortes restrictions sur le pas de temps et par conséquent à des temps de calcul conséquents. Les phénomènes inertiels d'interpénétration étant absents, le modèle n'a pas permis de simuler correctement l'interpénétration de fluides lors d'instabilités de type Richtmyer-Meshkov.

Un second modèle d'interpénétration, prenant en compte les effets inertiels, a alors été construit. Il est obtenu par un développement asymptotique à l'ordre 0 du modèle de Baer and Nunziato (1986) dans la limite des forts coefficients de relaxation des pressions mais pas des vitesses. Il fait intervenir deux paramètres : le coefficient de relaxation des vitesses et un coefficient de 'perméabilité' de l'interface. La zone de mélange peut maintenant évoluer après passage d'une onde de pression, sur la base de la quantité de mouvement relative accumulée. Le modèle ne faisant pas apparaître de terme diffusif, les restrictions numériques rencontrées précédemment avec le modèle de type Darcy sont supprimées. Néanmoins, la méthode de résolution numérique proposée est complexe : sur chaque bord de maille on doit résoudre un problème de Riemann à cinq ondes, une d'elles étant stationnaire. Ce modèle a toutefois permis de simuler de façon très satisfaisante l'interpénétration de fluides par instabilités de type Richtmyer-Meshkov dans le cas léger/lourd. Malheureusement, dans le cas lourd/léger, les résultats expérimentaux montrent que la forme de l'interface s'inverse lorsqu'elle est traversée par l'onde de choc. Ce processus difficile à traduire dans une approche monodimensionnelle s'est avéré bloquant. C'est la difficulté essentielle rencontrée durant ce travail de thèse. Ce modèle s'est donc avéré plus complet que le précédent, mais encore insuffisant.

Afin de contourner le problème de retournement de l'interface, un modèle de diffusion artificielle a été construit dans le Chapitre 5. Il s'agit d'une autre limite admissible au sens thermodynamique du modèle d'interpénétration du Chapitre 4. Le nouveau modèle ne fait intervenir qu'un seul paramètre qui est le coefficient de diffusion artificielle. Comme le modèle de type Darcy, il fait apparaître des termes de diffusion. Cependant, la méthode de résolution numérique peut se formuler de façon implicite, permettant l'emploi de pas de temps tout à fait raisonnables. Ce modèle permet de contourner le problème d'inversion de la forme de l'interface, produisant ainsi des résultats très satisfaisants dans les deux cas léger/lourd et lourd/léger des instabilités de Richtmyer-Meshkov.

Ce dernier modèle a pu être validé sur des problématiques plus complexes d'explosions sphériques. Il a alors fallu modéliser les réactions chimiques de post-combustion et utiliser des lois d'état adaptées pour calculer correctement le champ de pression. La comparaison des résultats numériques et expérimentaux sur plusieurs cas tests a permis d'établir une loi empirique sur le coefficient de diffusion, grâce à laquelle le modèle de diffusion ne possède plus aucun paramètre.

Plusieurs perspectives sont désormais envisageables.

La première serait de vérifier la loi empirique du paramètre de diffusion sur davantage de cas tests et éventuellement d'accroître sa précision. Le modèle de diffusion d'interface pourra ainsi être un outil permettant de calculer avec précision le rayon d'une explosion sphérique sans nécessiter d'expérience préalable. On peut aussi envisager d'améliorer les simulations d'explosions sphériques en prenant en compte les effets de particules solides noyées dans l'explosif qui viendraient traverser l'interface.

Ensuite, il serait intéressant de revenir au modèle d'interpénétration par déséquilibre de vitesse (Chapitre 4) qui pour l'instant ne possède pas toutes les caractéristiques nécessaires pour traiter le problème d'inversion d'interface. Il faudrait pour cela que la vitesse relative change de signe au moment de l'inversion. Cette voie reste à approfondir.

Enfin, même si actuellement ce modèle ne permet pas de simuler tous les cas d'épaississement d'interface, il peut toutefois s'avérer utile pour traiter des problèmes d'écoulements diphasiques en déséquilibre de vitesses. Cette perspective intéressante est aussi à approfondir.

Références

- Abgrall, R. & Perrier, V. (2006), 'Asymptotic expansion of a multiscale numerical scheme for compressible multiphase flows', *SIAM J. Multiscale and Modeling and Simulation* **5**, 84-115.
- Abgrall, R. & Saurel, R. (2003), 'Discrete equations for physical and numerical compressible multiphase mixtures', *Journal of Computational Physics*, **186 (2)**, 361-396.
- Ambroso, A., Chalons, C., Coquel, F., Galié, T., Godlewski, E., Raviart, P., Seguin, N. (2008), 'The drift-flux asymptotic limit of barotropic two-phase two-pressure models', *Commun. Math. Sci.*, **6 (2)**, 521-529.
- Andrianov, N., Saurel, R. and Warnecke, G. (2003), 'A simple method for compressible multiphase mixtures and interfaces', *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **41 (2)**, 109-131.
- Andronov, V., Bakhrah, S., Meshkov, E., Mokhov, V., Nikiforov, V., Pevnitskii A. & Tolshmyakov, A. (1976), 'Turbulent mixing at contact surface accelerated by shock waves', *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **44**, 424-427.
- Baer, M. & Nunziato, J. (1986), 'A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition DDT in reactive granular materials', *Int. J. of Multiphase Flows* **12**, 861-889.
- Besnard, D. & Harlow, F. (1988), 'Turbulence in multiphase flow', *Int. J. Multiphase Flow* **14 (6)**, 679-699.
- Besnard, D., Harlow, F., Rauen Zahn, R. & Zemach, C. (1992), 'Turbulence transport equations for variable-density turbulence and their relationship to two-field models', Los Alamos National Lab., NM, United States.
- Chen, G., Levermore, C. & Liu, T. (1994), 'Hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms and entropy', *Communications on Pure and Applied Mathematics* **47**, 787-830.
- Chen, Y., Glimm, J., Sharp, D.H. and Zhang, Q. (1996), 'A two-phase flow model of the Rayleigh-Taylor mixing zone', *Physics of Fluids* **8**, 816-825.
- Cheng, B. (2009), 'Review of turbulent mixing models', *Acta Mathematica Scientia* **29 (6)**, 1703-1720.
- Chinnayya, A., Daniel, E., Saurel, R. (2004), 'Modelling detonation waves in heterogeneous energetic materials', *Journal of Computational Physics* **192 (2)**, 490-538.
- Darcy, H. (1856), 'Les fontaines publiques de la ville de Dijon', V. Dalmont, Paris.
- Drew, D. (1983), 'Mathematical modeling of two-phase flow', *Annu. Rev. Fluid Mech* **15**, 261-291.
- Favrie, N., Gavriluk, S. & Saurel, R. (2009), 'Solid-fluid interface model in cases of extreme deformations', *Journal of Computational Physics*, **228**, 6037-3077.
- Fedkiw, R., Aslam, T., Merriman, B. & Osher, S. (1999), 'A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method)', *Journal of Computational Physics* **152 (2)**, 457-492.
- Glimm, J., Grove, J., Li, X.L., Shyue, K.M., Zhang, Q. & Zeng, Y. (1998), 'Three dimensional front tracking', *SIAM J. Scientific Computing* **19**, 703-727.
- Glimm, J., Saltz, D. & Sharp, D. (1999), 'Two-phase modelling of a fluid mixing layer', *Journal of Fluid Mechanics* **378**, 119-143.
- Guillard, H. and Duval, F. (2007), 'A Darcy law for the drift velocity in a two-phase flow model', *Journal of Computational Physics*, **224**, 288-313.
- Greenberg, J. and Leroux, A. (1996), 'A Well-Balanced Scheme for the Numerical Processing of Source Terms in Hyperbolic Equations', *SIAM Journal on Numerical Analysis* **33 (1)**, 1-16.
- Harlow, F. & Amsden, A. (1971), *Fluid Dynamics. Monograph LA*, vol. 4700, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM.
- Hirt, C. & Nichols, B. (1981), 'Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries', *Journal of Computational Physics* **39**, 201-255
- Hou, T., Le Floch, P., (1994), 'Why nonconservative schemes converge to wrong solutions: error analysis', *Mathematics of computation* **62**, 497-530.
- Houas L., Jourdan G., Schwaederlé L., Carrey R. and Diaz F. (2003), 'A new large cross section shock tube for interface hydrodynamic instability induced turbulent mixing study', *Shock Waves* **12 (5)**, 431-434.

- Ishii, M. (1975), ‘Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow’, Collection de la Direction des Etudes et Recherches Electricite de France, Eyrolles, Paris.
- Ishii, M & Hibiki, T. (2006), ‘Thermo fluid dynamics of two-phase flow’, Springer.
- Kapila, A., Menikoff, R., Bdzil, J., Son, S. & Stewart, D. (2001), ‘Two-phase modeling of deflagration to detonation transition in granular materials: Reduced equations’, *Physics of Fluids* **13** (10), 3002-3024.
- Karni, S. (1994), ‘Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm’, *Journal of Computational Physics* **112**, 31-43.
- Labois, M. (2008), ‘Modélisation des déséquilibres mécaniques dans les écoulements diphasiques : Approches par relaxation et par modèle réduit’, PhD dissertation, University Aix-Marseille I.
- Le Metayer, O., Massoni, J. & Saurel, R. (2004), ‘Elaboration des lois d’état d’un liquide et de sa vapeur pour les modèles d’écoulements diphasiques’. *Int. J. Thermal Sciences* **43** (3), 265-276 (in French).
- Lee, E., Hornig, H. & Kury J. (1968), ‘Adiabatic expansion of high explosive detonation products’, Rep UCRL-50422, Lawrence Livermore National Laboratory Livermore CA USA.
- Liska, R. & Wendroff, B. (2004), ‘Comparison of several difference schemes on 1D and 2D test problems for the Euler equations’, *SIAM Journal on Scientific Computing* **25** (3), 995-1017.
- Mariani C., Vandenboomgaerde M., Jourdan G., Souffland D. and Houas L. (2008), ‘Investigation of the Richtmyer-Meshkov instability with stereolithographed interfaces’, *Physical Review Letters* **100**, 254503
- Massoni, J., Saurel, R., Lefrançois, A. and Baudin, G. (2006), ‘Modelling spherical explosions with aluminized energetic materials’, *Shock Waves* **16** (1), 75-92.
- Munier, L. (2011), ‘Expérimentations et modélisation des effets retardés d’une explosion en milieu clos et en présence de produits liquides’, PhD dissertation, University Aix-Marseille I.
- Murrone, A. & Guillard, H. (2005), ‘A five equations reduced model for compressible two-phase flow problems’, *Journal of Computational Physics* **202**, 664-698.
- Natalini, R. (1997), ‘Recent Mathematical results on hyperbolic relaxation problems’. In *Analysis of systems of conservation laws*, 128-198, Aachen, Chapman and Hall/CRC, Boca Raton, FL.
- Perigaud, G. & Saurel, R. (2005), ‘A compressible flow model with capillary effects’, *Journal of Computational Physics* **209**, 139-178.
- Petitpas, F., & Saurel, R., (2008), ‘Modélisation de la physique à la micro-échelle dans les explosifs nano-structurés.’ *Marché n° 04.25.014.00.470.46.51 – Phase technique 2*, CCIP n° 2003-011779, CCAP n° 2004-002993, Rapport de synthèse RS2N avril 2008
- Petitpas, F., Saurel, R., Franquet, E. & Chinnayya, A. (2009), ‘Modelling detonation waves in condensed materials: Multiphase CJ conditions and multidimensional computations.’ *Shock waves* **19** (5), 377-401.
- Rusanov, V. (1961), ‘Calculation of interaction of non-steady shock waves with barriers’, *J. Comput. Math. Phys.* **1** (2), 267-279.
- Saurel, R. & Abgrall, R. (1999), ‘A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows’, *Journal of Computational Physics* **150**, 425-467.
- Saurel, R., Favrie, N., Petitpas, F., Lallemand, M.H. and Gavrilyuk, S. (2010), ‘Modelling dynamic and irreversible powder compaction’, *Journal of Fluid Mechanics* **664**, pp 348-396.
- Saurel, R., Gavrilyuk, S. & Renaud, F. (2003), ‘A multiphase model with internal degree of freedom: application to shock-bubble interaction’, *Journal of Fluid Mechanics* **495**, 283-321.
- Saurel, R., Le Metayer, O., Massoni, J., & Gavrilyuk, S. (2007), ‘Shock jump relations for multiphase mixtures with stiff mechanical relaxation’, *Shock Waves (Int. J.)* **16** (3), 209-232.
- Saurel, R., Petitpas, F. & Abgrall, R. (2008), ‘Modeling phase transition in metastable liquids. Application to flashing and cavitating flows’, *Journal of Fluid Mechanics* **607**, 313-350.
- Saurel, R., Petitpas, F., & Berry, R (2009), ‘Simple and efficient relaxation for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures’, *Journal of Computational Physics* **228**, 1678-1712.
- Stewart, H. & Wendroff, B. (1984), ‘Two-phase flow: models and methods’, *Journal of Computational Physics* **56** (3), 363-409.

