



**HAL**  
open science

# Modélisation et simulation d'écoulements transitoires eau-vapeur en approche bifluide

Hippolyte Lochon

► **To cite this version:**

Hippolyte Lochon. Modélisation et simulation d'écoulements transitoires eau-vapeur en approche bifluide. Mathématiques [math]. Aix Marseille Université, 2016. Français. NNT: . tel-01379453

**HAL Id: tel-01379453**

**<https://theses.hal.science/tel-01379453v1>**

Submitted on 11 Oct 2016

**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.

**THÈSE**

présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ AIX-MARSEILLE

*Spécialité : Mathématiques Appliquées*

par

**Hippolyte LOCHON**

---

**Modélisation et simulation d'écoulements transitoires  
eau-vapeur en approche bifluide**

---

soutenue publiquement le 7 octobre 2016

devant le jury composé de :

Christophe Chalons	Professeur, Université Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines	Examinateur
Frédéric Daude	Ingénieur chercheur, EDF R&D	Encadrant
Thierry Gallouët	Professeur, Université Aix-Marseille	Examinateur
Sergey Gavriluk	Professeur, Université Aix-Marseille	Examinateur
Edwige Godlewski	Professeur, Université Pierre et Marie Curie - Paris 6	Rapporteur
Jean-Marc Hérard	Ingénieur chercheur, EDF R&D	Directeur de thèse
Eleuterio Toro	Professeur, Università di Trento	Rapporteur



# Remerciements

Ce travail a été réalisé au sein du département Analyses en Mécanique Avancée d'EDF R&D, dont je tiens à remercier la chef de département Anika Razakanaivo, et en collaboration avec l'Institut de Mathématiques de Marseille.

Je tiens également à remercier Nicolas Tardieu et Ionel Nistor, chefs des groupes "Acoustique, Vibrations sous écoulements et Dynamique des machines" et "Outils de simulation mécanique" respectivement, pour leur appui et conseils au cours de la thèse.

Je voudrais exprimer toute ma gratitude à Jean-Marc Hérard, mon directeur de thèse, ainsi qu'à Frédéric Daude et Pascal Galon, mes encadrants de thèse. Merci à Jean-Marc pour sa pédagogie, ses conseils avisés et son soutien sans faille. Merci à Frédéric pour les interminables discussions autour de la machine à café, que ce soit à propos de modélisation diphasique, de Top 14, de schémas numériques ou même du Tour de France. Enfin merci à Pascal pour son aide et ses illustrations, qu'elles soient expérimentales ou satiriques. J'espère que d'autres doctorants auront à leur tour la chance d'être encadré par ses trois remarquables chercheurs.

Je remercie Edwige Godlewski et Eleuterio Toro pour avoir accepté de rapporter mon travail. Je souhaite exprimer toute ma gratitude à Christophe Chalons qui a présidé mon jury de soutenance. Je remercie également Thierry Gallouët et Sergey Gavriluk pour avoir accepté de faire partie du jury.

Je souhaite remercier chaleureusement tous mes collègues d'EDF, à Clamart, Chatou, Saclay et même Madrid! Merci pour leur bonne humeur et leur aide, qui ont contribué à l'excellente ambiance au sein de laquelle j'ai pu travailler. Je remercie tout particulièrement les madrilènes Célia, Jérôme, Victor, Elodie, Julie, Fred, Amine, Bachir, Olivier, mais aussi Malika, Marco et David, ainsi que la team jogging Frédéric, Romain et Nicolas.

Enfin je voudrais remercier ma famille et mes proches pour leur présence depuis toutes ces années. Je pense notamment à tous les bons moments passés ensemble au cours de ces trois ans, les soirées et les journées en montagne... Merci également à ma soeur Iris pour les cours de cuisine. Merci à mes parents qui m'ont toujours soutenu et encouragé dans mes études.



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>9</b>
Contexte industriel . . . . .	9
Modélisation des écoulements diphasiques . . . . .	10
Simulation d'écoulements diphasiques transitoires . . . . .	14
Synthèse des travaux . . . . .	17
<b>1 Modélisation d'écoulements diphasiques : fermetures entropiques des modèles bifluïdes</b>	<b>29</b>
Introduction . . . . .	31
1 Approche bifluïde statistique des écoulements diphasiques . . . . .	32
1.1 Equations de bilan monophasiques et fonctions caractéristiques . . . . .	32
1.2 Opérateur de moyenne statistique . . . . .	33
1.3 Equations des grandeurs moyennes . . . . .	34
2 Fermetures entropiques des modèles bifluïdes . . . . .	35
2.1 Etablissement des lois d'évolution des entropies phasiques . . . . .	35
2.2 Fermetures entropiques . . . . .	37
2.3 Remarques . . . . .	38
2.3.1 Choix de $\tilde{p}$ (détermination du coefficient $\beta$ ) . . . . .	38
2.3.2 Choix de $\tilde{u}$ (détermination du coefficient $\alpha$ ) . . . . .	39
2.3.3 Choix de $\tilde{w}$ (détermination du coefficient $\gamma$ ) . . . . .	40
2.3.4 Choix de $\tilde{g}$ (détermination du coefficient $\delta$ ) . . . . .	40
2.4 Synthèse . . . . .	40
Conclusion . . . . .	41
Bibliographie . . . . .	42
<b>2 Schémas numériques pour les termes sources des modèles bifluïdes</b>	<b>45</b>
Introduction . . . . .	47
1 Modèles bifluïdes d'écoulements diphasiques . . . . .	48
1.1 Une classe de modèles bifluïdes à deux pressions . . . . .	48
1.2 Les termes sources . . . . .	49
1.3 Lois d'états de type Stiffened Gas Généralisés . . . . .	50
2 Relaxation en pression . . . . .	50
2.1 Etablissement de solutions analytiques . . . . .	51
2.1.1 Cas du modèle CGHS . . . . .	51
2.1.2 Cas du modèle BN . . . . .	52

2.2	Un schéma d'Euler implicite . . . . .	53
2.3	Vérification numérique . . . . .	54
3	Relaxation en vitesse . . . . .	57
3.1	Etablissement de solutions analytiques . . . . .	57
3.2	Un schéma de discrétisation . . . . .	58
4	Relaxation en température . . . . .	58
4.1	Etablissement de solutions analytiques . . . . .	58
4.2	Un schéma de discrétisation . . . . .	59
5	Relaxation en potentiel chimique . . . . .	59
5.1	Etablissement de solutions analytiques . . . . .	60
5.2	Un schéma d'Euler implicite . . . . .	61
5.3	Vérification numérique . . . . .	63
	Conclusion . . . . .	65
	Annexe A : Un schéma explicite pour la relaxation en potentiel chimique . . . . .	66
	Bibliographie . . . . .	67
<b>3</b>	<b>Comparaison de modèles bifluides pour les transitoires eau-vapeur</b>	<b>69</b>
1	Introduction . . . . .	71
2	Two-fluid models . . . . .	73
2.1	Governing equations . . . . .	73
2.2	Main properties of the models . . . . .	75
2.3	Equation Of State and relaxation time scales . . . . .	76
3	Numerical methods . . . . .	78
3.1	Evolution step . . . . .	78
3.2	Relaxation step . . . . .	80
3.2.1	Pressure relaxation . . . . .	82
3.2.2	Velocity relaxation . . . . .	84
3.2.3	Temperature relaxation . . . . .	84
3.2.4	Chemical potential relaxation . . . . .	85
4	Comparison of two-fluid models on steam-water transients . . . . .	87
4.1	Simpson's column-separation water hammer . . . . .	88
4.2	Discharge of a hot liquid from Canon experiment . . . . .	92
5	Conclusion . . . . .	96
	Appendix A. A class of two-fluid models . . . . .	97
	Appendix B. Verification of the pressure relaxation scheme . . . . .	98
	Appendix C. Verification of the chemical potential relaxation scheme . . . . .	100
	References . . . . .	102
<b>4</b>	<b>Solveur de Riemann de type HLLC avec approximation du contact diphasique pour le modèle bifluide de Baer-Nunziato</b>	<b>105</b>
1	Introduction . . . . .	107
2	The Baer-Nunziato model . . . . .	109
2.1	Governing equations . . . . .	109
2.2	Properties and Riemann Problem . . . . .	110
3	HLLC-type Riemann solver with approximated two-phase contact . . . . .	113
3.1	Approximated two-phase contact . . . . .	113

3.2	HLLC-type intermediate states . . . . .	114
3.3	Numerical flux . . . . .	116
4	Numerical results . . . . .	119
4.1	1D test-cases . . . . .	119
4.1.1	Test 1 : Isolated two-phase contact . . . . .	120
4.1.2	Test 2 : Two-phase contact with shock waves . . . . .	121
4.1.3	Test 3 : Stationary two-phase contact . . . . .	126
4.1.4	Test 4 : A general Riemann problem . . . . .	126
4.1.5	Test 5 : Isolated two-phase contact with vanishing phases . . . . .	126
4.1.6	Test 6 : A general Riemann problem with vanishing phases . . . . .	129
4.1.7	Test 7 : Complex Equations Of State . . . . .	129
4.2	2D test-cases . . . . .	135
4.2.1	Shock-bubble interaction . . . . .	135
4.2.2	Underwater explosion . . . . .	135
4.2.3	Cylindrical underwater explosion near a planar wall . . . . .	137
5	Conclusion . . . . .	142
	Appendix A. Connection through the two-phase contact . . . . .	143
	Appendix B. Pressure and velocity relaxations . . . . .	144
	References . . . . .	145
<b>5</b>	<b>Modélisation en approche bifluide du transfert de masse à l'aide de la formulation de Bilicki pour la brusque dépressurisation d'eau liquide</b>	<b>149</b>
1	Introduction . . . . .	151
2	Modelling of mass transfer in two-phase flows . . . . .	152
2.1	The Baer-Nunziato model . . . . .	152
2.2	The Homogeneous Relaxation Model . . . . .	153
2.3	Evaluation of relaxation time scale $\tau_\mu$ . . . . .	154
3	Numerical results . . . . .	156
3.1	Canon experiment . . . . .	157
3.1.1	Numerical results using the correlation from Downar-Zapolski <i>et al.</i> [8] . . . . .	158
3.1.2	Proposal of a Bilicki-like mass transfer modelling and corresponding numerical results . . . . .	160
3.2	Super-Canon experiment . . . . .	163
3.3	Edwards pipe experiment . . . . .	166
4	Conclusion . . . . .	170
	Appendix A. Analysis of different mass transfer modelling for the Baer-Nunziato model . . . . .	171
	References . . . . .	173
	<b>Conclusions et perspectives</b>	<b>175</b>
	<b>Annexe A Un modèle bifluide turbulent simple</b>	<b>177</b>
	<b>Annexe B Caractérisations entropiques de modèles d'écoulements diphasiques</b>	<b>189</b>





# Introduction

## Contexte industriel

Des écoulements diphasiques sont présents au sein de nombreuses installations industrielles dans des secteurs aussi variés que celui de l'énergie, l'industrie pétrolière, l'ingénierie automobile, navale et aérospatiale. Dans le domaine de l'énergie nucléaire, ces écoulements diphasiques sont essentiellement des écoulements eau-vapeur dans les Réacteurs à Eau Pressurisée (REP). Bien que majoritairement monophasiques en régime nominal, les écoulements présents au sein des circuits primaires et secondaires sont susceptibles de devenir diphasiques en régime transitoire. Ces situations transitoires, monophasiques ou diphasiques, sont caractérisées par de nombreuses perturbations au sein de l'écoulement et notamment la propagation d'ondes de pression. La prise en compte des effets de compressibilité de la vapeur d'eau comme de l'eau liquide, est alors primordiale. Le phénomène de changement de phase interagit très fortement avec la propagation des ondes de pression et constitue un second phénomène physique majeur au sein des écoulements transitoires eau-vapeur. En présence de fortes ondes de pression, les interactions entre le fluide et les structures environnantes (IFS) peuvent également être importantes et éventuellement inclure des endommagements des structures.

Les coups de bélier sont un exemple frappant de situations d'écoulements transitoires diphasiques et ne concernent pas seulement les canalisations d'eau, mais aussi les hydrocarbures au sein des oléoducs et les fluides cryogéniques utilisés dans les technologies aérospatiales. Deux catégories de coups de bélier sont classiquement distinguées en fonction de l'origine du phénomène. Dans la première catégorie, les coups de bélier sont engendrés par un brusque changement de vitesse d'écoulement comme l'ouverture ou la fermeture d'une vanne, l'arrêt d'une pompe... La colonne d'eau soumise à ce changement vient alors impacter un obstacle ou une autre colonne d'eau, on parle de coups de bélier par jonction de colonne d'eau. Bien qu'initialement monophasiques, les coups de bélier par jonction de colonne d'eau peuvent être également diphasiques car un phénomène de cavitation est susceptible de se produire au cours de la propagation des ondes de pression. Dans ce cas, la formation de vapeur et sa recondensation peuvent augmenter la vitesse d'impact de la colonne d'eau et donc la violence du phénomène. La deuxième catégorie regroupe les coups de bélier par condensation, comme par exemple, le coup de bélier ayant eu lieu dans une canalisation de chauffage au cœur de New York en juillet 2007 [21]. Dans cette deuxième catégorie, la colonne d'eau est mise en vitesse par la condensation rapide d'une poche de vapeur au sein de l'écoulement. Les écoulements stratifiés avec de l'eau liquide et de la vapeur d'eau plus chaude sont susceptibles d'engendrer la formation d'une telle poche de vapeur car l'interface entre les deux phases se déstabilise progressivement sous l'effet du déséquilibre thermique et de l'éventuel glissement de phases.

Les transitoires diphasiques sont également étudiés dans le domaine de la sûreté nucléaire. Les réacteurs nucléaires sont conçus sur le principe de défense en profondeur [2] avec des niveaux multiples de protection. Chaque dispositif de sécurité est considéré comme vulnérable et doit donc être doublé par un autre dispositif indépendant. L'un des objectifs majeurs est la maîtrise du confinement de la radioactivité en toute circonstance. Trois barrières de confinement sont utilisées pour cela dans les Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) ; la première est la gaine du combustible, la seconde est le circuit primaire et la troisième est l'enceinte de confinement. Dès la conception, des accidents hypothétiques au niveau d'une de ces barrières sont envisagés afin de dimensionner les autres barrières et systèmes de secours. Parmi ces événements, l'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP) consiste en une brèche hypothétique au niveau du circuit primaire [4]. Une onde de dépressurisation, à l'origine d'un front de vaporisation, se propage alors le long du circuit, de la brèche jusqu'au cœur du réacteur. Un tel phénomène se produit extrêmement vite et dimensionne notamment les composants mécaniques du circuit primaire, l'enceinte de confinement ainsi que le système d'injection d'eau de sécurité. Les scénarios les plus extrêmes, au nombre de trois [5], envisagent même une libération importante d'énergie au-delà de la deuxième barrière de confinement afin de s'assurer du maintien de la troisième barrière de confinement. Ainsi la propagation des ondes de pression au sein d'écoulements diphasiques transitoires est très étudiée pour de nombreuses configurations dans le domaine de la sûreté nucléaire.

## Modélisation des écoulements diphasiques

La modélisation des écoulements diphasiques est un sujet de recherche actif depuis plus d'une quarantaine d'années comme en témoigne la diversité des modèles proposés dans la littérature et utilisés dans les codes de simulation. Les nombreux phénomènes physiques mis en jeu et leur complexité sont à l'origine de cette diversité. Avec l'augmentation des moyens informatiques disponibles, les simulations numériques directes (DNS en anglais) diphasiques ont fait leur apparition. Par analogie au domaine de la turbulence monophasique, l'acronyme DNS est utilisé dans la communauté diphasique pour désigner les simulations tentant de prendre en compte toutes les échelles spatiales d'interface entre les deux phases, même les plus petites. Ces simulations nécessitent donc l'utilisation de techniques, souvent Lagrangiennes, de suivi d'interfaces. A cause de leur coût numérique, ces techniques restent malgré tout minoritaires, notamment dans le domaine du nucléaire où les modélisations Eulériennes sont privilégiées afin d'étudier des systèmes de grande taille.

Deux approches Eulériennes sont classiquement distinguées pour la modélisation des écoulements diphasiques. La première et plus ancienne est l'approche homogène dans laquelle le mélange diphasique est modélisé comme un unique fluide. Les propriétés thermodynamiques de ce fluide, et notamment son équation d'état (EOS en anglais), sont alors obtenues grâce à des hypothèses d'équilibre entre les phases. Cette approche est souvent adoptée dans les codes dédiés à des composants particuliers des REP, comme par exemple le cœur des réacteurs avec les codes THYC (EDF) [78] et FLICA (CEA) [114]. Les hypothèses d'équilibre entre phases peuvent être mises en défaut dans certaines configurations d'écoulements. Ces insuffisances de l'approche homogène ont favorisé l'émergence d'une deuxième approche, dite biffuide. Les

deux phases sont alors modélisées comme deux fluides distincts et les hypothèses d'équilibre instantané local ne sont donc plus nécessaires. Dans une telle approche, les échanges entre phases doivent être modélisés grâce à de nombreuses lois de fermeture, en plus des deux équations d'état de chacune des phases. Cette approche est très utilisée dans le domaine international du nucléaire, comme en témoignent les codes RELAP5 et RELAP7 (développés par l'INL aux Etats-Unis), ATHLET (développé par le GRS en Allemagne) ainsi que CATHARE (CEA) [13] et NEPTUNE\_CFD (EDF-CEA-IRSN-AREVA) [55] en France.

La construction de modèles bifluides d'écoulements diphasiques est basée sur une moyenne des équations monophasiques locales de la mécanique des fluides [36, 68]. Un des premiers modèles bifluides pour les écoulements eau-vapeur a été proposé par Ransom & Hicks [95]. Une approche similaire a également été utilisée par Stewart & Wendroff [110], mais avec une hypothèse supplémentaire d'équilibre en pression entre les deux phases. Une des contributions majeures dans le domaine de la modélisation bifluide est le modèle proposé par Baer & Nunziato [11] pour les écoulements gaz-particules dans le cadre de l'étude des matériaux granulaires réactifs. Il a été largement repris dans la littérature pour la modélisation des écoulements gaz-particules [15, 73] mais aussi liquide-gaz [51]. De nombreuses fermetures alternatives, pour le couple pression-vitesse d'interface présent dans ce modèle, ont également été proposées [22, 48, 52, 70, 102]. Enfin, des extensions du modèle bifluide de Baer-Nunziato aux écoulements à trois phases [61], et même plus [91], ont été étudiées récemment.

## Hierarchisation de modèles et propriétés mathématiques

Malgré l'apparente diversité des modèles d'écoulements diphasiques, une hiérarchisation est possible et permet de mieux comparer entre eux les différents modèles. Dans les travaux de Labois [76], une telle hiérarchisation est construite à partir du modèle de Baer-Nunziato à l'aide des développements de Chapman-Enskog. Le choix du modèle de Baer-Nunziato comme modèle père est naturel puisqu'il s'agit d'un modèle ne supposant aucun équilibre entre les phases. Une approche similaire, dite par relaxation, est également utilisée par Flåtten & Lund [43, 88] dans le cadre homogène. La figure 1 reprend la représentation graphique utilisée par Lund [88] pour représenter une hiérarchie de modèles. Nous faisons ici le choix de ne pas représenter tous les modèles mais seulement les plus utilisés pour les écoulements eau-vapeur. Ainsi chaque cercle correspond à un ensemble de modèles, c'est à dire à des systèmes de lois d'évolutions pour les moments d'ordre un, avec des hypothèses d'équilibres phasiques sur les variables placées au centre du cercle. Un équilibre local instantané entre phases correspond à une loi de fermeture et réduit donc le nombre d'équations aux dérivés partielles (et de variables) du modèle. Ainsi, le modèle père “—” correspond à un système de 7 équations aux dérivés partielles en une seule dimension d'espace et le modèle fils “ $pvT\mu$ ” à un système de 3 équations. L'utilisation, malheureusement classique, du nombre d'équations pour désigner un modèle d'écoulements diphasique n'est pas pertinente. Il paraît beaucoup plus judicieux d'utiliser les hypothèses d'équilibre à cette fin et cela permet de souligner la physique sous-jacente.

La hiérarchie présentée en figure 1 rassemble des modèles bifluides et des modèles homogènes. Les modèles homogènes sont les modèles pour lesquels un équilibre de vitesse est supposé. Les modèles bifluides sont donc de deux types, les modèles “—” ne supposant aucun

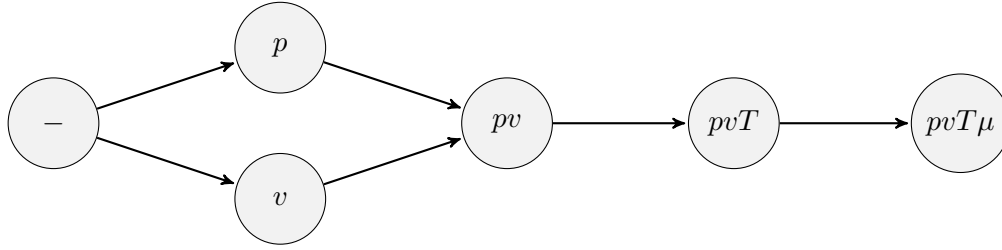


FIGURE 1 – Hiérarchie de modèles d’écoulements diphasiques : chaque cercle représente un ensemble de modèles partageant des hypothèses d’équilibre sur les variables placées en son centre (pression  $p$ , vitesse  $v$ , température  $T$  ou potentiel chimique  $\mu$ ).

équilibre entre phases comme celui de Baer-Nunziato [11] et les modèles “ $p$ ” avec équilibre de pression comme celui utilisé par Gale *et al.* [46]. Ce deuxième type de modèles bifluides est largement utilisée par les codes de simulation dans le domaine du nucléaire, comme RELAP5, ATHLET, CATHARE ou encore NEPTUNE\_CFD. Parmi les modèles homogènes, le modèle “ $pv$ ” proposé par Kapila *et al.* [72] dans le cadre des écoulements gaz-particules est construit à partir du modèle de Baer-Nunziato, par relaxation en vitesse puis en pression. Il a également été utilisé par Murrone & Guillard [90] pour des applications sans changement de phase. Le modèle proposé par Allaire *et al.* [6] est également de type “ $pv$ ” mais est dédié aux écoulements de deux fluides compressibles immiscibles. Une comparaison entre ce modèle et le modèle de Kapila [72] a été menée par Daude *et al.* [33]. Tout comme Kapila *et al.* [72], Saurel *et al.* [104] construisent des modèles par relaxation en vitesse puis en pression à partir du modèle de Baer-Nunziato, pour lequel les fermetures proposées dans [22] sont utilisées. Dans Saurel *et al.* [105], un modèle avec équilibre de vitesse “ $v$ ” est également proposé au cours de la construction. Une réécriture de ce modèle est utilisée par Pelanti & Shyue [94]. Un autre modèle de type “ $v$ ” est proposé par Barberon & Helluy [12] mais sa construction est basée sur une approche tout à fait différente. En effet, dans ce dernier cas, un problème d’optimisation autour de l’entropie du mélange est étudié [69]. Cette approche est reprise par Faccanoni [40] et appliquée à différents modèles homogènes. Le modèle homogène relaxé (HRM en anglais) proposé par Bilicki & Kestin [19] est un exemple de modèle de type “ $pvT$ ”. Il a également été utilisé par Faucher *et al.* [41]. Enfin, le modèle “ $pvT\mu$ ” correspond au modèle homogène équilibre (HEM en anglais), repris notamment par Clerc [23].

Les hypothèses physiques d’équilibre entre phases ont été évoquées jusqu’ici pour comparer les différents modèles, cependant il est également important de les étudier du point de vue mathématique. Les modèles de cette hiérarchie correspondent à un système d’équations aux dérivés partielles de type convection-source mais ils ne possèdent pas tous les mêmes propriétés mathématiques. Trois propriétés, constituant la clé de voûte de notre approche de modélisation, sont étudiées :

- l’hyperbolicité du système convectif,
- l’inégalité d’entropie du système global,
- l’unicité des relations de sauts à la traversée de chacune des ondes du système convectif.

Pour cette étude, une attention particulière est portée au modèle de Baer-Nunziato. Il est important de noter au préalable que la partie convective de plusieurs modèles, dont celui de Baer-Nunziato, ne peut s’écrire sous forme conservative et possède donc des produits non-

conservatifs. Tout d’abord, le système convectif du modèle de Baer-Nunziato est hyperbolique mais pas strictement hyperbolique. En effet, les valeurs propres du système sont réelles mais une condition algébrique est nécessaire afin que les vecteurs propres à droite engendrent tout l’espace. Parmi les modèles évoqués dans la hiérarchie de la figure 1, seuls les modèles bifluïdes avec équilibre de pression “ $p$ ” ne sont pas inconditionnellement hyperboliques et peuvent donc exhiber des valeurs propres complexes. Cette absence d’hyperbolicité a des conséquences majeures, du point de vue théorique comme numérique. En effet, le caractère bien posé à condition initiale du modèle n’est alors plus garanti [81, 111], ce qui se traduit par des explosions des solutions numériques associées comme illustrés par [59] ainsi que [56] (figure 8.16, page 158).

L’exigence d’une inégalité d’entropie globale dans le cas du modèle de Baer-Nunziato fournit plusieurs lois de fermeture. Elle impose une relation algébrique permettant d’exprimer la pression d’interface en fonction de la vitesse d’interface pour les produits non-conservatifs de la partie convective du modèle. Elle permet également de proposer des lois de fermeture pour les termes sources du modèle, sous la forme de phénomènes de relaxation des différents déséquilibres utilisés dans la hiérarchisation des modèles. L’utilisation de l’inégalité d’entropie est centrale dans de nombreux travaux de la littérature [71, 104], Gavrilyuk & Saurel [51] imposant même des inégalités d’entropie par phase pour les modèles bifluïdes. L’extension du modèle de Baer-Nunziato, aux écoulements avec plus de trois phases, proposée par Müller *et al.* [91] est également basée sur l’entropie. La plupart des autres modèles de la hiérarchie disposent également d’une inégalité d’entropie globale, correspondant à une forme relaxée de celle du modèle de Baer-Nunziato.

Enfin les relations de sauts sont étudiées, à la traversée de chacune des ondes du système convectif. L’unicité de ces dernières est une question délicate pour les systèmes non-conservatifs. Dans le cas du modèle de Baer-Nunziato, les produits non-conservatifs sont associés au gradient du taux de présence. L’approche proposée par Coquel *et al.* [24] est basée sur l’exigence du caractère linéairement dégénéré de l’onde associée au taux de présence et permet ainsi d’obtenir des lois de fermeture pour la vitesse d’interface. Ainsi la connaissance des invariants de Riemann de cette onde suffit à fermer les produits non-conservatifs. Il est important de souligner que ces produits non-conservatifs sont donc définis sans ambiguïté contrairement au cas des produits non-conservatifs associés à des champs vraiment non linéaires [29]. Les autres ondes du modèle de Baer-Nunziato ont une structure monophasique et des relations de sauts uniques sont ainsi obtenues à la traversée de chacune des ondes du système convectif. Cette unicité n’est pas obtenue pour tous les modèles de la hiérarchie présentée en figure 1. En effet, le modèle “ $pv$ ” de Kapila [72], ainsi que le modèle “ $v$ ” utilisé par Pelanti & Shyue [94], présente des produits non-conservatifs portant notamment sur le gradient de la vitesse. Ces produits non-conservatifs sont donc actifs dans les ondes vraiment non linéaires et l’unicité des relations de sauts ne peut être garantie à la traversée de ces ondes. Les conséquences numériques de l’absence de relations de sauts uniques sont majeures puisque les solutions numériques convergées, en présence d’ondes de choc, diffèrent alors en fonction du schéma utilisé. Une illustration frappante de ce résultat est proposé par Guillemaud [56] (figure 8.3, pages 135-136).

Pour de nombreux modèles présentés précédemment, les termes sources sont exprimés sous la forme de phénomènes de relaxation comme cela est suggéré par l’inégalité d’entropie du système global. Bien souvent, une échelle de temps de relaxation est associée à chacun de

ces phénomènes. La modélisation de ces échelles de temps est alors cruciale et conditionne les déséquilibres entre phases, autant que le choix du modèle lui-même. Enfin, avant toute simulation numérique, il convient de se rappeler que l’approximation numérique raisonnable des solutions des modèles diphasiques les plus complets s’avère généralement plus délicate et plus coûteuse.

## Simulation d’écoulements diphasiques transitoires

Une même approche de discrétisation peut être appliquée pour la simulation numérique des différents modèles présentés et hiérarchisés (voir figure 1) dans la partie précédente. Tous ces modèles sont des systèmes d’équations aux dérivés partielles de type convection-source et l’utilisation d’une méthode à pas fractionnaires, divisée en deux étapes consacrées à chacun de ces phénomènes physiques, est donc naturelle. La consistance de cette méthode avec l’inégalité d’entropie du système global est primordiale et sera présentée dans le cas du modèle de Baer-Nunziato.

La première étape de la méthode à pas fractionnaires est dédiée à la résolution du système convectif. Pour les systèmes hyperboliques, l’utilisation de solveurs de Riemann dans le cadre de la méthode des Volumes Finis constitue la pierre angulaire d’une telle résolution. Dans le cas du modèle de Baer-Nunziato, de nombreux solveurs de type HLL [7, 102] et HLLC [45, 82] ont été proposés. Des solveurs de Riemann dits complets, car ils prennent en compte toutes les ondes du modèle, ont aussi été étudiés, comme les solveurs de Godunov proposés par Schwendeman *et al.* [106] et par Deledicque & Papalexandris [34] plus récemment. La stratégie utilisée par Schwendeman *et al.* [106] pour le traitement des termes non-conservatifs du modèle a été reprise dans un solveur complet de type HLLC par Tokareva & Toro [112]. Des extensions des schémas VFRoe [48] et de Osher [37] au cadre non-conservatif ont également été proposées. Enfin, des approches par relaxation ont été appliquées au système barotrope [7, 25] puis étendues au système complet par Coquel et Saleh [26, 101]. Un des principaux avantages d’une telle approche est qu’elle permet de gérer toute type de loi d’état contrairement à beaucoup d’autres solveurs. En effet, l’utilisation de lois d’états complexes dans le cadre d’un solveur de Riemann est délicate dans le cadre diphasique comme monophasique. Elle est néanmoins primordiale dans le cas des écoulements transitoires eau-vapeur.

Les termes sources des modèles diphasiques sont traités dans la deuxième étape de la méthode à pas fractionnaires. Hérard & Hurisse [65] proposent de subdiviser celle-ci en 4 sous-étapes dédiées à chacun des phénomènes de relaxation impliqués dans le modèle de Baer-Nunziato. Cette approche permet ainsi d’assurer la consistance avec l’inégalité d’entropie du système global et peut être utilisée pour de nombreux modèles diphasiques présentés en figure 1. Dans le cas du modèle de Baer-Nunziato, quatre systèmes d’équations différentielles ordinaires sont donc résolus au cours de cette étape. Pour chacun d’eux, un schéma implicite doit être proposé. En effet, les termes de relaxation sont susceptibles d’être raides car les temps caractéristiques associés peuvent être largement inférieurs au pas de temps utilisé. Ce dernier est issu de l’étape de convection, et donc évalué avec une contrainte CFL. Ces systèmes sont fortement non-linéaires, même pour des choix de lois d’états relativement simples. Ainsi la prise en compte de lois d’états plus complexes est également délicate dans cette étape,

notamment pour assurer l’admissibilité thermodynamique des états obtenus à chaque sous-étape.

## Vérification & Validation

Dans cette thèse, une très grande attention est portée au processus de vérification & validation. Ce dernier est important pour toute simulation numérique et devient primordial dans le domaine de la sûreté nucléaire, particulièrement lorsque de nouvelles modélisations et de nouvelles méthodes numériques sont proposées. Dans la terminologie utilisée par Roache [98], la vérification correspond à bien résoudre les équations (“solving the equations right”) et la validation à résoudre les bonnes équations (“solving the right equations”). Ainsi la vérification est une étape essentiellement mathématique, dans laquelle la résolution numérique des équations est examinée, alors que la validation est une étape physique, dans laquelle le choix des équations, et des phénomènes qu’elles représentent, est questionné. La problématique de la vérification & validation n’est pas propre à la mécanique des fluides numérique mais elle est connue de la communauté depuis plusieurs dizaines d’années [100]. Elle touche de nombreux secteurs industriels, de l’ingénierie aérospatiale [92] à la sûreté nucléaire [93]. Dans le domaine de la thermohydraulique des réacteurs, cette problématique est à l’origine d’un changement radical de paradigme pour la nouvelle version RELAP7 du code développé par l’Idaho National Laboratory [16].

Pour le modèle de Baer-Nunziato, la vérification consiste à s’assurer de la bonne résolution des systèmes d’équations au cours de chaque étape de la méthode à pas fractionnaires. Dans chaque cas, des études de convergence sur des cas disposant de solutions analytiques sont réalisées. Elles permettent de vérifier que l’approximation numérique obtenue converge vers la solution analytique et que le bon ordre de convergence théorique est retrouvé. Comme évoqué précédemment, la vérification est un processus mathématique, les cas-tests étudiés sont donc choisis car ils disposent de solutions analytiques et ne sont pas nécessairement réalistes. Plus précisément, la méthode des solutions manufacturées [99] est généralement utilisée pour les systèmes complexes, ainsi le cas-test est construit pour obtenir une solution particulière choisie au préalable. L’étape de convection de la méthode à pas fractionnaires repose sur des solveurs de Riemann et les cas-tests utilisés pour la vérification sont donc des problèmes de Riemann monodimensionnels. Des études de convergence en maillage sont réalisées pour ces derniers. Dans l’étape dédiée au traitement des termes sources, des systèmes d’équations différentielles ordinaires sont résolus. Les cas-tests de vérification consistent alors en un choix particulier de conditions initiales et de paramètres thermodynamiques afin d’obtenir une solution analytique. La convergence, en fonction du pas de temps, est ensuite étudiée.

Pour la validation, le choix des cas-tests dépend non seulement du contexte et des applications visées, mais aussi des résultats expérimentaux disponibles. Dans notre cas, il s’agit des écoulements transitoires eau-vapeur pour lesquels le nombre d’expériences réalisées, et disposant de mesures suffisamment riches et fiables, qui plus est dans le domaine de fonctionnement (pression, température) adéquat, est restreint. A notre connaissance, les premières validations d’un modèle bifluide de type Baer-Nunziato pour ces écoulements ont été réalisées dans le cadre des travaux de thèse de Liu [28, 84]. Certains de ces cas-tests dont l’expérience Canon et celle de Simpson sont largement repris dans les présents travaux. La première a



été menée par Riegel [97] et s'intéresse à la brusque dépressurisation d'une tuyauterie d'eau liquide, représentative d'une brèche lors d'un APRP. La seconde est une expérience de coups de bélier, monophasiques comme diphasiques, réalisée par Simpson [107].

# Synthèse des travaux

## Chapitre 1. Modélisation d'écoulements diphasiques : fermetures entropiques des modèles bifluïdes

Ce chapitre est consacré à la construction de modèles bifluïdes pour les écoulements diphasiques. Dans le cadre de l'approche bifluïde, cette construction s'effectue en deux étapes successives [36, 68] et ne repose sur aucune hypothèse d'équilibre entre les phases, contrairement à l'approche homogène. Dans la première étape, un opérateur de moyenne est appliqué aux équations d'évolution de chacune des phases. Différents types de moyennes peuvent être utilisés : moyenne temporelle, moyenne spatiale ou encore moyenne statistique. Un système d'équations aux dérivées partielles est ainsi obtenu mais il est dit "ouvert" car il comporte un nombre de variables supérieur au nombre d'équations. La deuxième étape de la construction est donc consacrée à l'obtention d'un système fermé et bien posé. Pour cela, des lois de fermeture doivent être prescrites pour différents termes du système. Les équations d'états de chaque phase sont utilisées pour les termes d'énergie mais les termes d'échanges entre phases nécessitent également de nombreuses lois de fermeture. Différents critères tels que l'hyperbolicité, l'entropie ou en encore l'objectivité du modèle, peuvent alors être utilisés afin de construire de telles lois. Ce chapitre est donc divisé en deux parties, suivant les deux étapes de la construction.

Dans la première partie, nous appliquons un opérateur de moyenne statistique aux équations d'évolution de chacune des phases. Nous faisons ici le choix de négliger les effets visqueux et appliquons donc cet opérateur aux équations d'Euler. En outre, cet opérateur est également appliqué à l'équation d'évolution de la fonction caractéristique  $\chi_k$  d'une phase  $k$ , dite équation topologique [36]. Une équation portant sur l'évolution du taux de présence  $\alpha_k$  de cette phase est ainsi obtenue. Nous insistons ici sur le fait que ce taux de présence est un taux de présence statistique, étant donné notre choix d'opérateur de moyenne. Le système d'équations moyennées obtenu fait alors apparaître la moyenne eulérienne phasique classique  $\overline{f_k}$  d'une grandeur  $f_k$ , comme les densités ou les pressions, mais également la moyenne au sens de Favre  $\overline{f_k}$ , introduite dans le cadre monophasique turbulent [42], pour d'autres grandeurs comme les vitesses. En ce qui concerne les énergies internes, leur contribution principale est contenue dans le terme  $\langle \chi_k \overline{(\rho_k \varepsilon_k)} \rangle$  qui nécessite une loi de fermeture. Pour cela, nous faisons l'hypothèse que la fonction  $\overline{\rho_k \varepsilon_k}$  ne dépend que des grandeurs moyennes  $\overline{\rho_k}$  et  $\overline{p_k}$ . C'est une hypothèse forte sur la thermodynamique moyennée qui n'est pas vérifiée pour les lois d'états de type Van der Waals par exemple, mais reste valable pour des lois d'états plus simples comme les Stiffened Gas. De nombreux termes de fluctuations sont aussi présents et seront négligés dans la suite. Parmi eux, un tenseur du second ordre contenant les fluctuations turbulentes  $\langle \chi_k \rho_k u_k''^2 \rangle$ , analogue diphasique du tenseur de Reynolds, apparaît à trois reprises. La prise en compte d'une telle contribution dans le cadre des écoulements compressibles soulève de nombreuses difficultés théoriques. Ce tenseur sera donc négligé dans ce chapitre mais un modèle bifluïde turbulent simple conservant ce tenseur est proposé en annexe A. Contrairement à une approche très répandue dans le cadre monophasique turbulent, les travaux présentés en annexe A prennent en compte ce tenseur sous la forme d'une loi de fermeture, sans ajout d'équation d'évolution

supplémentaire. Grâce à ces nombreuses hypothèses, le système suivant est obtenu :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & + u_I \partial_x (\alpha_k) & = \Phi_k \\ \partial_t (\alpha_k \overline{\rho_k}) & + \partial_x (\alpha_k \overline{\rho_k} \widetilde{u_k}) & = \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \overline{\rho_k} \widetilde{u_k}) & + \partial_x (\alpha_k \overline{\rho_k} \widetilde{u_k}^2 + \alpha_k \overline{p_k}) & = \Lambda_k \\ \partial_t (\alpha_k \overline{\rho_k} \overline{e_k}) & + \partial_x (\widetilde{u_k} (\alpha_k \overline{\rho_k} \overline{e_k} + \alpha_k \overline{p_k})) & = \Psi_k \end{cases}$$

où  $\overline{e_k}$  est la moyenne de l'énergie totale spécifique de la phase  $k$ . Les notations liées aux différentes moyennes ne présentent plus aucune ambiguïté et seront omises dans la suite.

Dans la seconde partie, il s'agit de fermer le système obtenu suite à l'étape de moyenne statistique des équations. Des lois de fermeture doivent donc être proposées pour les termes d'échanges entre phases figurant au second membre ainsi que pour la vitesse d'interface  $u_I$ . L'outil mathématique utilisé tout au long de cette partie afin de proposer de telles lois de fermeture des termes d'échanges est la caractérisation entropique du système. Il s'agit donc d'obtenir la loi d'évolution de l'entropie globale du système afin de se restreindre aux lois de fermeture compatibles avec l'inégalité d'entropie. La classe de modèles bifluides ainsi obtenue comporte le modèle de Baer-Nunziato [11] ainsi que le modèle proposé dans [66]. Contrairement à l'approche utilisée dans [66], également basée sur la caractérisation entropique du système, nous insistons ici sur le traitement conjoint des termes sources et des termes non-conservatifs qui suggère de manière naturelle certaines fermetures. Afin de souligner l'enrichissement apporté par la classe de modèles bifluides construite par cette approche, un modèle particulier avec une nouvelle formulation du transfert de masse est mis en avant. Le système d'équations régissant ce modèle est le suivant :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & + u_I \partial_x (\alpha_k) & = \Phi_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) & = \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) - p_I \partial_x (\alpha_k) & = D_k + \frac{u_1 + u_2}{2} \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & + \partial_x (u_k (\alpha_k \rho_k e_k + \alpha_k p_k)) - u_I p_I \partial_x (\alpha_k) & = Q_k + u_I D_k + \left(\frac{u_1 u_2}{2} + \tilde{g}\right) \Gamma_k - p_I \Phi_k \end{cases}$$

Les termes sources du modèle sont modélisés par des termes de relaxation de différents déséquilibres entre phases :

$$\begin{cases} \Phi_k & = K_p (p_k - p_j) \\ \Gamma_k & = K_g (g_j - g_k) \\ D_k & = K_u (u_j - u_k) \\ Q_k & = K_T (T_j - T_k) \end{cases}, \quad j = 3 - k$$

Notre approche basée sur l'entropie est également appliquée à d'autres modèles d'écoulements diphasiques en annexe B. En ce qui concerne la vitesse d'interface  $u_I$ , la caractérisation entropique n'impose aucune contrainte particulière sur cette dernière. Sa loi de fermeture doit donc s'appuyer sur un autre critère et nous retenons ici l'approche proposée par Coquel *et al.* [24, 48] basée sur le caractère linéairement dégénéré du champ associé à cette vitesse d'interface. Enfin, nous insistons sur le fait que le modèle bifluide mis en avant ici n'est qu'un exemple au sein de la classe construite par notre approche. Le modèle proposé dans [66] appartient également à cette classe de modèles bifluides et sera retenu dans les autres chapitres de ce mémoire.

## Chapitre 2. Schémas numériques pour les termes sources des modèles bifluides

Ce chapitre est dédié aux schémas numériques pour le traitement des termes sources des modèles bifluides. Afin d'effectuer des simulations numériques d'écoulements diphasiques à l'aide du modèle de Baer-Nunziato [11], la méthode à pas fractionnaires proposée dans [65] est utilisée. A chaque pas de temps, le calcul est divisé en deux étapes : une pour les termes convectifs et une pour les termes sources à laquelle ce chapitre est consacré. Dans la première étape, le système homogène, correspondant à la partie convective du modèle de Baer-Nunziato, est traité. Dans la seconde étape, les termes convectifs, et donc les dérivés spatiales, sont négligés et un système d'équations différentielles ordinaires contenant les termes sources est résolu. Il est important de noter que le pas de temps utilisé dans la méthode à pas fractionnaires est le pas de temps fourni par l'étape de convection (et donc avec une contrainte CFL).

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la résolution du système suivant :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & = \Phi_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & = \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & = D_k + \frac{u_1 + u_2}{2} \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & = Q_k + \frac{u_1 + u_2}{2} D_k + \frac{u_1 u_2}{2} \Gamma_k - p_I \Phi_k \end{cases}$$

Les termes sources modélisent les échanges entre phases et sont exprimés grâce à des termes de relaxation en pression, vitesse, température et potentiel chimique :

$$\begin{aligned} \Phi_k &= \frac{1}{\tau_p p_{ref}} \alpha_k \alpha_j (p_k - p_j) \\ \Gamma_k &= \frac{1}{\tau_\mu \mu_{ref}} \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} (\mu_j - \mu_k) \\ D_k &= \frac{1}{\tau_u} \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} (u_j - u_k) \\ Q_k &= \frac{1}{\tau_T} \frac{m_k C_{V_k} m_j C_{V_j}}{m_k C_{V_k} + m_j C_{V_j}} (T_j - T_k) \end{aligned} \quad , \quad j = 3 - k$$

Une échelle de temps de relaxation  $\tau_\varphi$  ( $\varphi = p, u, T, \mu$ ) est associée à chacun de ces phénomènes. Ce système différentiel possède donc un caractère fortement non-linéaire même pour des lois d'états simples comme les Gaz Parfaits. Contrairement à [65], des lois d'états de type Stiffened Gas pour les deux phases sont considérées dans ce chapitre. Ce système est lui-même résolu grâce à une méthode à pas fractionnaires comprenant quatre sous-étapes. Chaque sous-étape est consacrée à un des phénomènes de relaxation, dans l'ordre suivant : pression, vitesse puis température et enfin potentiel chimique. Ainsi la méthode demeure consistante avec l'inégalité d'entropie du système global.

Chaque phénomène de relaxation est traité dans une section différente de ce chapitre. Dans chacune d'elles, nous détaillons tout d'abord des solutions analytiques du système d'équations différentielles correspondant. La relaxation en vitesse est indépendante de la loi d'état et il

est possible de résoudre analytiquement le système correspondant dans le cas général. Il en est de même pour la relaxation en température pour des lois d'états de type Stiffened Gas. En revanche, il est nécessaire de considérer des lois d'états particulières pour pouvoir exhiber des solutions analytiques dans le cas des relaxations en pression et potentiel chimique. Un schéma numérique est ensuite proposé pour chacune des quatre sous-étapes de la méthode. Il est impératif d'utiliser des schémas implicites puisque les termes de relaxation sont susceptibles d'être raides lorsque le pas de temps donné par la condition CFL est grand devant le temps de relaxation correspondant. Les schémas implicites utilisés ici sont des extensions aux lois d'états de type Stiffened Gas des schémas proposés dans [65] et dans [28] pour la relaxation en potentiel chimique. Pour les cas plus compliqués des relaxations en pression et potentiel chimique, le schéma nécessite la résolution d'une équation non-linéaire et une méthode itérative est utilisée pour cela. Il convient toutefois de s'assurer de l'existence et de l'unicité de la solution d'une telle équation, ainsi que du caractère admissible de cette solution du point de vue thermodynamique. Des études de convergence sont ensuite effectuées afin de procéder à la vérification des deux schémas de relaxation en pression et potentiel chimique grâce aux solutions analytiques particulières présentées au préalable.

Les travaux présentés dans [65], sur lesquels sont basés les schémas proposés ici, sont principalement dédiés au modèle de Baer-Nunziato [11] et donc au choix de vitesse et pression d'interface correspondant. Dans ce chapitre, nous généralisons également les schémas numériques à la loi de fermeture proposée par Coquel *et al.* [24] pour ces grandeurs d'interface. En pratique, cet autre choix de fermeture n'affecte que la sous-étape de relaxation en pression dans laquelle intervient la pression d'interface.

### Chapitre 3. Comparaison de modèles bifluides pour les transitoires eau-vapeur

Ce chapitre est consacré à la comparaison de modèles bifluides pour des écoulements diphasiques transitoires eau-vapeur. Les modèles bifluides considérés ne supposent aucun équilibre entre les deux phases et sont régis par le système d'équations suivant :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \partial_t (\alpha_k) & + & u_I \partial_x (\alpha_k) & = & \Phi_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + & \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) & = & \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & + & \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) - p_I \partial_x (\alpha_k) & = & D_k + \frac{u_1 + u_2}{2} \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & + & \partial_x (u_k (\alpha_k \rho_k e_k + \alpha_k p_k)) - u_I p_I \partial_x (\alpha_k) & = & Q_k + \frac{u_1 + u_2}{2} D_k + \frac{u_1 u_2}{2} \Gamma_k - p_I \Phi_k \end{array} \right.$$

De nombreuses lois de fermetures pour la vitesse et la pression d'interface, le couple  $(u_I, p_I)$ , sont disponibles dans la littérature. L'approche proposée par Coquel *et al.* [24] est basée sur deux critères fondamentaux portant sur les propriétés mathématiques du modèle. Ainsi, seules les lois de fermeture imposant que le modèle correspondant soit :

- doté d'une inégalité d'entropie physique,
- muni de relations de sauts uniques à la traversée de chacune des ondes.

sont retenues. Ces lois prennent alors la forme suivante :

$$\begin{aligned} u_I &= a u_1 + (1 - a) u_2, & a &= \frac{\chi m_1}{\chi m_1 + (1 - \chi) m_2} \\ p_I &= b p_1 + (1 - b) p_2, & b &= \frac{(1 - a) T_2}{a T_1 + (1 - a) T_2} \end{aligned}$$

avec  $\chi \in [0, 1]$ . Les cas “décentrés”  $\chi = 0$  et  $\chi = 1$  correspondent aux lois de fermeture proposées par Baer & Nunziato [11]. La vitesse d’interface est alors la vitesse d’une des deux phases et la pression d’interface est la pression de l’autre phase. Les modèles correspondants à ces deux choix sont désignés par BN1 et BN2. Le cas  $\chi = \frac{1}{2}$  correspond au modèle proposé dans [24, 48] qui est désigné par CGHS. La comparaison effectuée dans ce chapitre est restreinte à ces trois modèles ( $\chi = 0, \frac{1}{2}, 1$ ).  $\chi$  aurait également pu être considéré comme une nouvelle variable nécessitant alors une loi d’évolution. Une telle stratégie conduit à une nouvelle classe de modèles bifluïdes qui est brièvement présentée en annexe de ce chapitre.

Bien que les trois modèles retenus possèdent de nombreuses propriétés communes, ils demeurent très différents du point de vue purement convectif. Les invariants de Riemann de l’onde associée à  $\lambda = u_I$  constituent notamment une grande différence entre les modèles. Il est important de noter le caractère linéairement dégénéré de cette onde grâce au choix des lois de fermeture du couple  $(u_I, p_I)$ . Ainsi la connaissance des invariants de Riemann suffit à fermer les produits non-conservatifs. Dans le cas contraire, ces produits non-conservatifs pourraient être actifs au travers d’ondes de chocs conduisant alors à des différences entre solutions numériques convergées en maillage en fonction du choix du schéma de convection. Malgré les différences entre les parties convectives des trois modèles, les termes de relaxation, notamment en vitesse  $D_k$  et pression  $\Phi_k$ , tendent à réduire les écarts entre les différentes lois de fermeture et donc les différents modèles. Il convient alors de prendre en compte ces phénomènes physiques de la manière la plus réaliste possible afin de comparer ces modèles sur des écoulements transitoires eau-vapeur. Dans ce but, des évaluations des échelles de temps de relaxation basées sur le comportement d’une bulle en milieu infini sont proposées. Pour la pression, cette évaluation est basée sur l’équation de Rayleigh-Plesset et pour la vitesse, la force de traînée d’une sphère dans un écoulement est utilisée.

La discrétisation numérique des trois modèles est effectuée en utilisant une méthode à pas fractionnaires. Afin d’effectuer une comparaison de modèles indépendante des choix numériques effectués, il est primordial de comparer des résultats convergés en maillage et donc de vérifier chacun des schémas utilisés dans la méthode à pas fractionnaires grâce à des études de convergence. La vérification des schémas implicites utilisés pour le traitement des termes sources est conduite à l’aide des travaux du chapitre précédent. En ce qui concerne la partie convective des modèles, le schéma de Rusanov est utilisé. Bien que peu précis comparé à d’autres schémas, il présente l’avantage d’être robuste et facile à mettre en œuvre quelque soit le couple  $(u_I, p_I)$  choisi. Nous procédons à sa vérification dans le cas peu classique du modèle CGHS grâce à une étude de convergence sur un problème de Riemann monodimensionnel. Nous proposons également une illustration frappante des différences entre les parties convectives des trois modèles sur un autre problème de Riemann.

Deux expériences d’écoulements transitoires eau-vapeur sont choisies afin de comparer les trois modèles entre eux et avec les données expérimentales. La première est une expérience de coup de bélier menée par Simpson [107] sur une tuyauterie d’eau sous pression. De l’eau liquide s’écoule initialement le long de la tuyauterie et une vanne est brusquement fermée, générant alors le coup de bélier. En fonction de la vitesse initiale de l’écoulement, un phénomène de cavitation est susceptible de se produire et l’écoulement devient alors diphasique. La comparaison est effectuée dans cette configuration, avec des résultats numériques convergés en

maillage. Ces derniers montrent un bon accord avec les résultats expérimentaux et aucune différence visible entre les différents modèles. La seconde expérience, nommée Canon, a été réalisée par Riegel [97] et étudie la brusque dépressurisation d'une tuyauterie d'eau chaude sous pression. Une membrane, placée à une extrémité de la tuyauterie, est rompue à l'instant initial, ce qui entraîne la propagation d'un front de vaporisation le long de la tuyauterie. A la fin de l'expérience, la totalité de l'eau liquide est vaporisée. Ainsi l'écoulement passe brusquement d'un régime d'écoulement monophasique à l'autre et constitue donc un excellent cas-test de transitoire eau-vapeur. Une fois de plus, les résultats numériques obtenus avec les trois modèles ne montrent aucune différence. La comparaison avec les données expérimentales montre un bon accord malgré une vaporisation trop rapide avec les différents modèles. Une analyse plus approfondie des déséquilibres entre phases en vitesse et pression est menée afin de mieux cerner les similitudes observées entre les trois modèles. Cette dernière montre que les déséquilibres entre phases restent très petits expliquant ainsi les faibles différences induites par le choix de la loi de fermeture. Une forte dépendance de ces déséquilibres au transfert de masse est également observée, ce qui rend délicate toute généralisation de ces similitudes entre modèles à d'autres applications.

#### Chapitre 4. Solveur de Riemann de type HLLC avec approximation du contact diphasique pour le modèle bifluide de Baer-Nunziato

Dans ce chapitre, un nouveau schéma de convection pour le modèle de Baer-Nunziato [11] est présenté. Le système d'équations considéré est donc le suivant :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & + u_I \partial_x (\alpha_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) - p_I \partial_x (\alpha_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & + \partial_x (u_k (\alpha_k \rho_k e_k + \alpha_k p_k)) - u_I p_I \partial_x (\alpha_k) & = 0 \end{cases}$$

avec la loi de fermeture proposée par Baer & Nunziato,  $(u_I, p_I) = (u_2, p_1)$ . Les propriétés mathématiques de ce système convectif ont été étudiées par Embid & Baer [39]. Le système est inconditionnellement hyperbolique mais pas strictement hyperbolique. En effet, la condition  $(u_1 - u_2)^2 \neq c_1^2$  doit être satisfaite afin que la famille associée aux vecteurs propres à droite engendre tout l'espace  $\mathbb{R}^7$ . Une propriété importante de ce système est que le champ associé à la valeur propre  $\lambda = u_I$  est linéairement dégénéré. Cette onde est la seule au travers de laquelle le taux de présence  $\alpha_k$  varie et est donc qualifiée de contact diphasique. Ainsi les produits non-conservatifs, associés au gradient du taux de présence, ne sont pas actifs au travers des ondes vraiment non linéaires ( $\lambda = u_k \pm c_k$ ) et sont donc définis sans ambiguïté.

A l'aide des différentes propriétés mathématiques du système, le problème de Riemann pour le modèle de Baer-Nunziato peut être étudié. Comme souligné dans [39], il est important de noter que l'existence et l'unicité de la solution de ce problème ne sont pas garanties dans le cas général. Malgré cela, la structure générale de la solution est connue, ainsi les relations vérifiées par les états intermédiaires à la traversée de chacune des six ondes du modèle. Une des difficultés dans la résolution de ce problème est l'ordre des différentes ondes qui n'est pas connu *a priori*. Deux cas sont distingués : le cas subsonique lorsque  $(u_1 - u_2)^2 < c_1^2$  et le cas opposé, dit supersonique. Dans le premier cas, deux configurations d'ondes sont alors possibles en fonction des vitesses des deux discontinuités de contact. Nous nous concentrons

sur le cas subsonique, comme la plupart des schémas numériques proposés pour le modèle de Baer-Nunziato dans la littérature. Schwendeman *et al.* [106] ont proposé un solveur de Godunov approché pour le cas subsonique en utilisant la “thin-layer approximation” afin de traiter le contact diphasique. Cette approximation a été reprise par Tokareva & Toro [112] dans le cadre d’un solveur de type HLLC, également destiné au cas subsonique.

Les invariants de Riemann de l’onde de contact diphasique présentent une structure fortement non-linéaire qui correspond à un couplage entre les deux phases. Afin de résoudre numériquement le système convectif du modèle de Baer-Nunziato, nous proposons une “approximation subsonique” du contact diphasique. Cette dernière est basée sur une analyse physique des invariants de Riemann à l’issue de laquelle un nouveau jeu d’invariants est proposé grâce à l’hypothèse suivante :  $(u_1 - u_2)^2 \ll \frac{1}{\gamma_1} c_1^2$ . Deux éléments motivent particulièrement cette hypothèse. Le premier est la relaxation en vitesse qui est prise en compte dans les termes sources du modèle de Baer-Nunziato complet. Le second est le fait que les vitesses matérielles sont très inférieures aux vitesses du son phasiques dans bon nombre de situations du cas subsonique. Une conséquence importante de cette approximation du contact diphasique est que l’entropie  $s_1$  ne figure plus parmi les invariants de Riemann approchés de cette onde. Nous utilisons alors cette hypothèse d’approximation subsonique du contact diphasique dans le cadre d’un solveur de type HLLC sur la base des travaux de Tokareva & Toro [112]. Dans cette approche, nous démontrons un résultat d’existence et d’unicité des états intermédiaires pour toute condition initiale du problème de Riemann et pour toute loi d’état. En effet, les relations intégrales de type HLLC utilisées à la traversée des ondes VNL fournissent des équations linéaires portant sur les pressions et vitesses des états intermédiaires. De plus, les invariants de Riemann du contact diphasique approché sont également linéaires par rapport aux pressions et vitesses des états intermédiaires. Ainsi, la résolution d’un système linéaire permet d’obtenir les pressions et vitesses de tous les états intermédiaires. Il est alors aisé d’en déduire les densités ainsi que la configuration d’ondes. Contrairement au solveur HLLC de Tokareva & Toro [112], notre schéma peut donc traiter directement toute loi d’état et ne nécessite pas l’utilisation d’une méthode itérative afin de résoudre une équation non-linéaire. Les flux numériques utilisés dans le schéma sont ensuite calculés à partir des états intermédiaires. En ce qui concerne l’intégration des produits non-conservatifs, nous montrons que la préservation des invariants de Riemann du contact diphasique approché implique la “thin-layer approximation” proposée par [106]. Ainsi les flux sont calculés de manière identique au schéma HLLC d’origine [112] à partir d’états intermédiaires différents.

Des cas-tests 1D et 2D sont choisis afin d’évaluer le schéma proposé et de le comparer à deux autres schémas de convection pour le modèle de Baer-Nunziato, le schéma de Rusanov et le schéma HLLC de Tokareva & Toro [112]. Les cas-tests 1D sont des problèmes de Riemann dont certains sont construits de sorte que la solution analytique, et notamment les états intermédiaires, soit connue avec précision. Ainsi des études de convergence sont réalisées pour ces derniers. Le premier problème de Riemann consiste en une discontinuité de contact diphasique isolée. Il permet alors d’évaluer les conséquences de l’approximation de cette onde. Les résultats montrent que le schéma proposé est plus précis que le schéma de Rusanov mais demeure moins précis que le schéma HLLC d’origine. La comparaison est ensuite poursuivie sur d’autres problèmes de Riemann avec plus d’ondes. Des résultats extrêmement proches entre les deux schémas de type HLLC sont alors observés tandis que le schéma de Rusanov est



beaucoup moins précis et très diffusif au niveau du contact diphasique. Une étude d'efficacité est également effectuée sur un de ces cas-tests. Elle montre que le schéma proposé est 2.5 fois moins coûteux que le schéma de Tokareva & Toro [112] à précision donnée et 40 fois moins que le schéma de Rusanov. Un tel écart entre les deux schémas HLLC s'explique par le fait qu'ils font preuve d'une précision similaire à maillage donné mais que le schéma HLLC d'origine est moins rapide car il nécessite l'utilisation d'une méthode itérative. Deux cas-tests 1D sont consacrés aux phases évanescentes afin d'évaluer la robustesse du schéma proposé. Un nouveau cas d'onde de contact diphasique isolée est étudié, avec un taux de présence passant de  $1 - 10^{-6}$  dans l'état de gauche à  $10^{-6}$  dans l'état de droite. Nous n'avons pu obtenir de résultats avec le schéma HLLC de Tokareva & Toro [112] par manque de robustesse. Pour les deux autres schémas, une faible précision est observée car le test est sévère, néanmoins les résultats obtenus avec le nouveau schéma sont plus précis. Enfin le dernier cas-test 1D montre la capacité du schéma proposé à gérer des lois d'états complexes. Trois cas-tests 2D sont ensuite étudiés : une interaction choc-bulle et deux explosions sous-marines. Dans le premier cas, les résultats fournis par les deux schémas HLLC sont très proches alors qu'une diffusion beaucoup plus importante est observée avec le schéma de Rusanov. Les cas-test d'explosions sous-marines mettent en jeu des interfaces matérielles avec de grands sauts de taux de présence mais également des ondes de choc avec des sauts de pression très violents (environ  $10^9$  Pa). Ainsi le schéma HLLC d'origine n'est pas assez robuste pour ces cas. La comparaison entre les deux autres schémas montre une fois de plus que le schéma HLLC proposé est plus précis et beaucoup moins diffusif que le schéma de Rusanov, tout en faisant preuve d'une grande robustesse.

## **Chapitre 5. Modélisation en approche bifluide du transfert de masse à l'aide de la formulation de Bilicki pour la brusque dépressurisation d'eau liquide**

Ce chapitre est dédié à la modélisation du transfert de masse pour les écoulements eau-vapeur. De tels écoulements sont présents dans de nombreuses applications industrielles dont les circuits primaires et secondaires des Réacteurs à Eau Pressurisée. Bien que principalement monophasiques en régime nominal, les écoulements dans ces circuits peuvent devenir diphasiques en régime transitoire. Dans ce cadre, la prédiction du phénomène de changement de phase peut s'avérer très délicate. En effet, les interactions entre ce phénomène et les ondes de pression au sein de l'écoulement sont nombreuses comme en témoignent certaines situations telles que la crise d'ébullition ou les coups de bélier. Dans ce chapitre, nous nous concentrons sur une autre situation transitoire, la brusque dépressurisation d'eau liquide. Cette dernière fait l'objet de beaucoup d'attention dans le domaine du nucléaire car elle constitue un des phénomènes physiques majeurs dans un accident de sûreté très étudié, l'Accident par Perte de Réfrigérant Primaire. La prédiction des différents phénomènes mis en jeu dans un tel accident constitue d'ailleurs un moteur important des travaux de recherche en thermohydraulique. Depuis les années soixante, de nombreux modèles d'écoulements diphasiques ont été proposés et intégrés dans les codes de simulation afin de mieux prendre en compte l'ensemble de ces phénomènes physiques.

Deux approches sont classiquement distinguées pour la modélisation des écoulements diphasiques. La première et la plus ancienne est l'approche homogène. Dans les modèles basés sur cette approche, le mélange constitué des deux phases est considéré comme un unique fluide.

De nombreuses hypothèses d'équilibre entre les phases sont alors supposées afin d'obtenir les propriétés thermodynamiques d'un tel mélange. Bien que satisfaisante pour bon nombre de cas, l'approche homogène s'avère insuffisante lorsque les déséquilibres phasiques deviennent grands. Pour surmonter cet obstacle, la deuxième approche de modélisation, l'approche bi-fluide, s'avère naturelle. Comme leur nom l'indique, les modèles bifluides considèrent les deux phases de l'écoulement diphasique comme deux fluides distincts avec leurs caractéristiques thermodynamiques propres. Les nombreux échanges entre phases doivent alors être modélisés et de nombreuses lois de fermeture sont nécessaires pour cela. Dans cette thèse, le modèle bifluide de Baer-Nunziato [11] est considéré. Ce modèle a été proposé dans le cadre de la modélisation des matériaux granulaires réactifs mais a été largement utilisé pour les écoulements liquide-gaz depuis. Le système d'équations régissant ce modèle est le suivant :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & + & u_I \partial_x (\alpha_k) & = & \Phi_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + & \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) & = & \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & + & \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) - p_I \partial_x (\alpha_k) & = & D_k + \frac{u_1 + u_2}{2} \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & + & \partial_x (u_k (\alpha_k \rho_k e_k + \alpha_k p_k)) - u_I p_I \partial_x (\alpha_k) & = & Q_k + \frac{u_1 + u_2}{2} D_k + \frac{u_1 u_2}{2} \Gamma_k - p_I \Phi_k \end{cases}$$

Dans le cadre de l'approche détaillée dans le premier chapitre, les termes sources du modèle, qui constituent les échanges entre phases, sont modélisés grâce à des termes de relaxation des différents déséquilibres phasiques. Dans ce chapitre, nous nous intéressons plus particulièrement au transfert de masse  $\Gamma_k$ , défini de la manière suivante à l'aide du déséquilibre en potentiel chimique :

$$\Gamma_k = \frac{1}{\tau_\mu \mu_{ref}} \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} (\mu_j - \mu_k)$$

Une échelle de temps est associée à chacun des phénomènes de relaxation présents dans le modèle. Pour les échelles de temps de relaxation en pression et vitesse, des estimations ont été proposées dans le chapitre 3 et il s'agit de poursuivre ce travail en s'intéressant à l'échelle de temps de relaxation en potentiel chimique  $\tau_\mu$ , ainsi qu'au potentiel de référence  $\mu_{ref}$ . Afin de poursuivre la démarche utilisée précédemment, c'est à dire de proposer des évaluations réalistes mais simples des échelles de temps, nous nous intéressons au modèle homogène relaxé (HRM en anglais) proposé par Bilicki & Kestin [19]. Ce modèle est régi par le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + & \partial_x (\alpha_k \rho_k u) & = & \Gamma_k^{HRM} \\ \partial_t (\rho) & + & \partial_x (\rho u) & = & 0 \\ \partial_t (\rho u) & + & \partial_x (\rho u^2 + p) & = & 0 \\ \partial_t (\rho e) & + & \partial_x (\rho e u + p u) & = & 0 \end{cases}$$

En plus des trois équations de conservation pour le mélange utilisées dans un modèle homogène équilibre (HEM en anglais), il comporte une équation de masse supplémentaire portant sur une des deux phases. Le transfert de masse, constituant l'unique terme source de ce modèle, est exprimé comme un phénomène de relaxation et donne ainsi son nom au modèle :

$$\Gamma_k^{HRM} = -\frac{m_k - \bar{m}_k}{\theta}$$

Il s'agit d'une relaxation vers l'équilibre thermodynamique entre phases, avec une échelle de temps  $\theta$  qui a été évaluée dans le cadre de la dépressurisation d'eau liquide par Downar-Zapolski

*et al.* [35]. Une comparaison entre les deux formulations du transfert de masse,  $\Gamma_k$  et  $\Gamma_k^{HRM}$ , est effectuée sur la base de différentes hypothèses thermodynamiques et nous permet alors de proposer une évaluation du temps de relaxation  $\tau_\mu$  et du potentiel de référence  $\mu_{ref}$ .

Différentes expériences de dépressurisation brusque d'eau liquide sont sélectionnées afin de valider l'utilisation de cette nouvelle échelle de temps pour le modèle de Baer-Nunziato. Elles sont au nombre de trois et utilisent des dispositifs expérimentaux similaires. Une tuyauterie d'environ 4 m est remplie d'eau liquide sous pression. Une membrane, placée à l'une des extrémités de la tuyauterie, est rompue à l'instant initial, ce qui entraîne la propagation d'un front de vaporisation le long de la tuyauterie. Des mesures de pression ainsi que de taux de vide sont effectuées en différents points du dispositif. Les conditions initiales de pression et température des trois expériences sont très différentes, ce qui permet de tester le modèle sur une large gamme de conditions thermodynamiques. La première expérience est l'expérience de Canon, menée par Riegel [97]. Nous avons déjà testé le modèle de Baer-Nunziato sur cette expérience dans le chapitre 3 mais avec des temps de relaxation constants pour la température et le potentiel chimique. Ces calculs antérieurs servent donc de référence pour la présente comparaison. L'utilisation directe de l'évaluation de  $\tau_\mu$  basée sur les travaux de Bilicki *et al.* [19,35] fournit un faible accord avec les données expérimentales. En effet, la valeur du plateau de pression observé lors de la vaporisation est plus faible dans les résultats numériques par rapport aux mesures expérimentales. Malgré cela, nous jugeons ces résultats prometteurs puisque un bon comportement global est observé, sans que l'équilibre thermodynamique entre phases soit imposé comme dans le calcul de référence. Cette analyse, ainsi qu'une étude paramétrique, nous conduit donc à proposer une nouvelle évaluation de  $\tau_\mu$ , toujours basée sur les travaux de Bilicki *et al.* [19,35], mais conduisant à des temps de relaxation plus faibles. Les résultats obtenus grâce à cette nouvelle modélisation du transfert de masse pour le modèle de Baer-Nunziato sont à nouveau comparés aux données de l'expérience Canon ainsi qu'aux résultats numériques obtenus dans le calcul de référence utilisant des temps de relaxation constants. Ces derniers montrent que cette nouvelle modélisation du transfert de masse permet de retarder la vaporisation et conduit ainsi à un meilleur accord avec l'expérience. Nous poursuivons alors cette validation sur deux autres expériences de dépressurisation brusque d'eau liquide : l'expérience Super-Canon, également menée par Riegel [97], et l'expérience de Edwards & O'Brien [38]. Dans chaque cas, une étude de sensibilité au maillage est menée afin de comparer des résultats numériques convergés avec les données expérimentales. Un calcul de référence avec des temps de relaxation constants est également intégré à la comparaison. Les résultats montrent que la nouvelle modélisation du transfert de masse améliore significativement les résultats fournis par le modèle de Baer-Nunziato lorsque nous les comparons aux résultats expérimentaux. Deux points de comparaison nous semblent particulièrement importants. Le premier est la prise en compte des états métastables de l'eau caractérisés ici par le plateau de pression observé lors de la vaporisation. En effet, la nouvelle modélisation permet de retrouver le plateau expérimental, qui n'est pas situé à la pression de saturation correspondant à la température initiale contrairement au plateau observé dans le calcul de référence. Le second point est la vaporisation plus tardive induite par cette nouvelle évaluation du temps de relaxation et qui permet un meilleur accord avec les données expérimentales. Ainsi cette nouvelle modélisation en approche bifluide du transfert de masse, basée sur les travaux de Bilicki *et al.* [19,35] pour la brusque dépressurisation d'eau liquide, semble pertinente sur une large gamme de conditions thermodynamiques.

Deux annexes, consacrées à la proposition d'un modèle bifluide turbulent simple et à la caractérisation entropique de différents modèles d'écoulements diphasiques, complètent le manuscrit.

## Valorisation des travaux

Les travaux présentés dans les différents chapitres de ce manuscrit ont fait l'objet de publication.

1. Le chapitre 1 est paru sous la forme d'un rapport interne EDF H-T63-2014-10406-FR.
2. Les travaux présentés dans le chapitre 2 ont également fait l'objet d'un rapport interne EDF H-T61-2015-05315-FR.
3. Un article portant sur les travaux du chapitre 3 a été publié dans la revue *Mathematical Modelling and Numerical Analysis* : H. Lochon, F. Daude, P. Galon, and J.-M. Hérard. *Comparison of two-fluid models on steam-water transients*. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 2016.

Ces travaux ont été également présentés lors du congrès Pressure Surges 2015.

4. Les travaux du chapitre 4 ont fait l'objet d'un article accepté pour publication dans la revue *Journal of Computational Physics* : H. Lochon, F. Daude, P. Galon, and J.-M. Hérard. *HLLC-type Riemann solver with approximated two-phase contact for the computation of the Baer-Nunziato two-fluid model*. *Journal of Computational Physics*, 2016.

Ils ont aussi été présentés au congrès ECCOMAS 2016.

5. Un article reprenant les travaux du chapitre 5 est en cours de finalisation.
6. l'annexe A a été soumise en version révisée dans la revue *Comptes Rendus Mécanique*.



# Chapitre 1

## Modélisation d'écoulements diphasiques : fermetures entropiques des modèles bifluïdes

Ce chapitre est dédié à la construction de modèles bifluïdes d'écoulements diphasiques. Deux approches sont classiquement utilisées pour la modélisation des écoulements diphasiques : l'approche homogène et l'approche bifluïde. Dans le cadre de la première, le mélange diphase est modélisé comme un unique fluide homogène avec ses caractéristiques thermodynamiques propres basées sur des hypothèses d'équilibre entre les phases. En approche bifluïde, les deux phases sont modélisées séparément permettant ainsi de considérer les nombreux déséquilibres phasiques. Les différents échanges entre phases doivent alors être modélisés. De nombreuses lois de fermeture sont donc nécessaires pour ces échanges entre phases apparaissant, comme termes sources des modèles bifluïdes, mais aussi pour certains termes convectifs, notamment les produits non-conservatifs. Différents principes peuvent être utilisés afin de construire de telles lois de fermeture, notamment la caractérisation entropique du modèle.

Ce chapitre est divisé en deux parties, basées chacune sur un outil mathématique différent. Dans la première, un opérateur de moyenne statistique est appliqué aux équations de la mécanique des fluides. Il s'agit d'une approche classique permettant d'obtenir les équations d'évolutions des grandeurs moyennées pour chacune des phases [36, 68]. Ces moyennes s'apparentent d'ailleurs aux moyennes proposées par Favre [42] pour l'étude des écoulements monophasiques compressibles turbulents. Dans le cadre diphase, une équation supplémentaire, dite équation topologique [36], portant le taux de présence statistique doit également être prescrite. Le système ainsi obtenu est un système ouvert d'équations aux dérivées partielles. Dans la seconde partie, des lois de fermeture pour ce système sont construites à l'aide d'un deuxième outil mathématique, la caractérisation entropique du système. Elle permet la construction d'une classe de modèles bifluïdes, comprenant le modèle de Baer-Nunziato [11] ainsi que le modèle proposé dans [66] et bâti sur une approche similaire. Il convient ensuite d'étudier les propriétés mathématiques du système convectif obtenu afin de s'assurer de son caractère bien posé, notamment en présence de d'ondes de chocs, et de restreindre les lois de fermeture le cas échéant. Cet aspect est présenté en détails dans [24, 48], avec la proposition de lois de fermeture différentes de celles du modèle de Baer-Nunziato, et ne sera repris que très brièvement

dans cette partie. L'accent est mis sur le traitement conjoint des termes non-conservatifs et des termes sources qui fournit des fermetures de manière naturelle pour certains termes d'interface. Afin de souligner l'enrichissement apporté par la classe de modèles bifluides construite par cette approche, une nouvelle formulation du transfert de masse est proposée.

Ce chapitre est paru sous la forme d'un rapport interne EDF H-T63-2014-10406-FR.

# Modélisation d'écoulements diphasiques : fermetures entropiques des modèles bifluïdes

H. Lochon<sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup>EDF R&D, Département AMA, 7 Boulevard Gaspard Monge, 91120 Palaiseau, France

<sup>b</sup>IMSIA, UMR EDF/CNRS/CEA/ENSTA 9219, 828 Boulevard des Maréchaux, 91762 Palaiseau Cedex, France

<sup>c</sup>I2M, UMR CNRS 7373, Technopôle Château-Gombert, 39 rue F. Joliot Curie, 13453 Marseille Cedex 13, France

## Abstract

Ce document propose un formalisme général pour la modélisation des écoulements diphasiques afin d'enrichir la classe des modèles bifluïdes à deux pressions. On présente dans un premier temps une approche bifluïde statistique qui permet d'obtenir un modèle ouvert d'évolution des grandeurs moyennes de l'écoulement. Dans un second temps, on utilise la caractérisation entropique du modèle afin de proposer des lois de fermeture pertinentes. Ce travail a été réalisé dans le cadre du projet Dynamique Rapide porté par le département AMA de EDF R&D.

## Introduction

Une grande variété d'écoulements diphasiques est présente au niveau des circuits primaires et secondaires des centrales nucléaires de type Réacteur à Eau Pressurisée (REP). Bien souvent, les écoulements sont proches d'un régime purement monophasique en fonctionnement nominal mais une deuxième phase est susceptible d'apparaître de manière significative dans des configurations accidentelles. Parmi ces dernières, on peut citer l'accident par perte de réfrigérant primaire (APRP), la crise d'ébullition ou encore les coups de béliers de condensation. Afin de disposer de simulations numériques précises de ces différents phénomènes, la construction de modèles d'écoulements diphasiques pertinents est cruciale.

Deux grandes classes de modèles peuvent être distinguées dans le cadre des écoulements diphasiques. La première regroupe les modèles homogènes qui décrivent l'évolution d'un mélange des deux phases avec ses propriétés thermodynamiques propres, souvent basées sur des hypothèses d'équilibre entre les phases. A l'inverse, la deuxième classe est composée des modèles bifluïdes qui considèrent la dynamique des deux fluides et permettent ainsi la prise en compte de nombreux déséquilibres entre phases. Ce type de modèle fut notamment utilisé par Ransom et Hicks [14] ainsi que Stewart et Wendroff [15] pour l'étude d'écoulements liquide-gaz. Le modèle proposé par Baer et Nunziato [2] dans un tout autre cadre, l'étude des matériaux granulaires réactifs, constitue une contribution importante à cette classe des modèles bifluïdes. De nombreux modèles semblables à ce dernier utilisant des lois de fermetures différentes ont été proposés [3, 8, 9, 13].

L'objectif de ce travail est de proposer un formalisme général de construction de modèles bifluïdes [5, 12] par une approche statistique. Les différents choix de modélisation possibles



dans un tel formalisme seront soulignés afin d’enrichir la classe des modèles bifluïdes à deux pressions.

Dans une première partie, nous présenterons une approche bifluïde statistique de modélisation des écoulements diphasiques similaire à celle proposée dans [10] et qui permet d’aboutir à un modèle ouvert d’évolution des grandeurs moyennes de l’écoulement. La deuxième partie sera consacrée à la fermeture de ce modèle au moyen de critères basés sur l’entropie du système global.

## 1 Approche bifluïde statistique des écoulements diphasiques

Dans l’approche bifluïde de modélisation des écoulements diphasiques, le milieu est assimilé à un ensemble de régions monophasiques séparées par des interfaces infiniment minces dans lesquelles les équations locales instantanées de la mécanique des fluides s’appliquent. Un procédé de moyenne statistique de ces équations permet alors d’obtenir un système d’équations ouvert régissant les variables moyennes de l’écoulement.

Nous présentons dans un premier temps les équations s’appliquant dans les régions purement monophasiques ainsi que les fonctions caractéristiques de chacune des phases régissant l’évolution du milieu diphasique. Nous introduirons ensuite l’opérateur de moyenne statistique qui nous servira pour établir les équations des grandeurs moyennes.

### 1.1 Equations de bilan monophasiques et fonctions caractéristiques

Dans la suite, on notera  $k = 1, 2$  les indices respectifs de chaque phase. En l’absence de forces extérieures et en négligeant les effets visqueux, les régions monophasiques sont régies par les équations d’Euler (en dimension 1 d’espace) :

$$\begin{cases} \partial_t (\rho_k) & + \partial_x (\rho_k u_k) & = 0 \\ \partial_t (\rho_k u_k) & + \partial_x (\rho_k u_k^2 + p_k) & = 0 \\ \partial_t (\rho_k e_k) & + \partial_x (u_k (\rho_k e_k + p_k)) & = 0 \end{cases} \quad (1)$$

où  $\rho_k$  désigne la densité,  $u_k$  la vitesse,  $p_k$  la pression,  $\varepsilon_k$  l’énergie interne spécifique et  $e_k$  l’énergie totale spécifique de la phase  $k$  définie par :

$$e_k = \frac{1}{2} u_k^2 + \varepsilon_k \quad (2)$$

Rappelons ici que l’énergie interne spécifique  $\varepsilon_k$  est reliée aux variables thermodynamiques  $\rho_k$  et  $p_k$  par une loi d’état, c’est à dire une relation de la forme :  $\varepsilon_k = \varepsilon_k(\rho_k, p_k)$ . On écrit les équations (1) de la manière condensée suivante :

$$\partial_t (W_k) + \partial_x (F_k(W_k)) = 0 \quad (3)$$

Pour décrire le milieu diphasique, on introduit les fonctions caractéristiques de présence de phase  $\chi_k(x, t)$  valant 1 au point  $x$  et à l’instant  $t$  si la phase  $k$  est présente et 0 sinon. Ces deux fonctions sont donc telles que :  $\chi_1(x, t) + \chi_2(x, t) = 1$  pour tout point  $x$  et à tout instant

$t$ . Elles sont discontinues aux interfaces et vérifient, au sens des distributions, les relations suivantes :

$$\partial_x (\chi_k) = -n_k \delta \quad \text{et} \quad \partial_t (\chi_k) = \sigma \cdot n_k \delta$$

où  $\delta$  est la fonction caractéristique de l'interface,  $\sigma$  sa vitesse de déplacement et  $n_k$  le vecteur unitaire normal à l'interface et extérieur au domaine de présence de la phase  $k$ . On a donc la loi d'évolution suivante, dite équation topologique [5] :

$$\partial_t (\chi_k) + \sigma \partial_x (\chi_k) = 0 \quad (4)$$

Dans le cadre de l'approche statistique, nous supposons que la position de l'interface est distribuée aléatoirement. Les fonctions caractéristiques  $\chi_k$  dépendent donc également d'une réalisation  $\xi$  et nous allons nous intéresser à l'évolution de sa moyenne statistique.

## 1.2 Opérateur de moyenne statistique

Soit l'opérateur de moyenne  $\langle \cdot \rangle$  vérifiant la relation suivante pour une variable aléatoire  $\psi(\xi)$  :

$$\langle \psi(\xi) \rangle = \int_{\omega} \psi(\xi) \mu(\xi) d\xi$$

où  $\mu$  est une fonction à valeurs positives vérifiant  $\int_{\omega} \mu(\xi) d\xi = 1$ . Cet opérateur vérifie les propriétés suivantes :

- linéarité :  $\langle \lambda f + g \rangle = \lambda \langle f \rangle + \langle g \rangle$
- idempotence :  $\langle \langle f \rangle g \rangle = \langle f \rangle \langle g \rangle$
- commutativité avec les dérivations :  $\langle \partial_{\phi} f \rangle = \partial_{\phi} \langle f \rangle$  avec  $\phi = t, x$

Nous pouvons donc introduire le taux de présence statistique  $\alpha_k$  de la phase  $k$  comme la moyenne de la fonction caractéristique  $\chi_k$  :

$$\alpha_k = \langle \chi_k \rangle \quad (5)$$

Il vérifie :

$$0 \leq \alpha_k \leq 1 \quad \text{et} \quad \alpha_1 + \alpha_2 = 1$$

On définit également la moyenne eulérienne phasique classique  $\overline{f_k}$  d'une grandeur  $f_k$  ainsi que sa moyenne au sens de Favre  $\tilde{f}_k$  (introduite dans le cadre monophasique turbulent en 1965 [6]) :

$$\overline{f_k} = \frac{\langle \chi_k f_k \rangle}{\langle \chi_k \rangle} \quad \text{et} \quad \tilde{f}_k = \frac{\langle \chi_k \rho_k f_k \rangle}{\langle \chi_k \rho_k \rangle} \quad (6)$$

De manière classique, on note  $f'_k$  et  $f''_k$  les fluctuations autour de ces moyennes :

$$f'_k = f_k - \overline{f_k} \quad \text{et} \quad f''_k = f_k - \tilde{f}_k \quad (7)$$

Il est important de noter les relations suivantes, obtenues grâce à la propriété d'idempotence :

$$\langle \chi_k f'_k \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle \chi_k \rho_k f''_k \rangle = 0 \quad (8)$$

A l'aide de toutes ces notations, nous pouvons maintenant appliquer l'opérateur de moyenne au système d'équations (3)-(4).

### 1.3 Equations des grandeurs moyennes

Tout d'abord, on applique l'opérateur de moyenne définie dans la partie précédente à l'équation (4). Grâce à sa commutativité avec les dérivations, on obtient :

$$\partial_t \langle \chi_k \rangle + \langle \sigma \rangle \partial_x \langle \chi_k \rangle = \langle (\langle \sigma \rangle - \sigma) \partial_x (\chi_k) \rangle \quad (9)$$

En posant  $u_I = \langle \sigma \rangle$  et  $\Phi_k = \langle (\langle \sigma \rangle - \sigma) \partial_x (\chi_k) \rangle$ , l'équation (9) s'écrit :

$$\partial_t (\alpha_k) + u_I \partial_x (\alpha_k) = \Phi_k \quad (10)$$

Notons également que  $\sum_k \Phi_k = 0$ .

En ce qui concerne l'équation (3), on commence par la multiplier par  $\chi_k$  :

$$\partial_t (\chi_k W_k) + \partial_x (\chi_k F_k) = (F_k - W_k \sigma) \partial_x (\chi_k)$$

On applique ensuite l'opérateur de moyenne :

$$\partial_t \langle \chi_k W_k \rangle + \partial_x \langle \chi_k F_k \rangle = \langle (F_k - W_k \sigma) \partial_x (\chi_k) \rangle \quad (11)$$

Il s'agit maintenant d'explicitier les termes  $\langle \chi_k W_k \rangle$  et  $\langle \chi_k F_k \rangle$  en utilisant les décompositions en moyennes et fluctuations introduites dans la partie précédente. A l'aide des relations (7) et (8), on a :

$$\begin{aligned} \langle \chi_k W_k^1 \rangle &= \langle \chi_k \rho_k \rangle \\ \langle \chi_k W_k^2 \rangle &= \langle \chi_k \rho_k \widetilde{u}_k \rangle \\ \langle \chi_k W_k^3 \rangle &= \langle \chi_k \overline{(\rho_k \varepsilon_k)} \rangle + \langle \frac{1}{2} \chi_k \rho_k \widetilde{u}_k^2 \rangle + \langle \frac{1}{2} \chi_k \rho_k u_k''^2 \rangle \end{aligned}$$

Les flux sont sensiblement plus compliqués :

$$\begin{aligned} \langle \chi_k F_k^1 \rangle &= \langle \chi_k \rho_k \widetilde{u}_k \rangle \\ \langle \chi_k F_k^2 \rangle &= \langle \chi_k \overline{p_k} \rangle + \langle \chi_k \rho_k \widetilde{u}_k^2 \rangle + \langle \chi_k \rho_k u_k''^2 \rangle \\ \langle \chi_k F_k^3 \rangle &= \langle \chi_k \overline{(\rho_k \varepsilon_k + p_k)} \widetilde{u}_k \rangle + \langle \chi_k u_k'' \overline{(\rho_k \varepsilon_k + p_k)} \rangle + \langle \chi_k (\rho_k \varepsilon_k + p_k)' u_k'' \rangle \\ &\quad + \langle \frac{1}{2} \chi_k \rho_k \widetilde{u}_k^3 \rangle + \langle \frac{3}{2} \chi_k \rho_k u_k''^2 \rangle \widetilde{u}_k + \langle \frac{1}{2} \chi_k \rho_k u_k''^3 \rangle \end{aligned}$$

Nous pouvons noter que le terme  $\langle \chi_k \rho_k u_k''^2 \rangle$  apparait à trois reprises. Il s'agit d'un tenseur du second ordre prenant en compte les fluctuations turbulentes, analogue diphasique du tenseur de Reynolds. La prise en compte d'une telle contribution dans le cadre des écoulements compressibles soulève de nombreuses difficultés [1, 7] sur lesquelles nous ne nous étendrons pas. Nous négligeons ici ce tenseur mais notons toutefois qu'une fermeture simplifiée a récemment été proposée dans le cadre diphasique [11]. Nous négligeons également les contributions  $\langle \chi_k u_k'' \rangle$ ,  $\langle \chi_k (\rho_k \varepsilon_k + p_k)' u_k'' \rangle$  et  $\langle \chi_k \rho_k u_k''^3 \rangle$ .

Le terme  $\langle \chi_k \overline{(\rho_k \varepsilon_k)} \rangle$  nécessite aussi quelques remarques. Nous faisons ici l'hypothèse que la fonction  $\overline{\rho_k \varepsilon_k}$  ne dépend que des grandeurs moyennes  $\overline{\rho_k}$  et  $\overline{p_k}$ . Bien que vérifiée dans le cadre de lois d'états de type Stiffened Gas, c'est une hypothèse très forte sur la thermodynamique moyennée. Elle n'est pas vérifiée pour des lois d'états plus complexes, de type Van der Walls par exemple. On peut alors définir  $\overline{e_k} = \overline{\varepsilon_k} + \frac{1}{2} \widetilde{u_k}^2$  où  $\overline{\varepsilon_k}(\overline{\rho_k}, \overline{p_k}) = \frac{\overline{\rho_k \varepsilon_k}}{\overline{\rho_k}}$ .

Grâce à ces nombreuses hypothèses, l'équation (11) devient :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k \overline{\rho_k}) & + \partial_x (\alpha_k \overline{\rho_k} \widetilde{u_k}) & = \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \overline{\rho_k} \widetilde{u_k}) & + \partial_x (\alpha_k \overline{\rho_k} \widetilde{u_k}^2 + \alpha_k \overline{p_k}) & = \Lambda_k \\ \partial_t (\alpha_k \overline{\rho_k} \overline{e_k}) & + \partial_x (\widetilde{u_k} (\alpha_k \overline{\rho_k} \overline{e_k} + \alpha_k \overline{p_k})) & = \Psi_k \end{cases} \quad (12)$$

où on note  $(\Gamma_k, \Lambda_k, \Psi_k)^T = \left\{ \langle (F_k^j - W_k^j \sigma) \partial_x (\chi_k) \rangle \right\}_{j=1,3}$ .

Afin d'alléger les notations, on peut dorénavant, et sans risque d'ambiguïté, omettre les notations  $\overline{f}$ ,  $\widetilde{g}$  et  $\overline{h}$  pour toute grandeur  $f$ ,  $g$  et  $h$  dans les équations (10) et (12). Le système global régissant l'évolution des grandeurs moyennes s'écrit donc :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & + u_I \partial_x (\alpha_k) & = \Phi_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) & = \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) & = \Lambda_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & + \partial_x (u_k (\alpha_k \rho_k e_k + \alpha_k p_k)) & = \Psi_k \end{cases} \quad (13)$$

avec  $e_k = \frac{1}{2} u_k^2 + \varepsilon_k(\rho_k, p_k)$ .

## 2 Fermetures entropiques des modèles bifluïdes

Dans la partie précédente, nous avons obtenu un modèle d'écoulements diphasiques (13) par une approche bifluïde statistique. Ce système d'équations est un système ouvert car les termes du second membre ainsi que la vitesse  $u_I$  doivent faire l'objet d'une modélisation.

La loi de fermeture du terme  $u_I$  provient de l'hypothèse structurelle de champ linéairement dégénéré examinée dans [4, 8]. Cette hypothèse est naturelle puisqu'elle proscrie la formation de mélange par des phénomènes purement convectifs. Ainsi  $u_I$  sera supposée connue dans la suite.

En ce qui concerne les termes du second membre, dits termes sources, nous allons utiliser la caractérisation entropique du système afin de les fermer, stratégie classique dans le cadre de la modélisation d'écoulements diphasiques [2, 3, 5, 12].

### 2.1 Etablissement des lois d'évolution des entropies phasiques

Considérons le système (13) obtenu dans la partie précédente. Comme nous l'avons vu précédemment,  $\sum_k \Phi_k = 0$  et nous supposons qu'en l'absence de sources extérieures :

$$\sum_k \Gamma_k = \sum_k \Lambda_k = \sum_k \Psi_k = 0$$

Notre objectif est d'établir les lois d'évolution des entropies phasiques de ce système. Pour cela, on commence par écrire celle des énergies cinétiques en multipliant l'équation de la conservation de la quantité de mouvement par  $u_k$  :

$$\partial_t \left( \alpha_k \rho_k \frac{1}{2} u_k^2 \right) + \partial_x \left( \alpha_k \rho_k u_k \frac{1}{2} u_k^2 \right) + u_k \partial_x (\alpha_k p_k) = u_k \Lambda_k - \frac{1}{2} u_k^2 \Gamma_k$$

On en déduit l'équation d'évolution des énergies internes à l'aide de l'équation de la conservation de l'énergie :

$$\partial_t (\alpha_k \rho_k \varepsilon_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k \varepsilon_k) + \alpha_k p_k \partial_x (u_k) = \Psi_k - u_k \Lambda_k + \frac{1}{2} u_k^2 \Gamma_k$$

que l'on réécrit :

$$\partial_t (\varepsilon_k) + u_k \partial_x (\varepsilon_k) + \frac{p_k}{\rho_k} \partial_x (u_k) = RHS_{\varepsilon_k} \quad (14a)$$

$$\text{avec } RHS_{\varepsilon_k} = \frac{1}{\alpha_k \rho_k} \left( \Psi_k - u_k \Lambda_k + \left( \frac{1}{2} u_k^2 - \varepsilon_k \right) \Gamma_k \right) \quad (14b)$$

De même, on a :

$$\partial_t (\rho_k) + u_k \partial_x (\rho_k) + \rho_k \partial_x (u_k) + \frac{\rho_k}{\alpha_k} (u_k - u_I) \partial_x (\alpha_k) = RHS_{\rho_k} \quad (15a)$$

$$\text{avec } RHS_{\rho_k} = \frac{1}{\alpha_k} (\Gamma_k - \rho_k \Phi_k) \quad (15b)$$

Ainsi, à l'aide des 2 équations précédentes, on en déduit l'équation d'évolution des pressions :

$$\partial_t (p_k) + u_k \partial_x (p_k) + \rho_k c_k^2 \partial_x (u_k) - (\partial_{p_k} \varepsilon_k)^{-1} (\partial_{\rho_k} \varepsilon_k) \frac{\rho_k}{\alpha_k} (u_k - u_I) \partial_x (\alpha_k) = RHS_{p_k} \quad (16a)$$

$$\text{avec } RHS_{p_k} = (\partial_{p_k} \varepsilon_k)^{-1} \left( RHS_{\varepsilon_k} - (\partial_{\rho_k} \varepsilon_k) RHS_{\rho_k} \right) \quad (16b)$$

$c_k$  est la vitesse des ondes de pression dans la phase  $k$ , définie par :

$$\rho_k c_k^2 = (\partial_{p_k} \varepsilon_k)^{-1} \left( \frac{p_k}{\rho_k} - \rho_k (\partial_{\rho_k} \varepsilon_k) \right)$$

Cela permet d'introduire l'entropie spécifique par phase  $s_k = s_k(\rho_k, p_k)$  vérifiant la contrainte  $c_k^2 (\partial_{p_k} s_k) + (\partial_{\rho_k} s_k) = 0$ . On peut alors écrire l'équation d'évolution de ces entropies phasiques à l'aide des relations (15) et (16) :

$$\partial_t (s_k) + u_k \partial_x (s_k) - \frac{1}{T_k} \frac{p_k}{\alpha_k \rho_k} (u_k - u_I) \partial_x (\alpha_k) = RHS_{s_k} \quad (17a)$$

$$\text{avec } RHS_{s_k} = \frac{1}{T_k} \left( RHS_{\varepsilon_k} - \frac{p_k}{\rho_k^2} RHS_{\rho_k} \right) \quad (17b)$$

où l'on note  $T_k$  la température, vérifiant :

$$\frac{1}{T_k} = (\partial_{p_k} \varepsilon_k)^{-1} (\partial_{p_k} s_k) \quad (18)$$

On définit également  $p_I$  par la relation suivante :

$$\sum_k (-1)^k \frac{1}{T_k} (p_I - p_k) (u_k - u_I) = 0 \quad (19)$$

Cela permet de réécrire l'équation (17) sous la forme :

$$\begin{aligned} \partial_t (\alpha_k \rho_k s_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k s_k) + \frac{1}{T_k} (p_I - p_k) (u_k - u_I) \partial_x (\alpha_k) = \\ \frac{1}{T_k} \left( \Psi_k - u_k \Lambda_k + \left( \frac{1}{2} u_k^2 - g_k \right) \Gamma_k + p_k \Phi_k + p_I (u_k - u_I) \partial_x (\alpha_k) \right) \end{aligned} \quad (20)$$

où  $g_k = \varepsilon_k + \frac{p_k}{\rho_k} - T_k s_k$  est l'enthalpie libre (ou énergie libre de Gibbs) spécifique de la phase  $k$ .

Grâce aux lois d'évolution des entropies phasiques (20), nous pouvons nous intéresser à l'entropie globale du système. Nous allons voir dans la suite que l'exigence d'une inégalité sur cette dernière nous fournit des lois de fermeture. Il est important de noter que contrairement à [9], notre exigence ne porte pas sur les entropies phasiques mais seulement sur l'entropie globale du système.

## 2.2 Fermetures entropiques

Définissons le couple entropie, flux d'entropie du système :  $(\eta, f_\eta) = (\sum_k \alpha_k \rho_k s_k, \sum_k \alpha_k \rho_k u_k s_k)$ . A l'aide des équations (19) et (20), on obtient :

$$\partial_t (\eta) + \partial_x (f_\eta) = RHS_\eta \quad (21a)$$

$$\text{avec } RHS_\eta = \sum_k \frac{1}{T_k} \left( \Psi_k - u_k \Lambda_k + \left( \frac{1}{2} u_k^2 - g_k \right) \Gamma_k + p_k \Phi_k + p_I (u_k - u_I) \partial_x (\alpha_k) \right) \quad (21b)$$

Pour fermer le système, nous allons maintenant décomposer  $RHS_\eta$  en différents termes indépendants qui devront être positifs afin d'assurer l'inégalité d'entropie suivante :  $\partial_t (\eta) + \partial_x (f_\eta) > 0$ . Nous faisons ici le choix d'une décomposition en écarts de vitesse, température, pression et enthalpie libre. Ces 4 grandeurs étant indépendantes, nous pourrions tout à fait choisir une autre décomposition faisant intervenir 4 combinaisons indépendantes de ces grandeurs.

$RHS_\eta$  contient de nombreux termes de la forme  $\frac{z_1}{T_1} - \frac{z_2}{T_2}$  qui ne correspondent pas à la décomposition souhaitée. Posons  $\tilde{z} = \theta z_1 + (1 - \theta) z_2$  avec  $\theta \in [0, 1]$ , afin d'utiliser l'identité suivante :

$$\frac{z_1}{T_1} - \frac{z_2}{T_2} = \tilde{z} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) + (z_1 - z_2) \left( \frac{1 - \theta}{T_1} + \frac{\theta}{T_2} \right)$$

Ainsi, on définit :

$$\begin{aligned} \tilde{u} &= \alpha u_1 + (1 - \alpha) u_2 \\ \tilde{p} &= \beta p_1 + (1 - \beta) p_2 \\ \tilde{w}^2 &= \gamma u_1^2 + (1 - \gamma) u_2^2 \\ \tilde{g} &= \delta g_1 + (1 - \delta) g_2 \end{aligned}$$

Et on note :

$$\begin{aligned} u_I &= a u_1 + (1 - a) u_2 \\ p_I &= b p_1 + (1 - b) p_2 \end{aligned}$$

A ce stade, il est important de souligner le fait que les variables  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  d'une part et  $a, b$  d'autre part, ont des statuts très différents dans notre analyse. Les variables  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  restent à définir alors que les variables  $a, b$  sont ici des données. En effet, le caractère linéairement dégénéré du champ associé à  $u_I$  nous fournit 3 choix distincts pour  $a$ . La variable  $b$  est alors déterminée de manière unique par définition de  $p_I$  (équation (19)). Grâce à ces notations, nous pouvons décomposer  $RHS_\eta$  comme annoncé :

$$\begin{aligned}
RHS_\eta = & \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \left\{ \Psi_1 - \tilde{u}\Lambda_1 + \left( \frac{1}{2}\tilde{w}^2 - \tilde{g} \right) \Gamma_1 + \tilde{p}\Phi_1 \right\} \\
& + (u_1 - u_2) \left\{ - \left( \frac{1-\alpha}{T_1} + \frac{\alpha}{T_2} \right) \Lambda_1 + \left( \frac{1-\gamma}{T_1} + \frac{\gamma}{T_2} \right) \mathcal{U}\Gamma_1 + \left( \frac{1-a}{T_1} + \frac{a}{T_2} \right) p_I \partial_x(\alpha_1) \right\} \\
& + (g_1 - g_2) \left\{ - \left( \frac{1-\delta}{T_1} + \frac{\delta}{T_2} \right) \Gamma_1 \right\} \\
& + (p_1 - p_2) \left\{ \left( \frac{1-\beta}{T_1} + \frac{\beta}{T_2} \right) \Phi_1 \right\}
\end{aligned} \tag{22}$$

où on note  $\mathcal{U} = \frac{u_1 + u_2}{2}$ . Pour des raisons de factorisation évidentes, le choix  $\gamma = \alpha = a$  permet alors d'obtenir :

$$\begin{cases} K_T (T_2 - T_1) & = \Psi_1 - u_I \Lambda_1 + \left( \frac{1}{2}\tilde{w}^2 - \tilde{g} \right) \Gamma_1 + \tilde{p}\Phi_1 \\ K_u (u_2 - u_1) & = \Lambda_1 - \mathcal{U}\Gamma_1 - p_I \partial_x(\alpha_1) \\ K_g (g_2 - g_1) & = \Gamma_1 \\ K_p (p_1 - p_2) & = \Phi_1 \end{cases} \tag{23}$$

où  $K_T, K_u, K_g, K_p$  sont des scalaires positifs. Ainsi  $RHS_\eta > 0$  et donc  $(\eta, f_\eta)$  est bien couple entropie, flux d'entropie pour le système (13). En inversant (23), on obtient la forme complète des termes sources et des termes non conservatifs :

$$\begin{cases} \Phi_k & = K_p (p_k - p_j) \\ \Gamma_k & = K_g (g_j - g_k) \\ \Lambda_k - p_I \partial_x(\alpha_k) & = D_k + \mathcal{U}\Gamma_k \\ \Psi_k - u_I p_I \partial_x(\alpha_k) & = Q_k + u_I D_k + (\mathcal{H} + \tilde{g}) \Gamma_k - \tilde{p}\Phi_k \end{cases}, \quad j = 3 - k \tag{24}$$

où  $\mathcal{H} = \frac{u_1 u_2}{2}$  et :

$$\begin{aligned} D_k & = K_u (u_j - u_k) \\ Q_k & = K_T (T_j - T_k) \end{aligned}, \quad j = 3 - k$$

Notons que dans ce cas,  $\alpha$  et  $\gamma \in [0, 1]$  ont été fixés contrairement à  $\beta$  et  $\delta$  qui n'ont pas été déterminés. Chacun de ces quatre choix appelle quelques remarques.

## 2.3 Remarques

### 2.3.1 Choix de $\tilde{p}$ (détermination du coefficient $\beta$ )

Le lecteur attentif aura remarqué que nous avons fait intervenir  $p_I$  lors de la réécriture des lois d'évolution des entropies phasiques dans l'équation (20). Si cela n'avait pas été fait,  $RHS_\eta$  aurait contenu un terme de la forme :

$$\sum_k \frac{1}{T_k} p_k (\Phi_k + (u_k - u_I) \partial_x(\alpha_k))$$

qui se décompose donc de la façon suivante à l'aide d'une unique pression interfaciale  $\tilde{p}$  :

$$\begin{aligned} \sum_k \frac{1}{T_k} p_k (\Phi_k + (u_k - u_I) \partial_x (\alpha_k)) &= \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \{ \tilde{p} \Phi_1 \} \\ &+ (u_1 - u_2) \left\{ \left( \frac{1-a}{T_1} + \frac{a}{T_2} \right) \tilde{p} \partial_x (\alpha_1) \right\} \\ &+ (p_1 - p_2) \left\{ \left( \frac{1-\beta}{T_1} + \frac{\beta}{T_2} \right) \Phi_1 \right\} \\ &+ \left( \frac{(1-\beta)(1-a)}{T_1} - \frac{a\beta}{T_2} \right) (p_1 - p_2) (u_1 - u_2) \partial_x (\alpha_1) \end{aligned}$$

Le dernier terme fait intervenir différents déséquilibres de manière couplée, ce qui n'est pas souhaité dans notre décomposition. Nous allons donc choisir  $\beta$  de manière à ce qu'il soit nul, ce qui donne  $\beta = b$ . Ainsi le choix  $\tilde{p} = p_I$  semble ici naturel mais la caractérisation entropique du système ne l'impose pas comme nous l'avons vu précédemment.