- Strang, G. (1968), 'On the Construction and Comparison of Difference Schemes', *SIAM Journal on Numerical Analysis* **5** (3), 506-517.
- Toro, E., Spruce, M. & Speares, W. (1994), 'Restoration of the contact surface in the HLL Riemann solver', *Shock Waves* **4**, 25-34.
- Toro, E. (1997), 'Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: A practical introduction', Springer Verlag, Berlin.
- Wood, A. (1930), 'A textbook of sound', G. Bell and Sons LTD, London.
- Yanenko, N.Y. (1971), 'The method of fractional steps', Springer-Verlag.
- Youngs, D. (1984), 'Numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability', *Physica D: Non linear phenomena* **12**, 32-44.
- Youngs, D. (1989), 'Modelling turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability', *Physica D* **37**, 270-287.
- Zuber, N. & Findlay, J. (1965), 'Average volumetric concentration in two-phase flow systems', *Journal of Heat Transfer* 453-468.

Annexes

Annexe A. General two-phase flow model with velocity drift, heat and mass transfer

In the presence of mass transfer, System (III.2) becomes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_1 u}{\partial x} - \frac{\partial\varepsilon\rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= \dot{m}_1, \\ \frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha\rho)_2 u}{\partial x} + \frac{\partial\varepsilon\rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} &= -\dot{m}_1, \\ \frac{\partial\rho u}{\partial t} + \frac{\partial\rho u^2 + p}{\partial x} &= \rho g, \\ \frac{\partial\rho E}{\partial t} + \frac{\partial(\rho E + p)u}{\partial x} + \frac{\partial\varepsilon\rho Y_1 Y_2 w(h_2 - h_1)}{\partial x} &= \rho u g. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

where admissible forms of the mass transfer term \dot{m}_1 have to be determined.

As previously volume fraction and entropy equations have to be determined, first for system closure and second to check thermodynamic compatibility.

These equations are determined on the basis of a system composed of:

- the mixture energy equation,
- the pressure equilibrium constraint.

Combination of mass, momentum and energy equation of System (A.1) yield to the following equation:

$$\frac{de}{dt} + p \frac{dv}{dt} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial\varepsilon\rho Y_1 Y_2 w(h_2 - h_1)}{\partial x} = 0$$

Masses equations can be written as:

$$\begin{aligned} \frac{dY_1}{dt} &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial\varepsilon\rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} + \frac{\dot{m}_1}{\rho} \\ \frac{dY_2}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial\varepsilon\rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} - \frac{\dot{m}_1}{\rho} \end{aligned}$$

The mixture energy equation thus becomes:

$$Y_1 T_1 \frac{ds_1}{dt} + Y_2 T_2 \frac{ds_2}{dt} + \varepsilon Y_1 Y_2 w \frac{\partial(h_2 - h_1)}{\partial x} = (h_2 - h_1) \frac{\dot{m}_1}{\rho}$$

It is worth to mention that this equation can also be written as:

$$Y_1 T_1 \frac{d_1 s_1}{dt} + Y_2 T_2 \frac{d_2 s_2}{dt} + \varepsilon Y_1 Y_2 w \left(\frac{\partial h_2}{\partial x} - T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} - \left(\frac{\partial h_1}{\partial x} - T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} \right) \right) = (h_2 - h_1) \frac{\dot{m}_1}{\rho}$$

Where $\frac{d_k}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_k \frac{\partial}{\partial x}$, $k = 0, 1, 2$.

Noting that, $\frac{1}{\rho_k} \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial h_k}{\partial x} - T_k \frac{\partial s_k}{\partial x}$ and $w = \frac{1}{\lambda_0} \rho Y_1 Y_2 \left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2} \right) \frac{\partial p}{\partial x}$, we get :

$$Y_1 T_1 \frac{d_1 s_1}{dt} + Y_2 T_2 \frac{d_2 s_2}{dt} = \frac{\varepsilon \lambda_0}{\rho} w^2 + (h_2 - h_1) \frac{\dot{m}_1}{\rho} \quad (\text{A.2})$$

On the other hand, the pressure equilibrium constraint,

$$p_1(\rho_1, s_1) = p_2(\rho_2, s_2),$$

under differential form becomes:

$$c_1^2 \frac{d\rho_1}{dt} + \rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{ds_1}{dt} = c_2^2 \frac{d\rho_2}{dt} + \rho_2 \Gamma_2 T_2 \frac{ds_2}{dt},$$

with,

$$\left. \frac{\partial p_k}{\partial s_k} \right)_{\rho_k} = \rho_k \Gamma_k T_k \quad \text{and} \quad \left. \frac{\partial p_k}{\partial \rho_k} \right)_{s_k} = c_k^2.$$

This identity can be written as:

$$c_1^2 \frac{d\rho_1}{dt} + \rho_1 \Gamma_1 T_1 \left(\frac{d_1 s_1}{dt} + \varepsilon Y_2 w \frac{\partial s_1}{\partial x} \right) = c_2^2 \frac{d\rho_2}{dt} + \rho_2 \Gamma_2 T_2 \left(\frac{d_2 s_2}{dt} - \varepsilon Y_1 w \frac{\partial s_2}{\partial x} \right)$$

I.e.:

$$\rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{d_1 s_1}{dt} - \rho_2 \Gamma_2 T_2 \frac{d_2 s_2}{dt} + \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w \left(\frac{\Gamma_1 T_1}{\alpha_1} \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2 T_2}{\alpha_2} \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) = c_2^2 \frac{d\rho_2}{dt} - c_1^2 \frac{d\rho_1}{dt}$$

Masses equations imply:

$$\frac{d\rho_1}{dt} = \frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} - \frac{\rho_1}{\alpha_1} \frac{d\alpha_1}{dt} - \rho_1 \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\dot{m}_1}{\alpha_1}$$

$$\frac{d\rho_2}{dt} = -\frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} - \frac{\rho_2}{\alpha_2} \frac{d\alpha_2}{dt} - \rho_2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\dot{m}_1}{\alpha_2}$$

Thus :

$$c_2^2 \frac{d\rho_2}{dt} - c_1^2 \frac{d\rho_1}{dt} = -\frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) + \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{d\alpha_1}{dt} + (\rho_1 c_1^2 - \rho_2 c_2^2) \frac{\partial u}{\partial x} - \left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \dot{m}_1$$

The pressure equilibrium condition becomes:

$$\rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{d_1 s_1}{dt} - \rho_2 \Gamma_2 T_2 \frac{d_2 s_2}{dt} = \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \times$$

$$\left\{ \frac{d\alpha_1}{dt} - \rho c_w^2 \left[\alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{1}{\rho_1 c_1^2} - \frac{1}{\rho_2 c_2^2} \right) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} - \dot{m}_1 \right) \right] + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right\}$$

Thanks to the analysis conducted in Section (III.1) the volume fraction equation reads:

$$\frac{d\alpha_1}{dt} = \rho c_w^2 \left[\alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{1}{\rho_1 c_1^2} - \frac{1}{\rho_2 c_2^2} \right) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w}{\partial x} - \dot{m}_1 \right) + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} Q_1 - \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} Q_2 \right) \right] \quad (\text{A.3})$$

And the pressure equilibrium equation becomes:

$$\rho_1 \Gamma_1 T_1 \frac{d_1 s_1}{dt} - \rho_2 \Gamma_2 T_2 \frac{d_2 s_2}{dt} = \frac{\Gamma_1}{\alpha_1} Q_1 - \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} Q_2 \quad (\text{A.4})$$

With $Q_1 = H_1(T^* - T_1)$, $Q_2 = H_2(T^* - T_2)$ and $T^* = \frac{H_1 T_1 + H_2 T_2}{H_1 + H_2}$.