### 2.3.2 Choix de $\tilde{u}$ (détermination du coefficient $\alpha$ )

Nous allons voir que de manière analogue à  $\tilde{p}$ , le choix  $\tilde{u} = u_I$  (c'est à dire  $\alpha = a$ ), bien que naturel, n'est pas imposé par la caractérisation entropique du système. Pour cela, découplons de manière classique les termes sources des termes non conservatifs en posant :

$$\begin{cases} \Lambda_k &= \tilde{\Lambda}_k + p_I \partial_x (\alpha_k) \\ \Psi_k &= \tilde{\Psi}_k + u_I p_I \partial_x (\alpha_k) \end{cases} \quad (25)$$

L'équation d'évolution des entropies phasiques (20) devient :

$$\begin{aligned} \partial_t (\alpha_k \rho_k s_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k s_k) + \frac{1}{T_k} (p_I - p_k) (u_k - u_I) \partial_x (\alpha_k) = \\ \frac{1}{T_k} \left( \tilde{\Psi}_k - u_k \tilde{\Lambda}_k + \left( \frac{1}{2} u_k^2 - g_k \right) \Gamma_k + p_k \Phi_k \right) \end{aligned}$$

d'où :

$$\begin{aligned} RHS_\eta &= \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \left\{ \tilde{\Psi}_1 - \tilde{u} \tilde{\Lambda}_1 + \left( \frac{1}{2} \tilde{w}^2 - \tilde{g} \right) \Gamma_1 + \tilde{p} \Phi_1 \right\} \\ &+ (u_1 - u_2) \left\{ - \left( \frac{1-\alpha}{T_1} + \frac{\alpha}{T_2} \right) \tilde{\Lambda}_1 + \left( \frac{1-\gamma}{T_1} + \frac{\gamma}{T_2} \right) \mathcal{U} \Gamma_1 \right\} \\ &+ (g_1 - g_2) \left\{ - \left( \frac{1-\delta}{T_1} + \frac{\delta}{T_2} \right) \Gamma_1 \right\} \\ &+ (p_1 - p_2) \left\{ \left( \frac{1-\beta}{T_1} + \frac{\beta}{T_2} \right) \Phi_1 \right\} \end{aligned}$$

Et on conclut que  $RHS_\eta > 0$  avec les termes sources suivants :

$$\begin{cases} \Phi_k &= K_p (p_k - p_j) \\ \Gamma_k &= K_g (g_j - g_k) \\ \tilde{\Lambda}_k &= D_k + \left( \frac{1-\alpha}{T_1} + \frac{\alpha}{T_2} \right)^{-1} \left( \frac{1-\gamma}{T_1} + \frac{\gamma}{T_2} \right) \mathcal{U} \Gamma_k \\ \tilde{\Psi}_k &= Q_k + \tilde{u} D_k + \left( \left( \frac{1-\alpha}{T_1} + \frac{\alpha}{T_2} \right)^{-1} \left( \frac{1-\gamma}{T_1} + \frac{\gamma}{T_2} \right) \tilde{u} \mathcal{U} - \frac{1}{2} \tilde{w}^2 + \tilde{g} \right) \Gamma_k - \tilde{p} \Phi_k \end{cases} \quad (26)$$



où  $j = 3 - k$ .

Ainsi ces 2 remarques sur les pressions et vitesses interfaciales montrent bien que la distinction classique entre les fermetures des termes non conservatifs et celles des termes sources n'est pas nécessairement judicieuse. En effet, on voit ici qu'au lieu de faciliter la fermeture du système, elle introduit des degrés de liberté supplémentaires dans celle-ci.

### 2.3.3 Choix de $\tilde{w}$ (détermination du coefficient $\gamma$ )

Nous allons voir ici que le choix  $\gamma = \alpha$  n'est pas seulement naturel : il est imposé par l'invariance galiléenne sur les lois d'évolution des énergies internes. Afin de faciliter les calculs, on sépare à nouveau (équation (25)) les termes non conservatifs des termes sources et on suppose un équilibre thermique et mécanique entre les phases. L'équation (26) nous donne alors :

$$\begin{cases} \Phi_k &= 0 \\ \Gamma_k &= K_g (g_j - g_k) \\ \tilde{\Lambda}_k &= D_k + \mathcal{U}\Gamma_k \\ \tilde{\Psi}_k &= \tilde{u}D_k + (\tilde{u}\mathcal{U} - \frac{1}{2}\tilde{w}^2 + \tilde{g}) \Gamma_k \end{cases}, \quad j = 3 - k \quad (27)$$

Les lois d'évolution des énergies internes (14) deviennent :

$$\begin{aligned} \partial_t (\varepsilon_k) + u_k \partial_x (\varepsilon_k) + \frac{p_k}{\rho_k} \partial_x (u_k) + \frac{1}{\alpha_k \rho_k} p_I (u_k - u_I) \partial_x (\alpha_k) = \\ \frac{1}{\alpha_k \rho_k} \left( (\tilde{u} - u_k) D_k + (\tilde{g} - \varepsilon_k) \Gamma_k + \left( \frac{1}{2} (u_k^2 - \tilde{w}^2) + \mathcal{U} (\tilde{u} - u_k) \right) \Gamma_k \right) \end{aligned} \quad (28)$$

Or un simple calcul nous donne :

$$\frac{1}{2} (u_k^2 - \tilde{w}^2) + \mathcal{U} (\tilde{u} - u_k) = (-1)^k (\alpha - \gamma) \frac{u_1^2 - u_2^2}{2}$$

$\frac{u_1^2 - u_2^2}{2}$  est le seul terme de l'équation (28) à ne pas être un invariant galiléen. La conclusion  $\gamma = \alpha$  s'impose donc.

### 2.3.4 Choix de $\tilde{g}$ (détermination du coefficient $\delta$ )

Cette quatrième et dernière remarque sera la plus courte de toutes. En effet,  $\tilde{g}$  est la seule variable interfaciale pour laquelle la caractérisation entropique du système (13) ne suggère aucune fermeture.

## 2.4 Synthèse

En tenant compte des remarques précédentes, la caractérisation entropique du système (13) nous suggère le modèle bifluide suivant :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & + u_I \partial_x (\alpha_k) & = \Phi_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) & = \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) & - p_I \partial_x (\alpha_k) = D_k + \mathcal{U}\Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & + \partial_x (u_k (\alpha_k \rho_k e_k + \alpha_k p_k)) & - u_I p_I \partial_x (\alpha_k) = Q_k + \tilde{u}D_k + (\mathcal{H} + \tilde{g}) \Gamma_k - \tilde{p}\Phi_k \end{cases}$$

avec :

$$\mathcal{U} = \frac{u_1 + u_2}{2} \quad \mathcal{H} = \frac{u_1 u_2}{2}$$

$$\tilde{u} = u_I \quad \tilde{p} = p_I$$

$$\tilde{g} = \delta g_1 + (1 - \delta) g_2, \quad \delta \in [0, 1]$$

et les termes sources suivants :

$$\begin{cases} \Phi_k &= K_p (p_k - p_j) \\ \Gamma_k &= K_g (g_j - g_k) \\ D_k &= K_u (u_j - u_k) \\ Q_k &= K_T (T_j - T_k) \end{cases}, \quad j = 3 - k$$

Il est important de noter que le choix  $(\tilde{u}, \tilde{p}) = (u_I, p_I)$  est seulement suggéré lors de cette construction, notamment car nous n'avons pas séparé les termes non conservatifs des termes sources. Tout autre choix de la forme  $(\alpha u_1 + (1 - \alpha) u_2, \beta p_1 + (1 - \beta) p_2)$  avec  $\alpha, \beta \in [0, 1]$  préserve le caractère entropique du système, tel le modèle construit dans [10].

## Conclusion

Dans ce travail, nous avons présenté un formalisme général de construction de modèles bifluïdes d'écoulements diphasiques. Il repose sur deux outils fondamentaux présentés dans chacune des deux parties. Le premier est l'opérateur de moyenne statistique qui nous a permis d'établir un système ouvert d'équations régissant l'évolution des grandeurs moyennes de l'écoulement. Le deuxième est la caractérisation entropique du modèle, c'est à dire l'exigence d'un système hyperbolique doté d'une inégalité d'entropie.

Le modèle auquel nous aboutissons diffère sensiblement du modèle proposé par Baer et Nunziato [2] ou, plus récemment, de celui décrit dans [10]. La principale différence réside dans la proposition d'une nouvelle formulation du transfert de masse. Notons d'ailleurs que la modélisation des termes sources n'est pas tout à fait close puisque les scalaires  $K_\phi$  n'ont pas été explicités ici. Ces derniers devraient notamment faire intervenir les échelles de temps de relaxation des différents phénomènes sous-jacents et suggérer leur hiérarchisation. Enfin il est important de souligner que les deux outils évoqués précédemment ne sont pas discriminants lors de la comparaison de ces modèles d'où un enrichissement de la classe des modèles bifluïdes à deux pressions. Seul le traitement conjoint des termes non conservatifs et des termes sources nous suggère des lois de fermeture particulières.

# Bibliographie

- [1] B. Audebert. *Contribution à l'analyse des modèles aux tensions de Reynolds pour l'interaction choc turbulence*. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2006. URL <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00850928>
- [2] M. Baer and J. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6) :861–889, 1986.
- [3] J. B. Bdzil, R. Menikoff, S. F. Son, A. K. Kapila, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : A critical examination of modeling issues. *Physics of Fluids*, 11(2) :378–402, 1999.
- [4] F. Coquel, T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *Comptes Rendus Mathématique*, 334(10) :927–932, 2002.
- [5] D. A. Drew and S. L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer Verlag, 1999.
- [6] A. Favre. Equations des gaz turbulents compressibles. Méthodes des vitesses moyennes, méthode des vitesses macroscopiques pondérées par la masse volumique. *Journal de mécanique*, 4(4) :391, 1965.
- [7] A. Forestier, J.-M. Hérard, and X. Louis. Solveur de type Godunov pour simuler les écoulements turbulents compressibles. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series I - Mathematics*, 324(8) :919–926, 1997.
- [8] T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Numerical Modeling Of Two-Phase Flows Using The Two-Fluid Two-Pressure Approach. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 14(05) :663–700, 2004.
- [9] S. Gavriluk and R. Saurel. Mathematical and Numerical Modeling of Two-Phase Compressible Flows with Micro-Inertia. *Journal of Computational Physics*, 175(1) :326–360, 2002.
- [10] J.-M. Hérard and Y. Liu. Une approche bifluide statistique de modelisation des écoulements diphasiques à phases compressibles. Internal report H-I81-2013-01162-FR, EDF, 2013.
- [11] J.-M. Hérard and H. Lochon. A simple turbulent two-phase flow model. *in preparation*, 2014.
- [12] M. Ishii. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flows*. Collection de la Direction des Etudes et Recherches d'Electricité de France, 1975.
- [13] H. Jin, J. Glimm, and D. H. Sharp. Compressible two-pressure two-phase flow models. *Physics Letters A*, 353(6) :469–474, 2006.

- [14] V. H. Ransom and D. L. Hicks. Hyperbolic two-pressure models for two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 53(1) :124–151, 1984.
- [15] H. B. Stewart and B. Wendroff. Two-phase flow : Models and methods. *Journal of Computational Physics*, 56(3) :363–409, 1984.



## Chapitre 2

# Schémas numériques pour les termes sources des modèles bifluïdes

Ce chapitre est consacré aux schémas numériques dédiés au traitement des termes sources des modèles diphasiques à 2 pressions. De tels modèles peuvent s'écrire sous la forme vectorielle suivante :

$$\partial_t (\mathbf{U}) + \partial_x (\mathbf{F}(\mathbf{U})) + \mathbf{H}(\mathbf{U})\partial_x (\alpha_1) = \mathbf{S}(\mathbf{U})$$

et sont classiquement approximés grâce à une méthode à pas fractionnaires. Dans le cadre de l'utilisation d'une telle méthode, le traitement des termes sources correspond donc à l'approximation du système suivant :

$$\partial_t (\mathbf{U}) = \mathbf{S}(\mathbf{U})$$

Ce dernier est lui-même traité par pas fractionnaires, en consacrant chaque sous-étape à un déséquilibre phasique particulier ce qui permet de respecter l'inégalité d'entropie du système global. Ainsi, 4 sous-étapes se succèdent pour traiter, dans cet ordre, les relaxations en pression, vitesse, température et potentiel chimique. Chaque sous-étape correspond à la résolution d'un système d'équations différentielles ordinaires non-linéaires. Dans chaque cas, la solution d'un tel système est approximée à l'aide d'un schéma implicite car les termes de relaxation sont susceptibles d'être raides. En effet, le pas de temps utilisé dans la méthode à pas fractionnaires est celui issu de la résolution du système convectif homogène.

Les différentes parties de ce chapitre sont donc dédiées aux différentes sous-étapes de traitement des termes sources. Pour chaque effet de relaxation, on exhibe tout d'abord des solutions analytiques particulières. Le schéma numérique implicite correspondant est ensuite présenté en détail. La plupart des schémas sont issus de [65], ou de [28] dans le cas de la relaxation en potentiel chimique, et sont étendus ici à des lois d'états (EOS) de type "Stiffened Gas". La loi d'état revêt une importance capitale dans la non-linéarité des équations différentielles mises en jeu et il convient donc de vérifier que les extensions des schémas à des lois d'états plus complexes préservent les propriétés des schémas initiaux, notamment de positivité des variables thermodynamiques. De plus, ces schémas ont été initialement proposés pour les modèles BN [11] et nous les étendons également au modèle CGHS [24]. En pratique, cela ne concerne que l'étape de relaxation en pression puisqu'elle est la seule faisant intervenir le couple pression-vitesse d'interface. Enfin, des études de convergence sont menées, à l'aide des solutions analytiques particulières exhibées au préalable, pour procéder à la vérification

des différents schémas numériques présentés.

Ce chapitre est paru sous la forme d'un rapport interne EDF H-T61-2015-05315-FR.

# Développement de modèles diphasiques à deux pressions dans Europlexus et vérification numérique - Partie associée aux termes sources

H. Lochon<sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup>EDF R&D, Département AMA, 7 Boulevard Gaspard Monge, 91120 Palaiseau, France

<sup>b</sup>IMSIA, UMR EDF/CNRS/CEA/ENSTA 9219, 828 Boulevard des Maréchaux, 91762 Palaiseau Cedex, France

<sup>c</sup>I2M, UMR CNRS 7373, Technopôle Château-Gombert, 39 rue F. Joliot Curie, 13453 Marseille Cedex 13, France

## Abstract

Cette note constitue la deuxième partie du travail réalisé sur le développement de modèles diphasiques à deux pressions dans le cadre du projet Dynamique Rapide. Dans la note précédente H-T63-2012-01003-FR, la partie convective de ces modèles avait été traitée et nous nous intéressons donc ici à la deuxième et dernière partie, le traitement des termes sources. Comme précédemment, les schémas numériques utilisés seront validés sur des cas-tests disposant de solutions analytiques.

## Introduction

Dans le domaine du nucléaire civil, les écoulements diphasiques surviennent principalement dans des configurations accidentelles au niveau des circuits de refroidissement des centrales de type Réacteur à Eau Pressurisée (REP). Les phénomènes impliqués lors de ces accidents sont souvent rapides, violents, et peuvent causer des dégâts nuisibles à la disponibilité des installations. Il est donc nécessaire de disposer de modèles pouvant représenter ces transitoires thermohydrauliques et les éventuels dommages qu'ils peuvent causer.

Différentes classes de modèles d'écoulements diphasiques compressibles existent dans la littérature et sont utilisés dans des codes développés par EDF ou d'autres acteurs du domaine du nucléaire civil. Nous considérons ici les modèles bifluides à deux pressions basés sur le modèle historique proposé par Baer et Nunziato [1]. Plus précisément, nous nous intéressons à la généralisation de ce modèle proposé par [2] et dont les propriétés mathématiques (hyperbolicité, unicité des relations de sauts, caractérisation entropique...) sont indispensables afin d'assurer la cohérence des simulations numériques.

Le présent travail est dédié au traitement des termes sources du modèle dans le cadre de l'utilisation d'une méthode à pas fractionnaire. Nous reprenons en grande partie les schémas numériques ayant été proposés dans [6] et exhibons des solutions analytiques afin de procéder à la vérification de ces schémas. Ces solutions analytiques ne sont pas disponibles dans la littérature et nous détaillons donc ici leur établissement.

Dans une première partie, nous présentons succinctement les modèles bifluides à deux pressions ainsi que les lois de fermetures associées. Les quatre parties suivantes sont consacrées au traitement de chacun des quatre effets de relaxation contenus dans les termes sources.



Pour chaque effet, un traitement analytique et numérique du système d'équations ordinaires différentielles associé est proposé.

## 1 Modèles bifluïdes d'écoulements diphasiques

### 1.1 Une classe de modèles bifluïdes à deux pressions

Nous considérons la classe de modèles diphasiques à deux pressions s'exprimant sous la forme suivante (en dimension 1 d'espace) :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & + u_I \partial_x (\alpha_k) & = S_{1,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) & = S_{2,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) & - p_I \partial_x (\alpha_k) = S_{3,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & + \partial_x (u_k (\alpha_k \rho_k e_k + \alpha_k p_k)) & - p_I u_I \partial_x (\alpha_k) = S_{4,k} \end{cases} \quad (1)$$

$\alpha_k$  désigne le taux de présence statistique,  $\rho_k$  la densité,  $u_k$  la vitesse,  $p_k$  la pression et  $e_k$  l'énergie totale spécifique de la phase  $k$ ,  $k = 1, 2$ . Cette dernière vérifie la relation suivante :

$$e_k = \frac{1}{2} u_k^2 + \varepsilon_k \quad (2)$$

où  $\varepsilon_k = \varepsilon_k(\rho_k, p_k)$  est l'énergie interne spécifique de la phase  $k$ . On note également  $m_k = \alpha_k \rho_k$  les masses partielles phasiques. La première équation du modèle est redondante pour la deuxième phase puisque les taux de présence de chacune des phases sont reliés par la relation  $\alpha_1 = 1 - \alpha_2$ . On comprend ainsi pourquoi ces modèles sont souvent appelés modèles bifluïdes à 7 équations.

Les lois de fermeture retenues pour le couple vitesse-pression d'interface  $(u_I, p_I)$  sont celles proposées dans [2] :

$$u_I = a u_1 + (1 - a) u_2, \quad a \in \left\{ 0, \frac{m_1}{m_1 + m_2}, 1 \right\} \quad (3)$$

$$p_I = b p_1 + (1 - b) p_2, \quad b = \frac{\frac{1-a}{T_1}}{\frac{1-a}{T_1} + \frac{a}{T_2}} \quad (4)$$

où  $T_k$  est la température de la phase  $k$ . Le choix de la fermeture de  $u_I$  est motivé par l'exigence naturelle que le taux de présence soit porté par un champ linéairement dégénéré. Quant au choix de la fermeture de  $p_I$ , il est motivé par l'existence d'une équation d'entropie conservative pour le système (1). Le cas  $a \in \{0, 1\}$  correspond au modèle historique proposé par Baer et Nunziato [1] et nous l'appellerons modèle BN dans la suite. Le dernier cas,  $a = \frac{m_1}{m_1 + m_2}$ , sera quant à lui appelé modèle CGHS en référence à ses pères [2].

Le système (1) est de type convection-source, nous allons donc utiliser une méthode à pas fractionnaire afin de le simuler numériquement. C'est une méthode classique pour ce type de systèmes qui consiste à traiter les termes convectifs puis les termes sources les uns après les autres à chaque pas de temps. Il est important de noter que, sans travail supplémentaire, une telle méthode est d'ordre 1 en temps quel que soit le traitement de la convection ou des sources.

Dans notre cas, la première étape, dite étape d'évolution, consiste donc à résoudre le système convectif sans terme source ( $S_{i,k} = 0$  pour  $i = 1, 4$ ). Ce système exhibe de nombreuses propriétés mathématiques : il est hyperbolique, doté d'une inégalité d'entropie et muni d'unicques relations de sauts. Ces propriétés ainsi que les schémas numériques utilisés pour cette étape d'évolution sont présentés en détails dans [3, 4]. Il convient de noter qu'une condition de type CFL nous fournit le pas de temps pour cette étape. Nous nous intéressons dans cette note à la deuxième étape, dite étape de relaxation. Notons que, dans cette étape, nous utilisons également le pas de temps imposé par la convection.

## 1.2 Les termes sources

La construction des termes sources du système (1), détaillée dans [7], repose de manière centrale sur l'exigence d'une inégalité d'entropie. Cette construction est également reprise sous une forme sensiblement différente dans [8]. Les termes sources du système (1) prennent donc la forme suivante :

$$\begin{aligned} S_{1,k} &= \Phi_k \\ S_{2,k} &= \Gamma_k \\ S_{3,k} &= D_k + \mathcal{U}\Gamma_k \\ S_{4,k} &= Q_k + \mathcal{U}D_k + \mathcal{H}\Gamma_k - p_I\Phi_k \end{aligned} \quad (5)$$

où  $\mathcal{U} = \frac{u_1 + u_2}{2}$ ,  $\mathcal{H} = \frac{u_1 u_2}{2}$  et les effets de relaxation s'écrivent :

$$\begin{aligned} \Phi_k &= \frac{1}{\tau_p p_{ref}} \alpha_k \alpha_j (p_k - p_j) \\ \Gamma_k &= \frac{1}{\tau_\mu \mu_{ref}} \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} (\mu_j - \mu_k) \\ D_k &= \frac{1}{\tau_u} \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} (u_j - u_k) \\ Q_k &= \frac{1}{\tau_T} \frac{m_k C_{V_k} m_j C_{V_j}}{m_k C_{V_k} + m_j C_{V_j}} (T_j - T_k) \end{aligned} \quad , \quad j = 3 - k \quad (6)$$

Le potentiel chimique  $\mu_k$  de la phase  $k$  vérifie  $\mu_k = \frac{g_k}{T_k}$  où  $g_k = \varepsilon_k + \frac{p_k}{\rho_k} - T_k s_k$  est l'enthalpie de Gibbs spécifique et  $s_k$  l'entropie spécifique.  $\mu_{ref}$  représente donc un potentiel chimique de référence et  $p_{ref}$  une pression de référence. Les capacités calorifiques à volume constant sont notées  $C_{V_k}$ . Les grandeurs  $\tau_\varphi$  sont les temps caractéristiques de retour à l'équilibre pour chacune des grandeurs  $\varphi = p, \mu, u, T$  et sont donc strictement positifs.

Dans le cadre de l'utilisation d'une méthode à pas fractionnaire, l'étape de relaxation consiste donc à résoudre le système d'équations différentielles ordinaires suivant :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) &= S_{1,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) &= S_{2,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) &= S_{3,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) &= S_{4,k} \end{cases} \quad (7)$$

Pour cela, nous subdivisons cette étape de relaxation en 4 sous-étapes où nous traitons indépendamment chacun des 4 effets de relaxation précisés dans l'équation (6) et que nous détaillerons dans les parties suivantes. Nous ne faisons ici aucun choix concernant l'ordre dans lequel nous traitons ces sous-étapes. Ainsi dans la suite, nous utiliserons l'exposant  $\varphi^0$  pour désigner l'état d'une variable  $\varphi$  à l'issue de l'étape précédente et l'exposant  $\varphi^*$  pour désigner l'état de la même variable à l'issue de l'étape en cours de traitement.

### 1.3 Lois d'états de type Stiffened Gas Généralisés

Avant de traiter en détails chacune des sous-étapes de relaxation, nous précisons ici la loi d'état (EOS)  $\varepsilon_k = \varepsilon_k(\rho_k, p_k)$  que nous utiliserons dans tout ce qui suit. Nous supposons donc que chacune des phases de notre écoulement diphasique suit une loi d'état de type Stiffened Gas Généralisés (SGG) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_k = \frac{p_k + \gamma_k p_k^\infty}{(\gamma_k - 1) \rho_k} + q_k \\ T_k = \frac{p_k + p_k^\infty}{C_{V_k} (\gamma_k - 1) \rho_k} \\ s_k = C_{V_k} \ln \left( \frac{p_k + p_k^\infty}{(C_{V_k} (\gamma_k - 1) \rho_k)^{\gamma_k}} \right) + q'_k \end{array} \right. \quad (8)$$

où les grandeurs thermodynamiques  $\gamma_k$ ,  $p_k^\infty$ ,  $C_{V_k}$ ,  $q_k$  et  $q'_k$  sont des constantes.

Les lois SGG ne sont définies que si  $\gamma_k > 1$ ,  $C_{V_k} > 0$ ,  $p_k^\infty > 0$  et  $X_k = p_k + p_k^\infty > 0$  afin de garantir la positivité de certaines grandeurs thermodynamiques. Par ailleurs, dans le cas particulier  $q_k = 0$ , on obtient les lois d'état de type Stiffened Gas (SG). Si de plus on choisit  $p_k^\infty = 0$ , on retrouve les lois d'états de type Gaz Parfaits (GP).

## 2 Relaxation en pression

Le système d'équations correspondant à cette étape est :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_k) = \Phi_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) = -p_I \Phi_k \end{array} \right. \quad (9)$$

avec  $\Phi_k = \frac{1}{\tau_p p_{ref}} \alpha_k \alpha_j (p_k - p_j)$  où  $j = 3 - k$ . On le réécrit de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_k) = \Phi_k \\ \partial_t (m_k) = 0 \\ \partial_t (u_k) = 0 \\ m_k \partial_t (\varepsilon_k) = -p_I \Phi_k \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (10a) \\ (10b) \\ (10c) \\ (10d) \end{array}$$

Par ailleurs, une récente collaboration [5] suggère, sur la base de l'équation de Rayleigh-Plesset-Lamb :

$$\tau_p p_{ref} = \frac{4}{3} \eta l \quad (11)$$

dans le cadre d'écoulements liquide-gaz, où  $\eta_l$  est la viscosité dynamique du liquide. On considérera donc la quantité  $\tau_p p_{ref}$  constante dans la suite.

## 2.1 Etablissement de solutions analytiques

Le système (10) est fortement non-linéaire. Afin d'établir des solutions analytiques particulières d'un tel système, nous nous plaçons dans le cas de 2 gaz parfaits avec  $\gamma_1 = \gamma_2 = 2$  et  $C_{V1} = C_{V2} = C_V$  dans toute cette partie. Ainsi :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_k = \frac{p_k}{\rho_k} \\ T_k = \frac{p_k}{C_V \rho_k} \end{array} \right., \quad k = 1, 2 \quad (12)$$

Tout d'abord, intéressons nous à l'équation (10a). Grâce à nos hypothèses sur les lois d'états, elle s'écrit :

$$\partial_t (\alpha_1) = \frac{1}{\tau_p p_{ref}} (\alpha_2 m_1 \varepsilon_1 - \alpha_1 m_2 \varepsilon_2)$$

Or on note que  $\partial_t (m_1 \varepsilon_1 + m_2 \varepsilon_2) = 0$ . En posant  $E_T = m_1 \varepsilon_1 + m_2 \varepsilon_2$ , on a donc :

$$\partial_t (\alpha_1) = \frac{1}{\tau_p p_{ref}} (m_1 \varepsilon_1 - \alpha_1 E_T) \quad (13)$$

Considérons donc l'équation (10d) afin d'établir la loi d'évolution de la quantité  $m_1 \varepsilon_1$ . Cette dernière dépend du choix de fermeture sur  $p_I$ . Nous allons donc traiter les différents modèles introduits dans la première partie séparément.

### 2.1.1 Cas du modèle CGHS

Pour ce modèle dans le cadre des lois d'états particulières choisies ici, la pression interfaciale s'écrit :

$$p_I = \left( \frac{m_2}{\varepsilon_1} + \frac{m_1}{\varepsilon_2} \right)^{-1} \left( m_2 \frac{m_1}{\alpha_1} + m_1 \frac{m_2}{\alpha_2} \right)$$

On peut donc réécrire l'équation (10d) sous la forme suivante :

$$\left( \frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\frac{m_2}{m_1} \varepsilon_2} \right) \partial_t (\varepsilon_1) + \left( \frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2} \right) \partial_t (\alpha_1) = 0$$

Utilisons les relations  $\alpha_2 = 1 - \alpha_1$  et  $\frac{m_2}{m_1} \varepsilon_2 = \frac{E_T}{m_1} - \varepsilon_1$  afin d'intégrer cette équation. On obtient :

$$\partial_t \left( \frac{\alpha_1 m_1 \varepsilon_1}{\alpha_2 m_2 \varepsilon_2} \right) = 0$$

Dans la suite, on se place dans le cas particulier  $\left(\frac{\alpha_1 m_1 \varepsilon_1}{\alpha_2 m_2 \varepsilon_2}\right)(t_0) = 1$ . On a alors la loi d'évolution suivante pour  $m_1 \varepsilon_1$  :

$$m_1 \varepsilon_1 = (1 - \alpha_1) E_T \quad (14)$$

D'après les relations (13) et (14), on obtient l'équation différentielle suivante :

$$\partial_t (\alpha_1) = \theta (1 - 2\alpha_1) \quad (15)$$

où l'on a posé  $\theta = \frac{E_T}{\tau_p p_{ref}}$ . Nous en déduisons alors la solution analytique de notre cas particulier :

$$\alpha_1(t) = \frac{1}{2} + \left(\alpha_1(t_0) - \frac{1}{2}\right) e^{-2\theta(t-t_0)}$$

avec, d'après l'équation (14), les pressions suivantes :

$$p_1 = E_T \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \quad \text{et} \quad p_2 = E_T \frac{\alpha_1}{\alpha_2}$$

### 2.1.2 Cas du modèle BN

On se place dans le cas  $p_I = p_1$ . Cela permet de réécrire l'équation (10d) sous la forme :

$$\frac{\partial_t (\varepsilon_1)}{\varepsilon_1} + \frac{\partial_t (\alpha_1)}{\alpha_1} = 0$$

qui s'intègre facilement :

$$\partial_t (\alpha_1 \varepsilon_1) = 0$$

Ainsi, on obtient la loi d'évolution suivante pour  $m_1 \varepsilon_1$  :

$$m_1 \varepsilon_1 = \frac{(\alpha_1 m_1 \varepsilon_1)(t_0)}{\alpha_1} \quad (16)$$

Grâce à cette relation (16), l'équation (13) devient :

$$\frac{\alpha_1}{\bar{\alpha}^2 - \alpha_1^2} \partial_t (\alpha_1) = \theta \quad (17)$$

où l'on a posé  $\bar{\alpha} = \frac{(\alpha_1 m_1 \varepsilon_1)(t_0)}{E_T}$  et  $\theta = \frac{E_T}{\tau_p p_{ref}}$  comme précédemment. Une décomposition en éléments simples permet de résoudre facilement l'équation différentielle (17) :

$$\alpha_1(t) = \sqrt{\bar{\alpha}^2 - (\bar{\alpha}^2 - \alpha_1^2(t_0)) e^{-2\theta(t-t_0)}}$$

Les pressions se déduisent alors de l'équation (16) :

$$p_1 = E_T \frac{\bar{\alpha}}{\alpha_1^2} \quad \text{et} \quad p_2 = E_T \frac{\alpha_1 - \bar{\alpha}}{\alpha_1 \alpha_2}$$

Nous disposons ainsi de solutions analytiques du système (10) pour des lois d'états particulières dans le cadre du modèle BN comme dans celui du modèle CGHS. Elles permettront la vérification du schéma numérique proposé dans la suite.

## 2.2 Un schéma d'Euler implicite

Afin de résoudre le système (10), on propose un schéma d'Euler implicite, faisant évoluer la variable  $\varphi$  de  $\varphi^0$  à  $\varphi^*$  sur un pas de temps  $\Delta t$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\alpha_k^* - \alpha_k^0}{\Delta t} = \frac{1}{\tau_p p_{ref}} \alpha_k^* \alpha_j^* (p_k^* - p_j^*) \\ m_k^* = m_k^0 \\ u_k^* = u_k^0 \\ \frac{m_k^* \varepsilon_k^* - m_k^0 \varepsilon_k^0}{\Delta t} = -(b^0 p_1^* + (1 - b^0) p_2^*) \frac{\alpha_k^* - \alpha_k^0}{\Delta t} \end{array} \right. , \quad j = 3 - k \quad (18)$$

Un tel schéma conserve l'énergie totale du mélange par construction. Il est également important de noter que dans le cas du modèle CGHS, la pression interfaciale  $p_I$  n'est pas traitée de manière totalement implicite puisque le coefficient  $b$  qui dépend de la température est traité explicitement.

La résolution du système (18) passe par la résolution d'un système non-linéaire portant sur les inconnues  $\alpha_1^*$ ,  $p_1^*$  et  $p_2^*$ . Nous l'écrivons sous la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{(\tau_p p_{ref})^0}{\Delta t} \frac{\alpha_1^* - \alpha_1^0}{\alpha_1^* (1 - \alpha_1^*)} - (p_1^* - p_2^*) = 0 \\ \gamma_1 (\alpha_1^* - \alpha_1^m) X_1^* - \alpha_1^0 X_1^0 = (1 - b^0) (\gamma_1 - 1) (\alpha_1^* - \alpha_1^0) (p_1^* - p_2^*) \\ -\gamma_2 (\alpha_1^* - \alpha_1^M) X_2^* - \alpha_2^0 X_2^0 = b^0 (\gamma_2 - 1) (\alpha_1^* - \alpha_1^0) (p_1^* - p_2^*) \end{array} \right. \quad (19a)$$

$$\quad \quad \quad (19b)$$

$$\quad \quad \quad (19c)$$

où nous utilisons les notations suivantes :

$$\begin{aligned} X_k &= p_k + p_k^\infty \\ \alpha_1^m &= \frac{(\gamma_1 - 1) \alpha_1^0}{\gamma_1} \quad \text{et} \quad \alpha_1^M = 1 - \frac{(\gamma_2 - 1) \alpha_2^0}{\gamma_2} \end{aligned} \quad (20)$$

Les deux équations (19b) et (19c) constituent un système linéaire en  $p_1^*$  et  $p_2^*$ . Sa résolution permet d'écrire ces pressions comme fonction de la variable  $\alpha_1^*$ . Il est alors possible de réécrire l'équation (19a) sous la forme d'une équation résolvante portant sur  $\alpha_1^*$  :

$$G(\alpha_1^*) = 0 \quad (21)$$

où la fonction  $G$  est définie par :

$$G(\alpha_1^*) = \frac{(\tau_p p_{ref})^0}{\Delta t} \frac{\alpha_1^* - \alpha_1^0}{\alpha_1^* (1 - \alpha_1^*)} - (p_1^*(\alpha_1^*) - p_2^*(\alpha_1^*)) \quad (22)$$

Dans ce qui suit, nous étudions l'existence et l'unicité de solutions de l'équation (21) *dans le cas du modèle CGHS* (i.e.  $b^0 \in ]0, 1[$ ). Ces résultats restent valides dans le cas des modèles BN.

**Proposition 1.** *L'équation  $G(\alpha_1^*) = 0$  admet une solution dans l'intervalle  $]\alpha_1^m, \alpha_1^M[$  et cette solution préserve la positivité de  $X_1$  et  $X_2$ .*

*Proof.* Remarquons tout d'abord que :

$$\alpha_1^m - \alpha_1^0 = -\frac{\alpha_1^0}{\gamma_1} < 0 \quad \text{et} \quad \alpha_1^M - \alpha_1^0 = \frac{\alpha_2^0}{\gamma_2} > 0 \quad (23)$$

et donc  $\alpha_1^M > \alpha_1^m$ . On s'intéresse naturellement aux signes de  $G(\alpha_1^m)$  et  $G(\alpha_1^M)$ . A l'aide de (23), l'équation (19b) donne  $(p_1^*(\alpha_1^m) - p_2^*(\alpha_1^m)) > 0$ . On en déduit alors, en se servant à nouveau de (23), que  $G(\alpha_1^m) < 0$ . Un raisonnement analogue sur l'équation (19c) nous donne  $G(\alpha_1^M) > 0$  d'où l'existence de  $\alpha_1^* \in ]\alpha_1^m, \alpha_1^M[$  tel que  $G(\alpha_1^*) = 0$ .

Il reste à démontrer l'admissibilité des pressions  $p_k^*(\alpha_1^*)$ . D'après l'équation (21), le terme  $(p_1^* - p_2^*)$  est du signe de  $(\alpha_1^* - \alpha_1^0)$ . Par conséquent, le second membre des équations (19b) et (19c) est positif. On en déduit que  $\alpha_1^* > \alpha_1^m$  implique la préservation de la positivité de  $X_1$  et  $\alpha_1^* < \alpha_1^M$  implique la préservation de la positivité de  $X_2$ .  $\square$

**Proposition 2.** *Si l'on suppose de plus que les fonctions  $p_k^*(\alpha_k^*)$  sont strictement décroissantes alors l'équation  $G(\alpha_1^*) = 0$  admet une unique solution dans l'intervalle  $]\alpha_1^m, \alpha_1^M[$ .*

*Proof.* Par hypothèse, la fonction  $(p_1^*(\alpha_1^*) - p_2^*(\alpha_1^*))$  est strictement décroissante. Il reste à remarquer que la fonction  $\frac{\alpha_1^* - \alpha_1^0}{\alpha_1^*(1 - \alpha_1^*)}$  est strictement croissante sur  $]0, 1[$  et on en déduit que la fonction  $G(\alpha_1^*)$  est strictement croissante d'où le résultat.  $\square$

On laissera au lecteur le soin de résoudre le système linéaire en  $(p_1^*, p_2^*)$  formé des deux équations (19b) et (19c) pour des lois d'états de type Gaz Parfait ( $p_k^\infty = 0$ ). Il est alors facile de vérifier que les fonctions  $p_k^*(\alpha_k^*)$  sont strictement décroissantes dans ce cas.

### 2.3 Vérification numérique

Le schéma proposé ci-dessus a été implémenté dans *Europlexus*. Nous utilisons les solutions analytiques présentées dans le paragraphe 2.1 afin de vérifier ces développements. Ainsi les paramètres des lois d'états très particulières utilisées dans ce cas sont présentés dans la table 1. Nous utilisons les mêmes conditions initiales pour les modèles BN et CGHS mais il convient de se rappeler que les solutions analytiques diffèrent. Ces conditions initiales sont détaillées dans la table 2. Enfin, le temps de relaxation  $\tau_p$  ainsi que la pression de référence  $p_{ref}$  sont choisis d'après l'équation (11) avec  $\eta_l = 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ .

Les figures 1 et 2 présentent les résultats des études de convergence pour chacun des modèles. Nous retrouvons une convergence d'ordre 1 en temps dans chacun des cas comme attendu ce qui achève la vérification de cette étape de relaxation en pression.

	$\gamma_k$	$p_k^\infty$ (en Pa)	$q_k$ (en J.kg <sup>-1</sup> )	$C_{V_k}$ (en J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	$q'_k$ (en J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
<b>phase 1</b>	2	0	0	1500	0
<b>phase 2</b>	2	0	0	1500	0

TABLE 1 – Paramètres thermodynamiques des Stiffened Gas Généralisés

	$\alpha_k$	$\rho_k$ (en kg.m <sup>-3</sup> )	$p_k$ (en Pa)	$u_k$ (en m.s <sup>-1</sup> )
<b>phase 1</b>	0.8	2	100000	50
<b>phase 2</b>	0.2	1000	1600000	-20

TABLE 2 – Conditions initiales

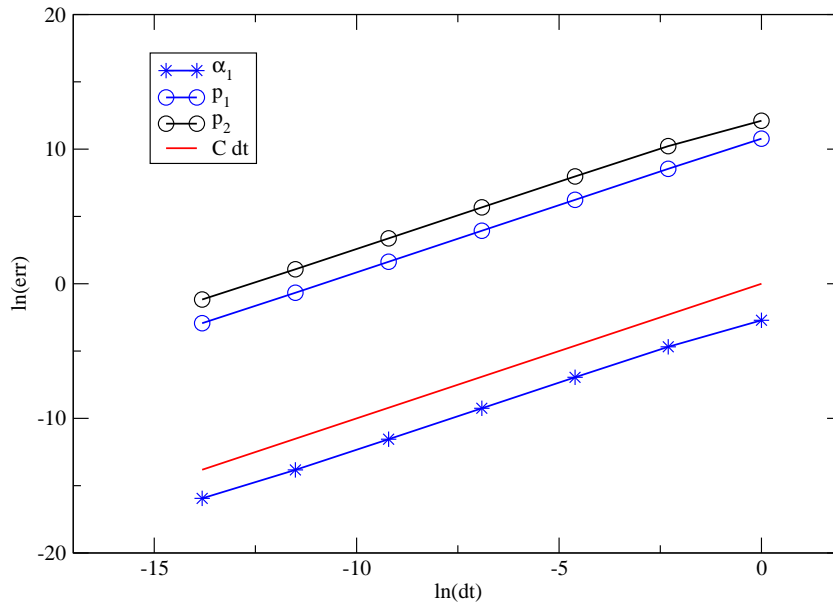


FIGURE 1 – Etude de convergence de l'étape de relaxation en pression pour le modèle BN : norme  $L1$  de l'erreur à  $t_f = 10^{-9}$  s en fonction du pas de temps



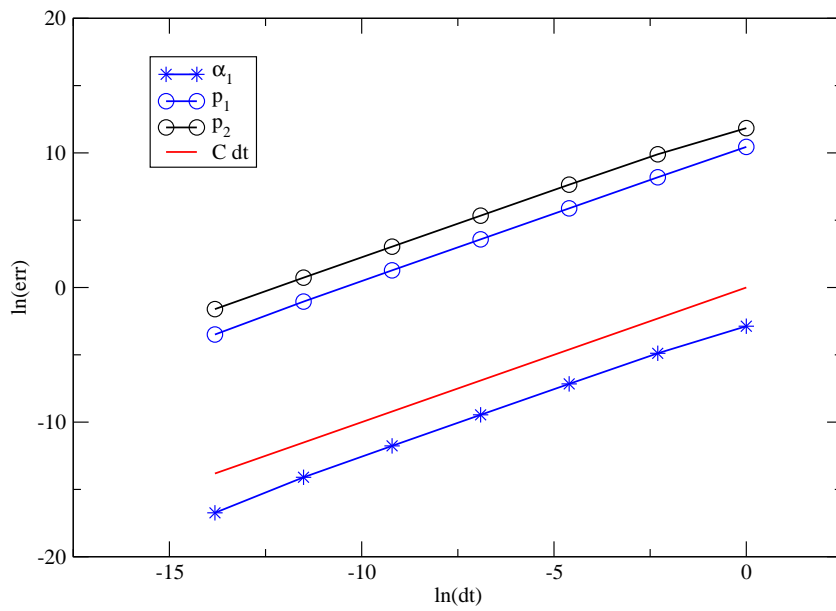


FIGURE 2 – Etude de convergence de l'étape de relaxation en pression pour le modèle CGHS : norme  $L1$  de l'erreur à  $t_f = 10^{-9}$  s en fonction du pas de temps

### 3 Relaxation en vitesse

Le système d'équations correspondant à cette étape est :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_k) = 0 \\ \partial_t (m_k) = 0 \\ \partial_t (m_k u_k) = D_k \\ \partial_t (m_k e_k) = \mathcal{U} D_k \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (24a) \\ (24b) \\ (24c) \\ (24d) \end{array}$$

avec  $\mathcal{U} = \frac{u_1 + u_2}{2}$  et  $D_k = \frac{1}{\tau_u} \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} (u_j - u_k)$  où  $j = 3 - k$ .

#### 3.1 Etablissement de solutions analytiques

Afin de résoudre le système (24), intéressons nous tout d'abord à l'équation (24c). Cette dernière nous donne

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (m_1 u_1 + m_2 u_2) = 0 \\ \partial_t (u_r) = -\frac{1}{\tau_u} u_r \end{array} \right.$$

où on a introduit  $u_r = u_1 - u_2$ . Dans le cas où  $\tau_u$  est constant, on en déduit facilement l'évolution des vitesses :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (u_1) = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \partial_t (u_r) \\ \partial_t (u_2) = -\frac{m_1}{m_1 + m_2} \partial_t (u_r) \end{array} \right. \quad (25)$$

avec  $u_r(t) = u_r(t_0) e^{-(t-t_0)/\tau_u}$ .

On peut également exprimer l'évolution des énergies internes à l'aide de  $u_r$ . Pour cela, commençons par réécrire l'équation (24d) :

$$\partial_t (m_k \varepsilon_k) = \mathcal{U} \partial_t (m_k u_k) - \partial_t \left( \frac{1}{2} m_k u_k^2 \right)$$

On en déduit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (m_1 \varepsilon_1) = -\frac{1}{2} m_1 u_r \partial_t (u_1) \\ \partial_t (m_2 \varepsilon_2) = \frac{1}{2} m_2 u_r \partial_t (u_2) \end{array} \right.$$

L'équation (25) nous permet de conclure :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\varepsilon_1) = -\frac{1}{4} \frac{m_2}{m_1 + m_2} \partial_t (u_r^2) \\ \partial_t (\varepsilon_2) = -\frac{1}{4} \frac{m_1}{m_1 + m_2} \partial_t (u_r^2) \end{array} \right. \quad (26)$$

Ainsi, nous pouvons intégrer de manière exacte le système d'équations différentielles ordinaires (24) dans le cas où  $\tau_u$  est constant. Cela nous conduit à la proposition d'un schéma numérique.

### 3.2 Un schéma de discrétisation

Afin de résoudre le système (24), on propose le schéma numérique suivant, faisant évoluer la variable  $\varphi$  de  $\varphi^0$  à  $\varphi^*$  sur un pas de temps  $\Delta t$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_k^* = \alpha_k^0 \\ m_k^* = m_k^0 \\ u_k^* = u_k^0 - \frac{m_j^0}{m_k^0 + m_j^0} \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_u}\right) (u_k^0 - u_j^0) \\ \varepsilon_k^* = \varepsilon_k^0 + \frac{1}{4} \frac{m_j^0}{m_k^0 + m_j^0} \left(1 - e^{-2\Delta t/\tau_u}\right) (u_k^0 - u_j^0)^2 \end{array} \right. , \quad j = 3 - k \quad (27)$$

Il correspond bien à une intégration exacte du système (24) dans le cas où  $\tau_u$  est constant.

## 4 Relaxation en température

Le système d'équations correspondant à cette étape est :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_k) = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) = Q_k \end{array} \right. \quad (28)$$

avec  $Q_k = \frac{1}{\tau_T} \frac{m_k C_{V_k} m_j C_{V_j}}{m_k C_{V_k} + m_j C_{V_j}} (T_j - T_k)$  où  $j = 3 - k$ . On le réécrit de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_k) = 0 \\ \partial_t (m_k) = 0 \\ \partial_t (u_k) = 0 \\ \partial_t (m_k \varepsilon_k) = Q_k \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (29a) \\ (29b) \\ (29c) \\ (29d) \end{array}$$

### 4.1 Etablissement de solutions analytiques

D'après l'équation (29b), on a  $\partial_t (\rho_k) = 0$ . Pour des lois d'états de type Stiffened Gas Généralisés, cela entraîne :  $\partial_t (\varepsilon_k) = C_{V_k} \partial_t (T_k)$ . Cela permet de réécrire l'équation (29d) sous la forme :

$$m_k C_{V_k} \partial_t (T_k) = \frac{1}{\tau_T} \frac{m_k C_{V_k} m_j C_{V_j}}{m_k C_{V_k} + m_j C_{V_j}} (T_j - T_k) \quad (30)$$

On en déduit alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (m_1 C_{V_1} T_1 + m_2 C_{V_2} T_2) = 0 \\ \partial_t (T_r) = -\frac{1}{\tau_T} T_r \end{array} \right.$$

où on a introduit l'écart de température  $T_r = T_1 - T_2$ . Dans le cas où  $\tau_T$  est constant, on obtient facilement l'évolution des températures :

$$\begin{cases} \partial_t(T_1) &= \frac{m_2 C_{V2}}{m_1 C_{V1} + m_2 C_{V2}} \partial_t(T_r) \\ \partial_t(T_2) &= -\frac{m_1 C_{V1}}{m_1 C_{V1} + m_2 C_{V2}} \partial_t(T_r) \end{cases} \quad (31)$$

avec  $T_r(t) = T_r(t_0)e^{-(t-t_0)/\tau_T}$ . Cela nous conduit à la proposition du schéma numérique suivant.

## 4.2 Un schéma de discrétisation

Afin de résoudre le système (29), on propose le schéma numérique suivant, faisant évoluer la variable  $\varphi$  de  $\varphi^0$  à  $\varphi^*$  sur un pas de temps  $\Delta t$  :

$$\begin{cases} \alpha_k^* &= \alpha_k^0 \\ m_k^* &= m_k^0 \\ u_k^* &= u_k^0 \\ T_k^* &= T_k^0 - \frac{m_j^0 C_{Vj}}{m_k^0 C_{Vk} + m_j^0 C_{Vj}} (1 - e^{-\Delta t/\tau_T}) (T_k^0 - T_j^0) \end{cases}, \quad j = 3 - k \quad (32)$$

Il correspond à une intégration exacte du système (29) dans le cas où  $\tau_T$  est constant.

## 5 Relaxation en potentiel chimique

Le système d'équations correspondant à cette étape est :

$$\begin{cases} \partial_t(\alpha_k) &= 0 \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k) &= \Gamma_k \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k u_k) &= \mathcal{U} \Gamma_k \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k e_k) &= \mathcal{H} \Gamma_k \end{cases} \quad (33)$$

avec  $\mathcal{U} = \frac{u_1 + u_2}{2}$ ,  $\mathcal{H} = \frac{u_1 u_2}{2}$  et  $\Gamma_k = \frac{1}{\tau_\mu \mu_{ref}} \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} (\mu_j - \mu_k)$  où  $j = 3 - k$ . On le réécrit de la manière suivante :

$$\begin{cases} \partial_t(\alpha_k) &= 0 & (34a) \\ \partial_t(m_k) &= \Gamma_k & (34b) \\ \partial_t(m_k u_k) &= \mathcal{U} \Gamma_k & (34c) \\ \partial_t(m_k \varepsilon_k) &= 0 & (34d) \end{cases}$$

De manière analogue à ce qui a été fait pour la relaxation en pression, on supposera la quantité  $\tau_\mu \mu_{ref}$  constante dans la suite.

## 5.1 Etablissement de solutions analytiques

Afin d'établir des solutions analytiques particulières du système (34), nous nous plaçons dans le cas de 2 Stiffened Gas avec  $q_1 = q_2 = 0$  et  $\gamma_1 C_{V1} = \gamma_2 C_{V2} = C_P$  dans toute cette partie. On en déduit que  $\partial_t(p_k) = 0$  d'après l'équation (34d). Cela nous permet d'écrire les potentiels chimiques sous la forme :

$$\mu_k = C_P + C_P \ln(m_k) - s_k^0 \quad (35)$$

où nous définissons  $s_k^0$  de la manière suivante :

$$s_k^0 = C_{V_k} \ln \left( \frac{(p_k + p_k^\infty) \alpha_k^{\gamma_k}}{(C_{V_k} (\gamma_k - 1))^{\gamma_k}} \right) + q'_k$$

Notons que cette quantité est constante.

Intéressons nous maintenant à l'équation (34b). Remarquons tout d'abord que  $\partial_t(m_1 + m_2) = 0$ . On introduit donc la notation  $M_T = m_1 + m_2$ . A l'aide de l'équation (35), on peut alors réécrire l'équation (34b) de la manière suivante :

$$(\tau_\mu \mu_{ref}) \frac{M_T}{m_1} \frac{\partial_t(m_1)}{(M_T - m_1)} = C_P (\ln(M_T - m_1) - \ln(m_1)) + (s_1^0 - s_2^0)$$

Cela nous conduit à introduire la grandeur  $f = \ln \left( \frac{m_1}{M_T - m_1} \right)$ . Elle vérifie l'équation différentielle suivante :

$$(\tau_\mu \mu_{ref}) \partial_t(f) = -C_P f + (s_1^0 - s_2^0) \quad (36)$$

On en déduit alors l'évolution des masses partielles :

$$\begin{cases} m_1 &= M_T \frac{1}{1 + e^{-f}} \\ m_2 &= M_T \frac{1}{1 + e^f} \end{cases}$$

$$\text{avec } f(t) = \frac{s_1^0 - s_2^0}{C_P} + \left( \ln \left( \frac{m_1(t_0)}{m_2(t_0)} \right) - \frac{s_1^0 - s_2^0}{C_P} \right) e^{-C_P(t - t_0)/(\tau_\mu \mu_{ref})}.$$

Il ne nous reste plus qu'à établir l'équation d'évolution des vitesses à partir de l'équation (34c). Bien évidemment,  $\partial_t(m_1 u_1 + m_2 u_2) = 0$  et on pose donc  $Q_T = m_1 u_1 + m_2 u_2$ . Réécrivons l'équation (34c) sous la forme :

$$\partial_t(u_k) = (U - u_k) \partial_t(\ln m_k)$$

On en déduit l'équation différentielle suivante, portant sur la variable  $u_r = u_1 - u_2$  introduite précédemment :

$$\partial_t(u_r) = -\frac{1}{2} u_r \partial_t(\ln(m_1 m_2)) \quad (37)$$

Ainsi les vitesses vérifient :

$$\begin{cases} u_1 = \frac{Q_T}{M_T} + \frac{m_2}{M_T} u_r \\ u_2 = \frac{Q_T}{M_T} - \frac{m_1}{M_T} u_r \end{cases}$$

avec  $u_r(t) = u_r(t_0) \sqrt{\frac{m_1(t_0) m_2(t_0)}{m_1(t) m_2(t)}}$ .

On dispose ainsi de solutions analytiques du système (34) qui permettront la vérification du schéma numérique proposé dans la suite.

## 5.2 Un schéma d'Euler implicite

Afin de résoudre le système (34), on propose un schéma d'Euler implicite, faisant évoluer la variable  $\varphi$  de  $\varphi^0$  à  $\varphi^*$  sur un pas de temps  $\Delta t$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_k^* = \alpha_k^0 \end{array} \right. \quad (38a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{m_k^* - m_k^0}{\Delta t} = \frac{1}{\tau_\mu \mu_{ref}} \frac{m_k^* m_j^*}{m_k^* + m_j^*} (\mu_j^* - \mu_k^*) \end{array} \right. \quad (38b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{m_k^* u_k^* - m_k^0 u_k^0}{\Delta t} = \frac{u_k^* + u_j^*}{2} \frac{m_k^* - m_k^0}{\Delta t} \end{array} \right. \quad (38c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} m_k^* \varepsilon_k^* = m_k^0 \varepsilon_k^0 \end{array} \right. \quad (38d)$$

On réécrit l'équation (38b) sous la forme :

$$H(m_1^*) = 0 \quad (39)$$

où nous utilisons les notations suivantes :

$$H(m_1^*) = M_T \frac{\tau_\mu \mu_{ref}}{\Delta t} \frac{m_1^* - m_1^0}{m_1^* (M_T - m_1^*)} + (\mu_1^*(m_1^*) - \mu_2^*(M_T - m_1^*)) \quad (40)$$

$$M_T = m_1^0 + m_2^0$$

L'écriture de  $\mu_k^*$  comme seule fonction de la variable  $m_k^*$  est possible grâce aux équations (38a) et (38d). En effet, on a :

$$\mu_k^* = \mu_k^*(\rho_k^*, \varepsilon_k^*) = \mu_k^* \left( \frac{m_k^*}{\alpha_k^0}, \frac{m_k^0 \varepsilon_k^0}{m_k^*} \right)$$

Ainsi l'équation (39) est une équation résolvante non-linéaire portant sur  $m_1^*$ . Une fois cette dernière résolue, il convient de calculer  $u_k^*$  à l'aide de l'équation (38c). On a le système linéaire suivant :

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} (m_1^* + m_1^0) & -(m_1^* - m_1^0) \\ -(m_2^* - m_2^0) & (m_2^* + m_2^0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^* \\ u_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1^0 u_1^0 \\ m_2^0 u_2^0 \end{pmatrix} \quad (41)$$

Son discriminant s'écrit :

$$\Delta = \frac{m_1^0 m_2^* + m_2^0 m_1^*}{2}$$

Il est strictement positif. On en déduit alors les vitesses :

$$\begin{cases} u_1^* = \frac{1}{\Delta} \left( m_2^* m_1^0 u_1^0 + \frac{1}{2} (m_1^* - m_1^0) (m_1^0 u_1^0 + m_2^0 u_2^0) \right) \\ u_2^* = \frac{1}{\Delta} \left( m_1^* m_2^0 u_2^0 + \frac{1}{2} (m_2^* - m_2^0) (m_1^0 u_1^0 + m_2^0 u_2^0) \right) \end{cases} \quad (42)$$

Toute la difficulté du schéma réside donc dans la résolution de l'équation (39). On démontre le résultat suivant :

**Proposition 3.** *L'équation  $H(m_1^*) = 0$  admet une unique solution assurant la positivité des masses partielles et des températures.*

*Proof.* Intéressons-nous tout d'abord aux contraintes de positivité. Pour cela, exprimons les températures en fonction des masses partielles :

$$T_k^*(m_k^*) = \frac{1}{C_{V_k}} \left( \frac{m_k^0 \varepsilon_k^0 - \alpha_k^0 p_k^\infty}{m_k^*} - q_k \right)$$

Dans le cas où  $q_k \neq 0$ , on introduit la grandeur  $\varphi_k$  définie par :

$$\varphi_k = \frac{m_k^0 \varepsilon_k^0 - \alpha_k^0 p_k^\infty}{q_k}$$

Cela permet de réécrire les températures de la manière suivante :

$$T_k^*(m_k^*) = \frac{q_k}{C_{V_k} m_k^*} (\varphi_k - m_k^*)$$

On en déduit les intervalles  $I_k$  assurant respectivement la positivité des températures  $T_k^*$  :

$$I_1 = \begin{cases} ]0, \varphi_1[ & \text{si } q_1 > 0 \\ ]0, +\infty[ & \text{si } q_1 = 0 \\ ]\varphi_1^+, +\infty[ & \text{si } q_1 < 0 \end{cases} \quad \text{et} \quad I_2 = \begin{cases} ](M_T - \varphi_2)^+, +\infty[ & \text{si } q_2 > 0 \\ ]0, +\infty[ & \text{si } q_2 = 0 \\ ]0, (M_T - \varphi_2)[ & \text{si } q_2 < 0 \end{cases}$$

où on utilise la notation classique  $\psi^+ = \max(0, \psi)$ . Nous pouvons alors introduire l'intervalle  $]m_1^{\min}, m_1^{\max}[$  assurant la positivité des masses partielles et des températures :

$$]m_1^{\min}, m_1^{\max}[ = ]0, M_T[ \cap I_1 \cap I_2$$

Une disjonction de cas, qui ne sera pas détaillée ici dans un souci de simplicité, nous permet de montrer que  $]m_1^{\min}, m_1^{\max}[ \neq \emptyset$ . Elle permet également d'obtenir les limites suivantes :

$$\lim_{m_1^* \rightarrow m_1^{\min}} (\mu_1^*(m_1^*) - \mu_2^*(M_T - m_1^*)) = -\infty \quad \text{et} \quad \lim_{m_1^* \rightarrow m_1^{\max}} (\mu_1^*(m_1^*) - \mu_2^*(M_T - m_1^*)) = +\infty$$

sachant que :

$$\begin{aligned} \mu_k^*(m_k^*) &= \gamma_k C_{V_k} + \frac{q_k}{T_k^*(m_k^*)} - C_{V_k} \ln(T_k^*(m_k^*)) + (\gamma_k - 1) C_{V_k} \ln(m_k^*) \\ &\quad + (\gamma_k - 1) C_{V_k} \ln\left((\gamma_k - 1) C_{V_k} \frac{1}{\alpha_k^0}\right) - q_k' \end{aligned}$$

Cela permet d'en déduire :

$$\lim_{m_1^* \rightarrow m_1^{min}} H(m_k^*) = -\infty \quad \text{et} \quad \lim_{m_1^* \rightarrow m_1^{max}} H(m_k^*) = +\infty$$

Ainsi la fonction continue  $H$  admet au moins un zéro sur  $]m_1^{min}, m_1^{max}[$ .

Intéressons-nous ensuite à la monotonie de  $H$  afin d'en déduire l'unicité d'un tel zéro. Pour cela, on dérive la fonction  $\mu_k^*(m_k^*)$  :

$$\mu_k^{*'}(m_k^*) = \frac{(\gamma_k - 1) C_{V_k}}{m_k^*} + \frac{1}{C_{V_k} (T_k^*(m_k^*))^2} \frac{(m_k^0 \varepsilon_k^0 - \alpha_k^0 p_k^\infty)^2}{m_k^{*3}}$$

Ainsi la fonction  $\mu_k^*(m_k^*)$  est strictement croissante sur  $]m_1^{min}, m_1^{max}[$ . En remarquant que la fonction  $\frac{m_1^* - m_1^0}{m_1^*(M_T - m_1^*)}$  est strictement croissante sur  $]0, M_T[$ , on conclut que  $H(m_1^*)$  est strictement croissante sur  $]m_1^{min}, m_1^{max}[$  et admet un unique zéro dans cet intervalle. □

### 5.3 Vérification numérique

Afin de vérifier le schéma d'Euler proposé précédemment et implémenté dans *Europlexus*, nous utilisons les solutions analytiques qui ont été détaillées dans le paragraphe 5.1. Ainsi le cas-test de vérification fait intervenir deux Stiffened Gas dont les caractéristiques thermodynamiques sont rappelées dans la table 3. On fixe le temps de relaxation et le potentiel chimique de référence aux valeurs suivantes :  $\tau_\mu = 10^{-3}$  s et  $\mu_{ref} = 10^4$  J.kg<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>. Enfin, la table 4 présente les conditions initiales du cas-test.

Ainsi que le montre la figure 3, nous retrouvons une convergence d'ordre 1 en temps comme attendu pour un schéma d'Euler.



	$\gamma_k$	$p_k^\infty$ (en Pa)	$q_k$ (en J.kg <sup>-1</sup> )	$C_{V_k}$ (en J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	$q'_k$ (en J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
<b>phase 1</b>	1.4	100000	0	3125	2000
<b>phase 2</b>	2.5	7000000	0	1750	25000

TABLE 3 – Paramètres thermodynamiques des Stiffened Gas Généralisés

	$\alpha_k$	$\rho_k$ (en kg.m <sup>-3</sup> )	$p_k$ (en Pa)	$u_k$ (en m.s <sup>-1</sup> )
<b>phase 1</b>	0.2	2.5	2800000	50
<b>phase 2</b>	0.8	995	3400000	20

TABLE 4 – Conditions initiales

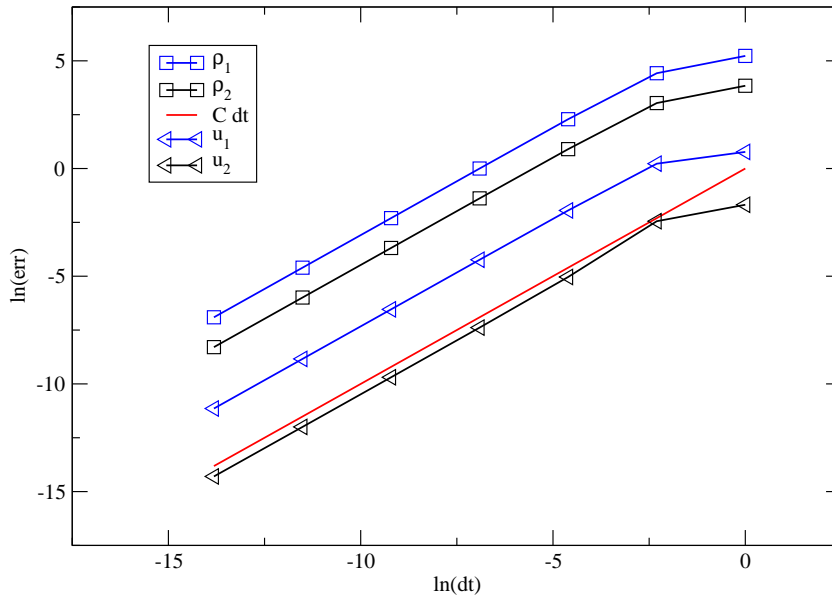


FIGURE 3 – Etude de convergence de l'étape de relaxation en potentiel chimique : norme  $L1$  de l'erreur à  $t_f = 5 \times 10^{-3}$  s en fonction du pas de temps

## Conclusion

Dans ce travail, nous avons présenté l'étape de relaxation d'une méthode à pas fractionnaire dans le cadre de modèles bifluides d'écoulements diphasiques. Cette étape est subdivisée en quatre sous-étapes traitant chacun des déséquilibres entre phases. Pour chaque sous-étape, nous avons présenté un schéma numérique ainsi que des solutions analytiques afin de procéder à la vérification de ce dernier. Ces schémas numériques, issus de [6] pour la plupart, ont été généralisés à des lois d'états de type Stiffened Gas Généralisés pour les deux phases. Il est important de noter que les temps de relaxation ont toujours été considérés comme des constantes dans ce travail bien que cela soit une approximation importante des phénomènes physiques sous-jacents. Cependant il est aisé d'étendre les schémas proposés à des échelles de temps non constantes en les traitant de manière explicite.

L'étape de relaxation a également été étendue au modèle proposé par [2] avec la proposition d'un nouveau schéma de relaxation en pression dédié à ce modèle. Pour cela, il est nécessaire de prendre en compte une pression interfaciale couplant les deux phases ce qui augmente la complexité de l'approche par rapport au modèle décentré historique de Baer et Nunziato [1]. Grâce à ce nouveau schéma, nous sommes donc en mesure de comparer les différents modèles en tenant compte des effets de relaxation. Ce dernier point est crucial puisque ces effets contribuent à diminuer les écarts entre les modèles à la différence des effets convectifs.

## Annexe A

### Un schéma explicite pour la relaxation en potentiel chimique

Cette annexe consiste en un bref rappel d'un autre schéma traitant la relaxation en potentiel chimique. Ce schéma est antérieur à celui présenté dans le paragraphe 5.2. Il traite de manière explicite l'écart entre les potentiels chimiques des deux phases d'où une relative faible précision du schéma. C'est d'ailleurs ce qui a motivé la proposition d'un schéma d'Euler traitant ce déséquilibre de manière implicite.

Ce schéma résout de manière exacte l'approximation suivante du système d'équations différentielles ordinaires (34) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_k) = 0 \\ \partial_t (m_k) = \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} G_k \\ \partial_t (m_k u_k) = \frac{u_1 + u_2}{2} \partial_t (m_k) \\ \partial_t (m_k \varepsilon_k) = 0 \end{array} \right. , \quad j = 3 - k$$

où  $G_k$  sont des constantes traitant explicitement les potentiels chimiques des deux phases et vérifiant  $\sum_k G_k = 0$ .

La résolution de ce système n'est pas détaillée ici ; elle utilise les mêmes ingrédients que l'établissement de solutions analytiques réalisé dans le paragraphe 5.1. Nous obtenons alors le schéma suivant, faisant évoluer la variable  $\varphi$  de  $\varphi^0$  à  $\varphi^*$  sur un pas de temps  $\Delta t$  de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_k^* = \alpha_k^0 \\ m_k^* = \frac{m_k^0 + m_j^0}{\frac{m_j^0}{m_k^0} e^{-G_k^0 \Delta t} + 1} \\ u_k^* = \frac{m_k^0 u_k^0 + m_j^0 u_j^0}{m_k^0 + m_j^0} + \frac{m_j^*}{m_k^0 + m_j^0} (u_k^0 - u_j^0) \sqrt{\frac{m_k^0 m_j^0}{m_k^* m_j^*}} \\ \varepsilon_k^* = \frac{m_k^0 \varepsilon_k^0}{m_k^*} \end{array} \right. , \quad j = 3 - k$$

$$\text{avec } G_k^0 = \frac{\mu_j^0 - \mu_k^0}{\tau_\mu \mu_{ref}}$$

# Bibliographie

- [1] M. Baer and J. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6) :861–889, 1986.
- [2] F. Coquel, T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *Comptes Rendus Mathématique*, 334(10) :927–932, 2002.
- [3] F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, P. Helluy, J.-M. Hérard, O. Hurisse, and Y. Liu. Approximate solutions of the Baer-Nunziato Model. *ESAIM : Proceedings*, 40 :63–82, 2013.
- [4] F. Daude and P. Galon. Développement d’un modèle diphasique à deux pressions dans Europlexus et vérifications numériques - Partie convective. Internal report H-T63-2012-01003-FR, EDF, 2012.
- [5] S. Gavrilyuk. The structure of pressure relaxation terms : one-velocity case. Internal report H-I83-2014-00276-EN, EDF R&D, 2014.
- [6] J.-M. Hérard and O. Hurisse. A fractional step method to compute a class of compressible gas-liquid flows. *Computers & Fluids*, 55 :57–69, 2012.
- [7] J.-M. Hérard and Y. Liu. Une approche bifluide statistique de modélisation des écoulements diphasiques à phases compressibles. Internal report H-I81-2013-01162-FR, EDF, 2013.
- [8] H. Lochon. Modélisation d’écoulements diphasiques : fermetures entropiques de modèles bifluides. Internal report H-T63-2014-10406-FR, EDF, 2014.



## Chapitre 3

# Comparaison de modèles bifluides pour les transitoires eau-vapeur

Ce chapitre est dédié à la comparaison de modèles bifluides sur des applications transitoires d'écoulements eau-vapeur. Les différents modèles étudiés ici, au nombre de trois, sont présentés sous un même formalisme afin de souligner leurs propriétés communes. En effet, ces trois modèles appartiennent à la classe des modèles bifluides à deux pressions et remplissent deux critères fondamentaux. Ces modèles sont :

- dotés d'une inégalité d'entropie,
- munis de relations de sauts uniques à la traversée de chacune des ondes.

Ces deux critères imposent des fermetures particulières pour le couple pression-vitesse d'interface des modèles bifluides à deux pressions. Parmi ces fermetures, on retrouve les modèles "décentrés" de type Baer-Nunziato [11] (au nombre de deux, désignés par BN1 et BN2 dans la suite) ainsi que le modèle proposé plus récemment par Coquel *et al.* [24] (modèle CGHS).

Les trois modèles étudiés sont très différents du point de vue purement convectif comme nous le soulignons et l'illustrons dans la suite. Cependant, les effets de relaxation, en pression et vitesse notamment, contenus dans les termes sources, tendent à réduire les écarts entre les différentes fermetures et donc les différents modèles. Ainsi la prise en compte la plus réaliste possible des effets de relaxation est primordiale afin de comparer les différents modèles sur des applications eau-vapeur. Pour cela, des évaluations des échelles de temps de relaxation en pression et vitesse basées sur le comportement d'une bulle en milieu infini sont proposées. En outre, il est également important de réduire au maximum les erreurs numériques associées à la discrétisation des équations pour que la comparaison reste une comparaison de modèles, indépendante des schémas numériques utilisés. Une vérification approfondie de chaque schéma numérique, avec études de convergence à l'appui, est donc effectuée.

Les applications sélectionnées pour cette comparaison sont deux cas classiques de transitoires eau-vapeur pour lesquelles des données expérimentales sont disponibles. Le premier cas est l'expérience de coup de bélier de Simpson [107] où la propagation d'ondes de choc dans une tuyauterie en présence de changement de phase est étudiée. Le second cas est l'expérience Canon menée par Riegel [97] afin d'étudier la brusque dépressurisation d'une tuyauterie d'eau chaude. Cette dernière entraîne la propagation d'un front de vaporisation le long de la tuyau-

terie et donc le passage d'un régime de phase évanescence à l'autre. Dans les deux cas, les résultats convergés des différents modèles sont extrêmement proches et montrent un bon accord avec les résultats expérimentaux. De très faibles écarts phasiques en pression et vitesse sont observés, expliquant donc les similitudes entre les différents modèles sur ces cas. Cependant, une très forte dépendance de ces écarts au transfert de masse ressort également de ces observations ce qui rend les résultats de cette comparaison de modèles difficilement généralisables à d'autres applications.

Les travaux présentés dans ce chapitre ont été acceptés pour publication dans la revue *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*.

# Comparison of two-fluid models on steam-water transients

H. Lochon<sup>a,b,e</sup>, F. Daude<sup>a,b</sup>, P. Galon<sup>b,c</sup>, and J.-M. Hérard<sup>d,e</sup>

<sup>a</sup>EDF R&D, Département AMA, 7 Boulevard Gaspard Monge, 91120 Palaiseau, France

<sup>b</sup>IMSIA, UMR EDF/CNRS/CEA/ENSTA 9219, 828 Boulevard des Maréchaux, 91762 Palaiseau Cedex, France

<sup>c</sup>CEA, DEN, DANS, DM2S, SEMT, DYN, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

<sup>d</sup>EDF R&D, Département MFEE, 6 Quai Watier, 78401 Chatou Cedex, France

<sup>e</sup>I2M, UMR CNRS 7373, Technopôle Château-Gombert, 39 rue F. Joliot Curie, 13453 Marseille Cedex 13, France

## Abstract

This paper is devoted to the comparison of three two-fluid models in steam-water applications involving phase transition and shock waves. The three models are presented in a common formalism that helps to underline their shared properties. A numerical method based on previous work is extended to all models and to more complex Equations Of State. Particular attention is paid to the verification of every step of the method so that convergence studies can be carried out. Afterwards, models are compared with each other and with experimental data in two different cases of steam-water transients. The first one is Simpson water-hammer experiment and the second one is a rapid depressurization with flashing studied in Canon experiment.

## 1 Introduction

Two distinct approaches are commonly used in order to model two-phase flows : the homogeneous approach and the two-fluid one. Homogeneous models consider the mixture as one fluid with its proper thermodynamical properties based on some hypothesis on the equilibria between phases. On the contrary, the two-fluid approach studies the evolution of two different fluids including many possible phasic disequilibria. In this paper, we focus on the second approach which is assumed to be more general.

The construction of two-fluid models is usually based on an averaging procedure of the local conservation laws [16, 27]. As no phasic equilibrium is assumed, closure laws need to be provided so that the model is fully defined. A classical approach to obtain those closure laws is to require some properties of the corresponding model. Thus, we choose to restrict the present work to models that comply with a physically relevant entropy inequality and exhibit unique jump conditions. We emphasize the fact that both properties are crucial from the numerical point of view in order to obtain grid converged solutions. Moreover, as pointed out in [7], the classical hypothesis of a pressure equilibrium leads to models that don't comply with those requirements. Therefore, we will only focus on the class of two-pressure models in this paper. Ransom and Hicks [36] have proposed one of the first models in this class. More recently, Baer and Nunziato [5] have proposed another model that belongs to this class in the frame of granular reactive materials. This model has received a lot of attention in the literature and has been applied to a wide range of applications using different closure laws [9, 20, 21, 29, 38]. Among those different closure laws, the choice proposed by Coquel *et al* [9] as well as the



one from Baer and Nunziato [5] comply with the previous requirements. It leads to the three models (one for the first choice of closure laws and two for the second choice) that will be examined in this paper.

Whereas the three models share similar properties, they show different behaviors from a purely convective point of view. Those differences are even more striking in the case of vanishing phases since the closure laws from Baer and Nunziato don't depend on the void fraction. However, the models not only include convective terms but also source terms that incorporate the different relaxation phenomena between phases. Thus those source terms should reduce the gap between the three models depending on the stiffness of the relaxation process, particularly the velocity relaxation. Unlike most of the available work in the literature, we consider non-instantaneous relaxations with physical evaluations of corresponding time scales so that the consequence on the gap between the models is more intricate. Once again, we underline the fact that we don't consider an instantaneous pressure relaxation which could induce numerical instabilities [17].

Based on previous work [25], a fractional step method has been used to approximate solutions of the three models. The first step of the method is an evolution step that takes into account the convective part of the model. In the case of the Baer and Nunziato models, lots of convective solvers have been proposed [3, 4, 10, 14, 39, 41] unlike in the case of the model from Coquel *et al* [9]. We choose to use a simple Rusanov scheme so that it could be easily applied for all models and should not interfere in the comparisons. The second step of the method is dedicated to the treatment of relaxation phenomena. The approach used in this step is similar to the one proposed in [25] for Baer and Nunziato models but the remaining model [9] requires specific work. For example, the pressure relaxation step involves a more complex scheme in this case. Extensions of the different substeps to more general Equations Of State (EOS) are also proposed. Particular attention is paid to the verification of each step and substep of the method. Grid convergence studies have been carried out for most of steps of the method in [25] and similar work is done here for the remaining steps of the different models.

Once the numerical methods for the three models have been verified, the comparison of those two-fluid models on steam-water transients can be tackled. Two experimental setups involving two-phase water flows with strong pressure waves have been chosen : the Simpson experiment which is a classical water hammer test case and the Canon experiment which consists in a sudden depressurization of hot liquid water. Grid convergence studies have also been carried out in those cases so that we can compare converged results of the different models with each other and with the experimental data as well.

Hence the paper is organized as follows. We first present the two-fluid models with the different closure laws and the corresponding source terms. We also recall the main properties of the models. Then the fractional step method used for the computations is presented. It includes the numerical treatment of convective terms as well as sources terms. A numerical example where we point out the differences between the convective part of the models is detailed. The last section of the paper presents the comparisons of the three models on the Simpson and Canon experiments.

## 2 Two-fluid models

The derivation of two-fluid models used in the sequel relies on a classical two-step approach [16, 27]. The first step is a statistical averaging of the local conservation equations which provides an open set of equations. The second step consists in closing this set of equations and the entropy inequality is a major tool to this end. Many details on this approach for seven-equation models can be found in [26, 33].

### 2.1 Governing equations

Throughout the paper, subscript  $k$  refers to the indexes of the phase ( $k = 1, 2$ ). Thus we denote  $\alpha_k \in ]0, 1[$  the statistical void fraction of phase  $k$ , which complies with :

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1$$

The mean density, mean velocity and mean pressure of phase  $k$  are denoted  $\rho_k > 0$ ,  $u_k$  and  $p_k$  respectively. We also define the partial masses as

$$m_k = \alpha_k \rho_k$$

Moreover the specific total energy of phase  $k$  is given by the following equation :

$$e_k = \varepsilon_k + \frac{1}{2} u_k^2$$

where  $\varepsilon_k$  is the specific internal energy of phase  $k$ , linked to the density and pressure by an equation of state (EOS) :

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k(\rho_k, p_k) \tag{1}$$

Once the EOS is given, we can define the celerity  $c_k$  of acoustics waves in phase  $k$ , and its temperature  $T_k > 0$  using the following relations :

$$\rho_k c_k^2 = (\partial_{p_k} \varepsilon_k)^{-1} \left( \frac{p_k}{\rho_k} - \rho_k (\partial_{\rho_k} \varepsilon_k) \right)$$

$$\frac{1}{T_k} = (\partial_{p_k} \varepsilon_k)^{-1} (\partial_{p_k} s_k)$$

where  $s_k$  is the specific entropy of phase  $k$  which complies with :

$$c_k^2 (\partial_{p_k} s_k) + (\partial_{\rho_k} s_k) = 0$$

Thanks to all those notations, governing equations of the two-fluid models read :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & + & u_I \partial_x (\alpha_k) & = & S_{1,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + & \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) & = & S_{2,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & + & \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) - p_I \partial_x (\alpha_k) & = & S_{3,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & + & \partial_x (\alpha_k \rho_k e_k u_k + \alpha_k p_k u_k) - p_I u_I \partial_x (\alpha_k) & = & S_{4,k} \end{cases} \tag{2}$$

The right-hand side terms  $S_{j,k}$  ( $j = 1, 4$ ) are so-called source terms and represent exchanges between phases. If no exterior source is considered, they comply with  $S_{j,1} + S_{j,2} = 0$ . Thus

the first equation in system (2) is redundant for both phases so those two-fluid models are seven-equation models.

The closure laws for the couple of interfacial quantities  $(u_I, p_I)$  are the following ones :

$$u_I = au_1 + (1 - a)u_2, \quad a = \frac{\chi m_1}{\chi m_1 + (1 - \chi)m_2} \quad (3)$$

$$p_I = bp_1 + (1 - b)p_2, \quad b = \frac{(1 - a)T_2}{aT_1 + (1 - a)T_2} \quad (4)$$

They are a generalization of those proposed by Coquel *et al.* [9, 18] which are based on two important requirements : the enforcement of a relevant entropy inequality and a linearly degenerate field associated with  $\lambda = u_I$ . Many other closure laws could be found in the literature [8, 21, 28, 38] and some generalisations to a larger number of components have been recently proposed [23, 34]. The classical choice of Baer and Nunziato [5] where the interfacial velocity is equal to the velocity of one of the phase corresponds to  $\chi = 0$  or  $\chi = 1$ . We denote respectively BN1 model and BN2 model, the case when  $(u_I, p_I) = (u_1, p_2)$  and  $(u_I, p_I) = (u_2, p_1)$ . The case when  $\chi = \frac{1}{2}$  corresponds to the model proposed in [9, 18] and will be denoted as CGHS model in reference to the authors. *In the sequel, we will restrict our attention to those three models* ( $\chi = 0, \frac{1}{2}, 1$ ). Another possible choice would have been to consider  $\chi$  as another variable which would require another evolution law then. It leads to a class of two-fluid models that has been proposed in [24] and which is briefly presented in appendix A.

At this stage, it only remains to define the source terms. For CGHS and BN models, we have the following relations :

$$\begin{aligned} S_{1,k} &= \Phi_k \\ S_{2,k} &= \Gamma_k \\ S_{3,k} &= D_k + \mathcal{U}\Gamma_k \\ S_{4,k} &= Q_k + \mathcal{U}D_k + \mathcal{H}\Gamma_k - p_I\Phi_k \end{aligned} \quad (5)$$

where  $\mathcal{U} = \frac{1}{2}(u_1 + u_2)$  and  $\mathcal{H} = \frac{1}{2}(u_1 u_2)$ . The contribution  $\Phi_k$  verifies  $\Phi_1 + \Phi_2 = 0$ , as well as the interfacial mass transfer  $\Gamma_k$ , the drag effects  $D_k$  and the interfacial heat transfer  $Q_k$ . All those contributions are written as relaxation phenomena :

$$\begin{aligned} \Phi_k &= \frac{1}{\tau_p p_{ref}} \alpha_k \alpha_j (p_k - p_j) \\ \Gamma_k &= \frac{1}{\tau_\mu \mu_{ref}} \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} (\mu_j - \mu_k) \\ D_k &= \frac{1}{\tau_u} \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} (u_j - u_k) \\ Q_k &= \frac{1}{\tau_T} \frac{m_k C_{V_k} m_j C_{V_j}}{m_k C_{V_k} + m_j C_{V_j}} (T_j - T_k) \end{aligned} \quad , \quad j = 3 - k \quad (6)$$

where  $\mu_k$  is the chemical potential of phase  $k$  which depends on the specific Gibbs enthalpy  $g_k$  :

$$\mu_k = \frac{g_k}{T_k} \quad \text{with} \quad g_k = \varepsilon_k + \frac{p_k}{\rho_k} - T_k s_k$$

$C_{V_k}$  represents the heat capacity of phase  $k$ ,  $p_{ref}$  and  $\mu_{ref}$  are respectively a reference pressure and a reference chemical potential. All relaxation phenomena involve relaxation time scales  $\tau_\varphi$  which lead physical quantity  $\varphi = p, \mu, u, T$  towards equilibrium. The evaluation of such time scales will be discussed later on in the paper. Readers are also referred to [5,6] for slightly different forms of source terms in the field of granular reactive materials.

## 2.2 Main properties of the models

We may now recall the main properties of the three models defined earlier (BN1, BN2 and CGHS). Due to a similar construction with the same requirements, the three models share the same properties. More details on the CGHS model, which is the most difficult case, could be found in [18] with all proofs, comments and details.

- **Entropy inequality**

Smooth solutions of system (2) with closure laws of CGHS or BN models comply with an entropy inequality :

$$\begin{aligned} \partial_t \left( \sum_k m_k s_k \right) + \partial_x \left( \sum_k m_k s_k u_k \right) &= (\mu_2 - \mu_1) \Gamma_1 \\ &+ \left( \frac{1-b}{T_1} + \frac{b}{T_2} \right) (p_1 - p_2) \Phi_1 \\ &+ \left( \frac{1}{2T_1} + \frac{1}{2T_2} \right) (u_2 - u_1) D_1 \\ &+ \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) Q_1 \quad \geq 0 \end{aligned} \quad (7)$$

- **Hyperbolicity and structure of waves**

The convective part of system (2) :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) &+ u_I \partial_x (\alpha_k) &= 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) &+ \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) &= 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) &+ \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) - p_I \partial_x (\alpha_k) &= 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) &+ \partial_x (\alpha_k \rho_k e_k u_k + \alpha_k p_k u_k) - p_I u_I \partial_x (\alpha_k) &= 0 \end{cases} \quad (8)$$

is hyperbolic. It admits seven real eigenvalues :

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= u_I, \\ \lambda_2 &= u_1 - c_1, \quad \lambda_3 = u_1, \quad \lambda_4 = u_1 + c_1, \\ \lambda_5 &= u_2 - c_2, \quad \lambda_6 = u_2, \quad \lambda_7 = u_2 + c_2 \end{aligned} \quad (9)$$

and associated righteigenvectors span the whole space  $\mathbb{R}^7$  if  $|u_k - u_I| \neq c_k$ . Fields associated with eigenvalues  $\lambda_{1,3,6}$  are linearly degenerate (LD) whereas fields associated with eigenvalues  $\lambda_{2,4,5,7}$  are genuinely non linear (GNL).

- **Jump conditions**

Unique jump conditions hold within each isolated field. Moreover, classical single phase jump relations hold in the GNL fields :

$$\left\{ \begin{array}{l} [\alpha_k] = 0 \\ -\sigma [\rho_k] + [\rho_k u_k] = 0 \\ -\sigma [\rho_k u_k] + [\rho_k u_k^2 + p_k] = 0 \\ -\sigma [\rho_k e_k] + [\rho_k e_k u_k + p_k u_k] = 0 \end{array} \right. \quad (10)$$

where  $[\varphi] = \varphi_R - \varphi_L$  is the jump between the Left and Right states on each side of a shock wave traveling at speed  $\sigma$ .

Though BN and CGHS models have the same properties, we emphasize the fact that they are quite different from a purely convective point of view. Indeed, the structure of waves is slightly different in the case of BN models since two LD waves collapse in that case. Thus jump conditions across the 1-field highly depend on the model. We also underline that the LD structure of the 1-field is crucial in order to obtain unique jump conditions. Otherwise the computation of grid converged shock solutions may differ, depending on the inner numerical viscosity of the scheme, due to the occurrence of the “true” non-conservative products (*i.e.* active in GNL fields). This point is not clearly addressed in the literature on two-fluid models but interesting examples can be found in [22].

### 2.3 Equation Of State and relaxation time scales

Before presenting the numerical methods, we provide remaining closure laws. So far, models have been presented using a general EOS so we need to precise the EOS used in the computations. Besides we also explain the estimations of the different relaxation time scales  $\tau_\varphi$ .

To describe steam-water transients, we used the Stiffened Gas EOS within each phase. It requires 5 thermodynamical constants  $\gamma_k, p_k^\infty, q_k, C_{V_k}$  and  $q'_k$  [31] to provide the following thermodynamical quantities :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_k = ((\gamma_k - 1)\rho_k)^{-1} (p_k + \gamma_k p_k^\infty) + q_k \\ T_k = (C_{V_k}(\gamma_k - 1)\rho_k)^{-1} (p_k + p_k^\infty) \\ s_k = C_{V_k} \ln ((C_{V_k}(\gamma_k - 1)\rho_k)^{-\gamma_k} (p_k + p_k^\infty)) + q'_k \end{array} \right. \quad (11)$$

Moreover, Stiffened Gas EOS are only defined if  $\gamma_k > 1, C_{V_k} > 0$  and  $p_k^\infty > 0$ . We also require  $X_k = p_k + p_k^\infty > 0$  in order to guarantee positivity of some thermodynamical quantities.

Evaluations of relaxation time scales are difficult to provide. Most available work in the literature deals with instantaneous relaxation [13,32,35] although the underlying physical phenomena could be less fast. In our case, we only consider non-instantaneous relaxations so that we need estimations of relaxation time scales. For pressure and velocity relaxations, which should reduce the differences between CGHS and BN models, we use physical approximations of the relaxation time scales. The other two relaxation time scales are linked together and more

complex to evaluate. In particular, only a few approximations of the chemical potential relaxation time scale, which drives the mass transfer, could be found in the literature [15]. Moreover, those approximations only deal with homogeneous models. Therefore chemical potential and temperature relaxation time scales will be assumed constant in the present simulations.

In the case of pressure relaxation, the evaluation of the time scale is based on the Rayleigh-Plesset equation [19], which considers the evolution of a bubble in an infinite medium. It provides the following approximation :

$$\tau_p p_{ref} = \begin{cases} \frac{4}{3}\eta_2 & \text{if } \alpha_1 < 0.2 \\ \frac{4}{3}\eta_1 & \text{if } \alpha_1 > 0.8 \\ \left(\frac{0.8-\alpha_1}{0.8-0.2}\right)\frac{4}{3}\eta_2 + \left(\frac{\alpha_1-0.2}{0.8-0.2}\right)\frac{4}{3}\eta_1 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (12)$$

where  $\eta_k$  is the dynamic viscosity of phase  $k$ .

In the case of velocity relaxation, the approach is really similar. The behavior of a bubble in an infinite medium is given by the drag equation which leads to an approximation of the relaxation time scale. In the NEPTUNE-CFD code [30], the following model is proposed for liquid-gas separated flows :

$$D_k = \alpha_k \alpha_j F_D(\alpha_1) (u_j - u_k) \quad , \quad j = 3 - k \quad (13)$$

where the function  $F_D$  of  $\alpha_1$  is defined as follows :

$$F_D(\alpha_1) = \begin{cases} F_{D,1}(1 - \alpha_1) & \text{if } \alpha_1 < 0.2 \\ F_{D,2}(\alpha_1) & \text{if } \alpha_1 > 0.8 \\ \left(\frac{0.8-\alpha_1}{0.8-0.2}\right) F_{D,1}(1 - 0.2) + \left(\frac{\alpha_1-0.2}{0.8-0.2}\right) F_{D,2}(0.8) & \text{otherwise} \end{cases}$$

The function  $F_D$  is equal to the function  $F_{D,p}(\alpha_q)$  in the case of isolated spherical inclusions of phase  $p$  in the continuous phase  $q$ . The following classic correlations are used [1, 30] :

$$F_{D,p}(\alpha_q) = \frac{3}{4} \frac{\rho_q}{\alpha_q} \frac{C_{D,p}}{d_p} |u_p - u_q| \quad , \quad q = 3 - p$$

with :

$$C_{D,p} = \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0.15 (Re_p)^{0.687}\right) \quad \text{and} \quad Re_p = \frac{\rho_q d_p}{\eta_q} |u_p - u_q|$$

where  $d_p$  is a characteristic diameter of the inclusion that needs to be defined in [30]. In our case, we choose to define it using the critical Weber number  $We = 10$  (see [1]) :

$$We = \frac{\rho_q d_p}{\sigma} |u_p - u_q|^2$$

where  $\sigma$  is the surface tension of the liquid phase. Thus, we obtain the following approximation for the velocity relaxation time scale using (6) and (13) :

$$\tau_u = \frac{\rho_1 \rho_2}{m_1 + m_2} \frac{1}{F_D(\alpha_1)} \quad (14)$$

### 3 Numerical methods

An entropy-consistent fractional step method is used to compute approximations of the whole system. This algorithm was first detailed in [25] for BN models without mass transfer. Two steps are used to compute approximate solutions of system (2). The first step is an evolution step where we compute approximate solutions of the homogeneous system :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & + u_I \partial_x (\alpha_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) - p_I \partial_x (\alpha_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k e_k u_k + \alpha_k p_k u_k) - p_I u_I \partial_x (\alpha_k) & = 0 \end{cases} \quad (15)$$

through the time interval  $[t^n, t^n + \Delta t]$  with given initial values  $\varphi^n$  of the seven variables. Thus, we obtain approximations  $\tilde{\varphi}$  which are used as initial values in the second step of the method. This second step is called relaxation step and takes into account the source terms. We compute approximate solutions of the following system :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & = S_{1,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & = S_{2,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & = S_{3,k} \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & = S_{4,k} \end{cases} \quad (16)$$

with  $S_{j,k}$  defined by equations (5) and (6). Finally, we obtain the approximations  $\varphi^{n+1}$ . As in [25], the relaxation time step is divided into different substeps to treat the different relaxation phenomena. In the sequel, we detail all steps and substeps of the method and we respect the order of the algorithm to present them.

#### 3.1 Evolution step

The first step of the fractional step method is an evolution one. It consists in using finite volume methods to solve the convective system (15). In the case of the BN models, several finite volume schemes have been proposed up to now. Many of them are approximate or exact Riemann solvers. Schwendeman *et al* [39] propose a Godunov scheme that approximates the LD 1-wave as a layer of vanishingly small thickness across which the solution is assumed to be smooth. This hypothesis has been also used by Tokareva and Toro [41] to build an HLLC-type Riemann solver. Deledicque and Papalexandris [14] as well as Andrianov and Warnecke [4] propose exact Riemann solvers based on different approaches. Relaxation solvers have also been used in [10] to handle vanishing phases.

In the case of the CGHS model, very few solvers could be found in the literature. Relaxation techniques have been applied in [3] and extensions of both Rusanov and VFRoe schemes to non-conservative systems have been proposed in [18]. Among those three schemes, we choose to use a Rusanov scheme for all models for simplicity.

Moreover, grid convergence studies of the Rusanov scheme for BN model can be found in [11] where first-order and second-order schemes have been verified. The expected rate of convergence which is 1/2 in the case of the first-order scheme (and 2/3 in the case of the second-order scheme) is retrieved. Those rates of convergence are due to the occurrence of

contact discontinuities in the exact solutions. In the case of smooth solutions, the first-order (or second-order) should be obtained. We underline the fact that only a few grid convergence studies in order to verify convective schemes could be found in the literature [10,22,25]. Thus, we propose to carry out a grid convergence study on a Riemann problem to verify the Rusanov scheme for the CGHS model. We set particular thermodynamical parameters for both phases (see table 1) in order to obtain an analytical solution. Once the Left state is set, the Right state is calculated so that the Riemann invariants of the LD 1-wave are preserved, leading to the initial states recalled in table 2. Therefore the analytical solution of this first Riemann problem only exhibits the LD 1-wave. Figure 1 shows the results of the grid convergence study and we retrieve the expected rate of convergence 1/2 as explained before.

TABLE 1 – EOS parameters for the first Riemann problem

	$\gamma_k$	$p_k^\infty$ (Pa)	$q_k$ (J.kg <sup>-1</sup> )	$C_{V_k}$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	$q'_k$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
<b>phase 1</b>	2.	10000.00	2000000.00	1500.00	2000.00
<b>phase 2</b>	2.	200000.00	1000.00	1500.00	25000.00

TABLE 2 – Initial conditions for the first Riemann problem

		$\alpha_k$	$\rho_k$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$p_k$ (Pa)	$u_k$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>Left state</b>	<b>phase 1</b>	0.8	2.00	100000.00	100.00
	<b>phase 2</b>	0.2	1000.00	300000.00	100.00
<b>Right state</b>	<b>phase 1</b>	0.3	1.47780679	71279.3734	100.00
	<b>phase 2</b>	0.7	738.903394	169451.697	100.00

Once again, the LD-structure of the 1-field should be highlighted. Indeed, due to this property, the non-conservative products are not active in GNL fields and so the three models exhibit unique jump conditions. It is of major importance to obtain unique analytical solutions of Riemann problems so that convective schemes could be verified.

As we emphasize it earlier, the three models are quite different when looking at the convective part of the models which is exactly the part we solve in the evolution step. An interesting test case proposed in [3] (Test 3) gives an illustration of those differences. This test case is a Riemann problem with two gases. Thermodynamical parameters of those gases are recalled in table 3 and both initial states of the test case are presented in table 4. The numerical results given by first-order Rusanov schemes with a CFL condition of 0.5 on a 1D mesh made of 1000 cells are presented in figure 2. As expected, the differences between the models are striking. The intermediate states are totally different in some cases. We can also notice that wave speeds are different as well. Moreover, the variable  $\rho_2$  is a good example to underline the fact that the models don't have the same number of waves. In the case of the CGHS model,  $\rho_2$  is an invariant of 3 waves (the three waves on phase 1) among the 7 waves of the model which gives us the 4 waves (and the 3 intermediate states) that can be observed on  $\rho_2$ . For the BN2 model,  $\rho_2$  is also an invariant of 3 waves but the model has only 6 waves so this



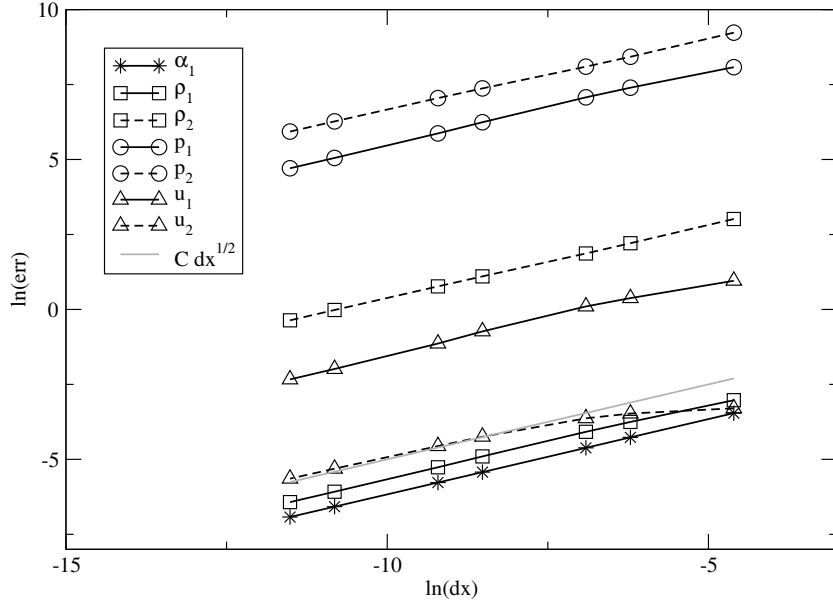


FIGURE 1 – Convergence study of the Rusanov scheme for the CGHS model on the first Riemann problem :  $L1$  norm of the error vs  $\Delta x$  at  $t_f = 1.5 \times 10^{-3}$  s with a 0.5 CFL condition.

variable exhibits 3 waves. To finish,  $\rho_2$  is an invariant of only 2 waves of the BN1 model (the 2 GNL waves on phase 1) so its leads to the 4 waves we can see on  $\rho_2$  in figure 2.

TABLE 3 – EOS parameters for the second Riemann problem

	$\gamma_k$	$p_k^\infty$ (Pa)	$q_k$ (J.kg <sup>-1</sup> )	$C_{V_k}$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	$q'_k$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
<b>phase 1</b>	1.4	0.00	0.00	1000.00	0.00
<b>phase 2</b>	1.4	0.00	0.00	1000.00	0.00

TABLE 4 – Initial conditions for the second Riemann problem

		$\alpha_k$	$\rho_k$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$p_k$ (Pa)	$u_k$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>Left state</b>	<b>phase 1</b>	0.8	1.00	1.00	0.00
	<b>phase 2</b>	0.2	0.20	0.30	0.00
<b>Right state</b>	<b>phase 1</b>	0.3	1.00	1.00	0.00
	<b>phase 2</b>	0.7	1.00	1.00	0.00

### 3.2 Relaxation step

The relaxation step is associated to the treatment of the source terms. During that step, we solve system (16) with 4 substeps, one for each relaxation phenomenon. They are treated in the following order : pressure relaxation, velocity relaxation, temperature relaxation and chemical potential relaxation. For each substep, we use the approach proposed in [25] for BN

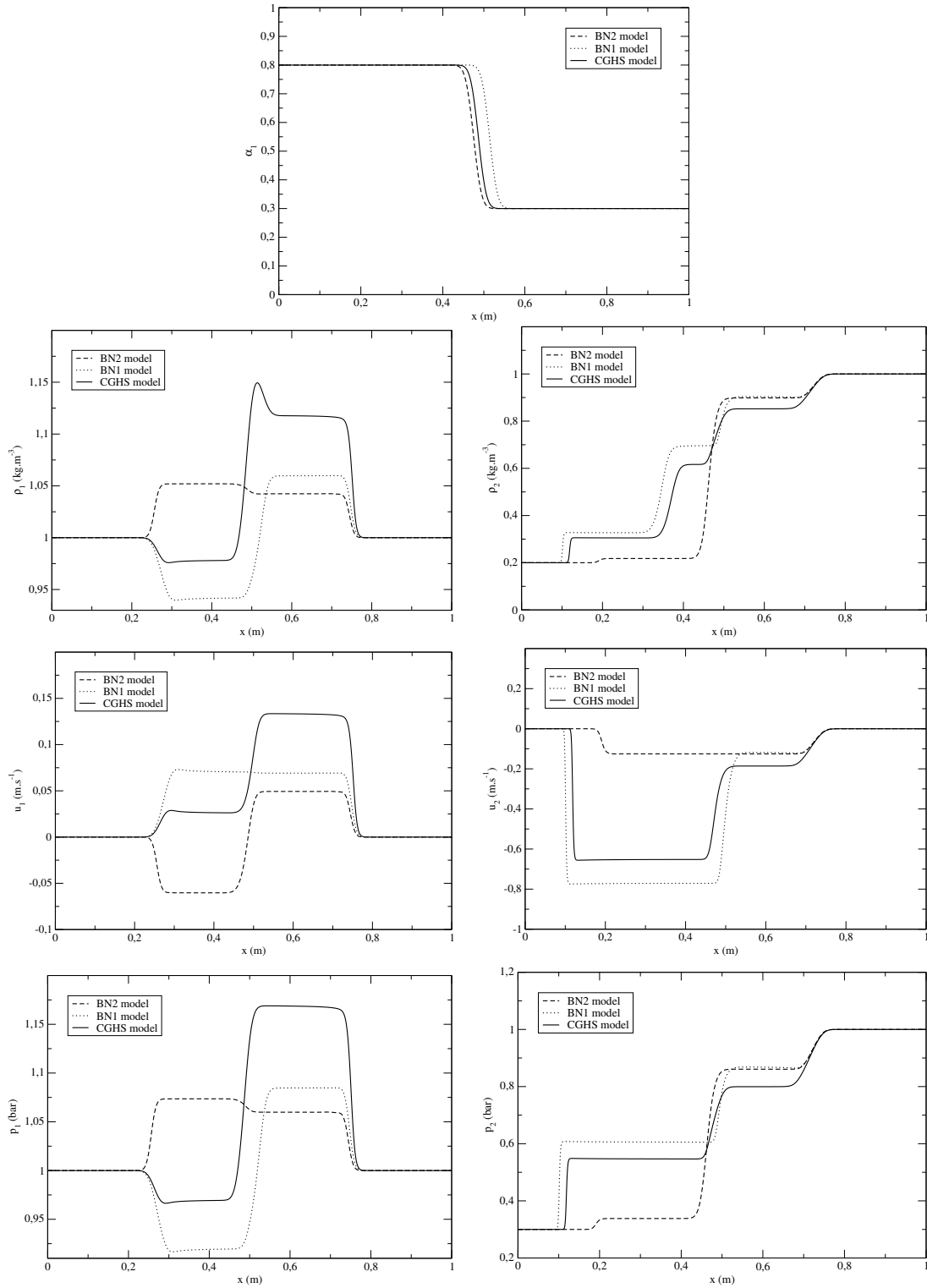


FIGURE 2 – Comparison between numerical solutions of the three models in the second Riemann problem at time  $t = 0.2$  s on a 1000-cell mesh. From the top to bottom right :  $\alpha_1, \rho_1, \rho_2, u_1, u_2, p_1, p_2$  vs  $x$ .

models. Thus, implicit first-order Euler schemes are used with the time step given by the CFL condition linked to the evolution step. We underline the fact that applying this approach in the case of the CGHS model requires a specific treatment in the case of the pressure relaxation. Moreover, we extend all schemes to the case when both phases are governed by Stiffened Gas EOS.

In the sequel, we use the notation  $\varphi^0$  to denote the state of a variable  $\varphi$  at the end of the previous substep and  $\varphi^*$  the state of the same variable at the end of the current substep.  $\Delta t$  denotes the time step given by the CFL condition associated to the evolution step.