Determination of the phases' entropy equations consists in solving system composed of (A.2) and (A.4).

$$\alpha_1 \rho_1 \frac{d_1 s_1}{dt} = \frac{1}{T_1} \left\{ \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2 + \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \Gamma (h_2 - h_1) \dot{m}_1 + Q_1 \right\}$$

$$\alpha_2 \rho_2 \frac{d_2 s_2}{dt} = \frac{1}{T_2} \left\{ \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2 - \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \Gamma (h_1 - h_2) \dot{m}_1 + Q_2 \right\}$$

They can also be expressed as:

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 s_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 u s_1}{\partial x} - \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w s_1}{\partial x} = \frac{1}{T_1} \left\{ \frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2 + \left(\frac{\alpha_1}{\Gamma_1} \Gamma (h_2 - h_1) + T_1 s_1 \right) \dot{m}_1 + Q_1 \right\}$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 s_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 u s_2}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w s_2}{\partial x} = \frac{1}{T_2} \left\{ \frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2 - \left(\frac{\alpha_2}{\Gamma_2} \Gamma (h_1 - h_2) + T_2 s_2 \right) \dot{m}_1 + Q_2 \right\} \text{Th}$$

erefore the mixture entropy equation reads:

$$\frac{\partial (\alpha_1 \rho_1 s_1 + \alpha_2 \rho_2 s_2)}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_1 \rho_1 s_1 + \alpha_2 \rho_2 s_2) u}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon \rho Y_1 Y_2 w (s_2 - s_1)}{\partial x} = \left(\frac{\alpha_1}{\Gamma_1 T_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2 T_2} \right) \Gamma \varepsilon \lambda_0 w^2$$

$$+ \frac{1}{T_2 T_1} H (T_2 - T_1)^2 + \Gamma \left(\frac{\alpha_1}{\Gamma_1 T_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2 T_2} \right) \left((h_2 - h_1) - T^* (s_2 - s_1) \right) \dot{m}_1$$

$$\text{with, } \frac{1}{H} = \frac{1}{H_1} + \frac{1}{H_2} \text{ and } T^* = \frac{\frac{\alpha_1}{\Gamma_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2}}{\frac{\alpha_1}{\Gamma_1 T_1} + \frac{\alpha_2}{\Gamma_2 T_2}}.$$

In order to fulfil the inequality entropy, the mass transfer term has to be modelled as:

$$\dot{m}_1 = \mathbf{v} (\tilde{g}_2 - \tilde{g}_1)$$

Where \mathbf{v} is a relaxation parameter that controls the rate at which generalized Gibbs free energies become equals. Generalized Gibbs free energies are defined by:

$$\tilde{g}_k = h_k - T^* s_k$$

This modelling ensures system relaxation to thermodynamic equilibrium.

Finally, when topological information are known, as for example with bubbly or droplet flows, in which the assumption of spherical inclusions is valid, conservation equations for the number of particles or bubbles per unit volume can be added to the system to determine the parameter

$$\varepsilon = 1 / A_1 :$$

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} + \frac{\partial N_1 u}{\partial x} - \frac{\partial N_1 \varepsilon Y_2 w}{\partial x} = \dot{N}_1$$

$$\frac{\partial N_2}{\partial t} + \frac{\partial N_2 u}{\partial x} + \frac{\partial N_2 \varepsilon Y_1 w}{\partial x} = \dot{N}_2$$

Kinetic laws regarding \dot{N}_k are usually based on the Weber number.

From $\alpha_k = \frac{4}{3} \pi R_k^3 N_k$ the inclusions radius is determined and the specific interfacial area is given by:

$$A_1 = 4 \pi R_k^2 N_k .$$

To summarise, the new two-phase flow model, in three dimensions reads:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \bar{u} \text{grad}(\alpha_1) = \rho c_w^2 \left[\begin{array}{l} \alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{1}{\rho_1 c_1^2} - \frac{1}{\rho_2 c_2^2} \right) \text{div}(\bar{u}) + \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \left(\frac{\alpha_1}{c_1^2} + \frac{\alpha_2}{c_2^2} \right) \left(\text{div}(\rho Y_1 Y_2 \bar{w}) - \dot{m}_1 \right) \\ + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 D T_1 \text{grad}(s_1) + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \varepsilon \rho Y_1 Y_2 D T_2 \text{grad}(s_2) \right) \\ + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} Q_1 - \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} Q_2 \right) \end{array} \right]$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \text{div}((\alpha\rho)_1 \bar{u} - \varepsilon\rho Y_1 Y_2 \bar{w}) = \dot{m}_1$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} + \text{div}((\alpha\rho)_1 \bar{u} + \varepsilon\rho Y_1 Y_2 \bar{w}) = -\dot{m}_1$$

$$\frac{\partial\rho u}{\partial t} + \text{div}(\rho\bar{u} \times \bar{u} + pI) = \rho\bar{g}$$

$$\frac{\partial\rho E}{\partial t} + \text{div}((\rho E + p) \bar{u} + \varepsilon\rho Y_1 Y_2 \bar{w}(h_2 - h_1)) = \rho\bar{u}\bar{g}$$

And if necessary:

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} + \text{div}(N_1 \bar{u} - N_1 \varepsilon Y_2 \bar{w}) = \dot{N}_1$$

Or,

$$\frac{\partial N_2}{\partial t} + \text{div}(N_2 \bar{u} + N_2 \varepsilon Y_2 \bar{w}) = \dot{N}_2.$$

Closure relations are:

$$\bar{u}_R = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\rho \lambda_0} [\rho_2 - \rho_1] \text{grad}(p),$$

$$Q_1 = H_1(T^* - T_1), \quad Q_2 = H_2(T^* - T_2) \quad \text{and} \quad T^* = \frac{H_1 T_1 + H_2 T_2}{H_1 + H_2},$$

$$\dot{m}_1 = v(\tilde{g}_2 - \tilde{g}_1),$$

$$p(\rho, e, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{\rho e - \left(\frac{\alpha_1 \gamma_1 p_{\infty 1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2 \gamma_2 p_{\infty 2}}{\gamma_2 - 1} \right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}.$$

The model is able to deal with two-phase mixtures evolving in temperature and velocity disequilibrium, as well as material interfaces, chemical and physical transformation fronts when $\varepsilon = 0$ and permeable interfaces when $\varepsilon > 0$.

Annexe B. Thermodynamic compatibility of the pressure equilibrium model

System (4.6) and phase's entropy equations must form a compatible system. From the mixture total energy,

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \left((\rho E + p + p_t)u + m \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2}(Y_2 - Y_1)w^2 \right) \right)}{\partial x} = 0,$$

with the help of the mixture momentum and mixture mass equations, the following identity is obtained:

$$\rho \frac{de}{dt} + \rho \frac{de_t}{dt} + (p + p_t) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial m \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2}(Y_2 - Y_1)w^2 \right)}{\partial x} = 0$$

With the help of the 'turbulent' equation of state ($p_t = 2\rho e_t$) and mixture internal energy definition ($e = Y_1 e_1 + Y_2 e_2$) we get:

$$\begin{aligned} & \rho \left[Y_1 \left(\frac{de_1}{dt} + p \frac{dv_1}{dt} \right) + Y_2 \left(\frac{de_2}{dt} + p \frac{dv_2}{dt} \right) \right] + m \frac{\partial (h_1 - h_2)}{\partial x} \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{dp_t}{dt} + 3p_t \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial \left(\frac{1}{2}(Y_2 - Y_1)w^2 \right) m}{\partial x} = 0 \end{aligned} \quad (B.1)$$

But,

$$\frac{dp_t}{dt} = \frac{d\rho Y_1 Y_2 w^2}{dt} = 2\rho Y_1 Y_2 w \frac{dw}{dt} + \rho w^2 (Y_2 - Y_1) \frac{dY_1}{dt} + Y_1 Y_2 w^2 \frac{d\rho}{dt}$$

Also, phase 1 mass equation can be expressed as:

$$\frac{dY_1}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial m}{\partial x}$$

Inserting these expressions in (A.1) the compatibility condition becomes:

$$\rho \left[Y_1 T_1 \frac{ds_1}{dt} + Y_2 T_2 \frac{ds_2}{dt} \right] + m \left(\frac{dw}{dt} + w \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial \left(\frac{1}{2}(Y_2 - Y_1)w^2 \right)}{\partial x} + \frac{\partial (h_1 - h_2)}{\partial x} \right) = 0 \quad (B.2)$$

The entropy equations can be written as,

$$\begin{aligned} \rho Y_1 \frac{ds_1}{dt} &= \frac{1}{T_1} \frac{Z_2}{Z_1 + Z_2} \Lambda w^2 + m \frac{\partial s_1}{\partial x} \\ \rho Y_2 \frac{ds_2}{dt} &= \frac{1}{T_2} \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2} \Lambda w^2 - m \frac{\partial s_2}{\partial x} \end{aligned}$$

Inserting again these expressions in the compatibility condition (A.2) and rearranging we get:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial w \left(\frac{1}{2}(Y_2 - Y_1)w + u \right)}{\partial x} + \frac{\partial (h_1 - h_2)}{\partial x} + T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} - m T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} = -\frac{\Lambda}{\rho Y_1 Y_2} w.$$

With the help of the Gibbs identity and enthalpy definition,

$$\frac{\partial h_k}{\partial x} = T_k \frac{\partial s_k}{\partial x} + v_k \frac{\partial p}{\partial x}$$

The relative velocity evolution equation is recovered:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial w \left(\frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w + u \right)}{\partial x} + (v_1 - v_2) \frac{\partial p}{\partial x} = - \frac{\Lambda}{\rho Y_1 Y_2} w.$$

Thus System (4.6) is compatible with the entropy equations.

Annexe C. Thermodynamic compatibility of System (4.15)

Starting from the mixture total energy,

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial m \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} = 0,$$

and using the definition of mixture energy and mixture momentum and mass equations of System (IV.5), we obtain:

$$\rho \frac{\partial (e + e_t)}{\partial t} + \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right) \frac{\partial m}{\partial x} + m \frac{\partial \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} = 0$$

Using the mixture energy definition and turbulent energy one,

$$\rho \frac{\partial (Y_1 e_1 + Y_2 e_2)}{\partial t} + \rho \frac{\partial \frac{1}{2} Y_1 Y_2 w^2}{\partial t} + \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right) \frac{\partial m}{\partial x} + m \frac{\partial \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} = 0$$

Expanding this equation we get:

$$\rho \left(Y_1 \frac{\partial e_1}{\partial t} + Y_2 \frac{\partial e_2}{\partial t} \right) + (p_1 v_1 - p_2 v_2) \frac{\partial m}{\partial x} + m \left(\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} \right) = 0$$

Or,

$$\rho \left(Y_1 \frac{\partial e_1}{\partial t} + Y_2 \frac{\partial e_2}{\partial t} \right) + \left(-p_1 v_1 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} - p_2 v_2 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} \right) + m \left(\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(h_1 - h_2 + \frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} \right) = 0$$

But,

$$\frac{\partial h_k}{\partial x} = T_k \frac{\partial s_k}{\partial x} + v_k \frac{\partial p_k}{\partial x}$$

Thus,

$$\left(\rho Y_1 \frac{\partial e_1}{\partial t} - p_1 v_1 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \rho Y_2 \frac{\partial e_2}{\partial t} - p_2 v_2 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} \right) + m \left(\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{1}{2} (Y_2 - Y_1) w^2 \right)}{\partial x} + T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} - T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} + v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} \right) = 0$$

Taking into account the relative motion equation:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{Y_2 - Y_1}{2} w^2 \right)}{\partial x} + v_1 \frac{\partial p_1}{\partial x} - v_2 \frac{\partial p_2}{\partial x} = 0$$

The compatibility condition reduces to:

$$\left(\rho Y_1 \frac{\partial e_1}{\partial t} - p_1 v_1 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \rho Y_2 \frac{\partial e_2}{\partial t} - p_2 v_2 \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} \right) + m \left(T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} - T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) = 0$$

Or again,

$$\rho Y_1 T_1 \left(\frac{\partial s_1}{\partial t} + Y_2 w \frac{\partial s_1}{\partial x} \right) + \rho Y_2 T_2 \left(\frac{\partial s_2}{\partial t} - Y_1 w \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) = (p_1 - p_2) \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}$$

As the volume fraction equation reads,

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \mu (p_1 - p_2)$$

The compatibility condition becomes,

$$\rho Y_1 T_1 \left(\frac{\partial s_1}{\partial t} + Y_2 w \frac{\partial s_1}{\partial x} \right) + \rho Y_2 T_2 \left(\frac{\partial s_2}{\partial t} - Y_1 w \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) = \mu (p_1 - p_2)^2$$

This identity is fulfilled by the entropy equations expressed as:

$$\frac{\partial(\alpha \rho s)_1}{\partial t} + \frac{\partial m s_1}{\partial x} = \theta \frac{\mu (p_1 - p_2)^2}{T_1}$$

$$\frac{\partial(\alpha \rho s)_2}{\partial t} - \frac{\partial m s_2}{\partial x} = (1 - \theta) \frac{\mu (p_1 - p_2)^2}{T_1}$$

Annexe D. Asymptotic analysis of System (4.13) in the limit of stiff pressure relaxation

The aim is to show that System (4.13) corresponds to System (4.11) in the limit of stiff pressure relaxation.