### 3.2.1 Pressure relaxation

In this substep, we compute approximate solutions of the system :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & = \Phi_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & = -p_I \Phi_k \end{cases} \quad (17)$$

Because of the occurrence of the interfacial pressure  $p_I$ , the choice of the model has a major impact in this substep. We propose the following implicit scheme to solve system (17) :

$$\begin{cases} \frac{\alpha_k^* - \alpha_k^0}{\Delta t} = \frac{1}{(\tau_p p_{ref})^0} \alpha_k^* \alpha_j^* (p_k^* - p_j^*) \\ m_k^* = m_k^0 \\ u_k^* = u_k^0 \\ \frac{m_k^* \varepsilon_k^* - m_k^0 \varepsilon_k^0}{\Delta t} = -(b^0 p_1^* + (1 - b^0) p_2^*) \frac{\alpha_k^* - \alpha_k^0}{\Delta t} \end{cases}, \quad j = 3 - k \quad (18)$$

where the interfacial pressure  $p_I$  defined by (4) is treated in a semi-implicit way. Therefore, the following non-linear system in  $\alpha_1^*$ ,  $p_1^*$  and  $p_2^*$  has to be solved in the case of Stiffened Gas :

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{(\tau_p p_{ref})^0}{\Delta t} \frac{\alpha_1^* - \alpha_1^0}{\alpha_1^* (1 - \alpha_1^*)} - (p_1^* - p_2^*) &= 0 \end{aligned} \right. \quad (19a)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \gamma_1 (\alpha_1^* - \alpha_1^m) X_1^* - \alpha_1^0 X_1^0 &= (1 - b^0) (\gamma_1 - 1) (\alpha_1^* - \alpha_1^0) (p_1^* - p_2^*) \end{aligned} \right. \quad (19b)$$

$$\left\{ \begin{aligned} -\gamma_2 (\alpha_1^* - \alpha_1^M) X_2^* - \alpha_2^0 X_2^0 &= b^0 (\gamma_2 - 1) (\alpha_1^* - \alpha_1^0) (p_1^* - p_2^*) \end{aligned} \right. \quad (19c)$$

where we use the following notations :

$$\begin{aligned} X_k &= p_k + p_k^\infty \\ \alpha_1^m &= \frac{(\gamma_1 - 1) \alpha_1^0}{\gamma_1} \quad \text{and} \quad \alpha_1^M = 1 - \frac{(\gamma_2 - 1) \alpha_2^0}{\gamma_2} \end{aligned} \quad (20)$$

Equations (19b) and (19c) form a linear system in  $p_1^*$  and  $p_2^*$ . Solving this system makes it possible to write those pressures as functions of  $\alpha_1^*$ . Thus equation (19a) could be written as

a non-linear equation on  $\alpha_1^*$  :

$$G(\alpha_1^*) = 0 \quad (21)$$

where the function  $G$  is defined as follows :

$$G(\alpha_1^*) = \frac{(\tau_p p_{ref})^0}{\Delta t} \frac{\alpha_1^* - \alpha_1^0}{\alpha_1^*(1 - \alpha_1^*)} - (p_1^*(\alpha_1^*) - p_2^*(\alpha_1^*)) \quad (22)$$

Due to the non-linearities of the function  $G$ , we use an iterative procedure to solve this equation. Particular attention is required to ensure that thermodynamical quantities remain in the admissible range. We can notice that the linear system in  $p_1^*$  and  $p_2^*$  made of equations (19b) and (19c) is easier to solve in the case of BN models than in the case of the CGHS model. In the sequel, we will examine existence and uniqueness of solution of equation (21) *in the case of the CGHS model (i.e.  $b^0 \in ]0, 1[$ )*. Same results hold for the BN models.

Existence of a solution for equation (21) is guaranteed by the following :

**Proposition 1.** *Assume that  $p_1^*(\alpha_1^*)$  and  $p_2^*(\alpha_1^*)$  are continuous functions. The equation  $G(\alpha_1^*) = 0$  has at least a solution in the interval  $] \alpha_1^m, \alpha_1^M [$  and this solution leads to admissible pressures ( $X_1^* > 0$  and  $X_2^* > 0$ ).*

*Proof.* Let us first remark the following results :

$$\alpha_1^m - \alpha_1^0 = -\frac{\alpha_1^0}{\gamma_1} < 0 \quad \text{and} \quad \alpha_1^M - \alpha_1^0 = \frac{\alpha_2^0}{\gamma_2} > 0 \quad (23)$$

which also gives  $\alpha_1^m < \alpha_1^M$ . Using (23), the equation (19b) gives  $(p_1^*(\alpha_1^m) - p_2^*(\alpha_1^m)) > 0$ . We deduce that  $G(\alpha_1^m) < 0$  by using equation (23) again. The same strategy applied on equation (19c) gives  $G(\alpha_1^M) > 0$  and we obtain that it exists  $\alpha_1^* \in ] \alpha_1^m, \alpha_1^M [$  such that  $G(\alpha_1^*) = 0$ .

The admissibility of pressures is now easy to prove. Equation (19a) shows that  $(p_1^* - p_2^*)$  and  $(\alpha_1^* - \alpha_1^0)$  have the same sign. Hence, the right hand sides of equations (19b) and (19c) are positive. Therefore, if  $\alpha_1^* \in ] \alpha_1^m, \alpha_1^M [$ , then  $X_1^* > 0$  and  $X_2^* > 0$ .  $\square$

**Proposition 2.** *If we also assume that functions  $p_k^*(\alpha_k^*)$  are strictly decreasing, then equation  $G(\alpha_1^*) = 0$  has a unique solution in  $] \alpha_1^m, \alpha_1^M [$ .*

*Proof.* Thanks to the hypothesis on  $p_k^*(\alpha_k^*)$ , the function  $(p_1^*(\alpha_1^*) - p_2^*(\alpha_1^*))$  is decreasing. Let's now remark that function  $\frac{\alpha_1^* - \alpha_1^0}{\alpha_1^*(1 - \alpha_1^*)}$  is strictly increasing on  $]0, 1[$  and we can deduce that the function  $G(\alpha_1^*)$  is strictly increasing on  $] \alpha_1^m, \alpha_1^M [$ . Therefore, it admits a unique zero on this interval.  $\square$

In practice, the linear system in  $(p_1^*, p_2^*)$  composed by equations (19b) and (19c) can be easily solved in the case of two perfect gas ( $p_k^\infty = 0$ ). Then, we can directly check that functions  $p_k^*(\alpha_k^*)$  are strictly decreasing in that particular case. The present scheme has been verified, details can be found in appendix B.

### 3.2.2 Velocity relaxation

The velocity relaxation substep computes approximations of solutions of the following system :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & = 0 \\ \partial_t (m_k) & = 0 \\ \partial_t (m_k u_k) & = D_k \\ \partial_t (m_k e_k) & = \mathcal{U} D_k \end{cases} \quad (24)$$

Solving this system is easier than solving the one of the previous substep. Indeed, we can show that :

$$\partial_t (u_1 - u_2) = -\frac{1}{\tau_u} (u_1 - u_2)$$

Hence, if  $\tau_u$  is assumed constant, analytical solution of system (24) could be provided. Therefore we propose the following numerical scheme, where  $\tau_u$  is treated in an explicit way during the time interval  $[t^n, t^n + \Delta t]$  :

$$\begin{cases} \alpha_k^* & = \alpha_k^0 \\ m_k^* & = m_k^0 \\ u_k^* & = u_k^0 - \frac{m_j^0}{m_k^0 + m_j^0} \left(1 - e^{-\Delta t/\tau_u^0}\right) (u_k^0 - u_j^0) \\ \varepsilon_k^* & = \varepsilon_k^0 + \frac{1}{4} \frac{m_j^0}{m_k^0 + m_j^0} \left(1 - e^{-2\Delta t/\tau_u^0}\right) (u_k^0 - u_j^0)^2 \end{cases}, \quad j = 3 - k \quad (25)$$

Note that the internal energy remains positive during this step. Moreover the relaxation effect on the velocities is ensured without any constraint on the time step. The verification of such a scheme can be found in [25].

### 3.2.3 Temperature relaxation

In this substep, we compute approximate solutions of the following system :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & = Q_k \end{cases} \quad (26)$$

As in the previous substep, the relaxation phenomenon is given by a simple equation :

$$\partial_t (T_1 - T_2) = -\frac{1}{\tau_T} (T_1 - T_2)$$

Thus, we use the following numerical scheme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_k^* = \alpha_k^0 \\ m_k^* = m_k^0 \\ u_k^* = u_k^0 \\ T_k^* = T_k^0 - \frac{m_j^0 C_{Vj}}{m_k^0 C_{Vk} + m_j^0 C_{Vj}} \left(1 - e^{-\Delta t / \tau_T^0}\right) (T_k^0 - T_j^0) \end{array} \right. , \quad j = 3 - k \quad (27)$$

We underline the fact that the temperatures remain positive and their relaxation is ensured without any constraint on the time step. This numerical scheme corresponds to the one proposed in [25] in the case of Stiffened Gas EOS.

### 3.2.4 Chemical potential relaxation

The last substep corresponds to the numerical treatment of the mass transfer. We compute approximate solutions of the system :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_k) = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) = \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) = \mathcal{U} \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k \varepsilon_k) = \mathcal{H} \Gamma_k \end{array} \right. \quad (28)$$

Thanks to simple manipulations, it could be written in the following way :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_k) = 0 \\ \partial_t (m_k) = \Gamma_k \\ \partial_t (m_k u_k) = \mathcal{U} \Gamma_k \\ \partial_t (m_k \varepsilon_k) = 0 \end{array} \right. \quad (29)$$

An implicit scheme is used to approximate solutions of that system, which is :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_k^* = \alpha_k^0 \quad (30a) \\ \frac{m_k^* - m_k^0}{\Delta t} = \frac{1}{(\tau_\mu \mu_{ref})^0} \frac{m_k^* m_j^*}{m_k^* + m_j^*} (\mu_j^* - \mu_k^*) \quad (30b) \\ \frac{m_k^* u_k^* - m_k^0 u_k^0}{\Delta t} = \frac{u_k^* + u_j^*}{2} \frac{m_k^* - m_k^0}{\Delta t} \quad (30c) \\ m_k^* \varepsilon_k^* = m_k^0 \varepsilon_k^0 \quad (30d) \end{array} \right.$$

Equation (30b) is written as follows :

$$H(m_1^*) = 0 \quad (31)$$

where we use the following notations :

$$H(m_1^*) = M_T \frac{(\tau_\mu \mu_{ref})^0}{\Delta t} \frac{m_1^* - m_1^0}{m_1^* (M_T - m_1^*)} + (\mu_1^*(m_1^*) - \mu_2^*(M_T - m_1^*)) \quad (32)$$

$$M_T = m_1^0 + m_2^0 = m_1^* + m_2^*$$

Chemical potentials  $\mu_k^*$  may be seen as functions of  $m_k^*$  thanks to equations (30a) and (30d). Indeed, we have :

$$\mu_k^* = \mu_k^*(\rho_k^*, \varepsilon_k^*) = \mu_k^* \left( \frac{m_k^*}{\alpha_k^0}, \frac{m_k^0 \varepsilon_k^0}{m_k^*} \right)$$

Once equation 31 has been solved, velocities  $u_k^*$  are calculated by solving the linear system made of equation (30c) for both phases. Its determinant is strictly positive :  $\Delta = \frac{1}{2} (m_1^0 m_2^* + m_2^0 m_1^*)$ . Thus, the main difficulty of the scheme lies in solving non-linear equation (31). In the numerical scheme, this difficulty is overcome by using an iterative solver. As it happens for the pressure relaxation, specific attention is required to ensure that thermodynamical quantities remain in the admissible range. This is guaranteed by the following property :

**Proposition 3.** *The equation  $H(m_1^*) = 0$  has a unique solution with positive partial masses and temperatures.*

*Proof.* First, we focus on the constraint on the signs of the temperatures. Let us first express temperatures as functions of partial masses thanks to the EOS (11) :

$$T_k^*(m_k^*) = \frac{1}{C_{V_k}} \left( \frac{m_k^0 \varepsilon_k^0 - \alpha_k^0 p_k^\infty}{m_k^*} - q_k \right)$$

If  $q_k \neq 0$ , we introduce  $\varphi_k$  as follows :

$$\varphi_k = \frac{m_k^0 \varepsilon_k^0 - \alpha_k^0 p_k^\infty}{q_k}$$

It results in the following expressions of temperatures :

$$T_k^*(m_k^*) = \frac{q_k}{C_{V_k} m_k^*} (\varphi_k - m_k^*)$$

So we can define the intervals  $I_k$  that ensure that temperatures  $T_k^*$  remain positive :

$$I_1 = \begin{cases} ]0, \varphi_1[ & \text{if } q_1 > 0 \\ ]0, +\infty[ & \text{if } q_1 = 0 \\ ]\varphi_1^+, +\infty[ & \text{if } q_1 < 0 \end{cases} \quad \text{and} \quad I_2 = \begin{cases} ](M_T - \varphi_2)^+, +\infty[ & \text{if } q_2 > 0 \\ ]0, +\infty[ & \text{if } q_2 = 0 \\ ]0, (M_T - \varphi_2)[ & \text{if } q_2 < 0 \end{cases}$$

where we use the classical notation  $\psi^+ = \max(0, \psi)$ . Then we define the interval  $]m_1^{min}, m_1^{max}[$  that ensure that all temperatures and partial masses remain positive :

$$]m_1^{min}, m_1^{max}[ = ]0, M_T[ \cap I_1 \cap I_2$$

In each case, depending on the signs of  $q_k$ , we can prove that  $]m_1^{min}, m_1^{max}[ \neq \emptyset$ . We skip the details for simplicity but we can also prove the following limits :

$$\lim_{m_1^* \rightarrow m_1^{min}} (\mu_1^*(m_1^*) - \mu_2^*(M_T - m_1^*)) = -\infty \quad \text{and} \quad \lim_{m_1^* \rightarrow m_1^{max}} (\mu_1^*(m_1^*) - \mu_2^*(M_T - m_1^*)) = +\infty$$

where :

$$\begin{aligned} \mu_k^*(m_k^*) = \gamma_k C_{V_k} + \frac{q_k}{T_k^*(m_k^*)} - C_{V_k} \ln(T_k^*(m_k^*)) + (\gamma_k - 1) C_{V_k} \ln(m_k^*) \\ + (\gamma_k - 1) C_{V_k} \ln\left((\gamma_k - 1) C_{V_k} \frac{1}{\alpha_k^0}\right) - q_k' \end{aligned}$$

Then, it is easy to deduce the limits of the function  $H(m_1^*)$  :

$$\lim_{m_1^* \rightarrow m_1^{min}} H(m_1^*) = -\infty \quad \text{and} \quad \lim_{m_1^* \rightarrow m_1^{max}} H(m_1^*) = +\infty$$

Hence, the continuous function  $H(m_1^*)$  has at least one zero in  $]m_1^{min}, m_1^{max}[$ .

Then, we focus on the monotonicity of  $H$  in order to prove that such a zero is unique. We have the following derivative :

$$\mu_k^{*'}(m_k^*) = \frac{(\gamma_k - 1) C_{V_k}}{m_k^*} + \frac{1}{C_{V_k} (T_k^*(m_k^*))^2} \frac{(m_k^0 \varepsilon_k^0 - \alpha_k^0 p_k^\infty)^2}{m_k^{*3}}$$

So the function  $(\mu_1^*(m_1^*) - \mu_2^*(M_T - m_1^*))$  is strictly increasing on  $]m_1^{min}, m_1^{max}[$ . Moreover, the function  $\frac{m_1^* - m_1^0}{m_1^*(M_T - m_1^*)}$  is also strictly increasing on  $]0, M_T[$ . Thus,  $H(m_1^*)$  is strictly increasing on  $]m_1^{min}, m_1^{max}[$  and the equation  $H(m_1^*) = 0$  has a unique solution in that interval.  $\square$

Appendix C provides a verification of the scheme. Note that the present scheme is an extension of the one proposed in [12] for Stiffened Gas EOS.

## 4 Comparison of two-fluid models on steam-water transients

This section is devoted to the comparison of the three different models described earlier. We focus in this paper on steam-water applications involving mass transfer. Two experimental configurations have been selected so that we could compare models with each other but also with experimental data. The first one is the Simpson experiment, a classical water hammer test case and the second one is the Canon experiment consisting in the rapid depressurization of hot liquid water in a horizontal pipe. An important guideline of our work is that we focus on the comparison of the three models and not on the comparison of numerical schemes used for those models. Therefore, the following section also includes grid convergence studies in order to reduce the numerical approximations as far as possible.



## 4.1 Simpson’s column-separation water hammer

The Simpson facility [40] consists of a 36 m long horizontal pipe linked to a tank and ending with a valve (see figure 3). Initially, a liquid water flow fills the pipe with a given velocity. At time zero, the valve is suddenly closed, thus generating a pressure wave that propagates towards the tank. Pressure is measured along the pipe at different locations denoted P1, P2 and P3 in figure 3. Due to the reflections at both ends of the pipe (the tank and the closed valve), different pressure peaks appear on the measurements. Moreover, if the initial velocity is high enough, pressure decreases towards the saturation pressure at the valve and a vapor pocket appears. This vapor pocket has a significant influence on the reflections of the pressure waves. Experimental measurements are compared to the results of 1D simulations of the two-fluid models.

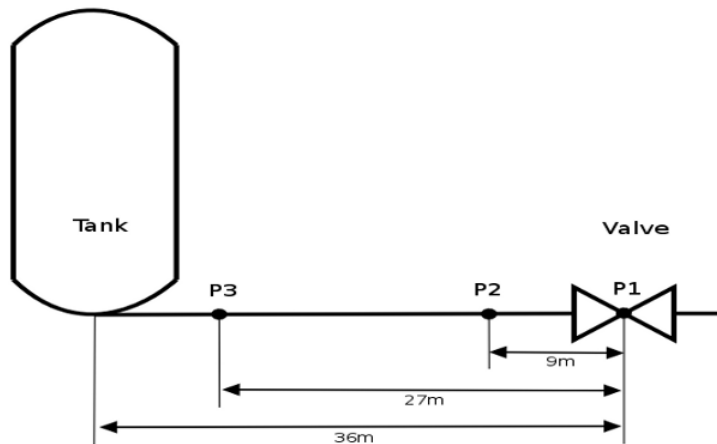


FIGURE 3 – Schematic of Simpson test facility

An important conclusion of Simpson’s work is that the influence of the elasticity of the pipe on the effective speed of sound must be taken into account in order to obtain a fair agreement between simulations and experimental data. Thus we use the Stiffened Gas EOS parameters presented in [13] which are chosen to recover the experimental speed of sound (see table 5). The initial conditions used in the simulations are presented in table 6. They are the same in the pipe and in the tank, and they correspond to the temperature of the experiment  $T = 296.3$  K in both phases. The temperature is assumed to be constant in the simulation so we neglect the temperature relaxation :  $\tau_T = +\infty$ . The chemical relaxation time scale is set to  $\tau_\mu = 10^{-3}$  s with  $\mu_{ref} = |\mu_1| + |\mu_2|$ . We recall that  $\tau_p$  and  $\tau_u$  are respectively defined by equations (12) and (14).

First of all, different mesh refinements have been used in order to carry out a grid convergence study with the CGHS model. As it is shown in figure 4, grid independance is obtained with 50 000 cells : only a few differences on the second pressure peak (occurring around 300 ms) can be observed between the two finest grids. Similar grid sensitivity has been observed for the BN models. Note that all results have been obtained with a CFL condition of 0.99 on 1D meshes thanks to the *Europlexus* fast transient dynamics software [2] where all the previous

TABLE 5 – Stiffened Gas EOS parameters for Simpson experiment

	$\gamma_k$	$p_k^\infty$ (Pa)	$q_k$ (J.kg <sup>-1</sup> )	$C_{V_k}$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	$q'_k$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
<b>vapor</b>	1.34	0.00	2009800.00	1344.06	1977.08
<b>liquid</b>	2.27	692754002.87	-1142331.00	1840.48	24218.87

TABLE 6 – Initial conditions for Simpson experiment

	$\alpha_k$	$\rho_k$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$p_k$ (bar)	$u_k$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>vapor</b>	10 <sup>-6</sup>	2.53	3.419	0.401
<b>liquid</b>	1 – 10 <sup>-6</sup>	997.90	3.419	0.401

models and algorithms have been implemented. Then results for all models on the mesh made of 50 000 cells could be compared with the experimental results. Figure 5 provides us the comparison of the mean pressure  $p = \alpha_l p_l + \alpha_v p_v$  history at the valve. We first notice that we are not able to distinguish the results of the different models. Close results are expected, especially with pressure and velocity relaxations, however the convective parts of the models are so different (see figure 2) that it is rather surprising. Then, we compare the numerical results with the experimental ones. If we focus on the pressure peak at 125 ms, we have an excellent agreement on the times when pressure waves reach the valve. However the amplitude of the peak is a bit overestimated but we think that the addition of a wall friction model could drive it closer to the experimental results.

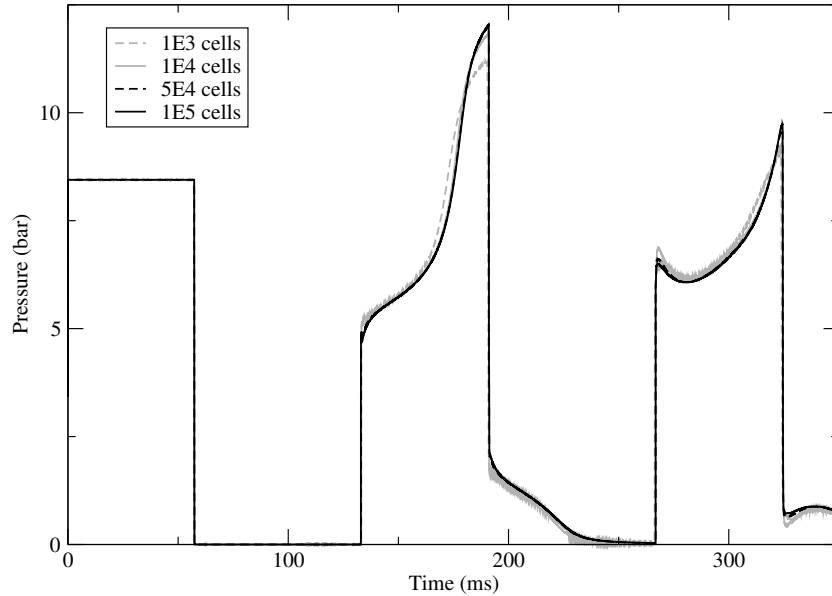


FIGURE 4 – Influence of the grid refinement on the history of the mean pressure  $p = \alpha_l p_l + \alpha_v p_v$  at P1 in Simpson water hammer experiment for CGHS model

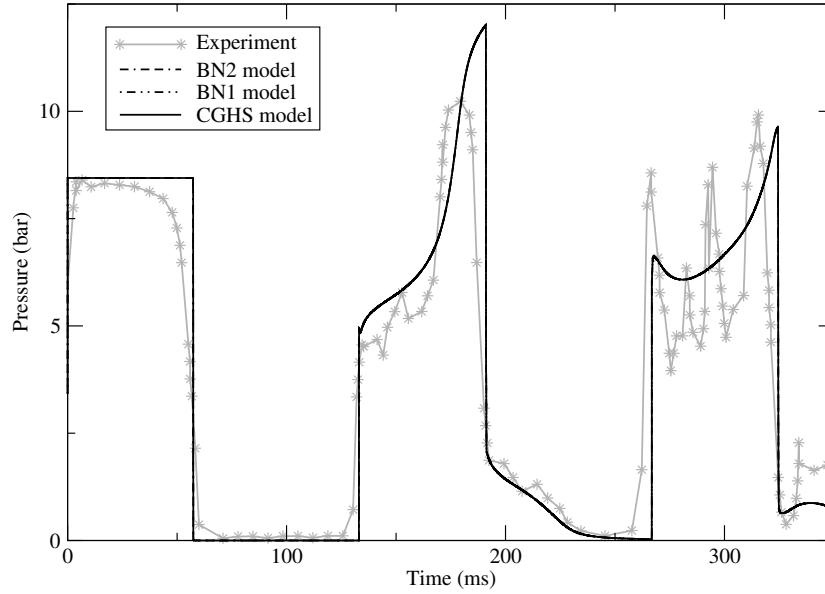


FIGURE 5 – Mean pressure  $p = \alpha_l p_l + \alpha_v p_v$  vs time at P1 in Simpson water hammer experiment : comparison between the CGHS model, the BN models and the experiment

Simpson also provides experimental results with other initial velocities. For smaller initial velocities ( $u_0 = 0.239 \text{ m.s}^{-1}$  for example), mass transfer no longer occurs so that the water hammer is purely monophasic. Obviously, the overall phenomenon is much easier to understand in this case, but it is also a good opportunity to highlight the lack of a wall friction model in our simulations. Figure 6 shows the comparison between the CGHS model, the BN models and the experiment in the monophasic case. As expected in a monophasic case, the results of the different models look the same. If we compare them to the experimental results, we see a very good agreement on the period of pressure peaks but their amplitudes are also slightly overestimated. It underlines the lack of physical dissipative phenomena in the present simulations.

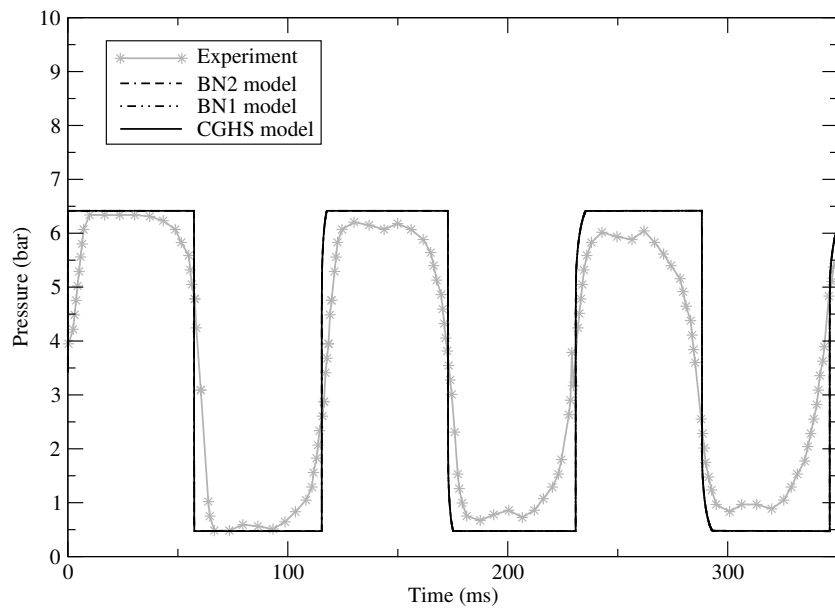


FIGURE 6 – Mean pressure  $p = \alpha_l p_l + \alpha_v p_v$  vs time at P1 in Simpson water hammer experiment with a smaller initial velocity ( $u_0 = 0.239 \text{ m.s}^{-1}$ ) : comparison between the CGHS model, the BN models and the experiment

## 4.2 Discharge of a hot liquid from Canon experiment

The Canon experiment [37] consists in the fast depressurization of water contained in a 4.389 m long pipe. The initial pressure and temperature of the water are high : 32 bar and 493.15 K. At time zero, a membrane located at the end of the pipe is fully broken. It generates a rarefaction wave propagating along the pipe and the liquid water flashes. As detailed in figure 7, several pressure transducers are disposed along the pipe (from P1 to P5) and a void fraction transducer is used at point Pt (between P2 and P3). Experimental results show that the liquid fully flashes therefore this is an excellent test case with vanishing phases. We emphasize the fact that the CGHS model makes more sense than the BN model in those cases from a theoretical point of view since the interfacial velocity  $u_I$  of this model depends on the void fraction unlike the interfacial velocity of the BN models. The computations are still performed with the *Europlexus* fast transient dynamics software [2].

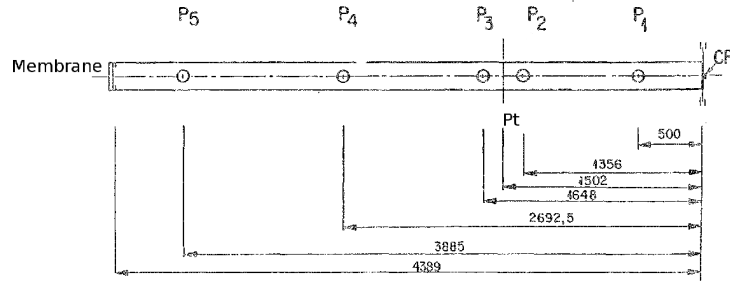


FIGURE 7 – Schematic of Canon test facility

Computational domains used in Canon test case are similar to those used for Simpson test case : a 1D grid with a tank at one side and a closed end at the other. However, it should be emphasized that the initial conditions (see table 8) are different in the tank and in the pipe unlike in Simpson experiment. Indeed, atmospheric conditions are applied in the tank in this case. Table 7 provides the Stiffened Gas EOS parameters. They are chosen to recover the water phase diagram as in [13]. Moreover the relaxation time scales  $\tau_p$  and  $\tau_u$  are respectively defined by equations (12) and (14). We also set  $\tau_T = 10^{-7}$  s and  $\tau_\mu = 5 \times 10^{-5}$  s with  $\mu_{ref} = |\mu_1| + |\mu_2|$ .

TABLE 7 – EOS parameters for Canon experiment

	$\gamma_k$	$p_k^\infty$ (Pa)	$q_k$ (J.kg <sup>-1</sup> )	$C_{V_k}$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	$q'_k$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
<b>vapor</b>	1.34	0.00	2032350.00	1162.00	2351.11
<b>liquid</b>	1.66	769317123.86	-1359570.00	2807.61	11671.61

As in the previous experimental test case, a grid convergence study of the numerical results is carried out. Figure 8 shows the results for the CGHS model with a 0.9 CFL condition : beyond 5000 cells, results are no longer sensitive to the mesh refinement. Thus results on the finest grid (10000 cells) are then compared to the experimental data. As it is shown in figures 9 and 10, numerical results of the different models are also completely similar in this case. Like the experimental data, numerical models show the sudden pressure drop, then the

TABLE 8 – Initial conditions for Canon experiment

		$\alpha_k$	$\rho_k$ ( $\text{kg.m}^{-3}$ )	$p_k$ (bar)	$u_k$ ( $\text{m.s}^{-1}$ )
<b>Pipe</b>	<b>vapor</b>	$10^{-3}$	16.72	32	0.00
	<b>liquid</b>	$1 - 10^{-3}$	841.12	32	0.00
<b>Tank</b>	<b>vapor</b>	$1 - 10^{-3}$	0.52	1	.
	<b>liquid</b>	$10^{-3}$	837.74	1	.

pressure remains constant around the saturation pressure value during the vaporization and slowly decreases to reach the atmospheric pressure. The main difference between the numerical simulations and the experimental results is that the vaporization process is predicted earlier in the simulations but apart from that a good agreement is observed.

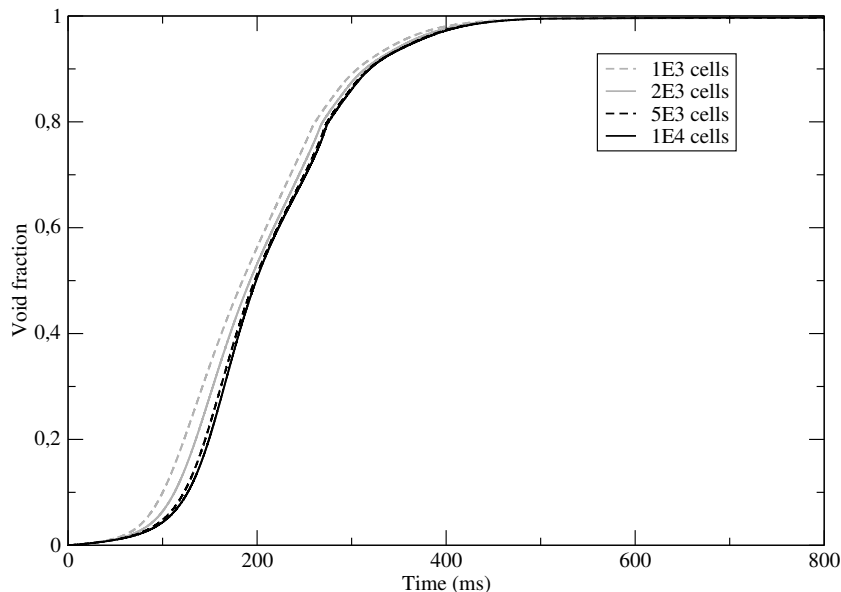


FIGURE 8 – Influence of the grid refinement on the history of the void fraction at Pt in Canon experiment for CGHS model

Although pressure and velocity relaxations are expected to lead to similar results for all models, the fact that no visible difference can be observed on the numerical results of this test case with vanishing phases is surprising. In order to investigate in more depth the effect of the relaxation terms, figure 11 shows normalized pressure and velocity differences between phases over time at Pt ( $p_0 = 32$  bar is the initial pressure in the pipe and  $c_0 = 1234$   $\text{m.s}^{-1}$  the celerity of pressure waves in liquid water at 32 bar). Thus, we observe that the normalized pressure and velocity differences are respectively lower than 1 ‰ and 3 ‰. We can also evaluate the order of magnitude of both  $\tau_p$  and  $\tau_u$ . If we assume that  $p_{ref} = 1$  bar and the dynamic viscosities are  $\eta_1 = 10^{-5}$   $\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$  and  $\eta_2 = 10^{-4}$   $\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ , equation (12) gives :

$$10^{-10} \text{ s} \leq \tau_p \leq 10^{-9} \text{ s}$$

If we also assume that the surface tension  $\sigma = 5 \times 10^{-2}$   $\text{N.m}^{-1}$ , the densities  $\rho_1 = 20$   $\text{kg.m}^{-3}$ ,

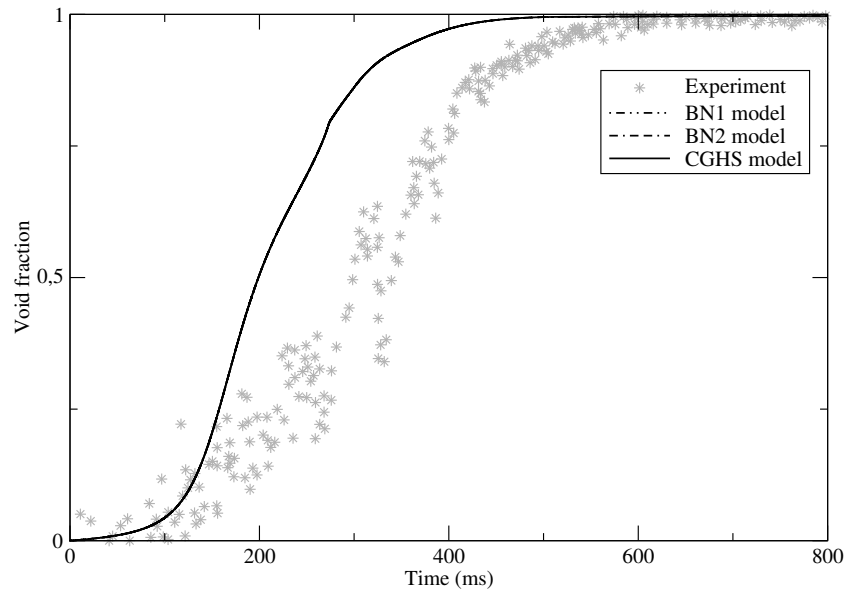


FIGURE 9 – Void fraction vs time at Pt in Canon experiment : comparison between the CGHS model, the BN models and the experiment

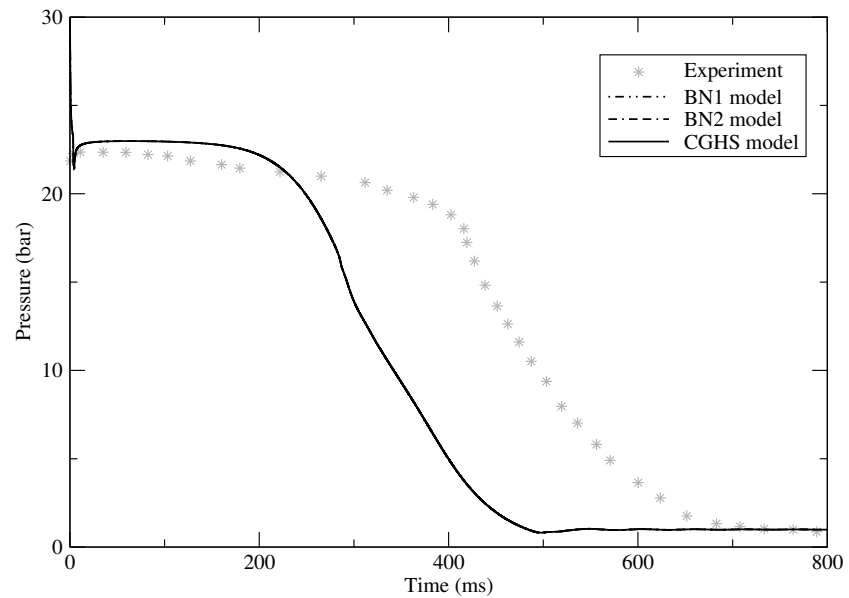


FIGURE 10 – Mean pressure  $p = \alpha_l p_l + \alpha_v p_v$  vs time at Pt in Canon experiment : comparison between the CGHS model, the BN models and the experiment

$\rho_2 = 800 \text{ kg.m}^{-3}$  and the velocity difference  $|u_1 - u_2| = 10 \text{ m.s}^{-1}$  (thanks to figure 11), equation (14) gives :

$$6 \times 10^{-9} \text{ s} \leq \tau_u \leq 8 \times 10^{-4} \text{ s}$$

We can notice that unlike  $\tau_p$ , the order of magnitude of  $\tau_u$  strongly depends on the void fraction because of the difference of densities between the two phases. Both those relaxation time scales need to be compared with the time step given by the CFL condition which is  $\Delta t \approx 3 \times 10^{-7} \text{ s}$  initially. Therefore,  $\tau_p$  is small compared to the time step and it leads to the small pressure difference which can be observed on figure 11. In the case of  $\tau_u$ , the effect of the relaxation during the transient is less clear since  $\tau_u$  can become greater than the time step when the flow is mainly made of vapor. This can be observed on figure 11 after 300 ms, at the end of the vaporization,  $\tau_u$  grows and so does the velocity difference. However, it does not exceed 3 % as pointed out before. On the whole, pressure and velocity differences remain small due to small relaxation time scales hence the numerical results of the different models are similar on this test case. Unfortunately, this result can not easily be extended to other applications, even other steam-water applications, due to the strong dependance of  $\tau_u$  on the void fraction. Indeed the mass transfer, which is a complex phenomenon in steam-water flows, has a significant effect on the void fraction and thus on the relaxation effects.

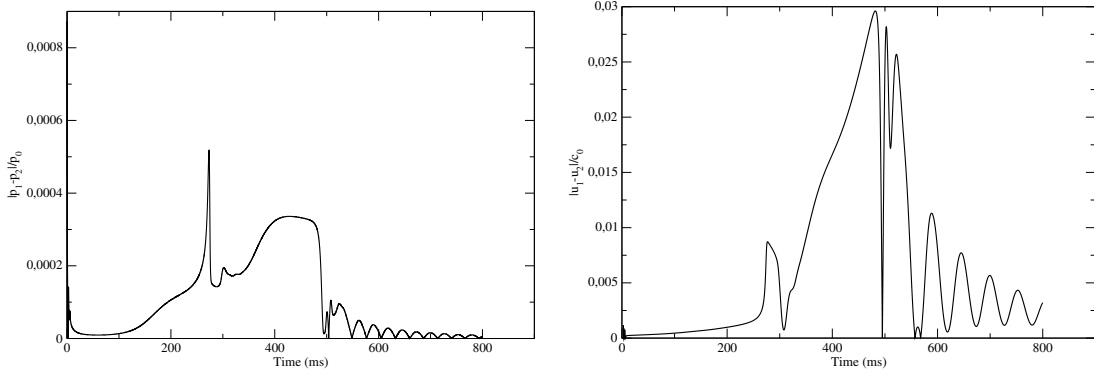


FIGURE 11 – Normalized pressure (left,  $p_0 = 32 \text{ bar}$ ) and velocity (right,  $c_0 = 1234 \text{ m.s}^{-1}$ ) differences between phases vs time at Pt in Canon experiment.



## 5 Conclusion

Different two-phase flow models have been presented and compared with each other in steam-water transient applications. They all are two-fluid models and they exhibit the same mathematical properties. Thus, similar approaches have been used to compute numerical approximations of those models. It is based on a fractional step method that complies with the key property of all models, an overall entropy inequality. For each step and substep of the method, rather simple numerical schemes have been used and particular attention have been paid to their verification with grid convergence studies. We emphasize this point because it is of major importance if we want a comparison between models with only a few numerical approximations. We also recall that schemes for relaxation terms proposed in [25] have been extended to Stiffened Gas EOS and that pressure relaxation in the case of the CGHS model has required the proposition of a new scheme.

From a theoretical point of view, pressure and velocity relaxation phenomena are expected to drive models closer to each other. Therefore we require physically relevant implementations of those two substeps and of the corresponding approximations of the relaxation time scales. For both test cases involving steam-water transients with mass transfer, the three models give a fair agreement with experimental data. An important conclusion of the present work is that all three models provide almost the same converged numerical results on those test cases, even with vanishing phases. It is surprising regarding the differences between the convective part of the models. Further work should be devoted to confirm this trend and also to improve the modelling of the mass transfer in order to obtain numerical results closer to the experimental data. The chemical potential relaxation time scale seems to be a key parameter in the current models, however only little attention has been paid to this for non-homogeneous models in the literature.

**Acknowledgements** The first author received a financial support through an EDF-CIFRE contract 0459-2013. Computational facilities were provided by EDF. Numerical simulations have been performed with the *Europlexus* code.

## Appendix A. A class of two-fluid models

The new framework proposed in [24] considers the scalar  $\chi$  which is introduced in the closure law of the interfacial velocity  $u_I$  as a new variable of a class of two-fluid models. This variable is a non-dimensional scalar lying in  $[0, 1]$  that characterizes the flow regime. The corresponding set of equations reads :

$$\begin{cases} \partial_t(\chi) & + \omega \partial_x(\chi) & = \chi(\chi - 1) \left(\chi - \frac{1}{2}\right) S_\chi \\ \partial_t(\alpha_k) & + u_I \partial_x(\alpha_k) & = S_{1,k} \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k) & + \partial_x(\alpha_k \rho_k u_k) & = S_{2,k} \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k u_k) & + \partial_x(\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) - p_I \partial_x(\alpha_k) & = S_{3,k} \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k e_k) & + \partial_x(\alpha_k \rho_k e_k u_k + \alpha_k p_k u_k) - p_I u_I \partial_x(\alpha_k) & = S_{4,k} \end{cases} \quad (33)$$

The same closure laws as in section 2.1 are used :

$$\begin{aligned} u_I &= a u_1 + (1 - a) u_2, & a &= \frac{\chi m_1}{\chi m_1 + (1 - \chi) m_2} \\ p_I &= b p_1 + (1 - b) p_2, & b &= \frac{(1 - a) T_2}{a T_1 + (1 - a) T_2} \end{aligned}$$

and the source terms  $S_{j,k}$  are defined by equations (5) and (6). The velocity  $\omega$  is closed so that the field associated with  $\lambda = \omega$  is linearly degenerate. Two different approaches are proposed in [24] :

$$\omega = \frac{m_1 u_1 + m_2 u_2}{m_1 + m_2} \quad \text{or} \quad \omega = 0 \quad (34)$$

The first choice ensures that the corresponding field is linearly degenerate and follows a moving interface between two domains. The second choice is rather equivalent to user-defined domains where particular models are used, depending on the dominant phase for example. In that case, it is important to note that the BN and CGHS models ( $\chi = 0, \frac{1}{2}, 1$ ) provide particular solutions of the first equation of system (33). We briefly recall the properties of this class of models. Details and proofs can be found in [24].

- **Entropy inequality**

Smooth solutions of system (33) with the previous closure laws comply with an entropy inequality :

$$\partial_t \left( \sum_k m_k s_k \right) + \partial_x \left( \sum_k m_k s_k u_k \right) \geq 0$$

- **Hyperbolicity and structure of waves**

The convective part of system (33) is hyperbolic and admits eight real eigenvalues :

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \omega, & \lambda_2 &= u_I, \\ \lambda_3 &= u_1 - c_1, & \lambda_4 &= u_1, & \lambda_5 &= u_1 + c_1, \\ \lambda_6 &= u_2 - c_2, & \lambda_7 &= u_2, & \lambda_8 &= u_2 + c_2 \end{aligned}$$

Associated righteigenvectors span the whole space  $\mathbb{R}^8$  if  $|u_k - u_I| \neq c_k$  and  $|u_k - \omega| \neq c_k$ . Fields associated with eigenvalues  $\lambda_{1,2,4,7}$  are linearly degenerate (LD) whereas fields associated with eigenvalues  $\lambda_{3,5,6,8}$  are genuinely non linear (GNL).

- **Jump conditions**

Unique jump conditions hold within each isolated field. Moreover, classical single phase jump relations hold in the GNL fields :

$$\left\{ \begin{array}{l} [\chi] = 0 \\ [\alpha_k] = 0 \\ -\sigma [\rho_k] + [\rho_k u_k] = 0 \\ -\sigma [\rho_k u_k] + [\rho_k u_k^2 + p_k] = 0 \\ -\sigma [\rho_k e_k] + [\rho_k e_k u_k + p_k u_k] = 0 \end{array} \right.$$

## Appendix B. Verification of the pressure relaxation scheme

This appendix is dedicated to the verification of the pressure relaxation scheme presented in section 3.2.1. In the case of BN models, it can be found in [25] so we focus on the case of the CGHS model. Thus, we recall that approximate solutions of the following system :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_k) = \Phi_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) = -p_I \Phi_k \end{array} \right. \quad (35)$$

are computed using the following scheme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\alpha_k^* - \alpha_k^0}{\Delta t} = \frac{1}{(\tau_p p_{ref})^0} \alpha_k^* \alpha_j^* (p_k^* - p_j^*) \\ \frac{m_k^* \varepsilon_k^* - m_k^0 \varepsilon_k^0}{\Delta t} = -(b^0 p_1^* + (1 - b^0) p_2^*) \frac{\alpha_k^* - \alpha_k^0}{\Delta t} \end{array} \right. , \quad j = 3 - k \quad (36)$$

which is equivalent to a non-linear system in  $\alpha_1^*$ ,  $p_1^*$  and  $p_2^*$ . The parameters of the Stiffened Gas used in the verification test case (see table 9) are chosen so that an analytical solution of system (35) could be provided. The initial conditions of the test case are presented in table 10 and the pressure relaxation time scale is set in the following way :  $\tau_p p_{ref} = \frac{4}{3} \mu$  with  $\mu = 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ . Figure 12 shows that a first-order of convergence is retrieved, as expected.

TABLE 9 – EOS parameters for the pressure relaxation test case

	$\gamma_k$	$p_k^\infty$ (en Pa)	$q_k$ (J.kg <sup>-1</sup> )	$C_{V_k}$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	$q'_k$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
<b>phase 1</b>	2	0.00	0.00	1500	0
<b>phase 2</b>	2	0.00	0.00	1500	0

TABLE 10 – Initial conditions for the pressure relaxation test case

	$\alpha_k$	$\rho_k$ ( $\text{kg.m}^{-3}$ )	$p_k$ (Pa)	$u_k$ ( $\text{m.s}^{-1}$ )
<b>phase 1</b>	0.8	2	100000	50
<b>phase 2</b>	0.2	1000	1600000	-20

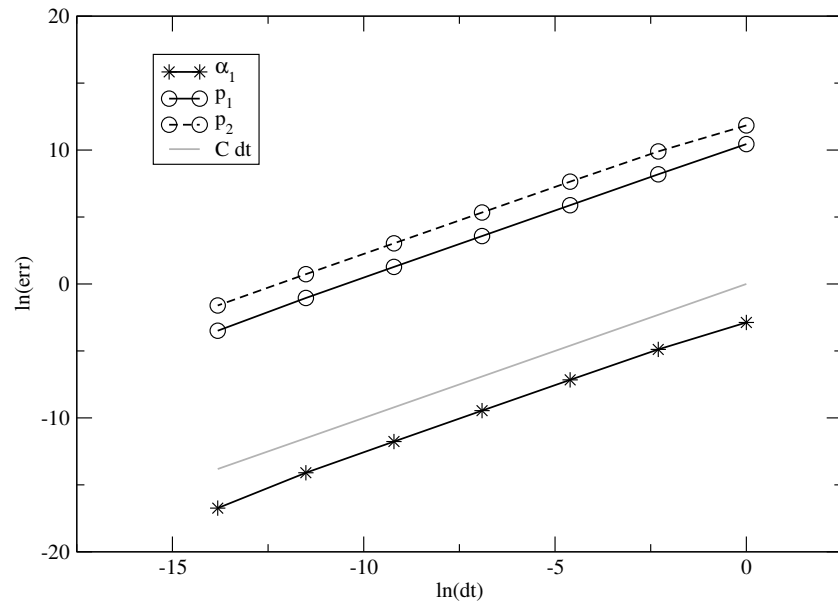


FIGURE 12 – Convergence study of the pressure relaxation scheme :  $L1$  norm of the error vs  $\Delta t$  at  $t_f = 10^{-9}$  s.

## Appendix C. Verification of the chemical potential relaxation scheme

This appendix is dedicated to the verification of the chemical potential relaxation scheme presented in section 3.2.4. Approximate solutions of the following system are computed :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & = 0 \\ \partial_t (m_k) & = \Gamma_k \\ \partial_t (m_k u_k) & = \mathcal{U} \Gamma_k \\ \partial_t (m_k \varepsilon_k) & = 0 \end{cases} \quad (37)$$

To that end, an implicit scheme is used. First,  $m_k^*$  is determined by solving the following non-linear equations :

$$\frac{m_k^* - m_k^0}{\Delta t} = \frac{1}{(\tau_\mu \mu_{ref})^0} \frac{m_k^* m_j^*}{m_k^* + m_j^*} (\mu_j^* - \mu_k^*) \quad , \quad j = 3 - k \quad (38)$$

Then,  $u_k^*$  can be easily computed as the solution of a linear system :

$$\frac{m_k^* u_k^* - m_k^0 u_k^0}{\Delta t} = \frac{u_k^* + u_j^*}{2} \frac{m_k^* - m_k^0}{\Delta t} \quad , \quad j = 3 - k \quad (39)$$

As in the case of pressure relaxation, we provide a verification test case with a particular choice of the EOS parameters (table 11) in order to have an analytical solution of system (37). Table 12 gathers the initial conditions of the test case. The chemical potential relaxation time scale is set to  $\tau_\mu = 10^{-3}$  s and the reference chemical potential to  $\mu_{ref} = 10^4$  J.kg<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>. As we can see in figure 13, we retrieve the expected first order of convergence.

TABLE 11 – EOS parameters for the chemical potential relaxation test case

	$\gamma_k$	$p_k^\infty$ (Pa)	$q_k$ (J.kg <sup>-1</sup> )	$C_{V_k}$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	$q'_k$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
<b>phase 1</b>	1.4	100000	0	3125	2000
<b>phase 2</b>	2.5	7000000	0	1750	25000

TABLE 12 – Initial conditions for the chemical potential relaxation test case

	$\alpha_k$	$\rho_k$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$p_k$ (Pa)	$u_k$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>phase 1</b>	0.2	2.5	2800000	50
<b>phase 2</b>	0.8	995	3400000	20

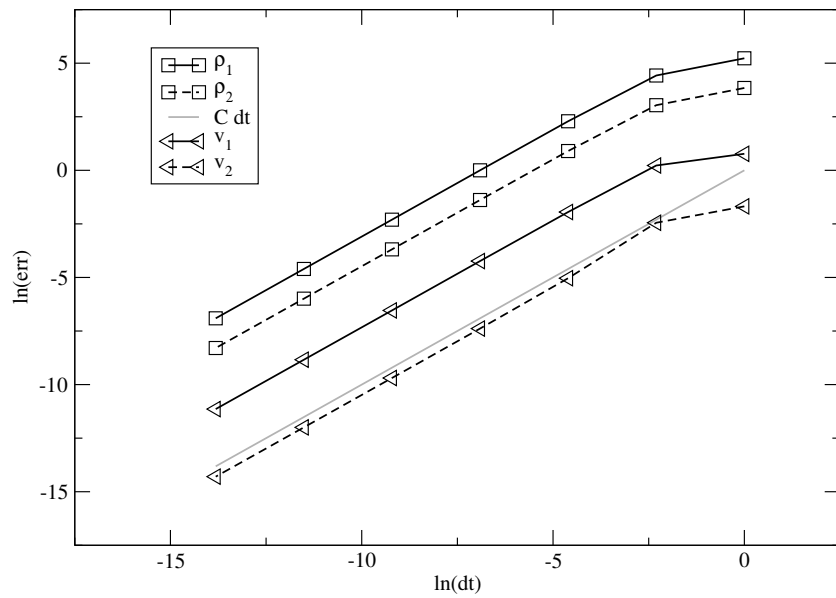


FIGURE 13 – Convergence study of the chemical potential relaxation scheme :  $L1$  norm of the error vs  $\Delta t$  at  $t_f = 5 \times 10^{-3}$  s.

# References

- [1] RELAP5-3d Code Manual Volume IV : Models and Correlations. Technical Report INEEL-EXT-98-00834, Idaho National Laboratory (INL), 2012.
- [2] Europlexus User’s Manual. Technical Report, Joint Research Centre (JRC), Commissariat à l’énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), 2016.  
URL [http://europlexus.jrc.ec.europa.eu/public/manual\\_html/index.html](http://europlexus.jrc.ec.europa.eu/public/manual_html/index.html)
- [3] A. Ambroso, C. Chalons, and P.-A. Raviart. A Godunov-type method for the seven-equation model of compressible two-phase flow. *Computers & Fluids*, 54 :67–91, 2012.
- [4] N. Andrianov and G. Warnecke. The Riemann problem for the Baer–Nunziato two-phase flow model. *Journal of Computational Physics*, 195(2) :434–464, 2004.
- [5] M. Baer and J. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6) :861–889, 1986.
- [6] J. B. Bdzil, R. Menikoff, S. F. Son, A. K. Kapila, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : A critical examination of modeling issues. *Physics of Fluids*, 11(2) :378–402, 1999.
- [7] R. Berry, L. Zou, H. Zhao, D. Andrs, J. Peterson, H. Zhang, and R. Martineau. Relap-7 : Demonstrating Seven-Equation, Two-Phase Flow Simulation in a Single-Pipe, Two-Phase Reactor Core and Steam Separator/Dryer. Technical Report INL/EXT-13-28750, Idaho National Laboratory (INL), 2013.  
URL <https://inldigitalibrary.inl.gov/sti/5712467.pdf>
- [8] A. Chinnayya, E. Daniel, and R. Saurel. Modelling detonation waves in heterogeneous energetic materials. *Journal of Computational Physics*, 196(2) :490–538, 2004.
- [9] F. Coquel, T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *Comptes Rendus Mathématique*, 334(10) :927–932, 2002.
- [10] F. Coquel, J.-M. Hérard, K. Saleh, and N. Seguin. A robust entropy-satisfying finite volume scheme for the isentropic Baer-Nunziato model. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 48(1) :165–206, 2014.
- [11] F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, P. Helluy, J.-M. Hérard, O. Hurisse, and Y. Liu. Approximate solutions of the Baer-Nunziato Model. *ESAIM : Proceedings*, 40 :63–82, 2013.
- [12] F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, J.-M. Hérard, O. Hurisse, and Y. Liu. Validation of a two-fluid model on unsteady liquid-vapor water flows. *Computers & Fluids*, 119 :131–142, 2015.

- [13] F. Daude, P. Galon, Z. Gao, and E. Blaud. Numerical experiments using a HLLC-type scheme with ALE formulation for compressible two-phase flows five-equation models with phase transition. *Computers & Fluids*, 94 :112–138, 2014.
- [14] V. Deledicque and M. V. Papalexandris. An exact Riemann solver for compressible two-phase flow models containing non-conservative products. *Journal of Computational Physics*, 222(1) :217–245, 2007.
- [15] P. Downar-Zapolski, Z. Bilicki, L. Bolle, and J. Franco. The non-equilibrium relaxation model for one-dimensional flashing liquid flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 22(3) :473–483, 1996.
- [16] D. A. Drew and S. L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer Verlag, 1999.
- [17] T. Gallouët, P. Helluy, J.-M. Hérard, and J. Nussbaum. Hyperbolic relaxation models for granular flows. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 44(2) :371–400, 2010.
- [18] T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Numerical Modeling Of Two-Phase Flows Using The Two-Fluid Two-Pressure Approach. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 14(05) :663–700, 2004.
- [19] S. Gavriluk. The structure of pressure relaxation terms : one-velocity case. Internal report H-I83-2014-00276-EN, EDF R&D, 2014.
- [20] S. Gavriluk and R. Saurel. Mathematical and Numerical Modeling of Two-Phase Compressible Flows with Micro-Inertia. *Journal of Computational Physics*, 175(1) :326–360, 2002.
- [21] J. Glimm, D. Saltz, and D. H. Sharp. Renormalization group solution of two-phase flow equations for Rayleigh-Taylor mixing. *Physics Letters A*, 222(3) :171–176, 1996.
- [22] V. Guillemaud. *Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques par une approche bifluide à deux pressions*. Ph.D. thesis, Université de Provence - Aix-Marseille I, 2007.  
URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00169178/document>
- [23] J.-M. Hérard. A three-phase flow model. *Mathematical and Computer Modelling*, 45(5–6) :732–755, 2007.
- [24] J.-M. Hérard. Une classe de modèles diphasiques bifluides avec changement de régime. Internal report H-I81-2010-00486-FR, EDF, 2010.
- [25] J.-M. Hérard and O. Hurisse. A fractional step method to compute a class of compressible gas-liquid flows. *Computers & Fluids*, 55 :57–69, 2012.
- [26] J.-M. Hérard and Y. Liu. Une approche bifluide statistique de modelisation des écoulements diphasiques à phases compressibles. Internal report H-I81-2013-01162-FR, EDF, 2013.
- [27] M. Ishii. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flows*. Collection de la Direction des Etudes et Recherches d’Electricité de France, 1975.
- [28] H. Jin, J. Glimm, and D. H. Sharp. Entropy of averaging for compressible two-pressure two-phase flow models. *Physics Letters A*, 360(1) :114–121, 2006.
- [29] A. K. Kapila, S. F. Son, J. B. Dzil, R. Menikoff, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of DDT : Structure of the velocity-relaxation zone. *Physics of Fluids*, 9(12) :3885–3897, 1997.



- [30] J. Lavieville, M. Boucker, E. Quemerais, S. Mimouni, and N. Mechtoua. NEPTUNE.cfd V1.0 - Theory Manual. Internal report H-I81-2006-04377-EN, EDF R&D, 2006.
- [31] O. Le Métayer, J. Massoni, and R. Saurel. Élaboration des lois d'état d'un liquide et de sa vapeur pour les modèles d'écoulements diphasiques. *International Journal of Thermal Sciences*, 43(3) :265–276, 2004.
- [32] O. Le Métayer, J. Massoni, and R. Saurel. Dynamic relaxation processes in compressible multiphase flows. Application to evaporation phenomena. *ESAIM : Proceedings*, 40 :103–123, 2013.
- [33] H. Lochon. Modélisation d'écoulements diphasiques : fermetures entropiques de modèles bifluïdes. Internal report H-T63-2014-10406-FR, EDF, 2014.
- [34] S. Müller, M. Hantke, and P. Richter. Closure conditions for non-equilibrium multi-component models. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, pages 1–33, 2015.
- [35] M. Pelanti and K.-M. Shyue. A mixture-energy-consistent six-equation two-phase numerical model for fluids with interfaces, cavitation and evaporation waves. *Journal of Computational Physics*, 259 :331–357, 2014.
- [36] V. H. Ransom and D. L. Hicks. Hyperbolic two-pressure models for two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 53(1) :124–151, 1984.
- [37] B. Riegel. *Contribution à l'étude de la décompression d'une capacité en régime diphasique*. Ph.D. thesis, Université Scientifique et Médicale et Institut National Polytechnique de Grenoble, 1978.
- [38] R. Saurel and R. Abgrall. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2) :425–467, 1999.
- [39] D. W. Schwendeman, C. W. Wahle, and A. K. Kapila. The Riemann problem and a high-resolution Godunov method for a model of compressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 212(2) :490–526, 2006.
- [40] A. R. Simpson. *Large water hammer pressures due to column separation in sloping pipes*. Ph.D. thesis, University of Michigan, 1986.
- [41] S. Tokareva and E. Toro. HLLC-type Riemann solver for the Baer–Nunziato equations of compressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 229(10) :3573–3604, 2010.

## Chapitre 4

# Solveur de Riemann de type HLLC avec approximation du contact diphasique pour le modèle bifluide de Baer-Nunziato

Dans ce chapitre, un nouveau schéma de convection pour le modèle de Baer-Nunziato [11] est présenté. Ce modèle bifluide à deux pressions peut s'écrire sous forme vectorielle :

$$\partial_t (\mathbf{U}) + \partial_x (\mathbf{F}(\mathbf{U})) + \mathbf{H}(\mathbf{U})\partial_x (\alpha_1) = \mathbf{S}(\mathbf{U})$$

Le nouveau schéma présenté ici est donc dédié à la résolution du système convectif suivant :

$$\partial_t (\mathbf{U}) + \partial_x (\mathbf{F}(\mathbf{U})) + \mathbf{H}(\mathbf{U})\partial_x (\alpha_1) = \mathbf{0}$$

Ce système contient des produits non-conservatifs  $\mathbf{H}(\mathbf{U})\partial_x (\alpha_1)$ , cependant, dans le cas du modèle BN, ces derniers sont associés à une onde linéairement dégénérée et ne sont donc pas actifs au travers des ondes de chocs. Pour la discrétisation de ces termes, Schwendeman *et al.* [106] ont proposé la “thin-layer approximation” dans le cadre d’une méthode de type Godunov. Cette approximation a été également utilisée par Tokareva et Toro [112] dans un solveur de type HLLC.

Les produits non-conservatifs du modèle sont liés à l’onde linéairement dégénérée associée au saut de taux de présence des phases et que nous désignons donc par contact diphasique dans la suite. Sur la base d’une analyse physique valable pour les configurations subsoniques, nous proposons ici une approximation des invariants de Riemann de cette onde. Nous utilisons alors cette hypothèse du “contact diphasique approché” dans le cadre d’un solveur de type HLLC sur la base des travaux de Tokareva et Toro [112]. Ce solveur de Riemann prend en compte toutes les ondes du modèle et peut être utilisé directement avec toute loi d’état grâce à l’approximation du contact diphasique. Une autre conséquence importante de cette approximation est que le solveur n’est plus basé sur l’utilisation d’une méthode itérative afin de résoudre un problème non-linéaire local à chaque interface contrairement au solveur HLLC d’origine. En effet, les états intermédiaires de la solution du problème de Riemann sont alors

approchés en résolvant un système linéaire. Enfin, en ce qui concerne l'intégration des produits non-conservatifs, l'approximation du contact diphasique est en accord avec la "thin-layer approximation" ce qui permet une approche similaire à [112].

Des cas-tests 1D et 2D sont sélectionnés afin d'évaluer le nouveau solveur HLLC et de le comparer à 2 solveurs existants, le schéma de Rusanov et le schéma HLLC proposé par Tokareva et Toro [112]. Des études de convergence sont également menées sur plusieurs problèmes de Riemann 1D. Elles montrent que le nouveau schéma est bien plus précis que le schéma de Rusanov, presque autant que le schéma HLLC d'origine dans un grand nombre de cas. Des problèmes de Riemann avec phases évanescentes sont également étudiés et montrent que le schéma proposé est très robuste en comparaison du schéma de Tokareva et Toro. Enfin, un dernier cas-test 1D montre la capacité du nouveau solveur à gérer des lois d'états complexes. Les trois schémas sont ensuite comparés sur trois cas-tests 2D, le premier concerne une interaction choc-bulle et les deux suivants des explosions sous-marines. Dans les trois cas, des interfaces matérielles ainsi que des ondes de choc (avec des sauts de pression et densités très importants dans le second cas) sont étudiés. Une fois de plus, le schéma proposé montre une précision proche de celle du schéma HLLC de Tokareva et Toro et fait preuve d'une plus grande robustesse. Enfin, il apparaît également plus efficace en terme de coût de calcul.

Les travaux présentés dans ce chapitre ont fait l'objet d'un article accepté pour publication dans la revue *Journal of Computational Physics*.

# HLLC-type Riemann solver with approximated two-phase contact for the computation of the Baer-Nunziato two-fluid model

H. Lochon<sup>a,b,e</sup>, F. Daude<sup>a,b</sup>, P. Galon<sup>b,c</sup>, and J.-M. Hérard<sup>d,e</sup>

<sup>a</sup>EDF R&D, Département AMA, 7 Boulevard Gaspard Monge, 91120 Palaiseau, France

<sup>b</sup>IMSIA, UMR EDF/CNRS/CEA/ENSTA 9219, 828 Boulevard des Maréchaux, 91762 Palaiseau Cedex, France

<sup>c</sup>CEA, DEN, DANS, DM2S, SEMT, DYN, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

<sup>d</sup>EDF R&D, Département MFEE, 6 Quai Watier, 78401 Chatou Cedex, France

<sup>e</sup>I2M, UMR CNRS 7373, Technopôle Château-Gombert, 39 rue F. Joliot Curie, 13453 Marseille Cedex 13, France

## Abstract

The computation of compressible two-phase flows with the Baer-Nunziato model is addressed. Only the convective part of the model that exhibits non-conservative products is considered and the source terms of the model that represent the exchange between phases are neglected. Based on the solver proposed by Tokareva & Toro [42], a new HLLC-type Riemann solver is built. The key idea of this new solver lies in an approximation of the two-phase contact discontinuity of the model. Thus the Riemann invariants of the wave are approximated in the “subsonic” case. A major consequence of this approximation is that the resulting solver can deal with any Equation of State. It also allows to bypass the resolution of a non-linear equation based on those Riemann invariants. We assess the solver and compare it with others on 1D Riemann problems including grid convergence and efficiency studies. The ability of the proposed solver to deal with complex Equations Of State is also investigated. Finally, the different solvers have been compared on challenging 2D test-cases due to the presence of both material interfaces and shock waves : a shock-bubble interaction and underwater explosions. When compared with others, the present solver appears to be accurate, efficient and robust.

## 1 Introduction

Different strategies are used to model compressible two-phase flows. Unlike the homogeneous approaches, the two-fluid approaches do not consider a mixture of the two phases with supposed equilibrium between phases. The two-fluid models are built using an averaging procedure of the local conservation laws [17, 30]. If no phasic equilibrium is assumed, two-pressure two-fluid models are obtained. As shown by Ransom and Hicks [39], who proposed one of the first two-pressure two-fluid models, this class of models exhibits pleasant mathematical properties, particularly hyperbolic systems. More recently, Baer and Nunziato [5] proposed another model of this class to study granular explosive materials. Then, the model has been used in a wider range of applications and many different closure laws have been proposed to that purpose [8, 21–23, 40]. The mathematical properties of the Baer-Nunziato model without any source term were first studied by Embid and Baer [19]. The main difficulty of the convective part of the model lies in the fact that it cannot be written under a conservative form. However, a detailed analysis of the system shows that the non-conservative products are associated with a linearly degenerate characteristic field due to the particular choice of

closure laws of the Baer-Nunziato model. Thus the non-conservative products are not active across shock waves resulting in unique jump conditions.

Many Finite Volume schemes have been proposed to tackle the numerical resolution of the Baer-Nunziato model, or similar forms, with different treatments of the non-conservative terms. Saurel and Abgrall [40] proposed to use a “free streaming” condition to discretize the non-conservative terms together with Rusanov and HLL schemes. Complete Riemann solvers that take into account all the characteristic waves of the model have then been proposed. Schwendeman *et al.* [41] and later Deledicque and Papalexandris [16] built Godunov-type schemes to that purpose. For the treatment of the non-conservative terms, Schwendeman *et al.* [41] proposed the “thin layer approximation” : the associated linearly degenerate wave is approximated by a thin layer across which the solution is assumed to be smooth. This approximation has also been used in the HLLC-type solver proposed by Tokareva and Toro [42]. Simpler but incomplete Riemann solvers have been proposed based on HLL-type solver [3] and HLLC-type solvers [20, 34]. The so-called VFRoe-ncv scheme used by Gallouët *et al.* [21] is another attempt to tackle the non-conservative framework. Extension of the Osher scheme to non-conservative systems has also been applied to the Baer-Nunziato model [18]. Finally, relaxation approaches have been applied to both the isentropic and the complete Baer-Nunziato model [2, 9, 10].

In this paper, we propose a new approximation of the linearly degenerate wave associated with the non-conservative terms. This approximation is based on a physically-relevant simplification of the Riemann invariants of the corresponding wave in the “subsonic” case. We propose to use it in a HLLC-type Riemann solver based on the work of Tokareva and Toro [42]. It results in a complete Riemann solver that can deal with any Equation Of State in a straightforward way thanks to the proposed approximation. Another important feature of the present solver is that no iterative method to solve a non-linear equation is required unlike the original HLLC-type solver. Indeed, the intermediate states of the Riemann problem are approximated as a solution of a linear system. Regarding the integration of the non-conservative terms, our new approximation is in agreement with the “thin layer approximation”, therefore we treat them as in [41, 42]. We compare this new solver with the Rusanov scheme and the HLLC-type solver [42] on both 1D and 2D test-cases. A detailed analysis of the accuracy of the solver is carried out, based on several grid convergence studies on 1D Riemann problems. We also pay a particular attention to the case of vanishing phases as it is involved in a lot of practical configurations and may raise robustness problems. The proposed scheme provides similar results as the original HLLC-type solver in most numerical test-cases. Moreover it appears to be very robust and computationally efficient.

Thus the paper is organized as follows. Section 2 introduces the governing equations of the Baer-Nunziato model. We also recall the main mathematical properties of the model in order to describe the general solution of the Riemann problem, particularly the two subsonic configurations. Section 3 is devoted to the numerical scheme. We first present the approximation of the two-phase contact which is the keystone of the scheme. Then we detailed the HLLC-type Riemann solver based on this approximation and we provide the complete numerical flux for the associated Finite Volume scheme. In section 4, we assess the proposed numerical scheme. Seven 1D Riemann problems have been carefully chosen to compare it with the Rusanov scheme and the HLLC-type scheme proposed by Tokareva and Toro [42]. Grid convergence studies are carried out on half of the test-cases in order to provide a deeper analysis. Besides, we also assess the ability of the solver to deal with complex Equations of State. Finally, three

2D test-cases are studied : a shock-bubble interaction and two underwater explosions. They both include material interfaces and shock waves (with very high pressure differences in the case of underwater explosions) so they are particularly suited to investigate both the accuracy and the robustness of the schemes.

## 2 The Baer-Nunziato model

### 2.1 Governing equations

The governing equations of the Baer-Nunziato model [5] without source terms are the following (when restricting to the one-dimensional case) :

$$\begin{cases} \partial_t(\alpha_1) & + & u_I \partial_x(\alpha_1) & = & 0 \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k) & + & \partial_x(\alpha_k \rho_k u_k) & = & 0 \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k u_k) & + & \partial_x(\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) + (-1)^k p_I \partial_x(\alpha_1) & = & 0 \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k e_k) & + & \partial_x(\alpha_k \rho_k e_k u_k + \alpha_k p_k u_k) + (-1)^k p_I u_I \partial_x(\alpha_1) & = & 0 \end{cases} \quad (1)$$

The subscript  $k$  is the index of the phase ( $k = 1, 2$ ). Thus,  $\alpha_k$  which is the volume fraction of phase  $k$ , lies in  $]0, 1[$  and complies with the following relation :

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1$$

$\rho_k$ ,  $u_k$  and  $p_k$  respectively refer to the mean density, the mean velocity and the mean pressure of phase  $k$ . The specific total energy  $e_k$  is given by :

$$e_k = \varepsilon_k + \frac{1}{2} u_k^2$$

where  $\varepsilon_k$  is the specific internal energy of phase  $k$ , linked to the density and pressure by an Equation Of State (EOS) :

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k(\rho_k, p_k) \quad (2)$$

Thanks to the EOS, the celerity  $c_k$  of acoustics waves in phase  $k$  is defined using the following :

$$\rho_k c_k^2 = (\partial_{p_k} \varepsilon_k)^{-1} \left( \frac{p_k}{\rho_k} - \rho_k (\partial_{\rho_k} \varepsilon_k) \right) \quad (3)$$

The specific entropy  $s_k$  of phase  $k$  complies with :

$$c_k^2 (\partial_{p_k} s_k) + (\partial_{\rho_k} s_k) = 0 \quad (4)$$

and the temperature  $T_k$  is defined as :

$$\frac{1}{T_k} = (\partial_{p_k} \varepsilon_k)^{-1} (\partial_{p_k} s_k) \quad (5)$$

The closure laws for the interfacial velocity and pressure ( $u_I, p_I$ ) used by Baer and Nunziato [5] are the following :

$$(u_I, p_I) = (u_2, p_1) \quad (6)$$

Many other closure laws have been proposed in the literature since then. For example, the approach proposed by Coquel *et al.* [8] and used in [21] is based on two requirements : the enforcement of an entropy inequality and a linearly degenerate field associated with  $\lambda = u_I$ . The following closure laws comply with these two conditions :

$$\begin{aligned} u_I &= au_1 + (1-a)u_2, & a &= \frac{\chi\alpha_1\rho_1}{\chi\alpha_1\rho_1 + (1-\chi)\alpha_2\rho_2} \\ p_I &= bp_1 + (1-b)p_2, & b &= \frac{(1-a)T_2}{aT_1 + (1-a)T_2} \end{aligned}$$

with  $\chi \in [0, 1]$ . We can notice that the case when  $\chi = 0$  (or  $\chi = 1$ ) corresponds to the closure laws of Baer and Nunziato [5] and the case when  $\chi = \frac{1}{2}$  to the closure laws proposed in [8, 21]. Those three choices ( $\chi = 0, \frac{1}{2}, 1$ ) have been compared for steam-water transient flows in [36]. Other approaches can also be found in the literature [7, 23, 31, 40] and a wider class of models is introduced in appendix A of [36]. **In the sequel, we use the closure laws proposed by Baer and Nunziato, detailed in equation (6).**

System (1) may be recast in the following vectorial form :

$$\partial_t(\mathbf{U}) + \partial_x(\mathbf{F}(\mathbf{U})) + \mathbf{H}(\mathbf{U})\partial_x(\alpha_1) = \mathbf{0} \quad (7)$$

with

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_k\rho_k \\ \alpha_k\rho_k u_k \\ \alpha_k\rho_k e_k \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_k\rho_k u_k \\ \alpha_k\rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k \\ \alpha_k\rho_k e_k u_k + \alpha_k p_k u_k \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad \mathbf{H}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} u_I \\ 0 \\ (-1)^k p_I \\ (-1)^k p_I u_I \end{pmatrix}$$

## 2.2 Properties and Riemann Problem

The homogeneous part of the Baer-Nunziato model has been first studied by Embid and Baer [19]. We first recall its main mathematical properties and then tackle the Riemann problem :

**Property 1** (Hyperbolicity and structure of waves). *System (1) is hyperbolic, but not strictly hyperbolic. Indeed, it admits the following seven eigenvalues :*

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= u_1 - c_1, & \lambda_2 &= u_1, & \lambda_3 &= u_1 + c_1, \\ \lambda_4 &= u_2 - c_2, & \lambda_{5,6} &= u_2, & \lambda_7 &= u_2 + c_2 \end{aligned} \quad (8)$$

and associated righteigenvectors span the whole space  $\mathbb{R}^7$  if  $|u_1 - u_2| \neq c_1$ . Fields associated with eigenvalues  $\lambda_{2,5,6}$  are linearly degenerate (LD) whereas fields associated with eigenvalues  $\lambda_{1,4,3,7}$  are genuinely non linear (GNL).

**Property 2** (Riemann invariants through LD waves).

- *The Riemann invariants of the LD 2-wave are  $\{\alpha_1, u_1, p_1, \rho_2, u_2, p_2\}$ . Thus the volume fraction is constant across the wave and the 2-wave has the classical structure of a monophasic contact discontinuity with respect to phase 1.*

- The 5 Riemann invariants of the LD 5,6-wave are the following :

$$\begin{aligned}
I_1 &= u_2 \\
I_2 &= \alpha_1 \rho_1 (u_1 - u_2) \\
I_3 &= \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_1 \rho_1 (u_1 - u_2)^2 \\
I_4 &= \varepsilon_1 + p_1 / \rho_1 + (u_1 - u_2)^2 / 2 \\
I_5 &= s_1
\end{aligned} \tag{9}$$

The 5,6-wave is the only one involving a jump of volume fraction therefore it will be referred as two-phase contact in the sequel. Although the structure of this wave is complex, some schemes [41,42] directly use its 5 Riemann invariants when solving the Riemann problem.

**Property 3** (Jump conditions through GNL waves). *Unique jump conditions hold within each isolated GNL field :*

$$\left\{ \begin{array}{l}
[\alpha_k]_L^R = 0 \\
-\sigma [\rho_k]_L^R + [\rho_k u_k]_L^R = 0 \\
-\sigma [\rho_k u_k]_L^R + [\rho_k u_k^2 + p_k]_L^R = 0 \\
-\sigma [\rho_k e_k]_L^R + [\rho_k e_k u_k + p_k u_k]_L^R = 0
\end{array} \right. \tag{10}$$

where  $[\varphi]_L^R = \varphi_R - \varphi_L$  is the jump between the Left and Right states on each side of a shock wave traveling at speed  $\sigma$ .

The fact that the void fraction remains constant across the GNL waves is closely linked to the LD structure of the two-phase contact and leads to classical monophasic jump conditions through GNL waves.

**Property 4** (Entropy of the system). *Assume that  $(u_I, p_I)$  comply with the following relation :*

$$\sum_k \frac{1}{T_k} (-1)^k (p_k - p_I) (u_k - u_I) = 0 \tag{11}$$

Then smooth solutions of system (1) are such that :

$$\partial_t \left( \sum_k \alpha_k \rho_k s_k \right) + \partial_x \left( \sum_k \alpha_k \rho_k s_k u_k \right) = 0 \tag{12}$$

*Proof.* Smooth solutions of system (1) comply with :

$$\partial_t (\alpha_k \rho_k s_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k s_k u_k) = \frac{1}{T_k} (p_k - p_I) (u_k - u_I) \partial_x (\alpha_k)$$

So the equation of the total entropy (12) is obtained thanks to the equation (11) by summing over the phases.  $\square$



Thus the enforcement of the entropy inequality directly provides the closure law for the interfacial pressure  $p_I$  thanks to equation (11) once the interfacial velocity  $u_I$  has been set. If we set  $u_I = u_2$  for example, we obtain  $p_I = p_1$  which is the closure law proposed by Baer and Nunziato given in equation (6). Moreover, the same strategy has been used to provide closure laws with three, or more, phases [28, 38].

Thanks to all those theoretical properties, we address the Riemann problem for system (7) :

$$\begin{cases} \partial_t(\mathbf{U}) + \partial_x(\mathbf{F}(\mathbf{U})) + \mathbf{H}(\mathbf{U})\partial_x(\alpha_1) = \mathbf{0} \\ \mathbf{U}(t=0, x) = \begin{cases} \mathbf{U}_L, & \text{if } x < 0 \\ \mathbf{U}_R, & \text{if } x > 0 \end{cases} \end{cases} \quad (13)$$

As pointed out in [4] (or in [21] in the case of other closure laws for interfacial quantities), the existence and uniqueness of the solution of such a problem is not guaranteed. Despite this, we can exhibit the general structure of a solution : it consists of several intermediate states connected by the 6 waves of the model. The previous properties provide the connection across each isolated wave, even shock waves thanks to the unique jump conditions across GNL waves detailed in property 3. An important difficulty of this Riemann problem lies in the fact that the wave-ordering is not known, different wave configurations are possible. Two cases are usually considered depending on the relative velocity  $(u_1 - u_2)$  : the case when  $(u_1 - u_2)^2 < c_1^2$  holds is called the “subsonic” one and the opposite case, when  $(u_1 - u_2)^2 > c_1^2$ , is called “supersonic”. The subsonic case is considered to be more physically-relevant and **we only consider the subsonic case in the sequel** like many other authors in the literature [9, 41, 42]. Readers interested in the supersonic case are referred to [4, 15, 16].

In the subsonic case, two wave configurations, presented in figure 1, are possible. We denote by  $(\mathbb{S}_k)_L$  (respectively  $(\mathbb{S}_k)_R$ ) the GNL waves associated with  $\lambda = u_k - c_k$  (respectively  $u_k + c_k$ ). In the same way, we denote  $(\mathbb{S}_k)_M$  the LD waves of the model. Thus, configuration (a) of figure 1 is the case  $(\mathbb{S}_2)_M \leq (\mathbb{S}_1)_M$  and configuration (b) the opposite case  $(\mathbb{S}_1)_M < (\mathbb{S}_2)_M$ . For both configurations, the previous properties provide us the relations between the different intermediate states. Besides, as pointed out previously, the GNL waves have a similar structure as in the monophasic case therefore they don’t interact with each other and we don’t need to consider separate cases when  $(\mathbb{S}_1)_K < (\mathbb{S}_2)_K$  or  $(\mathbb{S}_1)_K > (\mathbb{S}_2)_K$  for  $K = L, R$ . The notation  $\mathbf{W}_k$  used on figure 1 is defined by :

$$\mathbf{W}_k = \begin{pmatrix} \rho_k \\ u_k \\ p_k \end{pmatrix} \quad (14)$$

Moreover, the volume fraction  $\alpha_k$  only changes across the two-phase contact  $(\mathbb{S}_2)_M$  as pointed out on the figure. We underline that the LD structure of this wave is crucial in order to obtain unique jump conditions. Indeed, this LD structure implies that the non-conservative products are not active in the other waves, especially the GNL waves (equation (10)). Thus, those non-conservative products are not “true” non-conservative products (*i.e.* active in GNL fields) which would have required particular definitions [13]. As a consequence, shock solutions of the Riemann problems are defined in a non-ambiguous way. This is of major importance from a computational point of view : without such properties, numerical grid converged shock

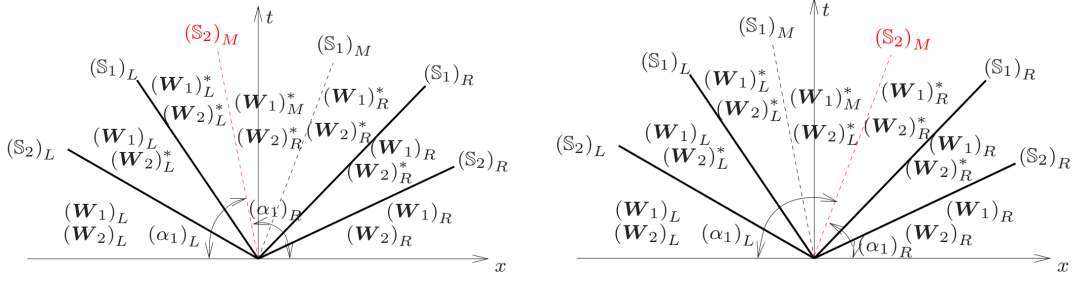


FIGURE 1 – Structure of the exact solution of the Riemann problem for the Baer-Nunziato model in the “subsonic” situation. On the left, configuration (a) where  $(\mathbb{S}_2)_M \leq (\mathbb{S}_1)_M$ . On the right, configuration (b) where  $(\mathbb{S}_1)_M < (\mathbb{S}_2)_M$ .

solutions may differ due to the inner numerical diffusion of the scheme. To the authors’ knowledge, this point has received very little attention in the literature on two-fluid models but striking numerical examples are available in [25] (pages 121-142).

### 3 HLLC-type Riemann solver with approximated two-phase contact

In this section, we introduce a HLLC-type Riemann solver to approximate the solutions of the Baer-Nunziato model based on the scheme proposed by Tokareva and Toro [42]. The key idea of the present scheme is an approximation of the two-phase contact whereas it is treated using the thin layer approximation proposed by Schwendeman *et al.* [41] in the original HLLC-type solver [42]. Thus, we first introduce the approximated two-phase contact then detail the intermediate states of the solution of the Riemann problem obtained thanks to the approximation and finally, we define the numerical flux of the solver based on the estimated states.

#### 3.1 Approximated two-phase contact

The Riemann invariants of the two-phase contact are recalled in equation (9). We introduce the coefficient  $\hat{\gamma}_k$  defined by the following :

$$\hat{\gamma}_k = \frac{\rho_k c_k^2}{p_k} \quad (15)$$

In the particular case of the ideal gas equation of state (EOS),  $\hat{\gamma}_k$  is equal to the ratio of specific heats  $\gamma_k$ . Thanks to this notation, some Riemann invariants can be recast in the following form :

$$I_3 = \alpha_1 \rho_1 \left( \frac{1}{\hat{\gamma}_1} c_1^2 + (u_1 - u_2)^2 \right) + \frac{1}{\hat{\gamma}_2} \alpha_2 \rho_2 c_2^2$$

$$I_4 = \varepsilon_1 + \frac{1}{\hat{\gamma}_1} c_1^2 + \frac{1}{2} (u_1 - u_2)^2$$

In the subsonic case, we already assume that  $(u_1 - u_2)^2 < c_1^2$ . In order to approximate the two-phase contact, we propose a stronger hypothesis :  $(u_1 - u_2)^2 \ll \frac{1}{\hat{\gamma}_1} c_1^2$ . This hypothesis

is physically relevant since  $u_1^2 \ll c_1^2$  in a lot of practical configurations in the subsonic case. Moreover, the difference  $(u_1 - u_2)^2$  should be even smaller due to the velocity relaxation included in a complete model with convective terms and source terms such as drag effects [5]. Finally,  $\frac{1}{\gamma_1}c_1^2$  can be considered to be in the same order of magnitude as  $c_1^2$ , particularly for most usual gases.

Thanks to the proposed hypothesis, the Riemann invariants of the wave are approximated in the following way :

$$\begin{aligned} I_1 &= u_2 \\ I_2 &= \alpha_1 \rho_1 (u_1 - u_2) \\ I_3 &\approx \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 \\ I_4 &\approx \varepsilon_1 + p_1 / \rho_1 \\ I_5 &= s_1 \end{aligned}$$

Therefore, the specific internal enthalpy  $\varepsilon_1 + p_1 / \rho_1$  of phase 1 seems to be a relevant approximation of  $I_4$ . However, the specific entropy  $s_1(p_1, \rho_1)$  of phase 1 is the Riemann invariant  $I_5$  of the wave. Preserving both is equivalent to the preservation of the primitive variables  $(\rho_1, p_1)$ . Thus, we define the approximated two-phase contact with the following new set of Riemann invariants :

$$\begin{aligned} \tilde{I}_1 &= u_2 \\ \tilde{I}_2 &= \alpha_1 (u_1 - u_2) \\ \tilde{I}_3 &= \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 \\ \tilde{I}_4 &= p_1 \\ \tilde{I}_5 &= \rho_1 \end{aligned} \tag{16}$$

If we now focus on the consequences of this approximation in the structure of the solution of the 1D-Riemann problem (figure 1), we can notice that the approximation of the state  $(\mathbf{W}_1)_M^*$  is directly obtained thanks to the states  $(\mathbf{W}_1)_K^*$ ,  $K = L, R$ . For example, if we consider configuration (a), we have :

$$(\mathbf{W}_1)_M^* = \begin{pmatrix} (\rho_1)_L^* \\ (u_1)_R^* \\ (p_1)_R^* \end{pmatrix}$$

whereas, in configuration (b), we get :

$$(\mathbf{W}_1)_M^* = \begin{pmatrix} (\rho_1)_R^* \\ (u_1)_L^* \\ (p_1)_L^* \end{pmatrix}$$

### 3.2 HLLC-type intermediate states

This section is devoted to the estimations of the intermediate states of the solution of the Riemann problem (figure 1) using the approximation of the two-phase contact. In a HLLC-type approach, the intermediate states are obtained by using the averaged Rankine-Hugoniot

relation across the GNL waves  $(\mathbb{S}_k)_K$  ( $k = 1, 2$  and  $K = L, R$ ). The speeds of those waves need to be estimated *a priori* on the Left and Right states of the Riemann problem as in the HLL approach [27]. Based on the work of Batten *et al.* [6] for the Euler equations, we use the following estimations, as in [15] :

$$\begin{aligned} (\mathbb{S}_k)_L &= \min\left((u_k)_L - (c_k)_L, \hat{u}_k - \hat{c}_k\right) \\ (\mathbb{S}_k)_R &= \max\left((u_k)_R + (c_k)_R, \hat{u}_k + \hat{c}_k\right) \end{aligned}, \quad k = 1, 2 \quad (17)$$

where  $\hat{u}_k$  and  $\hat{c}_k$  are the Roe-type average of the velocity and the speed of sound. We recall that the wave speeds of the LD waves  $(\mathbb{S}_k)_M$  ( $k = 1, 2$ ) do not need to be estimated *a priori* since they are directly given by the velocities of the intermediate states. If we consider the configuration (a) of figure 1, we have :  $(\mathbb{S}_1)_M = (u_1)_R^*$  and  $(\mathbb{S}_2)_M = (u_2)_L^*$ .

The averaged Rankine-Hugoniot relations for the mass and momentum equations across the GNL waves provide the following HLLC-type intermediate states :

$$\begin{cases} (\rho_k)_K^* &= (\rho_k)_K \frac{(\mathbb{S}_k)_K - (u_k)_K}{(\mathbb{S}_k)_K - (u_k)_K^*} \\ (p_k)_K^* &= (p_k)_K + (\rho_k)_K \left( (\mathbb{S}_k)_K - (u_k)_K \right) \left( (u_k)_K^* - (u_k)_K \right) \end{cases} \quad (18)$$

for  $k = 1, 2$  and  $K = L, R$ . They are similar to the intermediate states of the classical HLLC scheme [43] as expected since  $\alpha_1$  is constant across the GNL waves. The intermediate states  $(\mathbf{W}_k)_K^*$  can now be determined by using the preservation of the Riemann invariants of the approximated two-phase contact. The existence and uniqueness of those intermediate states are guaranteed by the following :

**Proposition 1.** *Assume that the intermediate states of the Riemann problem comply with the preservation of the Riemann invariants of the approximated two-phase contact (16) and with the HLLC relations (18) where the wave speed estimates (17) are used. Then there exist unique intermediate states  $(\mathbf{W}_k)_K^*$  ( $k = 1, 2$  and  $K = L, M, R$ ) of the Riemann problem for all initial conditions  $(\mathbf{W}_k)_K$  ( $k = 1, 2$  and  $K = L, R$ ) and for all phasic equations of state (EOS).*

*Proof.* Thanks to the HLLC relations (18), we have  $(u_k)_K^*$  as a linear function of  $(p_k)_K^*$  :

$$u_{kK}^* = u_{kK} + \frac{1}{\widetilde{c_{kK}}} (p_{kK}^* - p_{kK}) \quad \text{with} \quad \widetilde{c_{kK}} = \rho_{kK} (\mathbb{S}_{kK} - u_{kK})$$

where we use the short notation  $\varphi_{kK}$  instead of  $(\varphi_k)_K$  ( $k = 1, 2$  and  $K = L, R$ ) for simplicity. In order to determine the 4 intermediate pressures  $p_{kK}^*$ , we then need to use the Riemann invariants of the approximated two-phase contact from equation (16). Those Riemann invariants are also linear functions of the intermediate pressures and velocities therefore the intermediate pressures can be computed as the solutions of a linear system. We can notice that the pressure  $p_1$  is a Riemann invariant  $\tilde{I}_4$  of the approximated contact so we introduce

the notation  $p_1^* = \widetilde{p}_{1L}^* = \widetilde{p}_{1R}^*$  and we end up with the following  $3 \times 3$  linear system :

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\widetilde{c}_{2L}} & -\frac{1}{\widetilde{c}_{2R}} \\ \frac{\alpha_{1L}}{\widetilde{c}_{1L}} - \frac{\alpha_{1R}}{\widetilde{c}_{1R}} & -\frac{\alpha_{1L}}{\widetilde{c}_{2L}} & \frac{\alpha_{1R}}{\widetilde{c}_{2R}} \\ \alpha_{1L} - \alpha_{1R} & \alpha_{2L} & -\alpha_{2R} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1^* \\ p_{2L}^* \\ p_{2R}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} RHS_1 \\ RHS_2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

with

$$RHS_1 = \frac{p_{2L}}{\widetilde{c}_{2L}} - u_{2L} - \frac{p_{2R}}{\widetilde{c}_{2R}} + u_{2R}$$

$$RHS_2 = \alpha_{1L} \left( \frac{p_{1L}}{\widetilde{c}_{1L}} - u_{1L} - \frac{p_{2L}}{\widetilde{c}_{2L}} + u_{2L} \right) - \alpha_{1R} \left( \frac{p_{1R}}{\widetilde{c}_{1R}} - u_{1R} - \frac{p_{2R}}{\widetilde{c}_{2R}} + u_{2R} \right)$$

We underline the fact that this system is exactly the same for both wave configurations, (a) or (b) in figure 1. The determinant of the matrix can be easily computed :

$$\Delta = \left( \frac{\alpha_{1L}}{\widetilde{c}_{1L}} - \frac{\alpha_{1R}}{\widetilde{c}_{1R}} \right) \left( \frac{\alpha_{2R}}{\widetilde{c}_{2L}} - \frac{\alpha_{2L}}{\widetilde{c}_{2R}} \right) - \frac{(\alpha_{1L} - \alpha_{1R})^2}{\widetilde{c}_{2L}\widetilde{c}_{2R}}$$

It is important to notice that  $\widetilde{c}_{kR} > 0$  and  $\widetilde{c}_{kL} < 0$  for both phases ( $k = 1, 2$ ) due to wave speed estimates given in equation (17). From that remark, we deduce that  $\Delta > 0$  so the system has a unique solution for all initial conditions  $(\mathbf{W}_k)_K$  ( $k = 1, 2$  and  $K = L, R$ ). Once the intermediate pressures have been obtained, the intermediate states  $(\mathbf{W}_k)_K^*$  can be fully determined thanks to equation (18). Then we also determine the wave configuration, (a) or (b) in figure 1, by looking at the sign of  $\widetilde{I}_2$ .  $\square$

The existence and uniqueness of the intermediate states of the Riemann for all initial conditions is one of the major consequences of the approximation of the two-phase contact. It is important to recall that, without such an approximation, the connection through the two-phase contact is not possible for any Right and Left states as detailed in Appendix A. This approximation also has an important feature from the computational point of view since it leads to a linear system in order to determine the intermediate pressures whereas the original HLLC solver [42] needs to use an iterative procedure to solve a non-linear system. Finally, another major consequence of that approximation is that the analytical expression of the entropy  $s_1$ , which is an exact Riemann invariant of the wave ( $I_5$ ), is no longer required in the computation so the scheme can deal with any EOS.

### 3.3 Numerical flux

Thanks to the approximate solution of the Riemann problem proposed previously, we can introduce a Finite-Volume scheme based on this solution. This scheme is really close to the original HLLC scheme [42], the only difference lies in the intermediate states of the Riemann solver since the two-phase contact is approximated in our solver.

Let us assume a finite-volume mesh with volumes  $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \times [t^n, t^{n+1}]$  of size  $\Delta x \times \Delta t$ . We define the cell average of the state vector  $\mathbf{U}$  :

$$\mathbf{U}_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{U}(x, t^n) dx$$

The integration of equation (7) gives us the following relation :

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left( \mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^n - \mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left( \mathbf{H}_{i+\frac{1}{2},-}^n - \mathbf{H}_{i-\frac{1}{2},+}^n \right) \quad (19)$$

where we use the following discrete approximations of the fluxes :

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^n \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F} \left( \mathbf{U}(x_{i+\frac{1}{2}}, t) \right) dt$$

and

$$\left( \mathbf{H}_{i+\frac{1}{2},-}^n - \mathbf{H}_{i-\frac{1}{2},+}^n \right) \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{H} \left( \mathbf{U}(x, t) \right) \partial_x (\alpha_1(x, t)) dx dt$$

The computation of the fluxes is based on the approximate solution of a Riemann problem at each interface  $x_{i+\frac{1}{2}}$  :

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^n = \widehat{\mathbf{F}}(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_{i+1}^n) \quad \text{and} \quad \mathbf{H}_{i+\frac{1}{2},\pm}^n = \widehat{\mathbf{H}}_{\pm}(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_{i+1}^n) \quad (20)$$

Once the intermediate states  $(\mathbf{W}_1)_L^*$ ,  $(\mathbf{W}_1)_M^*$ ,  $(\mathbf{W}_1)_R^*$ ,  $(\mathbf{W}_2)_L^*$ ,  $(\mathbf{W}_2)_R^*$  of the Riemann problem have been determined as explained previously, we use them to calculate the fluxes.

Let us first focus on the computation of the conservative part  $\widehat{\mathbf{F}}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R)$ . We use the following notation :

$$\widehat{\mathbf{F}}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R) = \begin{pmatrix} 0 \\ \widehat{\mathbf{G}}_k(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R) \end{pmatrix}$$

The function  $\widehat{\mathbf{G}}_2(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R)$  is defined as follows [42] :

$$\widehat{\mathbf{G}}_2(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R) = \begin{cases} (\mathbf{G}_2)_L & \text{if } 0 \leq (\mathbb{S}_2)_L \\ (\mathbf{G}_2)_L^* = (\mathbf{G}_2)_L + (\mathbb{S}_2)_L \left( (\mathbf{V}_2)_L^* - (\mathbf{V}_2)_L \right) & \text{if } (\mathbb{S}_2)_L \leq 0 \leq (\mathbb{S}_2)_M \\ (\mathbf{G}_2)_R^* = (\mathbf{G}_2)_R + (\mathbb{S}_2)_R \left( (\mathbf{V}_2)_R^* - (\mathbf{V}_2)_R \right) & \text{if } (\mathbb{S}_2)_M \leq 0 \leq (\mathbb{S}_2)_R \\ (\mathbf{G}_2)_R & \text{if } (\mathbb{S}_2)_R \leq 0 \end{cases} \quad (21)$$

In the case of phase 1,  $\widehat{\mathbf{G}}_1(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R)$  depends on the wave configuration. For configuration (a) when  $(\mathbb{S}_2)_M \leq (\mathbb{S}_1)_M$ , we have :

$$\widehat{\mathbf{G}}_1(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R) = \begin{cases} (\mathbf{G}_1)_L & \text{if } 0 \leq (\mathbb{S}_1)_L \\ (\mathbf{G}_1)_L^* = (\mathbf{G}_1)_L + (\mathbb{S}_1)_L \left( (\mathbf{V}_1)_L^* - (\mathbf{V}_1)_L \right) & \text{if } (\mathbb{S}_1)_L \leq 0 \leq (\mathbb{S}_2)_M \\ (\mathbf{G}_1)_M^* = (\mathbf{G}_1)_R + (\mathbb{S}_1)_M \left( (\mathbf{V}_1)_M^* - (\mathbf{V}_1)_R \right) & \text{if } (\mathbb{S}_2)_M \leq 0 \leq (\mathbb{S}_1)_M \\ (\mathbf{G}_1)_R^* = (\mathbf{G}_1)_R + (\mathbb{S}_1)_R \left( (\mathbf{V}_1)_R^* - (\mathbf{V}_1)_R \right) & \text{if } (\mathbb{S}_1)_M \leq 0 \leq (\mathbb{S}_1)_R \\ (\mathbf{G}_1)_R & \text{if } (\mathbb{S}_1)_R \leq 0 \end{cases} \quad (22)$$

and for configuration (b) when  $(\mathbb{S}_1)_M < (\mathbb{S}_2)_M$  :

$$\widehat{\mathbf{G}}_1(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R) = \begin{cases} (\mathbf{G}_1)_L & \text{if } 0 \leq (\mathbb{S}_1)_L \\ (\mathbf{G}_1)_L^* = (\mathbf{G}_1)_L + (\mathbb{S}_1)_L \left( (\mathbf{V}_1)_L^* - (\mathbf{V}_1)_L \right) & \text{if } (\mathbb{S}_1)_L \leq 0 \leq (\mathbb{S}_1)_M \\ (\mathbf{G}_1)_M^* = (\mathbf{G}_1)_L^* + (\mathbb{S}_1)_M \left( (\mathbf{V}_1)_M^* - (\mathbf{V}_1)_L^* \right) & \text{if } (\mathbb{S}_1)_M \leq 0 < (\mathbb{S}_2)_M \\ (\mathbf{G}_1)_R^* = (\mathbf{G}_1)_R + (\mathbb{S}_1)_R \left( (\mathbf{V}_1)_R^* - (\mathbf{V}_1)_R \right) & \text{if } (\mathbb{S}_2)_M \leq 0 \leq (\mathbb{S}_1)_R \\ (\mathbf{G}_1)_R & \text{if } (\mathbb{S}_1)_R \leq 0 \end{cases} \quad (23)$$

In equations (21)-(23), we use the following notations (for  $k = 1, 2$  and  $K = L, R$ ) :

$$(\mathbf{V}_k)_K = (\alpha_k)_K \begin{pmatrix} (\rho_k)_K \\ (\rho_k)_K (u_k)_K \\ (\rho_k)_K (e_k)_K \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{G}_k)_K = (\alpha_k)_K \begin{pmatrix} (\rho_k)_K (u_k)_K \\ (\rho_k)_K \left( (u_k)_K \right)^2 + (p_k)_K \\ (\rho_k)_K (e_k)_K (u_k)_K + (p_k)_K (u_k)_K \end{pmatrix}$$

Moreover the intermediate states are given by the HLLC relations :

$$(\mathbf{V}_k)_K^* = (\alpha_k)_K (\rho_k)_K \begin{pmatrix} \frac{(\mathbb{S}_k)_K - (u_k)_K}{(\mathbb{S}_k)_K - (\mathbb{S}_k)_M} \\ 1 \\ (\mathbb{S}_k)_M \\ (e_k)_K + ((\mathbb{S}_k)_M - (u_k)_K) \left( (\mathbb{S}_k)_M + \frac{(p_k)_K}{(\rho_k)_K ((\mathbb{S}_k)_K - (u_k)_K)} \right) \end{pmatrix}$$

Finally,  $(\mathbf{V}_1)_M^*$  is defined in the following way :

$$(\mathbf{V}_1)_M^* = (\alpha_1)_M \begin{pmatrix} (\rho_1)_M^* \\ (\rho_1)_M^* (u_1)_M^* \\ (\rho_1)_M^* \varepsilon_1 \left( (\rho_1)_M^*, (p_1)_M^* \right) + \frac{1}{2} (\rho_1)_M^* \left( (u_1)_M^* \right)^2 \end{pmatrix}$$

We recall that, in the case of configuration (a), we have :

$$\begin{cases} (\alpha_1)_M = (\alpha_1)_R \\ (\rho_1)_M^* = (\rho_1)_L^* \\ (u_1)_M^* = (u_1)_R^* \\ (p_1)_M^* = (p_1)_R^* \end{cases}$$

and configuration (b) gives :

$$\begin{cases} (\alpha_1)_M = (\alpha_1)_L \\ (\rho_1)_M^* = (\rho_1)_R^* \\ (u_1)_M^* = (u_1)_L^* \\ (p_1)_M^* = (p_1)_L^* \end{cases}$$

Then we focus on the computation of the non-conservative part  $\widehat{\mathbf{H}}_{\pm}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R)$ . The main difficulty lies in the integration of the non-conservative product  $p_I \partial_x(\alpha_1)$  across the two-phase contact as emphasized in [41]. Thanks to our approximation of this wave given in equation (16), we have the following relation across the wave :

$$p_I \partial_x(\alpha_1) = \partial_x(\alpha_1 p_1) = -\partial_x(\alpha_2 p_2)$$

where we first use the preservation of  $\widetilde{I}_4$  and then the preservation of  $\widetilde{I}_3$ . We underline the fact that the thin layer approximation proposed in [41] provides the same relation. Thus we treat those non-conservative products as in [15, 41, 42] :

$$\widehat{\mathbf{H}}_{\pm}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R) = \frac{1 \pm \text{sign}[(\mathbb{S}_2)_M]}{2} \begin{pmatrix} (\mathbb{S}_2)_M [(\alpha_1)_R - (\alpha_1)_L] \\ 0 \\ (-1)^{k+1} [(\alpha_2)_R (p_2)_R^* - (\alpha_2)_L (p_2)_L^*] \\ (-1)^{k+1} (\mathbb{S}_2)_M [(\alpha_2)_R (p_2)_R^* - (\alpha_2)_L (p_2)_L^*] \end{pmatrix} \quad (24)$$

Schwendeman *et al.* [41] also proposed a second-order extension of their Godunov solver. They proposed to use a classical minmod reconstruction of the primitive variables before applying the Riemann solver. Thus, the conservative part of the flux is obtained as well as the second-order contribution of the integral of the non-conservative terms near the two-phase contact. As detailed in [41], the second-order contribution of the integral of the non-conservative terms away from the two-phase contact remains and is also computed based on the solution obtained using the Riemann solver. Although it won't be considered in the sequel, a second-order extension of our scheme can be proposed using a similar approach based on our approximate Riemann solver.

## 4 Numerical results

This section is dedicated to the assessment of the HLLC-type scheme introduced in the previous section. Due to the Approximation of the two-phase Contact, this solver will be referred as HLLAC in the sequel. We compare it with the Rusanov scheme [11] and the original HLLC-type solver from [42] on 1D as well as 2D test-cases. Those three schemes have been implemented in the fast transient dynamics software Europlexus [1, 15] which has been used for all the following computations.

General equations of states have been used so far but we need to specify them for the numerical test-cases. We consider that both phases are governed by the Stiffened Gas EOS as in most numerical tests from the literature :

$$\varepsilon_k(\rho_k, p_k) = \frac{p_k + \gamma_k p_k^{\infty}}{(\gamma_k - 1) \rho_k} \quad (25)$$

Thus, two thermodynamic constants  $\gamma_k$  and  $p_k^{\infty}$  need to be defined for both phases in each test-case.