Masses and mixture momentum equations are unchanged by the asymptotic analysis:

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_1}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho)_2}{\partial t} - \frac{\partial m}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = 0$$

Volume fraction and entropy equations have to be considered:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \mu(p_1 - p_2)$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho s)_1}{\partial t} + \frac{\partial m s_1}{\partial x} = \theta \frac{\mu(p_1 - p_2)^2}{T_1}$$

$$\frac{\partial(\alpha\rho s)_2}{\partial t} - \frac{\partial m s_2}{\partial x} = (1 - \theta) \frac{\mu(p_1 - p_2)^2}{T_2}$$

The entropy equations are transformed to pressure equations with the help of mass and volume fraction equations:

$$\frac{\partial p_1}{\partial t} + Y_2 w \frac{\partial p_1}{\partial x} + \frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} \frac{\partial \alpha_1 Y_2 w}{\partial x} = \frac{\theta \mu(p_1 - p_2)^2}{(\alpha\rho)_1 \left(\frac{\partial e_1}{\partial p_1} \right)_{\rho_1}} - \frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} \mu(p_1 - p_2)$$

$$\frac{\partial p_2}{\partial t} - Y_1 w \frac{\partial p_2}{\partial x} - \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \frac{\partial \alpha_2 Y_1 w}{\partial x} = \frac{(1 - \theta) \mu(p_1 - p_2)^2}{(\alpha\rho)_2 \left(\frac{\partial e_2}{\partial p_2} \right)_{\rho_2}} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \mu(p_1 - p_2)$$

Taking the difference of these two equations, an evolution equation for the relative pressure is obtained:

$$\frac{\partial p_1 - p_2}{\partial t} + Y_2 w \frac{\partial p_1}{\partial x} + Y_1 w \frac{\partial p_2}{\partial x} + \frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} \frac{\partial \alpha_1 Y_2 w}{\partial x} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \frac{\partial \alpha_2 Y_1 w}{\partial x} = \left(\frac{\theta}{(\alpha\rho)_1 \left(\frac{\partial e_1}{\partial p_1} \right)_{\rho_1}} - \frac{(1 - \theta)}{(\alpha\rho)_2 \left(\frac{\partial e_2}{\partial p_2} \right)_{\rho_2}} \right) \mu(p_1 - p_2)^2 - \left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \mu(p_1 - p_2)$$

We now consider the asymptotic limit of this equation.

- The relaxation parameter is assumed stiff: $\mu = \frac{1}{\varepsilon}$ with $\varepsilon \longrightarrow 0^+$.
- The pressure is assumed to have small variations around the pressure equilibrium state: $p_k = p_k^0 + \varepsilon p_k^1$.

With these notations, the leading order relative pressure equation becomes:

$$Y_2^0 w^0 \frac{\partial p_1^0}{\partial x} + Y_1^0 w^0 \frac{\partial p_2^0}{\partial x} + \frac{\rho_1^0 c_1^{02}}{\alpha_1^0} \frac{\partial \alpha_1^0 Y_2^0 w^0}{\partial x} + \frac{\rho_2^0 c_2^{02}}{\alpha_2^0} \frac{\partial \alpha_2^0 Y_1^0 w^0}{\partial x} = - \left(\frac{\rho_1^0 c_1^{02}}{\alpha_1^0} + \frac{\rho_2^0 c_2^{02}}{\alpha_2^0} \right) (p_1^1 - p_2^1)$$

Or again,

$$Y_2^0 w^0 \frac{\partial p_1^0}{\partial x} + Y_1^0 w^0 \frac{\partial p_2^0}{\partial x} + \frac{\rho_1^0 c_1^{02}}{\alpha_1^0} \frac{\partial m^0 v_1^0}{\partial x} + \frac{\rho_2^0 c_2^{02}}{\alpha_2^0} \frac{\partial m v_2^0}{\partial x} = - \left(\frac{\rho_1^0 c_1^{02}}{\alpha_1^0} + \frac{\rho_2^0 c_2^{02}}{\alpha_2^0} \right) (p_1^1 - p_2^1)$$

i.e.,

$$\left(\frac{c_1^{02}}{\alpha_1^0} + \frac{c_2^{02}}{\alpha_2^0}\right) \frac{\partial m^0}{\partial x} + m^0 \left(-\frac{c_1^{02}}{\alpha_1^0 \rho_1^0} \frac{\partial \rho_1^0}{\partial x} - \frac{c_2^{02}}{\alpha_2^0 \rho_2^0} \frac{\partial \rho_2^0}{\partial x} + \frac{1}{\alpha_1^0 \rho_1^0} \frac{\partial p_1^0}{\partial x} + \frac{1}{\alpha_2^0 \rho_2^0} \frac{\partial p_2^0}{\partial x}\right) = -\left(\frac{\rho_1^0 c_1^{02}}{\alpha_1^0} + \frac{\rho_2^0 c_2^{02}}{\alpha_2^0}\right) (p_1^1 - p_2^1)$$

But,

$$\frac{\partial p_k}{\partial x} = c_k^2 \frac{\partial \rho_k}{\partial x} + \rho_k \Gamma_k T_k \frac{\partial s_k}{\partial x}$$

Thus,

$$\left(\frac{c_1^{02}}{\alpha_1^0} + \frac{c_2^{02}}{\alpha_2^0}\right) \frac{\partial m^0}{\partial x} + m^0 \left(\frac{\Gamma_1^0 T_1^0}{\alpha_1^0} \frac{\partial s_1^0}{\partial x} + \frac{\Gamma_2^0 T_2^0}{\alpha_2^0} \frac{\partial s_2^0}{\partial x}\right) = -\left(\frac{\rho_1^0 c_1^{02}}{\alpha_1^0} + \frac{\rho_2^0 c_2^{02}}{\alpha_2^0}\right) (p_1^1 - p_2^1)$$

Consequently,

$$p_1^1 - p_2^1 = -\frac{\left(\frac{c_1^{02}}{\alpha_1^0} + \frac{c_2^{02}}{\alpha_2^0}\right) \frac{\partial m^0}{\partial x} + m^0 \left(\frac{\Gamma_1^0 T_1^0}{\alpha_1^0} \frac{\partial s_1^0}{\partial x} + \frac{\Gamma_2^0 T_2^0}{\alpha_2^0} \frac{\partial s_2^0}{\partial x}\right)}{\left(\frac{\rho_1^0 c_1^{02}}{\alpha_1^0} + \frac{\rho_2^0 c_2^{02}}{\alpha_2^0}\right)}$$

Inserting this result in the volume fraction equation,

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \mu(p_1 - p_2),$$

that becomes at leading order,

$$\frac{\partial \alpha_1^0}{\partial t} = p_1^1 - p_2^1,$$

we obtain :

$$\frac{\partial \alpha_1^0}{\partial t} = -\frac{\left(\frac{c_1^{02}}{\alpha_1^0} + \frac{c_2^{02}}{\alpha_2^0}\right) \frac{\partial m^0}{\partial x} + m^0 \left(\frac{\Gamma_1^0 T_1^0}{\alpha_1^0} \frac{\partial s_1^0}{\partial x} + \frac{\Gamma_2^0 T_2^0}{\alpha_2^0} \frac{\partial s_2^0}{\partial x}\right)}{\left(\frac{\rho_1^0 c_1^{02}}{\alpha_1^0} + \frac{\rho_2^0 c_2^{02}}{\alpha_2^0}\right)}$$

By dropping superscript '0', the volume fraction of System (4.11) is recovered:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = -\alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho c_w^2}{\rho_1 c_1^2 \rho_2 c_2^2} \left(\left(\frac{c_1^2}{\alpha_1} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial m}{\partial x} + m \left(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} T_1 \frac{\partial s_1}{\partial x} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} T_2 \frac{\partial s_2}{\partial x} \right) \right).$$

Annexe E. Newton-Raphson method for the 5-wave approximate Riemann solver

The aim is to determine the Riemann problem solution variables Y_{1Lext}^* , Y_{1Lint}^* , Y_{1Rint}^* , Y_{1Rext}^* , w_{Lext}^* , w_{Lint}^* , w_{Rint}^* and w_{Rext}^* . It is obtained when the following set of functions is zero.