### 4.1 1D test-cases

Seven 1D Riemann problems have been chosen in order to assess the accuracy, the robustness and the efficiency of the present scheme. Most of them have been proposed in [14]



where analytical solutions are provided with a maximum accuracy allowing to carry out grid convergence studies. The SG EOS parameters for all test-cases (except test 7) are gathered in table 1. The initial conditions consist of two constant states, detailed in table 2, separated by a discontinuity at  $x_0 = 0.5$  (except for test 4). The last 1D test-case has been chosen to assess the ability of the proposed solver to deal with complex EOS. In each test, we consider the domain  $[0, 1]$  with transmissive boundary conditions at both ends. All computations have been carried out with a Courant number  $C_{CFL} = \max(\lambda_k) \frac{\Delta t}{\Delta x} = 0.5$ .

TABLE 1 – SG EOS parameters for the 1D Riemann problems

	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$p_1^\infty$	$p_2^\infty$
<b>Test 1</b>	3	2	0.	0.
<b>Test 2</b>	3	2	0.	0.
<b>Test 3</b>	1.4	3	0.	10.
<b>Test 4</b>	1.4	3	0.	100.
<b>Test 5</b>	3	2	0.	0.
<b>Test 6</b>	1.4	3	0.	0.

TABLE 2 – Initial conditions for the 1D Riemann problems

		$\alpha_2$	$\rho_1$	$u_1$	$p_1$	$\rho_2$	$u_2$	$p_2$
<b>Test 1</b> [14]	<b>Left state</b>	0.8	1.25	0.1837722	1.	1.5185185	0.3110988	1.2
	<b>Right state</b>	0.2	1.2539534	0.2793675	1.0095183	0.5	0.3110988	1.7771419
<b>Test 2</b> [14]	<b>Left state</b>	0.8	1.	0.5	0.5	1.	0.8	0.5
	<b>Right state</b>	0.2	1.2539534	0.2793675	1.0095183	0.5	0.3110988	1.7771419
<b>Test 3</b> [14]	<b>Left state</b>	0.6	1.4	0.	1.	1.4	0.	2.
	<b>Right state</b>	0.3	1.	0.	1.	1.	0.	3.
<b>Test 4</b> [42]	<b>Left state</b>	0.7	1.	-19.5975	1000.	1.	-19.5975	1000.
	<b>Right state</b>	0.2	1.	-19.5975	0.01	1.	-19.5975	0.01
<b>Test 5</b>	<b>Left state</b>	$1 - 10^{-6}$	1.25	0.1837722	1.	1.5185185	0.3110988	1.2
	<b>Right state</b>	$10^{-6}$	1.25421479	0.311098673	1.01014963	0.5	0.3110988	189851.199
<b>Test 6</b> [41]	<b>Left state</b>	0.5	1.	0.	2.	2.	0.	5.
	<b>Right state</b>	$10^{-6}$	1.8	0.	4.	1.7829	0.2972	3.5422

#### 4.1.1 Test 1 : Isolated two-phase contact

This test proposed in [14] consists of an isolated two-phase contact discontinuity. To build such a test-case, a Left state needs to be set first allowing the evaluation of the exact Riemann invariants of the wave, given in equation (9). Then the preservation of those Riemann invariants provides us non-linear equations that need to be solved in order to obtain the Right state (see [11] for more details). The exact solution of the corresponding Riemann problem is an isolated two-phase contact discontinuity since the Riemann invariants of the wave are exactly preserved. Thus, this test-case appears to be relevant to assess the consequence of the key approximation of the HLLAC scheme. Figure 2 shows the comparison between the analytical solution and the numerical solutions obtained with the three different schemes on 1000 cells. As expected, the Rusanov scheme is very diffusive (see the results on  $\alpha_2$  for example) compared to the two others which seem to give a similar diffusion at the interface. We can also notice some “ghost waves” with inaccurate intermediate states on the numerical results

of the HLLAC scheme linked to the approximation of the two-phase contact (particularly on  $\rho_1$  and  $p_1$ ). Indeed, the Riemann invariants of the approximated two-phase contact (equation (16)) are not preserved between the Left and Right states, unlike the exact ones, therefore additional waves appear. In order to check if those “ghost waves” disappear when refining the grid, a convergence study has been carried out and results are provided in figure 3. For all schemes, we observed the expected rate of convergence 1/2 for first-order schemes due to the occurrence of a contact discontinuity. Moreover, the HLLC scheme appears to be the most accurate solver for all variables as expected, whereas the Rusanov scheme is the least accurate one. We notice that the accuracy of the HLLAC scheme is really close to the accuracy of the HLLC scheme for  $(\alpha_2, \rho_2, p_2, u_1)$ . For the other variables,  $(\rho_1, p_1, u_2)$ , the accuracy of the HLLAC scheme is closer to the one of the Rusanov scheme which is not surprising since those three variables correspond to some Riemann invariants of the approximated two-phase contact.

#### 4.1.2 Test 2 : Two-phase contact with shock waves

The second test is built on the previous one in [14] : one shock wave propagating to the left has been added to the two-phase contact in each phase. The Right state is the same as in the previous test. The new Left state is obtained thanks to jump conditions (10) with the Left state from the previous test-case. Thus, a classical monophasic (*i.e.* complying with the jump conditions of the Euler equations) shock wave propagating to the left appears in each phase in addition to the two-phase contact. Figure 4 provides the comparison between the analytical solution and the numerical ones. Convergence studies have also been carried out on this test and are presented in figure 5. The first remark is that the results of HLLAC and HLLC schemes are very close showing that the proposed approximation of the two-phase contact has a minor impact on the overall accuracy of the solver on this test-case. Differences between those two schemes can only be seen on very fine grids. Compared to those schemes, the Rusanov one appears to be very diffusive and less accurate. Except for  $u_2$ , the expected order of convergence 1/2 is retrieved. In the case of  $u_2$ , the observed order of convergence is 1 due to the fact that it is constant across the contact discontinuity and therefore exhibits only a shock wave.

An efficiency study is also carried out on this test to assess the computational cost of the proposed scheme. Thus figure 6 shows the error on  $\alpha_2$  from the grid convergence study *versus* the CPU time of the corresponding computation for the three different schemes. At a given error, we can see that the Rusanov scheme requires a higher computational cost than the other schemes although it is the least expensive scheme on a given mesh. Among both other schemes, the HLLAC one has a lower computational cost than the HLLC one due to the fact that it does not require the use of an iterative method for each local Riemann problem. More precisely, table 3 provides the computational cost of each scheme for a given error ( $err(\alpha_2) = 10^{-4}$ ). The Rusanov scheme appears to be 40 times more expensive than the HLLAC scheme whereas the HLLC one is 2.5 times more expensive than the HLLAC scheme. This latter observation is linked to the fact that 2 iterations are used in the Newton’s method involved in the HLLC scheme as suggested in [42].

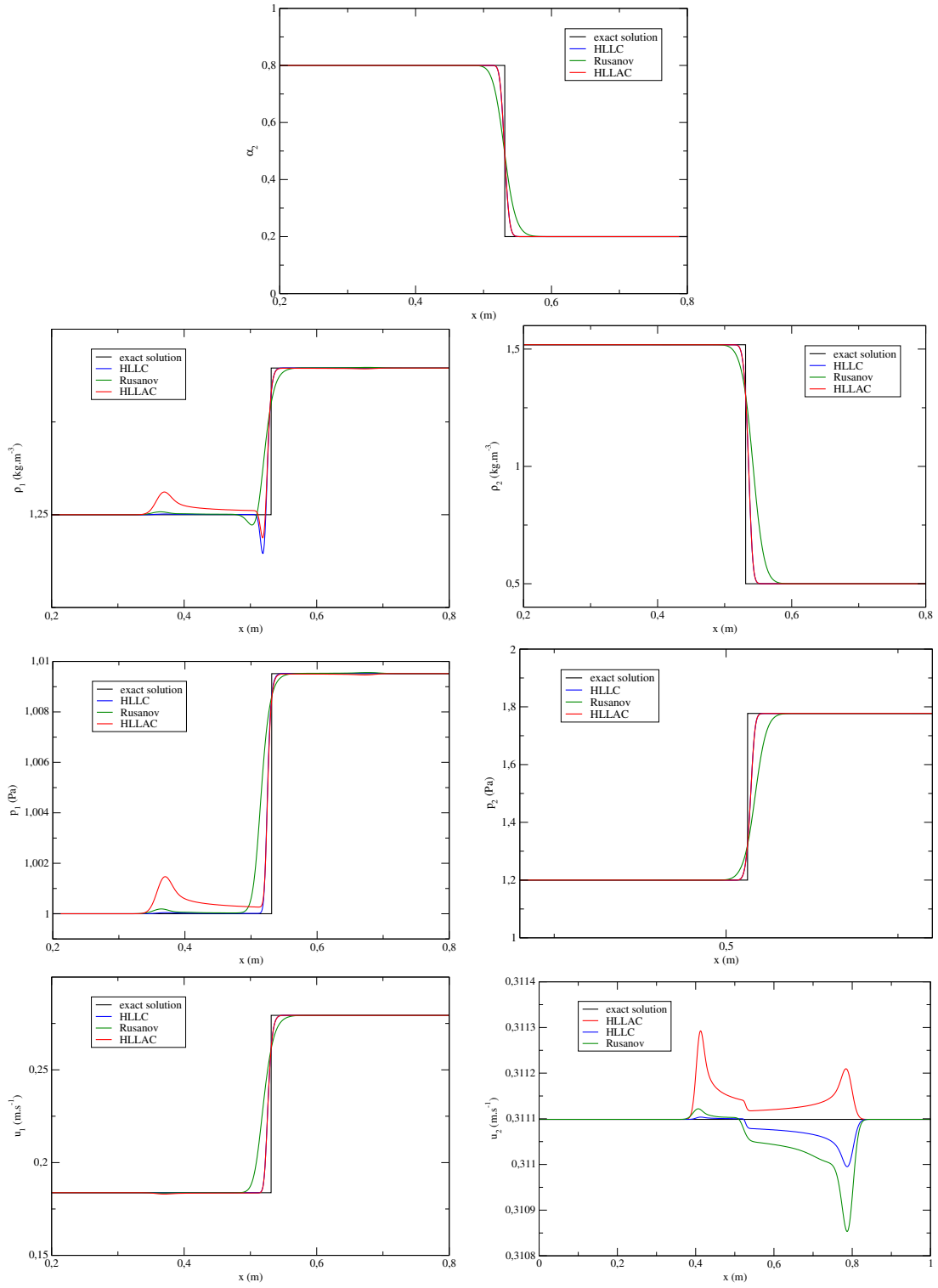


FIGURE 2 – Comparison between analytical and numerical solutions on Test 1 with 1000 cells at time  $t_f = 0.1s$ . From the top to the bottom right :  $\alpha_2, \rho_1, \rho_2, p_1, p_2, u_1, u_2$  vs  $x$ .

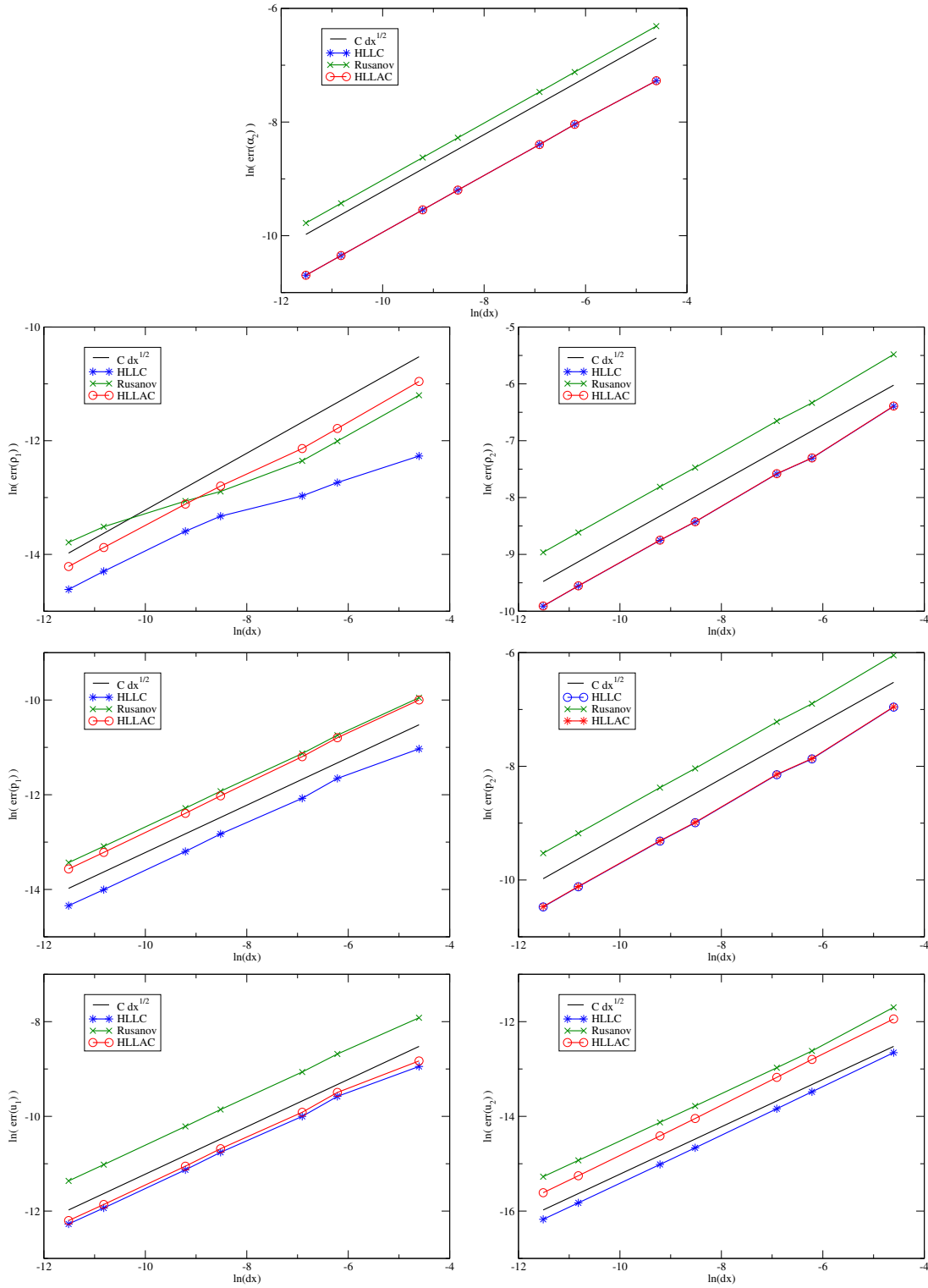


FIGURE 3 – Convergence study on Test 1 at time  $t_f = 0.1s$ . From the top to the bottom right : L1 norm of the error on  $\alpha_2, \rho_1, \rho_2, p_1, p_2, u_1, u_2$  vs  $\Delta x$ .

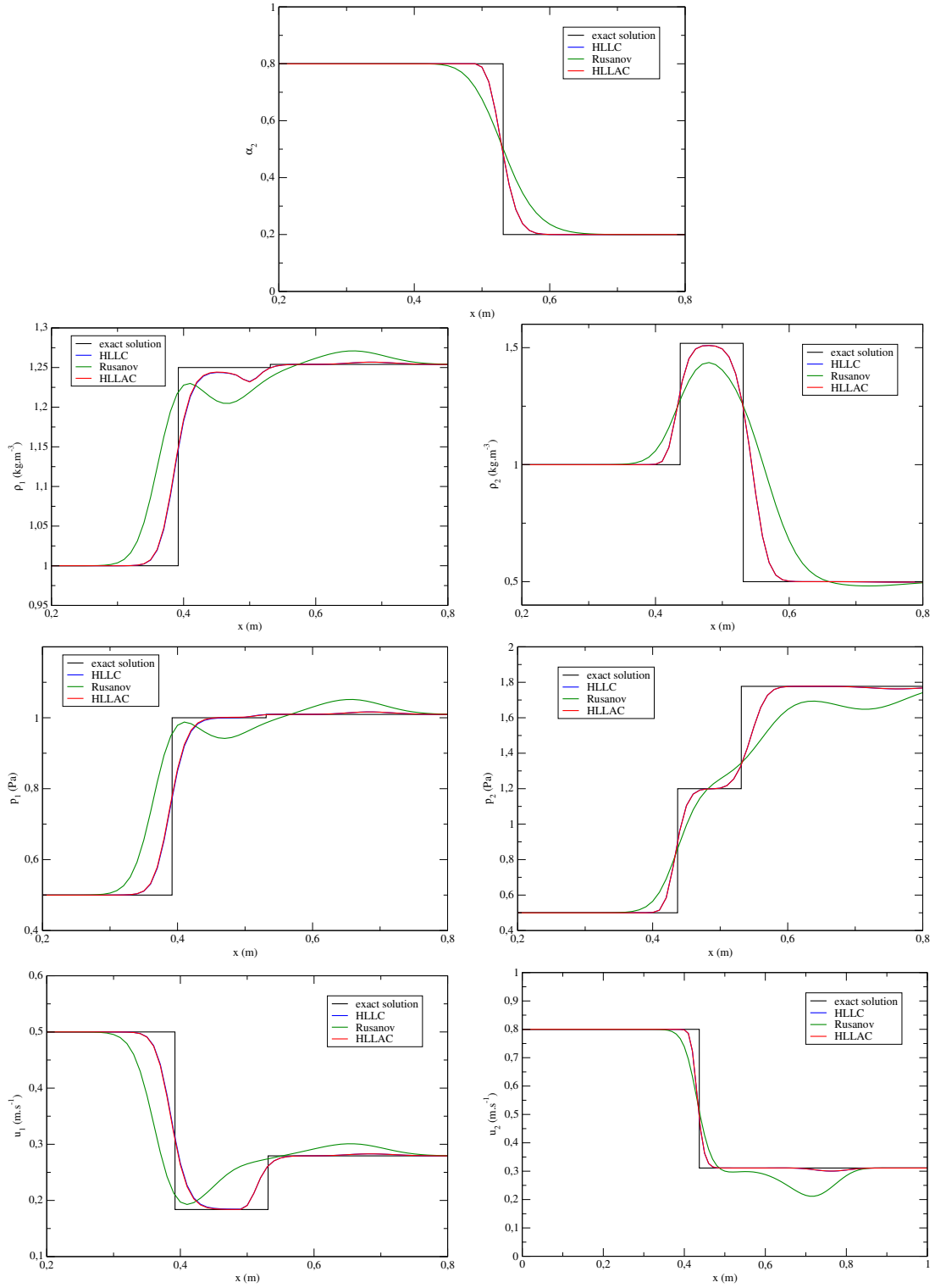


FIGURE 4 – Comparison between analytical and numerical solutions on Test 2 with 100 cells at time  $t_f = 0.1s$ . From the top to the bottom right :  $\alpha_2, \rho_1, \rho_2, p_1, p_2, u_1, u_2$  vs  $x$ .

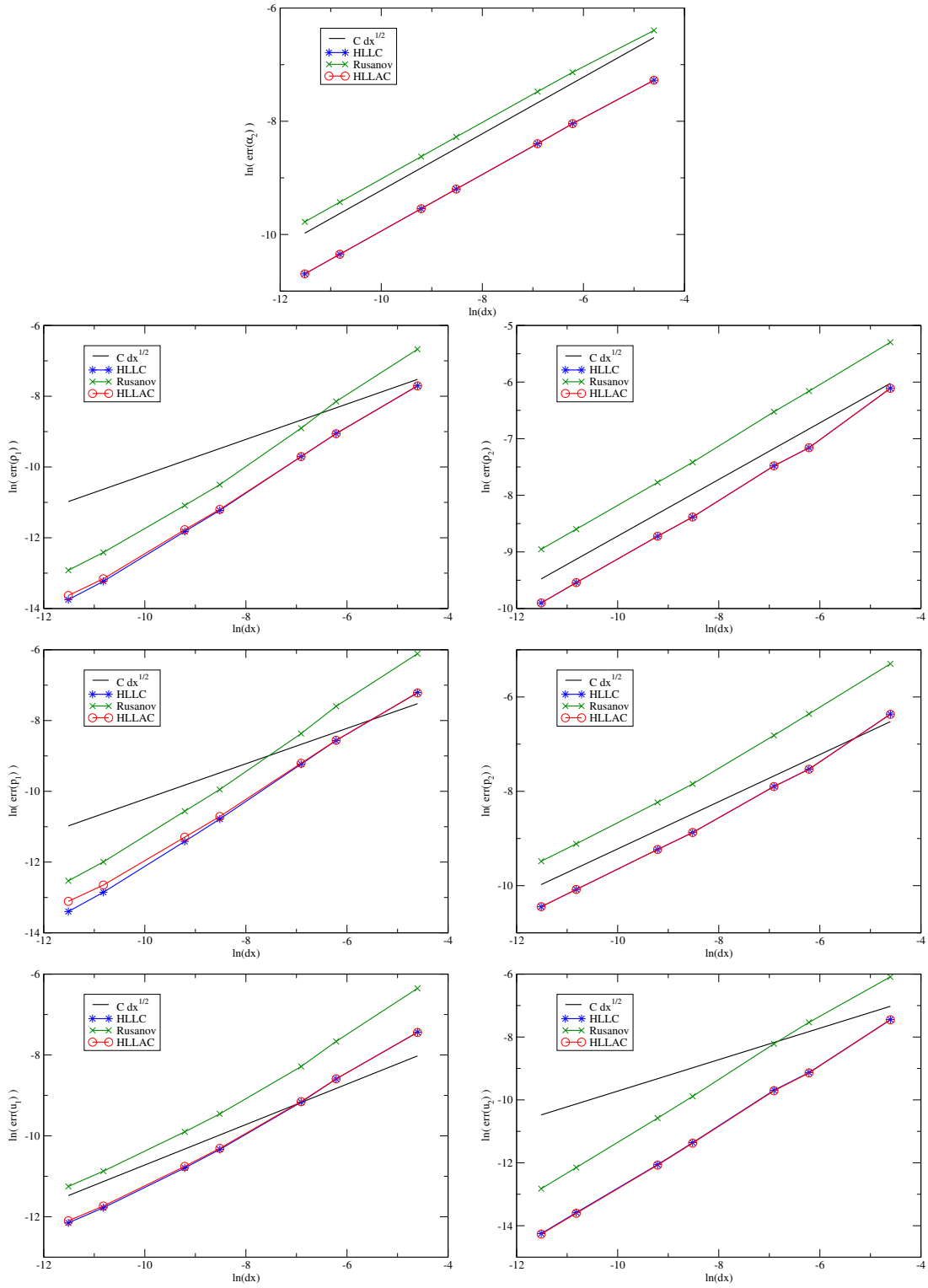


FIGURE 5 – Convergence study on Test 2 at time  $t_f = 0.1s$ . From the top to the bottom right : L1 norm of the error on  $\alpha_2, \rho_1, \rho_2, p_1, p_2, u_1, u_2$  vs  $\Delta x$ .

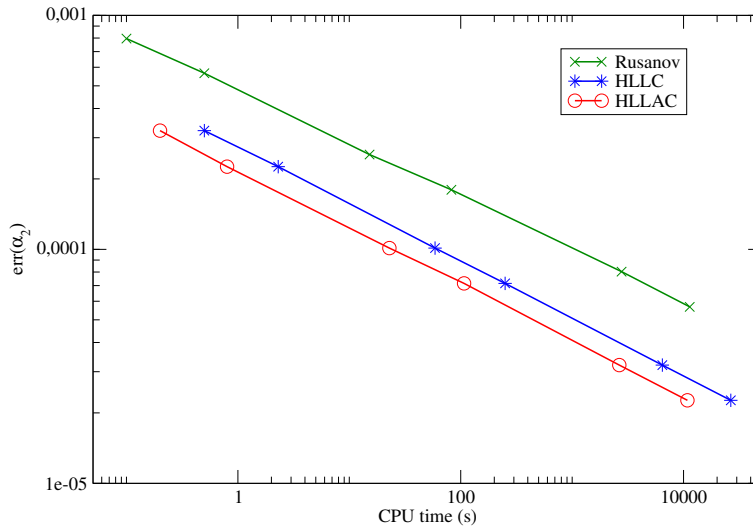


FIGURE 6 – Efficiency study on Test 2 at time  $t_f = 0.1s$  : L1 norm of the error on  $\alpha_2$  vs CPU time of the computation.

TABLE 3 – Computational cost of the three schemes for  $err(\alpha_2) = 10^{-4}$ .

Scheme	HLLC	Rusanov	HLLAC
CPU time (s)	61	1055	24

#### 4.1.3 Test 3 : Stationary two-phase contact

The third test-case consists of a stationary isolated two-phase contact proposed in [14]. The key point of this test is to assess that the HLLAC scheme keeps the property of the HLLC scheme to exactly preserve this wave. Whereas the two-phase contact is diffused by the Rusanov scheme, figure 7 shows that the HLLAC does preserve it as expected since the neglected terms of the Riemann invariants of this wave are equal to zero in this particular test-case.

#### 4.1.4 Test 4 : A general Riemann problem

This test has been used in [14] but was initially proposed in [42]. The exact solution of the Riemann problem is composed by the 6 waves of the model including strong shock waves. Unlike the other tests, the initial discontinuity is located at  $x_0 = 0.8$ . The comparison of the analytical and numerical solutions is shown in figure 8. Once again, the results of the HLLAC and HLLC scheme are very close. This test-case is particularly severe and we can observe that the accuracy of the Rusanov scheme is not sufficient to retrieve the intermediate states on coarse grids.

#### 4.1.5 Test 5 : Isolated two-phase contact with vanishing phases

Test 5 has been designed in the same way as test 1 so that it consists of an isolated two-phase contact. However it is also a test with vanishing phases in both states ( $\alpha_k$  close to 0 or 1) in order to assess the robustness of the schemes. Figure 9 provides the analytical solution

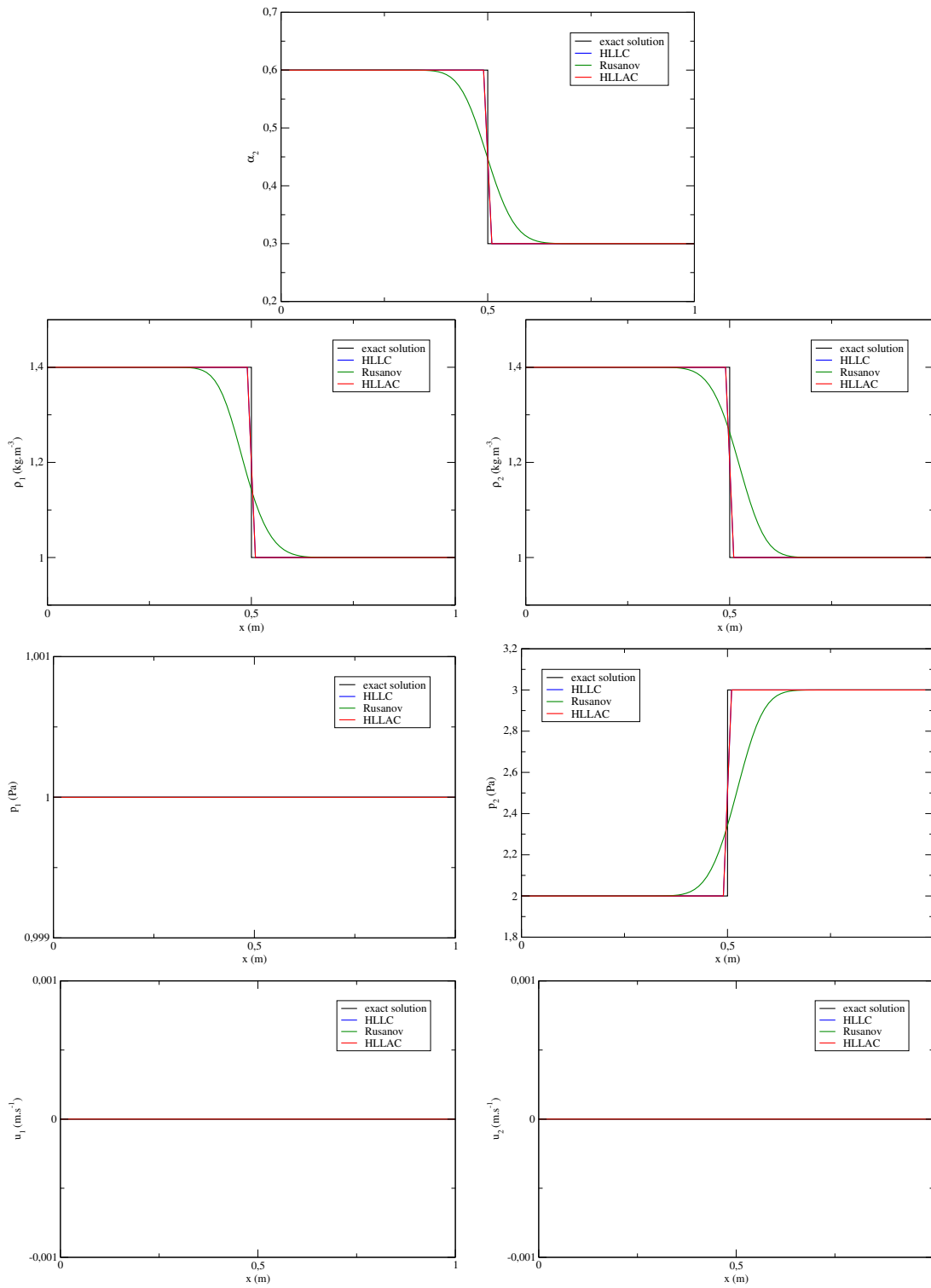


FIGURE 7 – Comparison between analytical and numerical solutions on Test 3 with 100 cells at time  $t_f = 0.05s$ . From the top to the bottom right :  $\alpha_2, \rho_1, \rho_2, p_1, p_2, u_1, u_2$  vs  $x$ .



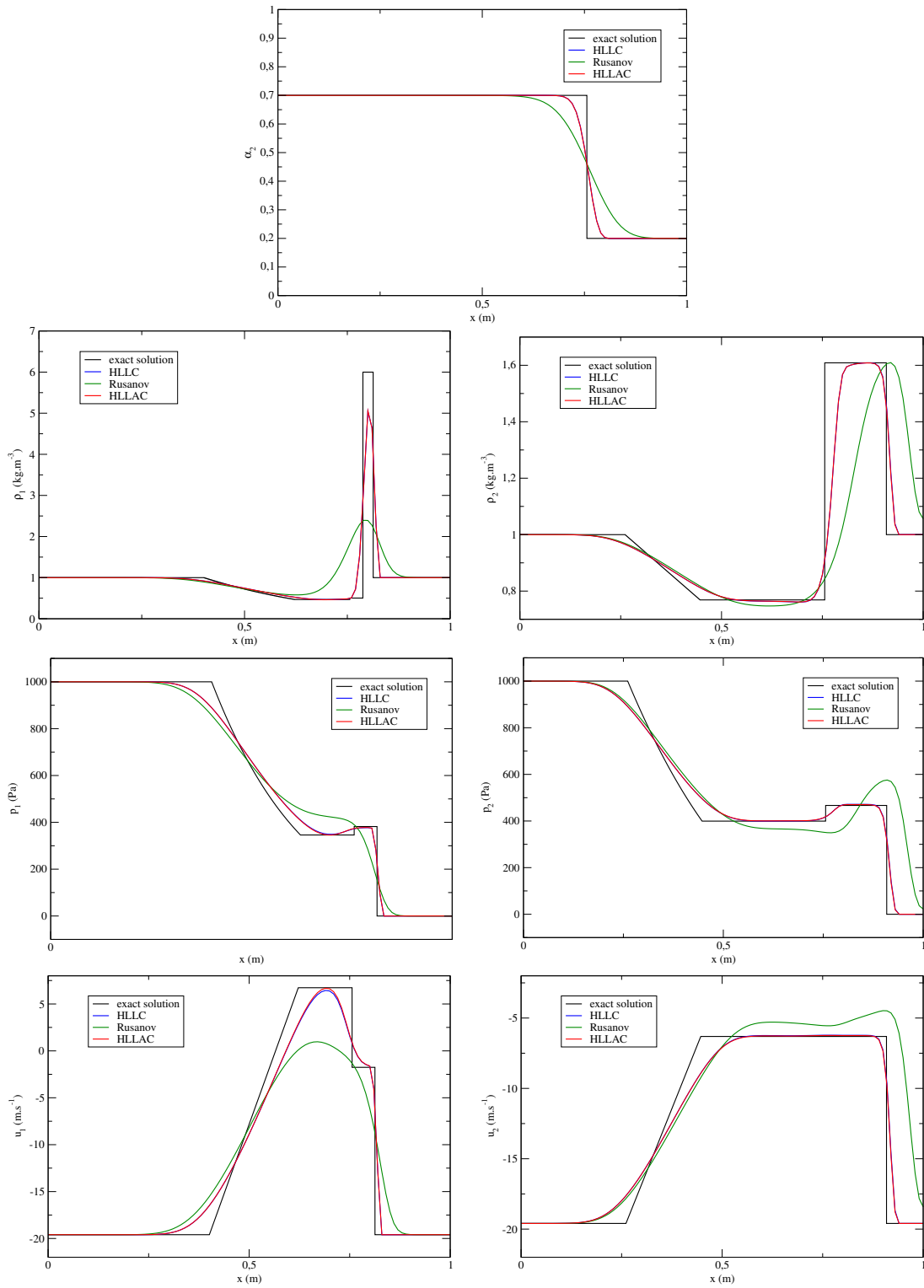


FIGURE 8 – Comparison between analytical and numerical solutions on Test 4 with 100 cells at time  $t_f = 0.007s$ . From the top to the bottom right :  $\alpha_2, \rho_1, \rho_2, p_1, p_2, u_1, u_2$  vs  $x$ .

and the numerical solutions obtained with the Rusanov and the HLLAC schemes. Indeed the HLLC scheme was not robust enough for this test since it did not preserve the positivity of pressures. We observe that the accuracy of the Rusanov scheme is very poor on this severe test, especially on phase 2. We also study the convergence of the two schemes on this test-case. Surprising results for the HLLAC scheme on coarse grids (for phase 1) are observed on figure 10. Nevertheless we retrieve the order of convergence of 1/2 for both schemes except in the case of the error on  $u_2$  which remains stable, close to round-off errors.

#### 4.1.6 Test 6 : A general Riemann problem with vanishing phases

Test 6 is a general Riemann problem with vanishing phases proposed in [41]. The exact solution of the problem is composed by five of the six waves of the model, only the GNL wave  $(\mathbb{S}_2)_R$  is not present. Figure 11 provides the comparison between the analytical solution and the numerical solutions of the three schemes. We still observe similar results with the HLLAC and HLLC schemes, even on “ghost waves” in phase 2. Moreover the diffusion of the Rusanov scheme, which is striking on  $\alpha_2$ , leads to a poor accuracy when compared to the two other schemes.

#### 4.1.7 Test 7 : Complex Equations Of State

This last Riemann problem has been chosen to assess the ability of the proposed solver to deal with any Equation Of State. Thus, a test-case from [40], which studies the interaction between gaseous detonation products (phase 1) and a copper plate (phase 2), is considered. The detonation products are governed by the Jones-Wilkins-Lee (JWL) EOS while the copper is governed by the Cochran-Chan (CC) EOS. Both EOS can be written in the Mie-Gruneisen form :

$$\varepsilon_k(\rho_k, p_k) = \frac{p_k - \Pi_k(\rho_k)}{\Gamma_k \rho_k} + Q_k(\rho_k) \quad (26)$$

where the functions  $\Pi_k(\rho_k)$  and  $Q_k(\rho_k)$  need to be specify. In the case of the JWL EOS, they depend on the Chapman-Jouguet state (CJ) :

$$\begin{aligned} \Pi_1(\rho) &= A \exp\left(-R_1 \frac{\rho_1^{ref}}{\rho}\right) + B \exp\left(-R_2 \frac{\rho_1^{ref}}{\rho}\right) \\ Q_1(\rho) &= \frac{A}{\rho_1^{ref} R_1} \exp\left(-R_1 \frac{\rho_1^{ref}}{\rho}\right) + \frac{B}{\rho_1^{ref} R_2} \exp\left(-R_2 \frac{\rho_1^{ref}}{\rho}\right) \\ &\quad - \frac{A}{\rho_1^{ref} R_1} \exp\left(-R_1 \frac{\rho_1^{ref}}{\rho_{CJ}}\right) - \frac{B}{\rho_1^{ref} R_2} \exp\left(-R_2 \frac{\rho_1^{ref}}{\rho_{CJ}}\right) - \frac{p_{CJ} - \Pi_1(\rho_{CJ})}{\Gamma_1 \rho_{CJ}} + e_{CJ} \end{aligned} \quad (27)$$

In the case of the CC EOS, we have :

$$\begin{aligned} \Pi_2(\rho) &= A_1 \left(\frac{\rho}{\rho_2^{ref}}\right)^{E_1} - A_2 \left(\frac{\rho}{\rho_2^{ref}}\right)^{E_2} \\ Q_2(\rho) &= \frac{A_1}{\rho_2^{ref} (E_1 - 1)} \left( \left(\frac{\rho}{\rho_2^{ref}}\right)^{E_1 - 1} - 1 \right) - \frac{A_2}{\rho_2^{ref} (E_2 - 1)} \left( \left(\frac{\rho}{\rho_2^{ref}}\right)^{E_2 - 1} - 1 \right) - e_0 \end{aligned} \quad (28)$$

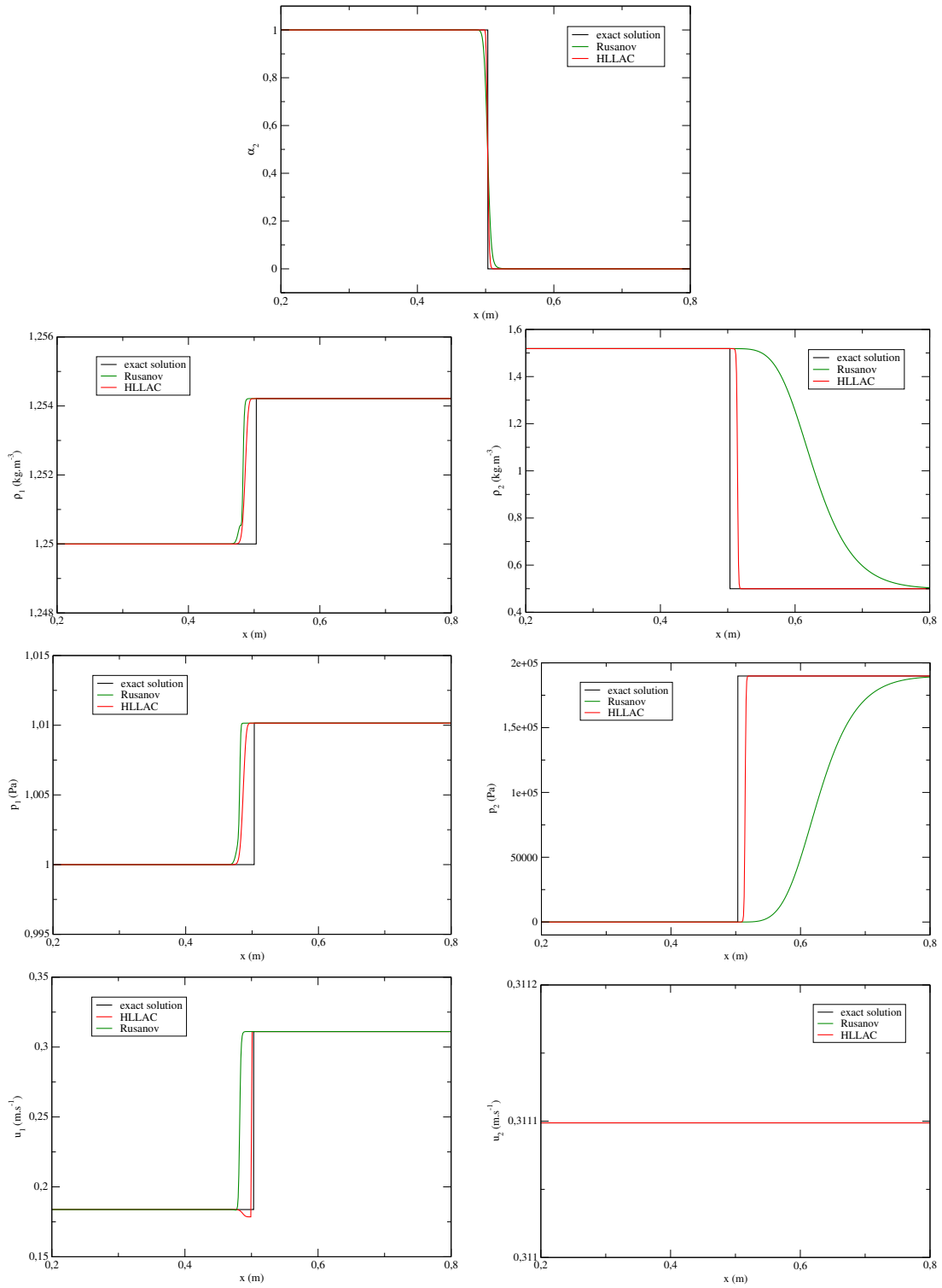


FIGURE 9 – Comparison between analytical and numerical solutions on Test 5 with 1000 cells at time  $t_f = 0.01s$ . From the top to the bottom right :  $\alpha_2, \rho_1, \rho_2, p_1, p_2, u_1, u_2$  vs  $x$ .

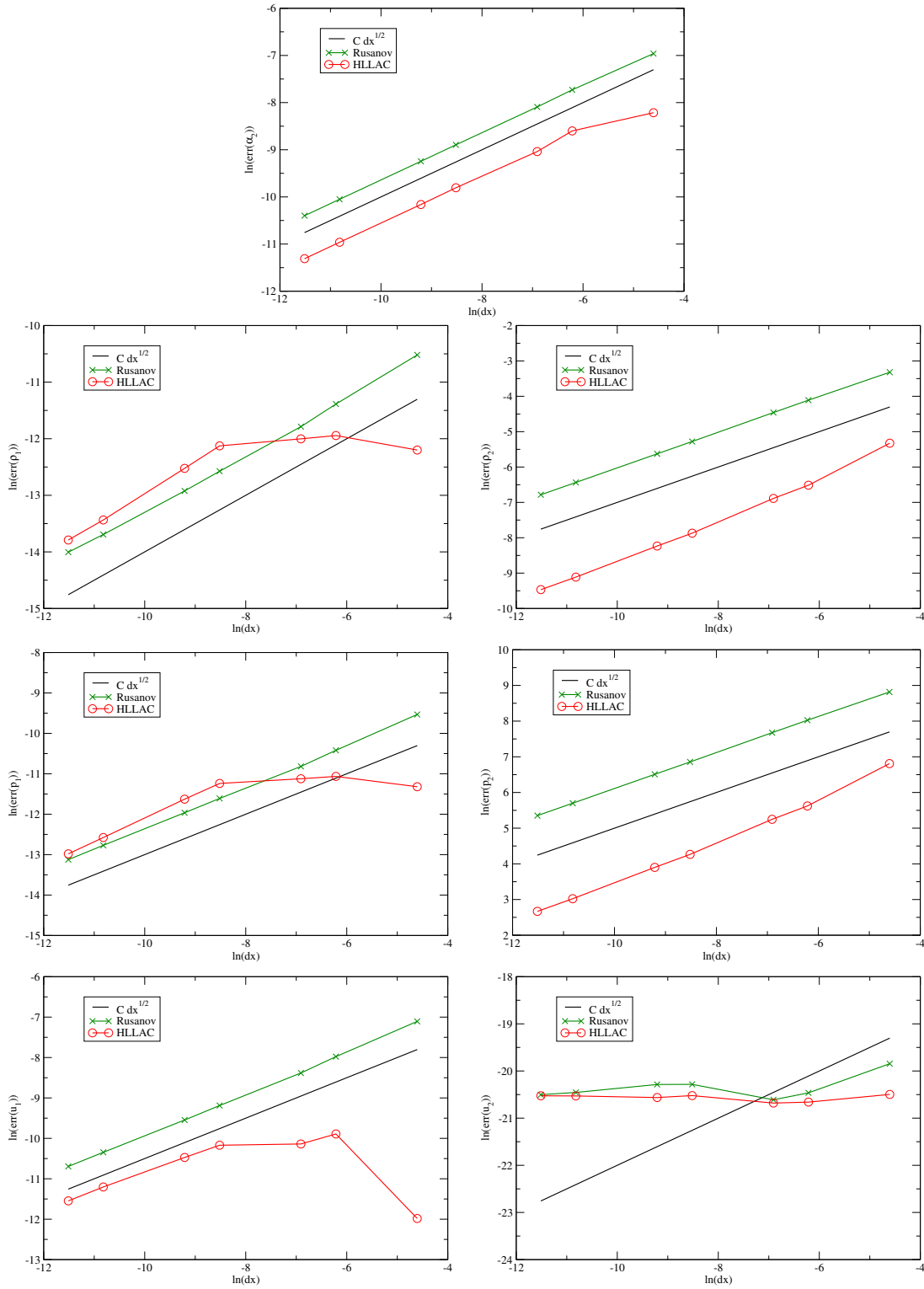


FIGURE 10 – Convergence study on Test 5 at time  $t_f = 0.01s$ . From the top to the bottom right : L1 norm of the error on  $\alpha_2, \rho_1, \rho_2, p_1, p_2, u_1, u_2$  vs  $\Delta x$ .

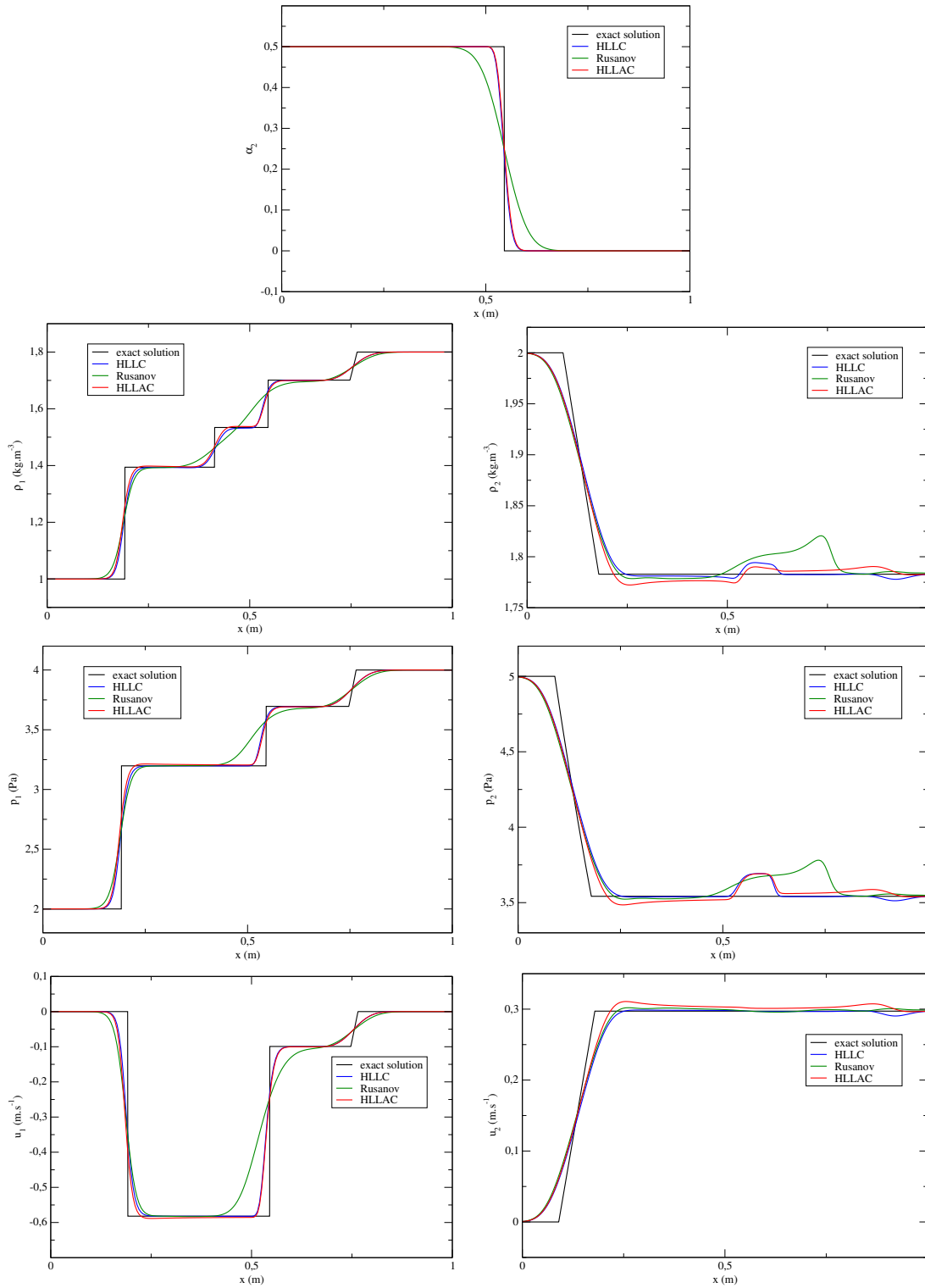


FIGURE 11 – Comparison between analytical and numerical solutions on Test 6 with 200 cells at time  $t_f = 0.15s$ . From the top to the bottom right :  $\alpha_2, \rho_1, \rho_2, p_1, p_2, u_1, u_2$  vs  $x$ .

Many thermodynamical parameters are required for both EOS and they are provided in table 4. Initially, the detonation products are at the Chapman-Jouguet state and the copper is under atmospheric conditions, as recalled in table 5. Only the HLLAC scheme is considered in this test and different meshes are used. Figure 12 provides the numerical results on the fraction  $\alpha_2$  and the mean variables  $\rho = \alpha_1\rho_1 + \alpha_2\rho_2$ ,  $u = \frac{1}{\rho}(\alpha_1\rho_1u_1 + \alpha_2\rho_2u_2)$ ,  $p = \alpha_1p_1 + \alpha_2p_2$  at time  $t_f = 73 \times 10^{-6} s$ . The solution of this test-case consists of a rarefaction wave propagating to the left in the detonation gases, a two-phase contact propagating to the right and a shock wave propagating to the right in the copper. Due to the complexity of the considered EOS, no exact solution is available for this test but the comparison of the numerical solutions on the different meshes shows that the different waves and intermediate states are accurately captured by the HLLAC scheme when refining the grid. This numerical solution is in agreement with the one provided in [40] (Figure 11 page 454). Since we use a first-order scheme, more diffusion is observed in our numerical results. We also recall that Saurel & Abgrall [40] do not consider the Baer-Nunziato closure laws (equation (6)) and use instantaneous pressure and velocity relaxations. This test-case demonstrates the ability of the HLLAC to deal with complex EOS, even in the presence of vanishing phases and violent pressure waves.

TABLE 4 – JWL and CC EOS parameters for Test 7

JWL EOS		CC EOS	
$\Gamma_1$	0.25	$\Gamma_2$	2
$\rho_1^{ref}$ (kg.m <sup>-3</sup> )	1840	$\rho_2^{ref}$ (kg.m <sup>-3</sup> )	8900
$A$ (Pa)	$8.545 \times 10^{11}$	$A_1$ (Pa)	$1.45667 \times 10^{11}$
$B$ (Pa)	$2.05 \times 10^{10}$	$A_2$ (Pa)	$1.47751 \times 10^{11}$
$R_1$	4.6	$E_1$	2.994
$R_2$	1.35	$E_2$	1.994
$e_{CJ}$ (J.kg <sup>-1</sup> )	$2.610793 \times 10^6$	$e_0$ (J.kg <sup>-1</sup> )	$1.17900 \times 10^5$
$p_{CJ}$ (Pa)	$37 \times 10^9$		
$\rho_{CJ}$ (kg.m <sup>-3</sup> )	2485.37		

TABLE 5 – Initial conditions for Test 7

	$\alpha_2$	$\rho_1$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$u_1$ (m.s <sup>-1</sup> )	$p_1$ (Pa)	$\rho_2$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$u_2$ (m.s <sup>-1</sup> )	$p_2$ (Pa)
<b>Test 7</b> [40]	<b>Left state</b>	$10^{-6}$	2485.37	0.	$37 \times 10^9$	8924	0.
	<b>Right state</b>	$1 - 10^{-6}$	2485.37	0.	$37 \times 10^9$	8924	0.