Case $w > 0$

$$f_1 = w_{Lext}^* - w_L - Z_L (Y_{1Lext}^* - Y_{1L}^*)$$

$$f_2 = w_{Lint}^* - w_L - Z_L (Y_{1Lint}^* - Y_{1L}^*) - \frac{\rho_{1L}^{\gamma_1 - 1}}{Y_{1L} w_L + Y_{1L} Y_{2L} Z_L} (\phi_{1R} - \phi_{1L})$$

$$f_3 = w_{Lint}^* - w_{Lext}^* + Z_L (Y_{1Lint}^* - Y_{1Lext}^*) - \frac{\rho_{1L}^{\gamma_1 - 1}}{Y_{1L} w_L - Y_{1L} Y_{2L} Z_L} (\phi_{1R} - \phi_{1L})$$

$$f_4 = w_{Rext}^* - w_R + Z_R (Y_{1Rext}^* - Y_{1R}^*)$$

$$f_5 = w_{Rint}^* - w_R + Z_R (Y_{1Rint}^* - Y_{1R}^*) - \frac{\rho_{2R}^{\gamma_2 - 1}}{Y_{2R} w_R + Y_{1R} Y_{2R} Z_R} (\phi_{2L} - \phi_{2R})$$

$$f_6 = w_{Rint}^* - w_{Rext}^* - Z_R (Y_{1Rint}^* - Y_{1Rext}^*) - \frac{\rho_{2R}^{\gamma_2 - 1}}{(Y_{2R} w_R - Y_{1R} Y_{2R} Z_R)} (\phi_{2L} - \phi_{2R})$$

$$f_7 = \rho_L Y_{1Lint}^* (1 - Y_{1Lint}^*) w_{Lint}^* - \rho_R Y_{1Rint}^* (1 - Y_{1Rint}^*) w_{Rint}^*$$

$$f_8 = h_{2Lint}^* - h_{1Lint}^* - h_{2Rint}^* + h_{1Rint}^* + \frac{1}{2} (2Y_{1Lint}^* - 1) w_{Lint}^{*2} - \frac{1}{2} (2Y_{1Rint}^* - 1) w_{Rint}^{*2}$$

With,

$$h_{1Lint}^* = \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \phi_{1R} \left(\frac{\rho_L}{\alpha_{1L}} \right)^{\gamma_1 - 1} Y_{1Lint}^{* \gamma_1 - 1}$$

$$h_{1Rint}^* = \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \phi_{1R} \left(\frac{\rho_R}{\alpha_{1R}} \right)^{\gamma_1 - 1} Y_{1Rint}^{* \gamma_1 - 1}$$

$$h_{2Lint}^* = \frac{\gamma_2}{\gamma_2 - 1} \phi_{2L} \left(\frac{\rho_L}{\alpha_{2L}} \right)^{\gamma_2 - 1} Y_{2Lint}^{* \gamma_2 - 1}$$

$$h_{2Rint}^* = \frac{\gamma_2}{\gamma_2 - 1} \phi_{2L} \left(\frac{\rho_R}{\alpha_{2R}} \right)^{\gamma_2 - 1} Y_{2Rint}^{* \gamma_2 - 1}$$

It can be written under the form:

$$AX - B = 0$$

with,

$$A = \begin{pmatrix} -Z_L & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -Z_L & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -Z_L & Z_L & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Z_R & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & Z_R & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -Z_R & Z_R & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_L Y_{1Lint}^* (1 - Y_{1Lint}^*) & -\rho_R Y_{1Rint}^* (1 - Y_{1Rint}^*) & 0 \\ 0 & K_L & K_R & 0 & 0 & \frac{1}{2} (2Y_{1Lint}^* - 1) w_{Lint}^* & -\frac{1}{2} (2Y_{1Rint}^* - 1) w_{Rint}^* & 0 \end{pmatrix},$$

where,

$$\mathbf{K}_L = \frac{\left(\frac{\gamma_2}{\gamma_2 - 1} \left(\frac{\rho_L}{\alpha_{2L}} \right)^{\gamma_2 - 1} \varphi_{2L} \mathbf{Y}_{ILint}^*{}^{\gamma_2 - 2} - \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \left(\frac{\rho_L}{\alpha_{1L}} \right)^{\gamma_1 - 1} \varphi_{1R} \mathbf{Y}_{ILint}^*{}^{\gamma_1 - 2} \right)}{\mathbf{Y}_{ILint}^*},$$

$$\mathbf{K}_R = \frac{\left(-\frac{\gamma_2}{\gamma_2 - 1} \left(\frac{\rho_R}{\alpha_{2R}} \right)^{\gamma_2 - 1} \varphi_{2L} \mathbf{Y}_{2Rint}^*{}^{\gamma_2 - 2} + \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} \left(\frac{\rho_R}{\alpha_{1R}} \right)^{\gamma_1 - 1} \varphi_{1R} \mathbf{Y}_{IRint}^*{}^{\gamma_1 - 2} \right)}{\mathbf{Y}_{IRint}^*},$$

and,

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{Y}_{ILext}^* \\ \mathbf{Y}_{ILint}^* \\ \mathbf{Y}_{IRint}^* \\ \mathbf{Y}_{IRext}^* \\ \mathbf{w}_{Lext}^* \\ \mathbf{w}_{Lint}^* \\ \mathbf{w}_{Rint}^* \\ \mathbf{w}_{Re xt}^* \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}_L - \mathbf{Z}_L \mathbf{Y}_{IL} \\ \frac{\rho_{1L}^{\gamma_1 - 1}}{\mathbf{Y}_{1L} \mathbf{w}_L + \mathbf{Y}_{1L} \mathbf{Y}_{2L} \mathbf{Z}_L} (\varphi_{1R} - \varphi_{1L}) + \mathbf{w}_L - \mathbf{Z}_L \mathbf{Y}_{IL} \\ \frac{\rho_{1L}^{\gamma_1 - 1}}{\mathbf{Y}_{1L} \mathbf{w}_L - \mathbf{Y}_{1L} \mathbf{Y}_{2L} \mathbf{Z}_L} (\varphi_{1R} - \varphi_{1L}) \\ \mathbf{w}_R - \mathbf{Z}_R \mathbf{Y}_{IR} \\ \frac{\rho_{2R}^{\gamma_2 - 1}}{\mathbf{Y}_{2R} \mathbf{w}_R + \mathbf{Y}_{1R} \mathbf{Y}_{2R} \mathbf{Z}_R} (\varphi_{2L} - \varphi_{2R}) + \mathbf{w}_R + \mathbf{Z}_R \mathbf{Y}_{IR} \\ \frac{\rho_{2R}^{\gamma_2 - 1}}{\mathbf{Y}_{2R} \mathbf{w}_R - \mathbf{Y}_{1R} \mathbf{Y}_{2R} \mathbf{Z}_R} (\varphi_{2L} - \varphi_{2R}) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

The Newton-Raphson iteration reads:

$$\mathbf{X}^{n+1} = \mathbf{X}^n + \mathbf{J}^{-1} (\mathbf{A} \mathbf{X}^n - \mathbf{B})$$

It uses the following Jacobian matrix:

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} -\mathbf{Z}_L & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mathbf{Z}_L & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\mathbf{Z}_L & \mathbf{Z}_L & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{Z}_R & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \mathbf{Z}_R & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathbf{Z}_R & \mathbf{Z}_R & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & \rho_L \mathbf{w}_L^* (1 - 2\mathbf{Y}_{1L}^*) & -\rho_R \mathbf{w}_R^* (1 - 2\mathbf{Y}_{1R}^*) & 0 & 0 & \rho_L \mathbf{Y}_{1L}^* (1 - \mathbf{Y}_{1L}^*) & -\rho_R \mathbf{Y}_{1R}^* (1 - \mathbf{Y}_{1R}^*) & 0 \\ 0 & \frac{\partial f_8}{\partial \mathbf{Y}_{1L}^*} & \frac{\partial f_8}{\partial \mathbf{Y}_{1R}^*} & 0 & 0 & (2\mathbf{Y}_{1L}^* - 1) \mathbf{w}_L^* & -(2\mathbf{Y}_{1R}^* - 1) \mathbf{w}_R^* & 0 \end{pmatrix}$$

with,

$$\frac{\partial f_8}{\partial \mathbf{Y}_{1Lint}^*} = \frac{\partial h_{2Lint}^*}{\partial \mathbf{Y}_{1Lint}^*} - \frac{\partial h_{1Lint}^*}{\partial \mathbf{Y}_{1Lint}^*} + \mathbf{w}_{Lint}^*{}^2$$

$$\frac{\partial f_8}{\partial \mathbf{Y}_{1Rint}^*} = -\frac{\partial h_{2Rint}^*}{\partial \mathbf{Y}_{1Rint}^*} + \frac{\partial h_{1Rint}^*}{\partial \mathbf{Y}_{1Rint}^*} - \mathbf{w}_{Rint}^*{}^2$$

$$\frac{\partial h_{1Lint}^*}{\partial \mathbf{Y}_{1Lint}^*} = \gamma_1 \varphi_{1R} \left(\frac{\rho_L}{\alpha_{1L}} \right)^{\gamma_1 - 1} \mathbf{Y}_{1Lint}^*{}^{\gamma_1 - 2}$$

$$\frac{\partial h_{1R \text{int}}^*}{\partial Y_{1R \text{int}}^*} = \gamma_1 \phi_{1R} \left(\frac{\rho_R}{\alpha_{1R}} \right)^{\gamma_1-1} Y_{1R \text{int}}^*{}^{\gamma_1-2}$$

$$\frac{\partial h_{2L \text{int}}^*}{\partial Y_{2L \text{int}}^*} = -\gamma_2 \phi_{2L} \left(\frac{\rho_L}{\alpha_{2L}} \right)^{\gamma_2-1} Y_{2L \text{int}}^*{}^{\gamma_2-2}$$

$$\frac{\partial h_{2R \text{int}}^*}{\partial Y_{2R \text{int}}^*} = -\gamma_2 \phi_{2L} \left(\frac{\rho_R}{\alpha_{2R}} \right)^{\gamma_2-1} Y_{2R \text{int}}^*{}^{\gamma_2-2}$$

Case $w < 0$

The same method is used with the same matrix Λ except,

$$K_L = \frac{\begin{pmatrix} \frac{\gamma_2}{\gamma_2-1} \left(\frac{\rho_L}{\alpha_{2L}} \right)^{\gamma_2-1} \phi_{2R} Y_{1L \text{int}}^*{}^{\gamma_2-2} - \frac{\gamma_1}{\gamma_1-1} \left(\frac{\rho_L}{\alpha_{1L}} \right)^{\gamma_1-1} \phi_{1L} Y_{1L \text{int}}^*{}^{\gamma_1-2} \end{pmatrix}}{Y_{1L \text{int}}^*}$$

$$K_R = \frac{\begin{pmatrix} -\frac{\gamma_2}{\gamma_2-1} \left(\frac{\rho_R}{\alpha_{2R}} \right)^{\gamma_2-1} \phi_{2R} Y_{2R \text{int}}^*{}^{\gamma_2-2} + \frac{\gamma_1}{\gamma_1-1} \left(\frac{\rho_R}{\alpha_{1R}} \right)^{\gamma_1-1} \phi_{1L} Y_{1R \text{int}}^*{}^{\gamma_1-2} \end{pmatrix}}{Y_{1R \text{int}}^*}$$

The same vector of variables X is used, but the vector B is different:

$$B = \begin{pmatrix} w_L - Z_L Y_{1L} \\ \frac{\rho_{2L}{}^{\gamma_2-1}}{Y_{2L} w_L + Y_{1L} Y_{2L} Z_L} (\phi_{2R} - \phi_{2L}) + w_L - Z_L Y_{1L} \\ \frac{\rho_{2L}{}^{\gamma_2-1}}{Y_{2L} w_L - Y_{1L} Y_{2L} Z_L} (\phi_{2R} - \phi_{2L}) \\ w_R - Z_R Y_{1R} \\ \frac{\rho_{1R}{}^{\gamma_1-1}}{Y_{1R} w_R + Y_{1R} Y_{2R} Z_R} (\phi_{1L} - \phi_{1R}) + w_R + Z_R Y_{1R} \\ \frac{\rho_{1R}{}^{\gamma_1-1}}{Y_{1R} w_R - Y_{1R} Y_{2R} Z_R} (\phi_{1L} - \phi_{1R}) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

The Jacobian matrix J is the same as previously, except:

$$\frac{\partial f_8}{\partial Y_{1L \text{int}}^*} = \frac{\partial h_{2L \text{int}}^*}{\partial Y_{1L \text{int}}^*} - \frac{\partial h_{1L \text{int}}^*}{\partial Y_{1L \text{int}}^*} + w_{L \text{int}}^*{}^2$$

$$\frac{\partial f_8}{\partial Y_{1R \text{int}}^*} = -\frac{\partial h_{2R \text{int}}^*}{\partial Y_{1R \text{int}}^*} + \frac{\partial h_{1R \text{int}}^*}{\partial Y_{1R \text{int}}^*} - w_{R \text{int}}^*{}^2$$

$$\frac{\partial h_{1L \text{int}}^*}{\partial Y_{1L \text{int}}^*} = \gamma_1 \phi_{1L} \left(\frac{\rho_L}{\alpha_{1L}} \right)^{\gamma_1-1} Y_{1L \text{int}}^*{}^{\gamma_1-2}$$

$$\frac{\partial h_{1R \text{int}}^*}{\partial Y_{1R \text{int}}^*} = \gamma_1 \phi_{1L} \left(\frac{\rho_R}{\alpha_{1R}} \right)^{\gamma_1-1} Y_{1R \text{int}}^*{}^{\gamma_1-2}$$

$$\frac{\partial h_{2L \text{ int}}^*}{\partial Y_{2L \text{ int}}^*} = -\gamma_2 \varphi_{2R} \left(\frac{\rho_L}{\alpha_{2L}} \right)^{\gamma_2 - 1} Y_{2L \text{ int}}^{* \gamma_2 - 2}$$

$$\frac{\partial h_{2R \text{ int}}^*}{\partial Y_{2R \text{ int}}^*} = -\gamma_2 \varphi_{2R} \left(\frac{\rho_R}{\alpha_{2R}} \right)^{\gamma_2 - 1} Y_{2R \text{ int}}^{* \gamma_2 - 2}$$

Annexe F. Analyse asymptotique du Système (5.28) dans la limite des forts coefficients de relaxation de pressions

Le modèle de diffusion d'interface hors d'équilibre des pressions s'écrit

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}}{\partial x} &= \mu(p_1 - p_2) \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial x}}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial x}}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \rho_u}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \rho_u}{\partial x}}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial x}}{\partial x} &= \mu((\theta - 1)p_1 - \theta p_2)(p_1 - p_2) \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial x}}{\partial x} &= -\mu((\theta - 1)p_1 - \theta p_2)(p_1 - p_2) \end{aligned}$$

On écrit l'équation d'entropie de la phase 1. Pour cela on commence par réécrire l'équation d'énergie de la phase 1 :

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial x}}{\partial x} + \frac{\partial \frac{1}{2} \alpha_1 \rho_1 u^2}{\partial t} = \mu((\theta - 1)p_1 - \theta p_2)(p_1 - p_2)$$

Après calcul, l'équation peut s'écrire :

$$\alpha_1 \rho_1 \frac{\partial e_1}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial x}}{\partial x} + E_1 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} - Y_1 u^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + Y_1 u \frac{\partial \rho u}{\partial t} = \mu((\theta - 1)p_1 - \theta p_2)(p_1 - p_2)$$

En utilisant la relation de Gibbs, on fait apparaître l'entropie :

$$\alpha_1 \rho_1 T_1 \frac{\partial s_1}{\partial t} - \alpha_1 \rho_1 p_1 \frac{\partial v_1}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial x}}{\partial x} + E_1 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} - Y_1 u^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + Y_1 u \frac{\partial \rho u}{\partial t} = \mu((\theta - 1)p_1 - \theta p_2)(p_1 - p_2)$$

On simplifie cette équation avec l'équation de masse de la phase 1, et on obtient :

$$\alpha_1 \rho_1 T_1 \frac{\partial s_1}{\partial t} - p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial x}}{\partial x} + H_1 \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} - Y_1 u^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + Y_1 u \frac{\partial \rho u}{\partial t} = \mu((\theta - 1)p_1 - \theta p_2)(p_1 - p_2)$$

Grâce à l'équation sur la fraction volumique, on peut écrire :

$$\alpha_1 \rho_1 T_1 \frac{\partial s_1}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial x}}{\partial x} - H_1 \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial x}}{\partial x} + Y_1 u^2 \frac{\partial D \frac{\partial \rho}{\partial x}}{\partial x} - Y_1 u \frac{\partial D \frac{\partial \rho u}{\partial x}}{\partial x} = \mu \theta (p_1 - p_2)^2$$

On considère la limite asymptotique de l'équation d'entropie de la phase 1. Le coefficient de relaxation des pressions s'écrit $\mu = \frac{\mu^0}{\varepsilon}$ et on considère que les pressions de chaque phase varient légèrement autour d'une pression d'équilibre : $p_k = p_k^0 + \varepsilon p_k^1$. On ne gardera que les termes d'ordre 0.

L'équation d'entropie de la phase 1 devient alors :

$$(\alpha_1 \rho_1 T_1)^0 \frac{\partial s_1^0}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial(\alpha_1 \rho_1 E_1)^0}{\partial x}}{\partial x} - H_1^0 \frac{\partial D \frac{\partial(\alpha_1 \rho_1)^0}{\partial x}}{\partial x} + (Y_1 u^2)^0 \frac{\partial D \frac{\partial \rho^0}{\partial x}}{\partial x} - (Y_1 u)^0 \frac{\partial D \frac{\partial(\rho u)^0}{\partial x}}{\partial x}$$

$$= \frac{\mu^0}{\varepsilon} \theta (p_1^0 - p_2^0 + \varepsilon (p_1^1 - p_2^1))^2$$

Pour $\varepsilon \rightarrow 0$, on obtient $p_1^0 = p_2^0 = p^0$.

L'équation d'entropie devient donc en enlevant les indices 0 :

$$\alpha_1 \rho_1 T_1 \frac{\partial s_1}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial x}}{\partial x} - H_1 \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial x}}{\partial x} + Y_1 u^2 \frac{\partial D \frac{\partial \rho}{\partial x}}{\partial x} - Y_1 u \frac{\partial D \frac{\partial \rho u}{\partial x}}{\partial x} = 0$$

Par analogie pour la phase 2 on a :

$$\alpha_2 \rho_2 T_2 \frac{\partial s_2}{\partial t} + \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial x}}{\partial x} - H_2 \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial x}}{\partial x} + Y_2 u^2 \frac{\partial D \frac{\partial \rho}{\partial x}}{\partial x} - Y_2 u \frac{\partial D \frac{\partial \rho u}{\partial x}}{\partial x} = 0$$

Pour déterminer l'équation sur la fraction volumique, on part de l'égalité des pressions

$$p_1(\rho_1, s_1) = p_2(\rho_2, s_2)$$

En différentiant cette identité, on a :

$$\frac{c_1^2}{\alpha_1} \alpha_1 d\rho_1 + \frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \alpha_1 \rho_1 T_1 ds_1 = \frac{c_2^2}{\alpha_2} \alpha_2 d\rho_2 + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \alpha_2 \rho_2 T_2 ds_2$$

En développant et en isolant la différentielle sur la fraction volumique, on a :

$$\left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \frac{c_1^2}{\alpha_1} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} - \frac{c_2^2}{\alpha_2} \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \alpha_1 \rho_1 T_1 \frac{\partial s_1}{\partial t} - \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \alpha_2 \rho_2 T_2 \frac{\partial s_2}{\partial t}$$

Pour ne plus faire apparaître les dérivées temporelles sur les autres variables, on se sert des équations de masses et d'entropies, et après simplification on obtient :

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \frac{1}{\left(\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2} \right)} \left(\begin{aligned} &+ \left(\frac{\Gamma_1 H_1}{\alpha_1} - \frac{c_1^2}{\alpha_1} \right) \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial x}}{\partial x} - \left(\frac{\Gamma_2 H_2}{\alpha_2} - \frac{c_2^2}{\alpha_2} \right) \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial x}}{\partial x} \\ &+ \frac{\Gamma_2}{\alpha_2} \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial x}}{\partial x} - \frac{\Gamma_1}{\alpha_1} \frac{\partial D \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial x}}{\partial x} \\ &+ \frac{(\rho_2 \Gamma_2 - \rho_1 \Gamma_1)}{\rho} u^2 \frac{\partial D \frac{\partial \rho}{\partial x}}{\partial x} + \frac{(\rho_2 \Gamma_2 - \rho_1 \Gamma_1)}{\rho} u \frac{\partial D \frac{\partial \rho u}{\partial x}}{\partial x} \end{aligned} \right)$$

Annexe G. Schéma implicite pour le modèle d'interpénétration

Le système d'interpénétration correspond finalement à un système de diffusion non-linéaire du type :

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(U) \frac{\partial U}{\partial x} \right) \quad (\text{B.1})$$

où $D(U)$ correspond au coefficient d'interpénétration, qui ne peut pas être pris constant, au risque d'avoir une diffusion excessive de l'onde de choc. On prendra donc :

$$D(U) = Y_1 Y_2 D_0,$$

où D_0 est une constante positive.

Considérons le bord de maille $i+1/2$ séparant les centres de mailles i et $i+1$. La continuité du flux au bord de maille et la continuité de la solution, pour un maillage à pas constant conduit à :

$$D_i \frac{U_{i+1/2} - U_i}{\frac{\Delta x}{2}} = D_{i+1} \frac{U_{i+1} - U_{i+1/2}}{\frac{\Delta x}{2}}.$$

Ainsi,

$$U_{i+1/2} = \frac{D_i U_i + D_{i+1} U_{i+1}}{D_i + D_{i+1}}.$$

On en déduit le flux,

$$q_{i+1/2} = D_i \frac{U_{i+1/2} - U_i}{\frac{\Delta x}{2}} = 2 \frac{D_i D_{i+1}}{D_i + D_{i+1}} \frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x}.$$

Le schéma d'intégration de l'équation (B.1) est donc :

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} = \frac{q_{i+1/2} - q_{i-1/2}}{\Delta x} \quad (\text{B.2})$$

C'est-à-dire :

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} = \frac{2}{\Delta x^2} \left(\frac{D_i D_{i+1}}{D_i + D_{i+1}} (U_{i+1} - U_i) - \frac{D_i D_{i-1}}{D_i + D_{i-1}} (U_i - U_{i-1}) \right)$$

Précisons maintenant l'instant auquel les flux sont calculés. Si la formule suivante est employée :

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} = \frac{2}{\Delta x^2} \left(\left(\frac{D_i D_{i+1}}{D_i + D_{i+1}} \right)^n (U_{i+1}^n - U_i^n) - \left(\frac{D_i D_{i-1}}{D_i + D_{i-1}} \right)^n (U_i^n - U_{i-1}^n) \right),$$

le schéma est alors explicite en temps et la limitation précédemment mentionnée apparaît sur le pas de temps.

Afin de s'affranchir de cette contrainte, effectuons un développement limité du flux,

$$q_{i+1/2} = a_{i+1/2} \frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x},$$

$$\text{avec } a_{i+1/2} = 2 \frac{D_i D_{i+1}}{D_i + D_{i+1}}.$$

Ainsi,

$$q_{i+1/2}^{n+1} = q_{i+1/2}^n + \frac{\partial q_{i+1/2}}{\partial U_i} (U_i^{n+1} - U_i^n) + \frac{\partial q_{i+1/2}}{\partial U_{i+1}} (U_{i+1}^{n+1} - U_{i+1}^n)$$

C'est-à-dire :

$$q_{i+1/2}^{n+1} = q_{i+1/2}^n - \frac{a_{i+1/2}}{\Delta x} \Delta U_i + \frac{a_{i+1/2}}{\Delta x} \Delta U_{i+1},$$

$$\text{avec, } \Delta U_i = U_i^{n+1} - U_i^n.$$

Reportons ce résultat dans la formule (B.2). On obtient :

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} = \frac{\left(q_{i+1/2}^n - \frac{a_{i+1/2}}{\Delta x} \Delta U_i + \frac{a_{i+1/2}}{\Delta x} \Delta U_{i+1} \right) - \left(q_{i-1/2}^n - \frac{a_{i-1/2}}{\Delta x} \Delta U_{i-1} + \frac{a_{i-1/2}}{\Delta x} \Delta U_i \right)}{\Delta x}$$

C'est-à-dire :

$$-\frac{\Delta t}{\Delta x^2} a_{i+1/2} \Delta U_{i+1} + \left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (a_{i+1/2} + a_{i-1/2}) \right) \Delta U_i - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} a_{i-1/2} \Delta U_{i-1} = \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{i+1/2}^n - q_{i-1/2}^n)$$

On a alors à résoudre un système tridiagonal. Ceci est réalisé pour chaque composante du vecteur U à l'aide de la méthode de Thomas.

On peut remarquer que le membre de droite correspond à la contribution explicite, le membre de gauche permettant la stabilisation implicite.

Lorsque les ΔU_i sont déterminés, on détermine les U_i^{n+1} par :

$$U_i^{n+1} = U_i^n + \Delta U_i.$$

Annexe H. Schémas numériques sphériques pour le modèle d'interpénétration

Schéma sphérique pour le sous-système hydrodynamique (hors d'équilibre des pressions)

On rappelle le schéma numérique utilisé de type Godunov dans le cas Cartésien.

Pour les variables obéissant à une équation sous forme conservative on utilise :

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F^*(U_i^n, U_{i+1}^n) - F^*(U_{i-1}^n, U_i^n))$$

$$\text{Où } U = (\alpha_1 \rho_1 \quad \alpha_2 \rho_2 \quad \rho u \quad \rho E)^T \text{ et } F = (\alpha_1 \rho_1 u \quad \alpha_2 \rho_2 u \quad \rho u^2 + p \quad (\rho E + p)u)^T$$

Avec F^* déterminé par la solution du problème de Riemann pour chaque bord de maille.

Pour l'équation de fraction volumique, on utilise :

$$\alpha_{1,i}^{n+1} = \alpha_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} ((u\alpha_1)_{i+1/2}^* - (u\alpha_1)_{i-1/2}^* - \alpha_{1,i}^n (u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*))$$

Et pour les équations d'énergies :

$$(\alpha \rho e)_{k,i}^{n+1} = (\alpha \rho e)_{k,i}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} ((\alpha \rho e u)_{k,i+1/2}^* - (\alpha \rho e u)_{k,i-1/2}^* + (\alpha p)_{k,i}^n (u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*))$$

Dans le cas d'un maillage sphérique monodimensionnel, le schéma s'écrit

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{V_i} (S_{i+1/2} F^*(U_i^n, U_{i+1}^n) - S_{i-1/2} F^*(U_{i-1}^n, U_i^n))$$

$$\text{Où } U = (\alpha_1 \rho_1 \quad \alpha_2 \rho_2 \quad \rho E)^T \text{ et } F = (\alpha_1 \rho_1 u \quad \alpha_2 \rho_2 u \quad (\rho E + p)u)$$

Avec V_i représentant le volume de la maille sphérique et $S_{i\pm 1/2}$ les sections de passage aux bords de mailles.

Pour l'équation de fraction volumique, on utilise :

$$\alpha_{1,i}^{n+1} = \alpha_{1,i}^n - \frac{\Delta t}{V_i} (S_{i+1/2} (u\alpha_1)_{i+1/2}^* - S_{i-1/2} (u\alpha_1)_{i-1/2}^* - \alpha_{1,i}^n (S_{i+1/2} u_{i+1/2}^* - S_{i-1/2} u_{i-1/2}^*))$$

Pour les équations d'énergies :

$$(\alpha \rho e)_{k,i}^{n+1} = (\alpha \rho e)_{k,i}^n - \frac{\Delta t}{V_i} (S_{i+1/2} (\alpha \rho e u)_{k,i+1/2}^* - S_{i-1/2} (\alpha \rho e u)_{k,i-1/2}^* + (\alpha p)_{k,i}^n (S_{i+1/2} u_{i+1/2}^* - S_{i-1/2} u_{i-1/2}^*))$$

Et enfin pour la quantité de mouvement du mélange

$$(\rho u)_i^{n+1} = (\rho u)_i^n - \frac{\Delta t}{V_i} (S_{i+1/2} (\rho u^2 + p)_{i+1/2}^* - S_{i-1/2} (\rho u^2 + p)_{i-1/2}^*) + \frac{\Delta t}{V_i} p (S_{i+1/2} - S_{i-1/2})$$

Schéma sphérique implicite du sous-système d'interpénétration (hors d'équilibre des pressions)

Dans le chapitre précédent, on a écrit que le schéma cartésien s'écrit :

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} = \frac{q_{i+1/2} - q_{i-1/2}}{\Delta x} \quad (6.1)$$

$$\text{Avec } q_{i+1/2} = a_{i+1/2} \frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x}, \text{ et } a_{i+1/2} = 2 \frac{D_i D_{i+1}}{D_i + D_{i+1}}$$

Où D est le coefficient de diffusion.

L'analogue de la formule (6.1) s'écrit en géométrie sphérique :

$$\Delta U_i = \frac{\Delta t}{V_i} ((Sq)_{i+1/2} - (Sq)_{i-1/2}) \quad (6.2)$$

Où V_i représente le volume de la maille sphérique et $S_{i\pm 1/2}$ les sections de passage aux bords de mailles.

On rappelle que le développement limité des flux aux bords de mailles s'écrit :

$$q_{i+1/2}^{n+1} = q_{i+1/2}^n - \frac{a_{i+1/2}}{\Delta x} \Delta U_i + \frac{a_{i+1/2}}{\Delta x} \Delta U_{i+1}$$

Ce qui conduit à :

$$\Delta U_i = \frac{\Delta t}{V_i} \left\{ \left((Sq)_{i+1/2}^n - \frac{(Sa)_{i+1/2}}{\Delta x} \Delta U_i + \frac{(Sa)_{i+1/2}}{\Delta x} \Delta U_{i+1} \right) - \left((Sq)_{i-1/2}^n - \frac{(Sa)_{i-1/2}}{\Delta x} \Delta U_{i-1} + \frac{(Sa)_{i-1/2}}{\Delta x} \Delta U_i \right) \right\}$$

C'est-à-dire :

$$-\frac{\Delta t}{V_i} \frac{(Sa)_{i-1/2}}{\Delta x} \Delta U_{i-1} + \left(I + \frac{\Delta t}{V_i} \left(\frac{(Sa)_{i+1/2}}{\Delta x} + \frac{(Sa)_{i-1/2}}{\Delta x} \right) \right) \Delta U_i - \frac{\Delta t}{V_i} \frac{(Sa)_{i+1/2}}{\Delta x} \Delta U_{i+1} = \frac{\Delta t}{V_i} \{ (Sq)_{i+1/2}^n - (Sq)_{i-1/2}^n \}$$

On obtient de nouveau un système tridiagonal, résolu avec la méthode de Thomas. On peut vérifier que si les sections de passage sont constantes, $S_{i\pm 1/2} = S$ et que le volume est égal à $V_i = S\Delta x$, alors le précédent schéma implicite Cartésien est retrouvé.

Annexe I. Utilisation de l'équation d'état de Jones-Wilkins-Lee (Lee, Hornig and Kury, 1968)

L'équation d'état JWL, qui est empirique, est souvent utilisée pour traiter les produits de détonations gazeux. Elle s'écrit :

$$p = (\gamma - 1)\rho(e - e_\infty) + p_\infty$$

Avec,

$$p_\infty = A \exp\left(-R_1 \frac{\rho_0}{\rho}\right) + B \exp\left(R_2 \frac{\rho_0}{\rho}\right) + K \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^\gamma$$

et

$$e_\infty = \frac{A}{R_1 \rho_0} \exp\left(-R_1 \frac{\rho_0}{\rho}\right) + \frac{B}{R_2 \rho_0} \exp\left(R_2 \frac{\rho_0}{\rho}\right) + \frac{K}{(\gamma - 1)\rho_0} \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1} + C$$

Où A, B, R₁, R₂, K, γ et C sont des constantes.

Les constantes K et C sont calculées à partir des relations suivantes :

$$K = (P_{CJ} - P_1(\rho_{CJ}) - \rho_{CJ}(\gamma - 1)C_v T_{CJ}) \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^\gamma$$

et

$$C = -e_1(\rho_{CJ}) - \frac{P_{CJ} - P_1(\rho_{CJ})}{(\gamma - 1)\rho_{CJ}} + e_{CJ}$$

Avec,

$$P_1(\rho) = A \exp\left(-R_1 \frac{\rho_0}{\rho}\right) + B \exp\left(R_2 \frac{\rho_0}{\rho}\right)$$

$$e_1(\rho) = \frac{A}{R_1 \rho_0} \exp\left(-R_1 \frac{\rho_0}{\rho}\right) + \frac{B}{R_2 \rho_0} \exp\left(R_2 \frac{\rho_0}{\rho}\right)$$

$$\frac{1}{\rho_{CJ}} = \frac{1}{\rho_0} - P_{CJ} \left(\frac{1}{\rho_0 D_{CJ}}\right)^2$$

$$e_{CJ} = \frac{1}{2} P_{CJ} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_{CJ}}\right) + e_0$$

Les constantes γ, A, B, R₁ et R₂ sont délivrées par le code CHEETAH.

	TNT	HMX
Γ	1,35	1,408
A (en Pa)	353,91.10 ⁹	1218.10 ⁹
B (en Pa)	3,45.10 ⁹	12,31.10 ⁹
R ₁	4,15	4,77
R ₂	0,9	1,10

Les paramètres CJ peuvent être obtenus à l'aide d'un code thermochimique comme CHEETAH 2.0. Pour le TNT et le HMX, on donne leurs valeurs : P_{CJ}

	TNT	HMX
P _{CJ} (en Pa)	19,56.10 ⁹	38,8.10 ⁹
D _{CJ} (en m/s)	6885,8	9300

Annexe J. Relations thermodynamiques avec la loi d'état JWL

Relation de saut d'Hugoniot

On utilise cette relation pour calculer la pression de la phase obéissant à la loi d'état JWL (produits de détonation), lors de la résolution du problème de Riemann du sous-système hydrodynamique.

A travers une onde de choc, on rappelle que chaque phase vérifie la relation suivante :

$$e_k - e_k^0 + \frac{p_k + p_k^0}{2} (v - v_k^0) = 0.$$

Où les termes ayant un exposant 0 représentent l'état du fluide au repos, et les autres l'état choqué.

Dans le cas où l'équation d'état utilisé est stiffened-gas

$$p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k (e_k - e_{0,k}) + \gamma_k p_{\infty,k},$$

$e_{0,k}$ étant l'énergie de formation de la phase k, la relation d'Hugoniot peut s'écrire :

$$p_k = \frac{(\gamma_k + 1)p_k - (\gamma_k - 1)p_k^0}{(\gamma_k + 1)p_k^0 - (\gamma_k - 1)p_k} p_k^0.$$

Dans le cas où on l'on utilise la loi d'état JWL

$$p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k (e_k - e_{\infty,k}) + p_{\infty,k},$$

la relation d'Hugoniot s'écrit

$$p_k = \frac{((\gamma_k + 1)\rho_k - (\gamma_k - 1)\rho_k^0)p_k^0 + 2(\rho^0 p_{\infty,k} - \rho p_{\infty,k} - (\gamma_k - 1)\rho p^0 (e_{\infty} - e_{\infty}^0))}{(\gamma_k + 1)\rho_k^0 - (\gamma_k - 1)\rho_k}$$

Relaxation des pressions

On rappelle que lors de chaque étape de relaxation des pressions, on doit résoudre le système suivant (voir Chapitre 2) :

$$\begin{cases} e_k(p, v_k) - e_k^0(p^0, v_k^0) + \hat{p}_I (v_k - v_k^0) = 0, k = 1, 2 \\ \sum_k (\alpha \rho)_k^0 v_k = 1 \end{cases}$$

Des estimations possibles sont $\hat{p}_I = p^0$ ou encore $\hat{p}_I = p_I^0$.

Si on considère que la phase 2 est l'air, qui est traité par la loi d'état stiffened gas, son équation d'énergie peut s'écrire

$$v_2(p) = v_2^0 \frac{p_2^0 + \gamma_2 p_{\infty,2} + (\gamma_k - 1)\hat{p}_I}{p + \gamma_2 p_{\infty,2} + (\gamma_k - 1)\hat{p}_I}.$$

Les produits de détonation (phase 1), obéissent à la loi d'état JWL. Leur équation d'énergie peut donc s'écrire

$$v_1 = \frac{v_2^0 \left(p_2^0 + p_{\infty,2}(v_1) + (\gamma_k - 1)\hat{p}_I \right) + e_{\infty}^0 - e_{\infty}}{p + \gamma_2 p_{\infty,2} + (\gamma_k - 1)\hat{p}_I}$$

Ainsi, on doit finalement résoudre une équation à une inconnue qui est p :

$$\sum_k (\alpha \rho)_k^0 v_k = 1$$

Cette équation peut se résoudre avec un algorithme itératif de type Newton-Raphson.

Pression de mélange

Après chaque étape de relaxation des pressions, lors de la réinitialisation des énergies, on calcule la pression de mélange. Pour l'exprimer, on rappelle que l'énergie de mélange peut s'écrire :

$$\rho e = \alpha_1 \rho_1 e_1 + \alpha_2 \rho_2 e_2$$

En considérant que la phase 1 représente les produits de détonation (loi d'état JWL), et la phase 2 l'air (loi d'état stiffened gas), on a

$$p_1 = (\gamma_1 - 1) \rho_1 (e_1 - e_{\infty,1}) + p_{\infty,1}$$

Et

$$p_2 = (\gamma_2 - 1) \rho_2 (e_2 - e_{2,0}) + \gamma_2 p_{\infty,2}$$

L'énergie de mélange devient donc

$$\rho e = \frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} (p_1 - p_{\infty,1}) + \alpha_1 \rho_1 e_{\infty,1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1} (p_2 - \gamma_2 p_{\infty,2}) + \alpha_2 \rho_2 e_{0,2}$$

On est en équilibre de pression donc $p_1 = p_2 = p$. On obtient donc

$$p = \frac{\rho e + \left(\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} p_{\infty,1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1} \gamma_2 p_{\infty,2} \right) - q}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}$$

$$\text{Avec } q = \alpha_1 \rho_1 e_{\infty,1} + \alpha_2 \rho_2 e_{0,2}$$

Annexe K. Calcul des profils de détonations initiaux

On explique dans cette annexe la méthode permettant de calculer le profil de détonation dans la charge d'explosif. Cette méthode est décrite plus en détails dans Massoni et al. (2006).

On rappelle que les équations d'Euler sont :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot (F) = 0$$

Avec,

$$U = (\rho \quad \rho u \quad \rho E)^T \text{ et } F = (\rho u \quad \rho u^2 + p \quad (\rho E + p)u)^T$$

Ce système est strictement hyperbolique et admet les 3 vitesses d'ondes suivantes :

$$\lambda_L = u - c, \quad \lambda = u, \quad \lambda_R = u + c$$

Où c désigne la vitesse du son.

On résout ce système par un schéma de type Godunov dans un maillage 1D sphérique dont la taille de chaque cellule est variable en fonction du temps.

La construction d'un schéma de résolution par volumes finis du système d'Euler consiste à approximer l'intégration sur l'espace et le temps de ce système :

$$\int_{\Delta t} \int_{V_i(t)} \left(\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot (F) \right) dV dt = 0$$

Après calcul, le schéma s'écrit :

$$U_i^{n+1} = \frac{(VU)_i^n - \Delta t \left((F^* S)_{i+1/2} - (F^* S)_{i-1/2} \right)}{V_i^{n+1}}$$

L'exposant * désigne la solution du problème de Riemann que l'on détaille après.

V_i représente le volume de maille i , et $S_{i+1/2}$ la surface de contact entre la maille i et $i+1$. En appelant r_i la distance séparant le centre de la maille et l'origine du repère, on a

$$V_i = \frac{4\pi}{3} (r_{i+1/2}^n{}^3 - r_{i-1/2}^n{}^3) \text{ et } S_{i+1/2} = \frac{4\pi}{3} (r_{i+1/2}^{n+1}{}^2 + r_{i+1/2}^{n+1} r_{i+1/2}^n + r_{i+1/2}^n{}^2)$$

$$\text{Avec } F^* = \begin{pmatrix} \rho^* (u^* - \dot{r}) \\ \rho^* (u^* - \dot{r}) u^* + p^* - p_i \\ \rho^* (u^* - \dot{r}) E^* + p^* u^* \end{pmatrix}$$

Où $\dot{r} = \frac{dr}{dt}$ et p_i désigne la pression moyenne à l'intérieur de la maille i .

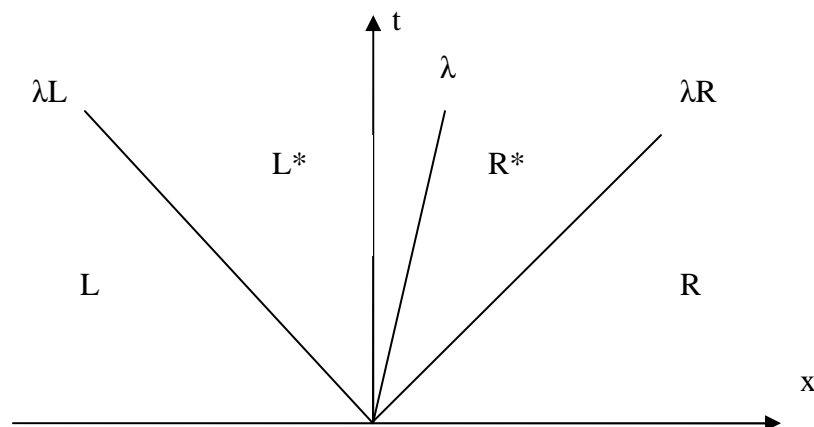


Figure 6.38 Représentation du problème de Riemann.

Sur chaque bord de maille, la solution du problème de Riemann est donnée par

$$U_k^* = \rho_k \frac{S_k - u_k}{S_k - S_m} \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ S_m \\ E_k + (S_m - u_k) \left(S_m + \frac{P_k}{\rho_k (S_k - u_k)} \right) \end{array} \right. , k=L,R$$

$$\text{Avec, } S_m = \frac{S_R (\rho u)_R - S_L (\rho u)_L + (\rho u^2 + p)_L - (\rho u^2 + p)_R}{S_R \rho_R - S_L \rho_L + (\rho u)_L - (\rho u)_R}$$

Ainsi, le flux au bord de chaque maille se calcule par

$$F^* = \left\{ \begin{array}{l} F_L, 0 \leq S_L \\ F(U_L^*), S_L \leq 0 \leq S_m \\ F(U_R^*), S_m \leq 0 \leq S_R \\ F_R, 0 \geq S_R \end{array} \right.$$

On impose comme condition aux limites, pour le bord de maille mobile le plus éloigné du centre du repère sphérique:

$$F^* = \left(\begin{array}{l} \rho_{CJ} (u_{CJ} - D_{CJ}) \\ \rho_{CJ} (u_{CJ} - D_{CJ}) + p_{CJ} - p_i \\ \rho_{CJ} (u_{CJ} - D_{CJ}) E_{CJ} + p_{CJ} u_{CJ} \end{array} \right)$$

Les variables CJ sont obtenues à partir d'un code thermochimique (Cheetah 2.0 par exemple).

Pour calculer les profils de détonation, on initialise le domaine de calcul avec un rayon total inférieur au rayon de la charge (généralement 20 fois plus petit). Dans chaque maille, la pression, la masse volumique et la vitesse sont initialement celles d'une explosion à volume constant. On résout le système d'Euler avec la méthode décrite ci-dessus et on arrête le calcul lorsque la taille du domaine a atteint le rayon de la charge.