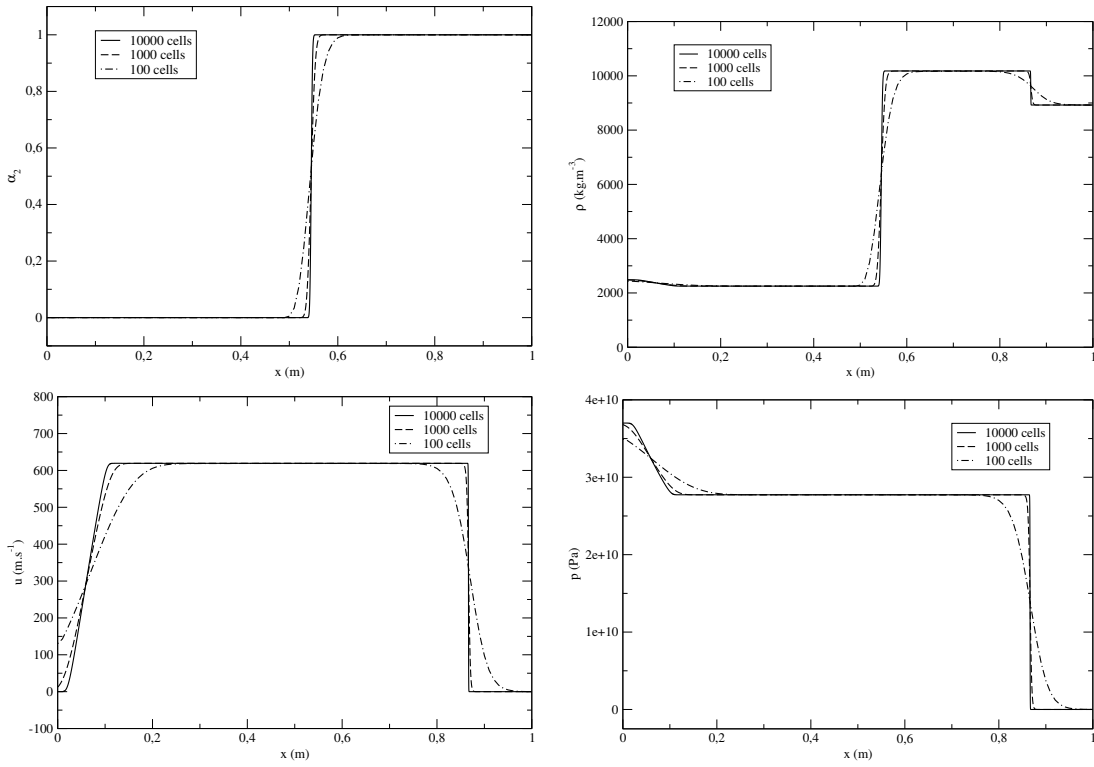


FIGURE 12 – Numerical solutions of Test 7 obtained with the HLLAC scheme on different meshes at time  $t_f = 73 \times 10^{-6} \text{s}$ . From the top left to the bottom right :  $\alpha_2, \rho, u, p$  vs  $x$ .

## 4.2 2D test-cases

Three 2D test-cases have been selected to push forward the assessment of the present HLLAC scheme and compare it with the HLLC and the Rusanov schemes. The efficiency of the three schemes is also briefly examined here.

### 4.2.1 Shock-bubble interaction

The first 2D test studies the interaction between a shock wave and a Helium bubble. It has been experimentally investigated by Haas and Sturtevant [26] and widely used to assess models and numerical methods since then [15, 32, 33]. A planar shock wave with  $M = 1.22$  is moving in the air towards a cylindrical Helium bubble. More precisely, the computational domain is  $267 \text{ mm} \times 89 \text{ mm}$  with the initial shock located at  $15 \text{ mm}$  from the inlet, the radius of bubble is  $25 \text{ mm}$  and its center is vertically centered at  $84.33 \text{ mm}$  from the inlet of the domain. The computations are performed on a mesh made of  $630 \times 210$  cells using transmissive inlet and outlet boundary conditions with walls at top and bottom. The two gases, Helium and air, are modeled as ideal gases ( $p_k^\infty = 0 \text{ Pa}$ ) with  $\gamma_1 = 1.648$  and  $\gamma_2 = 1.4$  respectively. The initial conditions of the test are presented in table 6 and the Courant number is set to  $C_{CFL} = 0.5$ .

Figure 13 shows the comparison between numerical results of the three different schemes on the mean density  $\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$  at different times. As in many of the 1D Riemann problems, the results of the HLLAC and the HLLC schemes are similar. In contrast, the Rusanov scheme is very diffusive as it can be seen on the stationary interface of the bubble before being reached by the shock wave. This diffusion prevents the Rusanov scheme from capturing important physical phenomena in the interaction unlike the other schemes. Thus, we observe with the two HLLC-type schemes that the refracted shock wave in the bubble is ahead the shock due to the higher speed of sound in Helium. Moreover, a transmitted shock wave appears at the location where the reflected rarefaction wave meets the interface and it forms a  $\lambda$ -shock by interacting with the incoming shock. We also retrieve the beginning of the Richtmyer-Meshkov instability due to the interaction between the shock wave and the curved interface of the bubble. Finally we compare the CPU time of the computations of  $1 \text{ ms}$  with the three different schemes. Although, they provide very different results the Rusanov and the HLLAC schemes have a similar CPU cost whereas the HLLC scheme is 2.8 times slower on this test.

TABLE 6 – Initial conditions for the shock-bubble interaction test-case

	$\alpha_1$	$\rho_1$ ( $\text{kg.m}^{-3}$ )	$u_1$ ( $\text{m.s}^{-1}$ )	$p_1$ (Pa)	$\rho_2$ ( $\text{kg.m}^{-3}$ )	$u_2$ ( $\text{m.s}^{-1}$ )	$p_2$ (Pa)
<b>Right state</b>	$10^{-6}$	0.2546	-114.42	$10^5$	1.92691	-114.42	$1.5698 \times 10^5$
<b>Left state</b>	$10^{-6}$	0.2546	0.	$10^5$	1.4	0.	$10^5$
<b>Bubble</b>	$1 - 10^{-6}$	0.2546	0.	$10^5$	1.4	0.	$10^5$

### 4.2.2 Underwater explosion

The second 2D test is taken from [24, 32] and focuses on an underwater explosion. A rectangular domain  $[-2; 2] \text{ m} \times [-1.5; 1] \text{ m}$  with wall boundary conditions is considered.



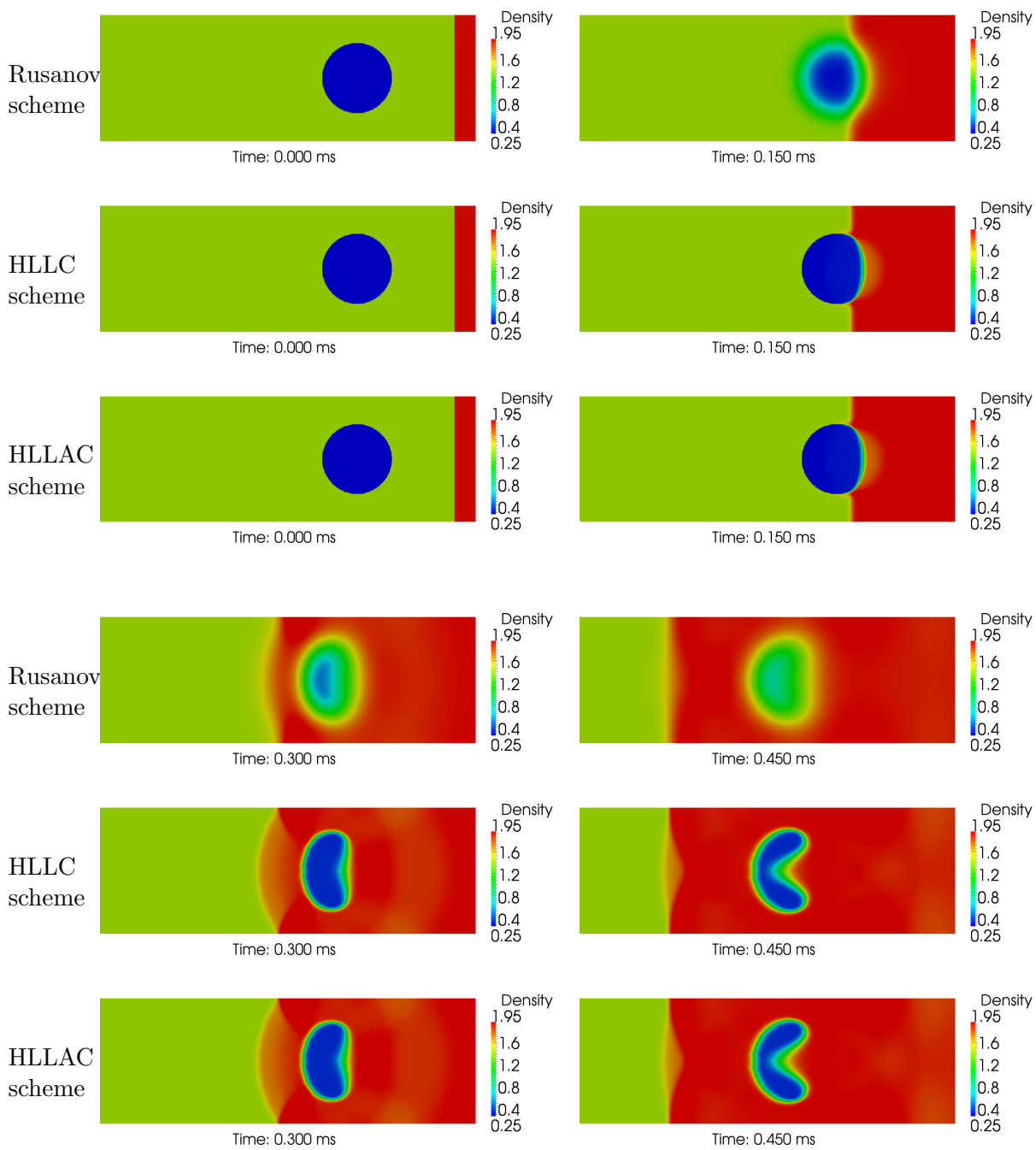


FIGURE 13 – Shock and air/He bubble interaction : comparison between numerical solutions obtained with the Rusanov, the HLLC and the HLLAC schemes at different times.

Initially, a circular bubble of high-pressure gas is located in the water under the air-water interface located at  $y = 0$ . The radius of the bubble is 0.12 m and its center is located at  $(0; -0.3)$  m. The air above the interface and the gas in the bubble are modelled as an ideal gas ( $p_1^\infty = 0$  Pa) with  $\gamma_1 = 1.4$ . The Stiffened Gas EOS is used for the water ( $p_2^\infty = 6 \times 10^8$  Pa and  $\gamma_2 = 4.4$ ). Table 7 provides the initial conditions of the computations. This test is particularly suited to assess the robustness of the schemes due to the presence of a strong shock wave and material interfaces between vanishing phases. The initial pressure and density ratios are particularly high : around  $10^4$  for pressure and  $10^3$  for density. We use a grid with  $400 \times 250$  cells and a Courant number  $C_{CFL} = 0.5$ . Moreover the pressure and velocity relaxation terms [12, 29, 36] are also used in this test-case. Details on those source terms can be found in appendix B. The time scales associated to those phenomena are set to very small values in order to obtain quasi-instantaneous relaxations :  $\tau_p = 10^{-12}$  s and  $\tau_u = 10^{-12}$  s.

Figure 14 provides the numerical results of the computations with the different schemes on the mean density  $\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$  at several times. First, the HLLC scheme was not robust enough for this severe test. As in test 5, the HLLC does not preserve the positivity of the pressures of the intermediate states probably due to the presence of vanishing phases. Once again, the results obtained with the Rusanov and the HLLAC schemes look very different due to the inner numerical diffusion of the Rusanov scheme. Indeed, the initial pressure difference between the bubble and the water generates a shock wave in the water and a rarefaction wave in the bubble. Then, the shock wave reaches the free surface resulting in a reflected rarefaction wave in the water and a transmitted shock wave in the air which is much weaker and cannot be observed on the present density results. In the case of the Rusanov scheme, the horizontal air-water interface is very smeared. As it can be observed on the results obtained with the HLLAC scheme, the shape of the growing bubble evolves from a circular one to an oval one. More details on the physical phenomena can be found in [35]. The results obtained with the Rusanov scheme show a very different shape of the bubble due to its poor accuracy. Finally we note that the CPU cost of the HLLAC scheme is only 15% higher than the one of the Rusanov scheme on this test demonstrating the efficiency of the proposed scheme.

TABLE 7 – Initial conditions for the underwater explosion test-case

	$\alpha_1$	$\rho_1$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$u_1$ (m.s <sup>-1</sup> )	$p_1$ (Pa)	$\rho_2$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$u_2$ (m.s <sup>-1</sup> )	$p_2$ (Pa)
<b>Water</b>	$10^{-6}$	1.225	0.	$1.01325 \times 10^5$	1000	0.	$1.01325 \times 10^5$
<b>Air</b>	$1 - 10^{-6}$	1.225	0.	$1.01325 \times 10^5$	1000	0.	$1.01325 \times 10^5$
<b>Gas bubble</b>	$1 - 10^{-6}$	1250	0.	$10^9$	1000	0.	$10^9$

### 4.2.3 Cylindrical underwater explosion near a planar wall

The third 2D test is similar to the previous one except that a rigid planar wall replaces the free surface. Therefore the strong interaction between a shock wave in the water and a planar wall can be investigated. This test-case was previously studied in [37, 44]. A rectangular computational domain  $[-6; 6]$  m  $\times$   $[-6; 3]$  m is considered. The upper boundary condition located at  $y = 3$  m is a rigid wall whereas the other boundary conditions are transmissive. Initially, a 1-m radius explosive gas bubble is located at  $(0; 0)$ . This gas is modelled as an ideal gas ( $p_1^\infty = 0$  Pa) with  $\gamma_1 = 2$  whereas the water is modeled as a Stiffened Gas with  $p_2^\infty = 3 \times 10^8$

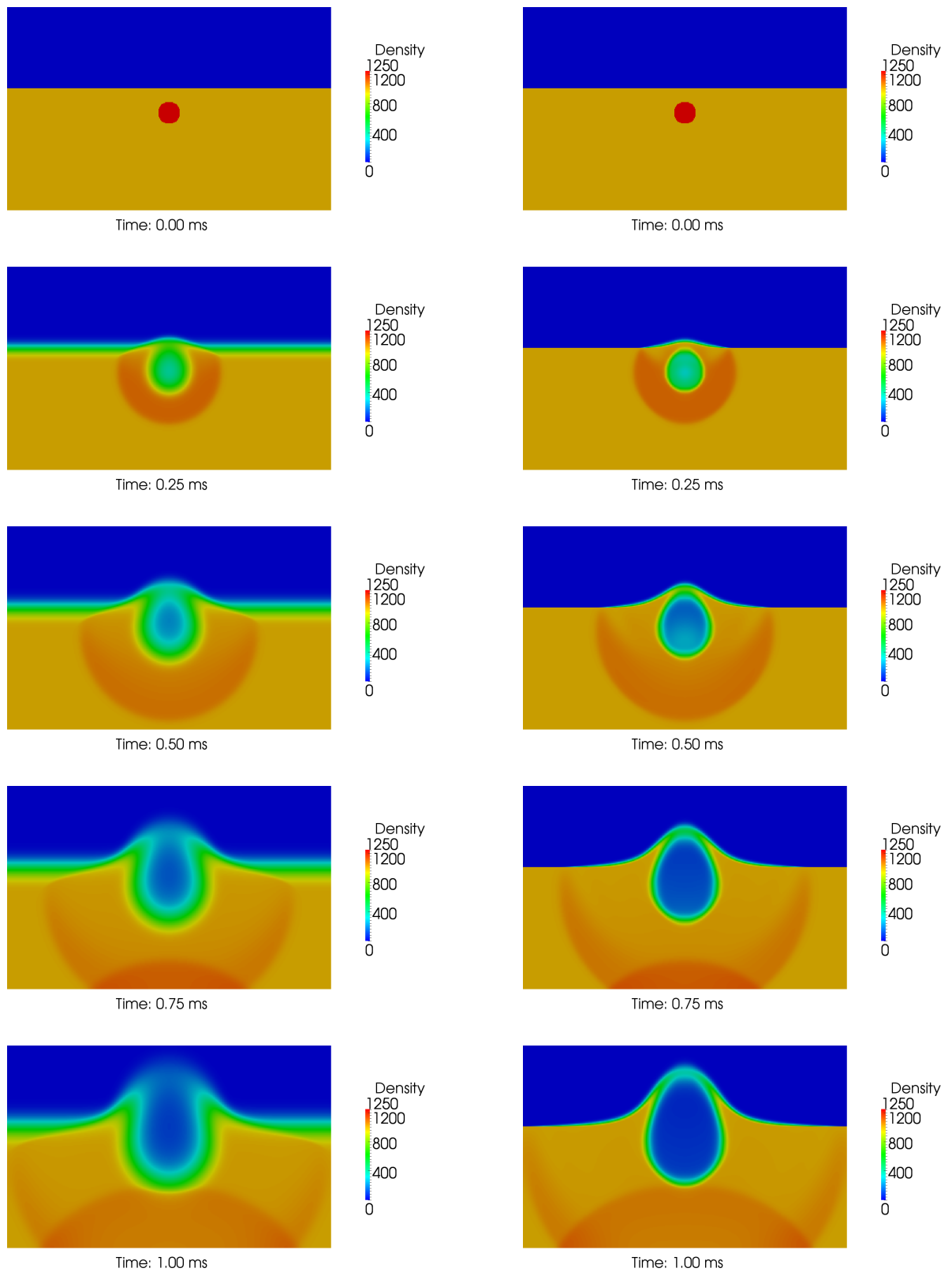


FIGURE 14 – Underwater explosion : comparison between numerical solutions obtained with the Rusanov scheme (left column) and the HLLAC scheme (right column) at different times.

Pa and  $\gamma_2 = 7.15$ . Table 8 provides the initial conditions used for the present computations. As in [37], a small amount of gas with  $\alpha_1 = 0.005$  is uniformly distributed in the water. A very fine mesh is used with  $1200 \times 900$  cells. All of the computations are performed with a Courant number  $C_{CFL} = 0.5$ . As in the previous underwater explosion test, the pressure and velocity relaxation terms [12, 29, 36] are used with  $\tau_p = 10^{-12}$  s and  $\tau_u = 10^{-12}$  s (see appendix B for details on those source terms).

TABLE 8 – Initial conditions for the computation of the 2D cylindrical underwater explosion near a planar wall

	$\alpha_1$	$\rho_1$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$u_1$ (m.s <sup>-1</sup> )	$p_1$ (Pa)	$\rho_2$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$u_2$ (m.s <sup>-1</sup> )	$p_2$ (Pa)
<b>Water</b>	0.005	1.27	0.	$10^5$	1000	0.	$10^5$
<b>Gas bubble</b>	0.995	1270	0.	$8.29 \times 10^8$	1000	0.	$8.29 \times 10^8$

Figure 15 provides the numerical results of the computation with the different schemes on the mean density ( $\rho = \alpha_1\rho_1 + \alpha_2\rho_2$ ) fields in conjunction with the mean pressure ( $p = \alpha_1p_1 + \alpha_2p_2$ ) contours at different time instances. First, as in the previous underwater explosion test, the HLLC scheme is not robust enough on this challenging test. At  $t = 1.5$  ms, the main shock generated by the explosion has been reflected from the upper planar rigid wall (see Figure 15-(a)). The excessive numerical diffusion of the Rusanov scheme smears both the density jump located at the gas-water interface and the shock waves which propagate in the water. Then, the reflected shock wave interacts with the gas-water interface resulting in a rarefaction wave propagating in the water towards the upper wall and a weak shock wave propagating in the gas bubble (with a lower celerity) which are clearly visible at  $t = 2$  ms (see Figure 15-(b)). Notice that the rarefaction wave is strongly affected by the numerical dissipation of the Rusanov scheme. As a consequence, the obtained reflection of this rarefaction wave at the upper wall is weaker with the use of the Rusanov scheme than with the use of the HLLAC scheme. Due to this reflection, a low pressure region is generated near the wall leading to an inception of cavitation. Notice that the cavitation is only obtained with the HLLAC scheme. Afterwards, the cavitation pocket collapses as it can be seen on the numerical results obtained with the HLLAC scheme. Figure 15-(e) shows that, at  $t = 5.5$  ms, the cavitation region near the center of the wall has collapsed whereas cavitation regions still exist on both sides of the collapse zone.

The pressure and the gas volume fraction histories at the center of the wall are presented on Figure 16. All of the computations retrieve the main pressure peak at  $t = 1$  ms which corresponds to the reflection of the main shock wave at the upper wall. The time of occurrence and the shape of this peak are in agreement with the previous computations performed by Xie *et al.* [44] (see Figure 16 page 1190) and by Ma *et al.* [37] (see Figure 13 page 16). The maximal amplitude of the pressure peak (6600 bar with HLLAC and 6400 bar with Rusanov) is very close to the Xie’s solution (6500 bar). The generation of cavitation at  $t = 3.7$  ms is only retrieved with the the HLLAC scheme. In contrast, no cavitation occurs during the computation using the Rusanov scheme as it can also be noticed on the time evolution of the gas volume fraction. However, the collapse of the cavitation pocket is predicted earlier in the present computation ( $t = 4.55$  ms) in comparison with the Xie’s solution ( $t = 5.05$  ms) and

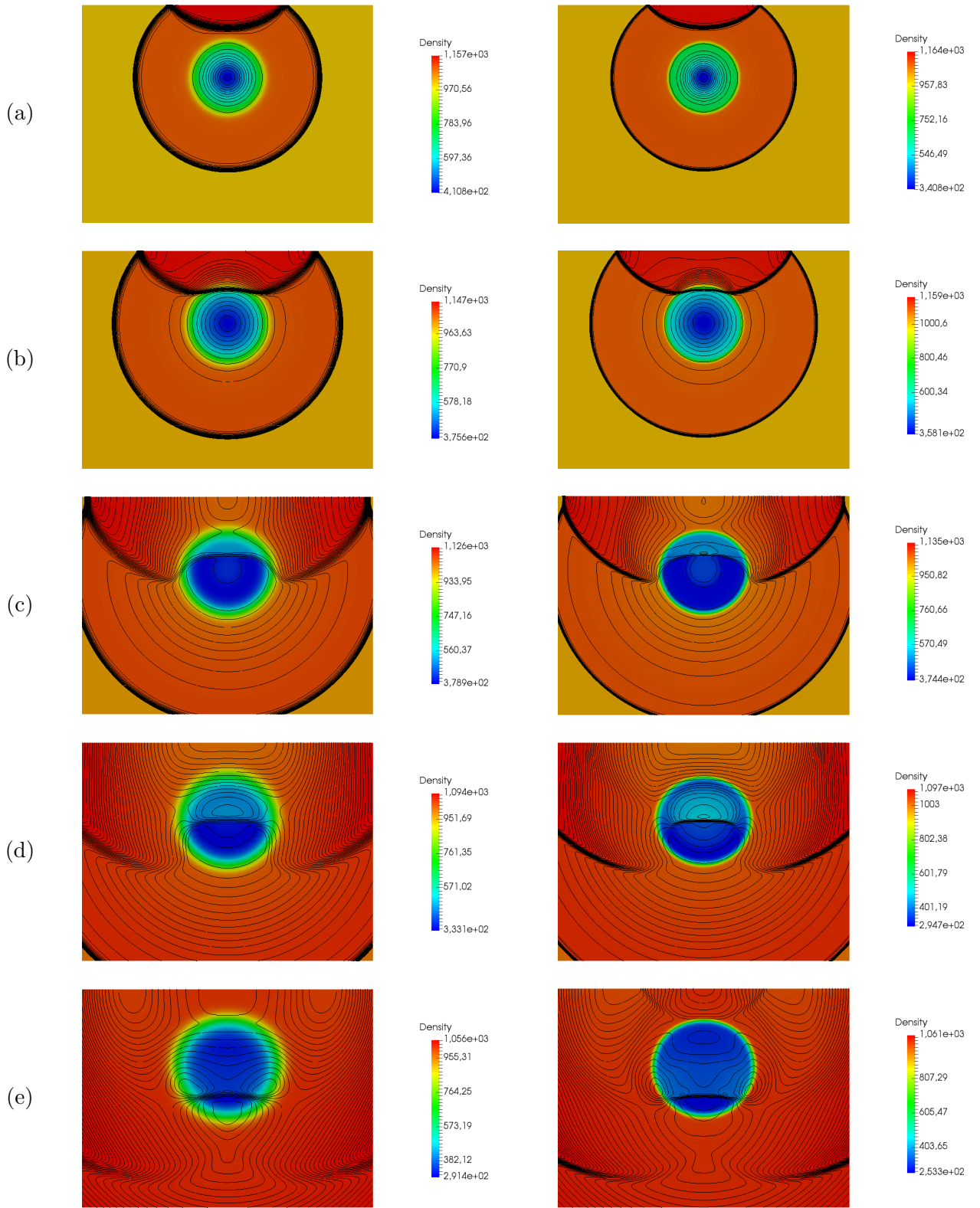


FIGURE 15 – Cylindrical underwater explosion near a planar wall : comparison between numerical solutions obtained with the Rusanov (left) and HLLAC (right) schemes at different instants : (a)  $t = 1.5$  ms, (b)  $t = 2$  ms, (c)  $t = 3$  ms, (d)  $t = 4$  ms, and (e)  $t = 5.5$  ms.

the Ma's solution ( $t = 5.25$  ms). This discrepancy may be explained by the use of first-order schemes in the present computations in contrast to the previous ones [37,44]. In the same way, the earliest stages of the gas volume fraction history obtained with the HLLAC scheme are in agreement with the Ma's solution (see Figure 14 page 16), *i.e.* strong drop at  $t = 1$  ms when the shock wave reflects at the wall and rapid increase at  $t = 3.7$  ms when cavitation occurs. However, the gas volume fraction strongly reduces at  $t = 4.55$  ms in the present computation which corresponds to the collapse of the cavitation pocket. Besides the maximal value of the gas volume fraction is also lower in the present computation in comparison to the Ma's computation (0.0165 vs 0.04-0.05). In order to investigate the influence of the numerical errors induced by the use of first-order schemes, a finer mesh  $2400 \times 1800$  cells is also considered to reduce the corresponding numerical diffusion errors. The associated results show that the collapse of the cavitation pocket is postponed ( $t = 4.7$  ms) and the maximum value of  $\alpha_1$  is increased (0.04).

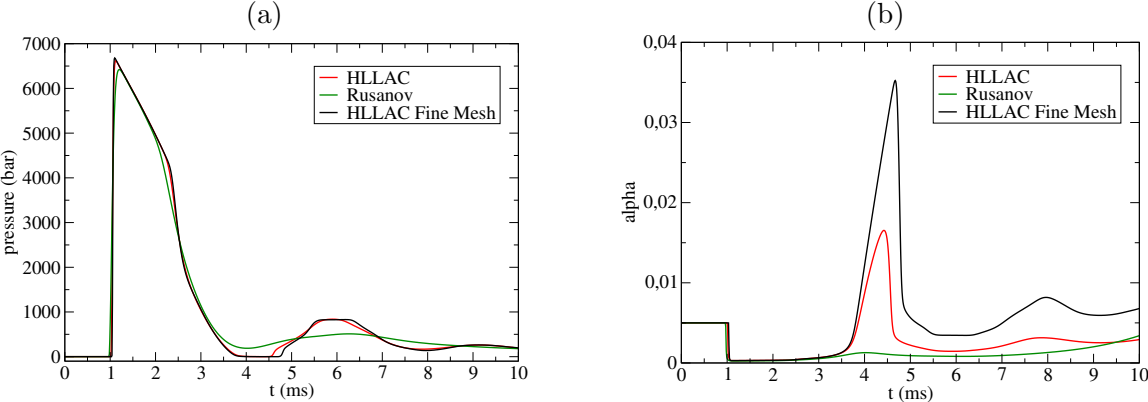


FIGURE 16 – Cylindrical underwater explosion near a planar wall : comparison of the time evolutions of the pressure (a) and the gas volume fraction (b) obtained with the HLLAC and Rusanov schemes.

## 5 Conclusion

Based on the solver proposed by Tokareva and Toro [42], a new HLLC-type Riemann scheme for the computation of the Baer-Nunziato model has been proposed. The key idea of that new scheme is an approximation of the two-phase contact of the model based on the Riemann invariants of this wave. It is only valid for “subsonic” flows but physically-relevant in those cases. An important consequence of the approximation is that the solver can directly deal with any Equation Of State. Moreover the solver no longer requires the resolution of a non-linear equation using an iterative procedure since the intermediate states are obtained as the solution of a linear system unlike the original one. Finally, the approximation of the two-phase contact is in agreement with the thin layer approximation proposed by Schwendeman *et al.* [41] and therefore a similar numerical treatment of the non-conservative products is used. The proposed solver has been compared with the original one and the Rusanov scheme on both 1D and 2D test-cases. Several 1D Riemann problems have been selected in order to assess the accuracy and the robustness of the scheme. The last 1D Riemann problem also demonstrates its ability to deal with complex Equations Of State. Grid convergence studies have been carried out and particular attention has been paid to the case of vanishing phases. Numerical results show that the original HLLC scheme is the most accurate one but the new HLLC-type scheme provides similar results in most cases and appears to be more robust on challenging tests. An efficiency study has also been carried out showing that the proposed scheme is more efficient than the original HLLC one. Three 2D test-cases have then been studied, a shock-bubble interaction and two underwater explosions which are severe test-cases with violent shock waves and material interfaces. Once again, the new scheme exhibits accuracy and robustness. Moreover, it appears to be very efficient since its computational cost is similar to the Rusanov one on those tests whereas it is more accurate. Thus, the proposed scheme appears to be an excellent candidate for the computation of more realistic situations since it is a good compromise between the accuracy of the original HLLC scheme and the robustness of the Rusanov scheme, while showing great efficiency.

Only first-order schemes have been considered in the present work but the extension of the proposed solver to the second-order, using the approach of Schwendeman *et al.* [41] for example, should be assessed. Based on previous work [15], the solver should also be tested in the ALE framework, particularly its robustness, in order to tackle the computations of two-phase flows with fluid-structures interactions.

**Acknowledgements** The first author received a financial support through the EDF-CIFRE contract 0459-2013. Computational facilities were provided by EDF. Numerical simulations have been performed with the *Europlexus* software.

## Appendix A. Connection through the two-phase contact

This appendix is dedicated to the connection through the two-phase contact between two states  $\mathbf{W}_l$  and  $\mathbf{W}_r$  where we use the following notation :

$$\mathbf{W}_K = \begin{pmatrix} (\alpha_1)_K \\ (\rho_1)_K \\ (u_1)_K \\ (p_1)_K \\ (\rho_2)_K \\ (u_2)_K \\ (p_2)_K \end{pmatrix}, \quad K = l, r$$

More precisely, we assume  $\mathbf{W}_l$ ,  $(\alpha_1)_r$ ,  $(\rho_2)_r$  and look for  $\mathbf{W}_r$  such that :

$$I_k(\mathbf{W}_r) = I_k(\mathbf{W}_l) \quad , \quad k = 1, 5$$

where  $(I_k)_{k=1,5}$  are the exact Riemann invariants of the two-phase contact given in equation (9). To that end, we first define the main unknown  $x = (\rho_1)_r$  and recast the preservation of  $I_4$  in the following way :

$$I_4(\mathbf{W}_l) = h_1(x, (p_1)_r) + \frac{1}{2} \left( \frac{I_2(\mathbf{W}_l)}{(\alpha_1)_r x} \right)^2 \quad (29)$$

where  $h_1(\rho_1, p_1)$  is the specific internal enthalpy of phase 1. We also define the function  $\mathcal{P}_1$  such that  $p_1 = \mathcal{P}_1(\rho_1, s_1)$ . Thus, equation (29) can be written as a non-linear equation on  $x$  :

$$f(x) = I_4(\mathbf{W}_l) \quad \text{with} \quad f(x) = h_1\left(x, \mathcal{P}_1(x, I_5(\mathbf{W}_l))\right) + \frac{1}{2} \left( \frac{I_2(\mathbf{W}_l)}{(\alpha_1)_r x} \right)^2 \quad (30)$$

Once this equation has been solved,  $W_r$  can easily be fully determined. Indeed,  $(p_1)_r = \mathcal{P}_1(x, I_5(\mathbf{W}_l))$ ,  $(u_1)_r$  and  $(u_2)_r$  are obtained thanks to the preservation of  $I_1$  and  $I_2$ . Finally the last Riemann invariant  $I_3$  provides us the remaining unknown  $(p_2)_r$ . Thus the connection through the two-phase contact only depends on the resolution of the non-linear equation (30).

For classical EOS, the first term of  $f(x)$  is an increasing function of  $x$ . For example, the ideal gas EOS gives :

$$h_1\left(x, \mathcal{P}_1(x, I_5(\mathbf{W}_l))\right) = \frac{\gamma_1 I_5(\mathbf{W}_l)}{\gamma_1 - 1} x^{\gamma_1 - 1}$$

Therefore, for non-zero values of  $I_2(\mathbf{W}_l)$ , the function  $f(x)$  admits a minimum for  $x = x_0$ . Moreover  $f(x)$  is decreasing for  $x$  in  $]0, x_0]$  and then increasing for  $x$  in  $[x_0, +\infty[$ . As a consequence, the equation (30) has no solution if  $f(x_0) > I_4(\mathbf{W}_l)$ , one solution if  $f(x_0) = I_4(\mathbf{W}_l)$  and two solutions if  $f(x_0) < I_4(\mathbf{W}_l)$  which corresponds to figure 17. It must be underlined that, when  $f(x_0) > I_4(\mathbf{W}_l)$ , no state  $\mathbf{W}_r$  can be connected to  $\mathbf{W}_l$  by the two-phase contact.



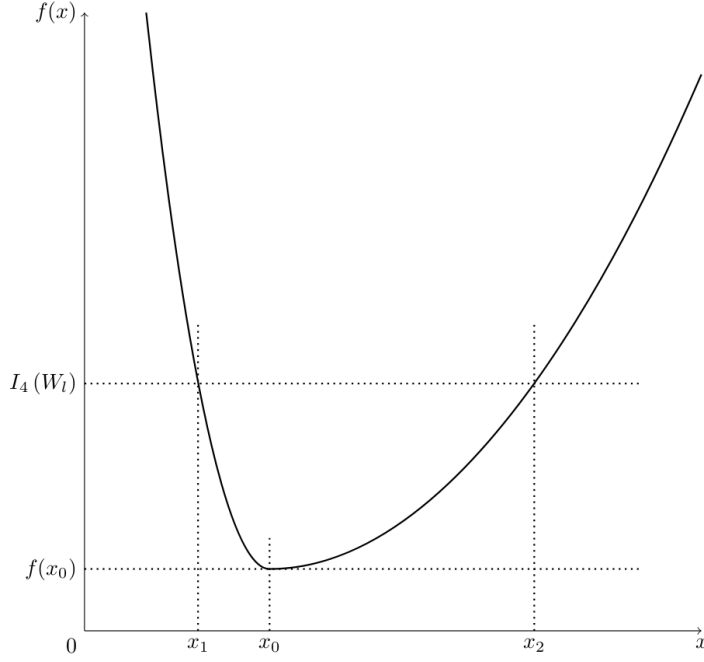


FIGURE 17 – Resolution of equation (30)

## Appendix B. Pressure and velocity relaxations

The Baer-Nunziato model with the source terms including pressure and velocity relaxations can be written as follows :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_1) & + & u_I \partial_x (\alpha_1) & = & K_p (p_1 - p_2) \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + & \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) & = & 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & + & \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) + (-1)^k p_I \partial_x (\alpha_1) & = & K_u (u_j - u_k) \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & + & \partial_x (\alpha_k \rho_k e_k u_k + \alpha_k p_k u_k) + (-1)^{k+1} p_I \partial_t (\alpha_1) & = & \frac{u_1 + u_2}{2} K_u (u_j - u_k) \end{cases} \quad (31)$$

where  $k = 1, 2$  and  $j = 3 - k$ . The scalars  $K_p$  and  $K_u$  are positive functions given by [29] :

$$K_p = \frac{1}{\tau_p} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{|p_1| + |p_2|} \quad \text{and} \quad K_u = \frac{1}{\tau_u} \frac{\alpha_1 \rho_1 \alpha_2 \rho_2}{\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2}$$

where  $\tau_p$  and  $\tau_u$  are respectively the time scales of pressure and velocity relaxation. System (31) is approximated using a fractional step method proposed in [29]. More details on the different relaxation substeps can be found in [12, 29, 36].

# References

- [1] Europlexus User's Manual. Technical Report, Joint Research Centre (JRC), Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), 2016.  
URL [http://europlexus.jrc.ec.europa.eu/public/manual\\_html/index.html](http://europlexus.jrc.ec.europa.eu/public/manual_html/index.html)
- [2] A. Ambroso, C. Chalons, F. Coquel, and T. Galié. Relaxation and numerical approximation of a two-fluid two-pressure diphasic model. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 43(06) :1063–1097, 2009.
- [3] A. Ambroso, C. Chalons, and P.-A. Raviart. A Godunov-type method for the seven-equation model of compressible two-phase flow. *Computers & Fluids*, 54 :67–91, 2012.
- [4] N. Andrianov and G. Warnecke. The Riemann problem for the Baer-Nunziato two-phase flow model. *Journal of Computational Physics*, 195(2) :434–464, 2004.
- [5] M. Baer and J. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6) :861–889, 1986.
- [6] P. Batten, N. Clarke, C. Lambert, and D. Causon. On the Choice of Wavespeeds for the HLLC Riemann Solver. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 18(6) :1553–1570, 1997.
- [7] A. Chinnayya, E. Daniel, and R. Saurel. Modelling detonation waves in heterogeneous energetic materials. *Journal of Computational Physics*, 196(2) :490–538, 2004.
- [8] F. Coquel, T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *Comptes Rendus Mathématique*, 334(10) :927–932, 2002.
- [9] F. Coquel, J.-M. Hérard, K. Saleh, and N. Seguin. A robust entropy-satisfying finite volume scheme for the isentropic Baer-Nunziato model. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 48(1) :165–206, 2014.
- [10] F. Coquel, J.-M. Hérard, K. Saleh, and N. Seguin. A Positive and Entropy-Satisfying Finite Volume Scheme for the Baer-Nunziato Model, 2016. Preprint.  
URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01261458>
- [11] F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, P. Helluy, J.-M. Hérard, O. Hurisse, and Y. Liu. Approximate solutions of the Baer-Nunziato Model. *ESAIM : Proceedings*, 40 :63–82, 2013.
- [12] F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, J.-M. Hérard, O. Hurisse, and Y. Liu. Validation of a two-fluid model on unsteady liquid-vapor water flows. *Computers & Fluids*, 119 :131–142, 2015.
- [13] G. Dal Maso, P. G. LeFloch, and F. Murat. Definition and weak stability of nonconservative products. *Journal de mathématiques pures et appliquées*, 74(6) :483–548, 1995.

- [14] S. Dallet. A comparative study of numerical schemes for the Baer-Nunziato model. *submitted to International Journal On Finite Volumes*, 2016.
- [15] F. Daude and P. Galon. On the computation of the Baer-Nunziato model using ALE formulation with HLL- and HLLC-type solvers towards fluid-structure interactions. *Journal of Computational Physics*, 304 :189–230, 2016.
- [16] V. Deledicque and M. V. Papalexandris. An exact Riemann solver for compressible two-phase flow models containing non-conservative products. *Journal of Computational Physics*, 222(1) :217–245, 2007.
- [17] D. A. Drew and S. L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer Verlag, 1999.
- [18] M. Dumbser and E. F. Toro. A Simple Extension of the Osher Riemann Solver to Non-conservative Hyperbolic Systems. *Journal of Scientific Computing*, 48(1-3) :70–88, 2010.
- [19] P. Embid and M. Baer. Mathematical analysis of a two-phase continuum mixture theory. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 4(4) :279–312, 1992.
- [20] D. Furfaro and R. Saurel. A simple HLLC-type Riemann solver for compressible non-equilibrium two-phase flows. *Computers & Fluids*, 111 :159–178, 2015.
- [21] T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Numerical Modeling Of Two-Phase Flows Using The Two-Fluid Two-Pressure Approach. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 14(05) :663–700, 2004.
- [22] S. Gavriluk and R. Saurel. Mathematical and Numerical Modeling of Two-Phase Compressible Flows with Micro-Inertia. *Journal of Computational Physics*, 175(1) :326–360, 2002.
- [23] J. Glimm, D. Saltz, and D. H. Sharp. Renormalization group solution of two-phase flow equations for Rayleigh-Taylor mixing. *Physics Letters A*, 222(3) :171–176, 1996.
- [24] J. W. Grove and R. Menikoff. Anomalous reflection of a shock wave at a fluid interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 219 :313–336, 1990.
- [25] V. Guillemaud. *Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques par une approche bifluide à deux pressions*. Ph.D. thesis, Université de Provence - Aix-Marseille I, 2007.  
URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00169178/document>
- [26] J.-F. Haas and B. Sturtevant. Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities. *Journal of Fluid Mechanics*, 181 :41–76, 1987.
- [27] A. Harten, P. Lax, and B. van Leer. On Upstream Differencing and Godunov-Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Review*, 25(1) :35–61, 1983.
- [28] J.-M. Hérard. A three-phase flow model. *Mathematical and Computer Modelling*, 45(5-6) :732–755, 2007.
- [29] J.-M. Hérard and O. Hurisse. A fractional step method to compute a class of compressible gas-liquid flows. *Computers & Fluids*, 55 :57–69, 2012.
- [30] M. Ishii. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flows*. Collection de la Direction des Etudes et Recherches d’Electricité de France, 1975.
- [31] H. Jin, J. Glimm, and D. H. Sharp. Entropy of averaging for compressible two-pressure two-phase flow models. *Physics Letters A*, 360(1) :114–121, 2006.

- [32] S. Kokh and F. Lagoutière. An anti-diffusive numerical scheme for the simulation of interfaces between compressible fluids by means of a five-equation model. *Journal of Computational Physics*, 229(8) :2773–2809, 2010.
- [33] J. J. Kreeft and B. Koren. A new formulation of Kapila’s five-equation model for compressible two-fluid flow, and its numerical treatment. *Journal of Computational Physics*, 229(18) :6220–6242, 2010.
- [34] S. Liang, W. Liu, and L. Yuan. Solving seven-equation model for compressible two-phase flow using multiple GPUs. *Computers & Fluids*, 99 :156–171, 2014.
- [35] T. G. Liu, B. C. Khoo, and K. S. Yeo. The simulation of compressible multi-medium flow : II. Applications to 2D underwater shock refraction. *Computers & Fluids*, 30(3) :315–337, 2001.
- [36] H. Lochon, F. Daude, P. Galon, and J.-M. Hérard. Comparison of two-fluid models on steam-water transients. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 2016.
- [37] Z. Ma, D. Causon, L. Qian, H. Gu, C. Mingham, and P. M. Ferrer. A GPU based compressible multiphase hydrocode for modelling violent hydrodynamic impact problems. *Computers & Fluids*, 120 :1–23, 2015.
- [38] S. Müller, M. Hantke, and P. Richter. Closure conditions for non-equilibrium multi-component models. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, pages 1–33, 2015.
- [39] V. H. Ransom and D. L. Hicks. Hyperbolic two-pressure models for two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 53(1) :124–151, 1984.
- [40] R. Saurel and R. Abgrall. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2) :425–467, 1999.
- [41] D. W. Schwendeman, C. W. Wahle, and A. K. Kapila. The Riemann problem and a high-resolution Godunov method for a model of compressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 212(2) :490–526, 2006.
- [42] S. Tokareva and E. Toro. HLLC-type Riemann solver for the Baer-Nunziato equations of compressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 229(10) :3573–3604, 2010.
- [43] E. F. Toro, M. Spruce, and W. Speares. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver. *Shock Waves*, 4(1) :25–34, 1994.
- [44] W. Xie, T. Liu, and B. Khoo. Application of a one-fluid model for large scale homogeneous unsteady cavitation : The modified Schmidt model. *Computers & Fluids*, 35(10) :1177–1192, 2006.



## Chapitre 5

# Modélisation en approche bifluide du transfert de masse à l'aide de la formulation de Bilicki pour la brusque dépressurisation d'eau liquide

Ce chapitre est consacré à la modélisation du transfert de masse pour les écoulements diphasiques eau-vapeur. Le changement de phase est un phénomène compliqué à prédire, tout particulièrement pour les écoulements compressibles transitoires. En effet, les interactions entre ce phénomène et les ondes de pression sont nombreuses comme en témoignent des applications telles que les coups de béliers ou la crise d'ébullition. Dans ce chapitre, une autre application est considérée : la brusque dépressurisation d'eau liquide. Il s'agit d'un phénomène particulièrement étudié dans le domaine du nucléaire puisqu'il est typique de l'Accident par Perte de Réfrigérant Primaire (APRP), un accident de référence pour la sûreté des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP).

Le modèle bifluide de Baer-Nunziato [11] est utilisé pour représenter les écoulements diphasiques. Plus précisément, l'approche proposée par [66] et basée sur un opérateur de moyenne statistique est considérée. Dans cette approche, les lois de fermeture utilisées pour les termes d'échanges entre phases reposent sur la caractérisation entropique du modèle et sont donc exprimées grâce à des termes de relaxation des différents déséquilibres phasiques. Une échelle de temps est associée à chaque effet de relaxation et il convient de proposer une évaluation pertinente de chacune d'elles dans le cadre des écoulements eau-vapeur. En ce qui concerne les relaxations en pression et vitesse, des évaluations basées sur le comportement d'une bulle (ou d'une goutte) dans un milieu infini ont été proposées dans [86]. Nous nous intéressons ici à l'évaluation des deux autres échelles de temps de relaxation, et plus particulièrement à celle de la relaxation en potentiel chimique qui correspond au transfert de masse. Afin de proposer une évaluation simple mais réaliste de cette dernière, les travaux de Bilicki *et al.* [19, 35] sur un modèle de type homogène relaxé (HRM en anglais) sont considérés.

Dans une première partie, nous présentons donc le modèle bifluide de Baer-Nunziato [11] et le modèle HRM proposé par Bilicki et Kestin [19]. La comparaison de la formulation du transfert de masse dans ces deux modèles permet de proposer une évaluation de l'échelle de temps de relaxation associée au transfert de masse. La deuxième partie du chapitre est alors consacrée à la validation de cette modélisation du transfert de masse sur trois expériences de dépressurisation brusque d'une tuyauterie d'eau chaude. Ces trois expériences ont été réalisées avec des conditions initiales différentes sur des dispositifs expérimentaux similaires ce qui permet d'évaluer cette modélisation sur une large gamme de conditions thermodynamiques. Tout d'abord, la corrélation proposée par Downar-Zapolski *et al.* [35] est utilisée sur l'expérience Canon [97]. Les résultats sont comparés aux données expérimentales ainsi qu'à des résultats numériques de référence obtenus avec des temps de relaxation constants [86]. Bien que prometteurs, ces résultats montrent que l'utilisation de cette corrélation conduit à des temps de relaxation trop grands, aussi une nouvelle corrélation est proposée. Cette dernière est ensuite testée sur l'expérience Canon, mais aussi Super-Canon [97] et l'expérience d'Edwards [38]. Pour chaque cas, une étude de sensibilité au maillage est menée afin de comparer des résultats numériques convergés avec les données expérimentales et les résultats d'un calcul numérique de référence effectué sur le même maillage. Cette comparaison montre que la modélisation du transfert de masse basée sur les travaux de Bilicki *et al.* [19,35] apporte un enrichissement important au modèle bifluide de Baer-Nunziato [11] pour l'étude de la brusque dépressurisation d'eau liquide.

# Bilicki-like mass transfer for the computation of fast depressurization of water using the Baer-Nunziato model

H. Lochon<sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup>EDF R&D, Département AMA, 7 Boulevard Gaspard Monge, 91120 Palaiseau, France

<sup>b</sup>IMSIA, UMR EDF/CNRS/CEA/ENSTA 9219, 828 Boulevard des Maréchaux, 91762 Palaiseau Cedex, France

<sup>c</sup>I2M, UMR CNRS 7373, Technopôle Château-Gombert, 39 rue F. Joliot Curie, 13453 Marseille Cedex 13, France

## 1 Introduction

Compressible two-phase flows are involved in many industrial applications such as naval engineering, petroleum industry, nuclear power generation, automotive or aerospace technologies. In the nuclear field, two-phase flows are mainly steam-water flows in Pressurized Water Reactors (PWR). Thus, particular attention must be paid to the mass transfer when studying those flows. Since the 1960s, many two-phase flow models have been proposed for nuclear thermal hydraulics. Most of the modelling efforts has been made to predict the Loss-Of-Coolant-Accident (LOCA) which is one of the basic failure mode of PWR.

Two different approaches are usually distinguished to model two-phase flows : the homogeneous approach and the two-fluid approach. Models based on the first approach consider the mixture of the two phases as one fluid assuming different equilibria between both phases. In the second approach, no phasic equilibrium is assumed and two different fluids are considered. As a consequence, many transfers between the two phases, including the mass transfer, require proper modelling. Ransom and Hicks [21] proposed one of the first models based on this second approach. Since then, the two-fluid approach has gained interest and many models could be found in the literature, see [2, 12, 13, 15, 17, 24] among others.

The present work is dedicated to the model proposed by Baer and Nunziato [2]. More precisely, it is focused on the mass transfer of the Baer-Nunziato model for steam-water transient flows. As in previous work [6, 16], the modelling of the source terms is based on relaxation phenomena to comply with the entropy inequality. Thus, several relaxation time scales are involved in the transfers between phases and require proper modelling. In order to propose simple but physically-based evaluations of the time scales dedicated to the mass transfer, we focus on the work of Bilicki and co-authors [3, 4, 8] on the Homogeneous Relaxation Model. Several experiments of fast depressurization of water which are similar to a LOCA have been chosen in order to assess the proposed modelling of the mass transfer : the Edwards pipe experiment [9], the Canon and Super-Canon experiments [23].

Hence the present work is organized as follows. We first present the Baer-Nunziato model [2] and the Homogeneous Relaxation Model proposed by Bilicki and Kestin [3]. Based on the comparison of the two different modelling of the mass transfer, an evaluation of the relaxation time scale involved in the mass transfer of the Baer-Nunziato model is proposed. The second part of the work is dedicated to the assessment of the proposed modelling. The correlation proposed by Downar-Zapolski *et al.* [8] is first used on the Canon experiment. Those results suggest that the time scale should be taken smaller therefore an other evaluation is proposed and assessed on the Canon experiment. Finally, converged numerical results obtained with the



proposed Bilicki-like mass transfer are compared with the measurements of the Super-Canon and Edwards pipe experiments. They are also compared with computational results of the Baer-Nunziato model without the Bilicki-like mass transfer, underlining the benefits of the proposed modelling.

## 2 Modelling of mass transfer in two-phase flows

This section is devoted to the modelling of the mass transfer in two-phase flows. We first present the Baer-Nunziato two-fluid model [2]. The Homogenous Relaxed Model introduced by Bilicki and Kestin [3] is then recalled. Based on this latter model, a simple physically-based modelling of the mass transfer is proposed for the Baer-Nunziato model.

### 2.1 The Baer-Nunziato model

The Baer-Nunziato model [2] is a two-fluid model that does not assume any equilibrium between the two phases. Throughout the paper, the subscript  $k$  refers to the index of the phase ( $k = 1, 2$ ).  $\alpha_k \in ]0, 1[$  is the statistical fraction of phase  $k$  and complies with the following relation :

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1$$

We denote  $\rho_k$  the mean density of phase  $k$ ,  $u_k$  its mean velocity,  $p_k$  its mean pressure,  $s_k$  its mean specific entropy and  $e_k$  its mean specific total energy complying with :

$$e_k = \varepsilon_k + \frac{1}{2}u_k^2 \quad (1)$$

$\varepsilon_k$  is the mean specific internal energy of phase  $k$  which is linked to the mean density and pressure of phase  $k$  by an equation of state (EOS) :

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k(\rho_k, p_k) \quad (2)$$

Thus, the governing equations of the Baer-Nunziato model read :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\alpha_k) + u_I \partial_x(\alpha_k) = S_{1,k} \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k) + \partial_x(\alpha_k \rho_k u_k) = S_{2,k} \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k u_k) + \partial_x(\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k) - p_I \partial_x(\alpha_k) = S_{3,k} \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k e_k) + \partial_x(\alpha_k \rho_k e_k u_k + \alpha_k p_k u_k) - p_I u_I \partial_x(\alpha_k) = S_{4,k} \end{array} \right. \quad (3)$$

The closure laws for the interfacial velocity and pressure of the Baer-Nunziato model are the following :

$$(u_I, p_I) = (u_2, p_1) \quad (4)$$

Although many other closure laws have been proposed in the literature [5, 14, 24], we only consider the Baer-Nunziato one in the sequel. The closure laws for the source terms  $S_{j,k}$  ( $j = 1, 4$ ) on the right-hand side are the following :

$$\begin{aligned} S_{1,k} &= \Phi_k \\ S_{2,k} &= \Gamma_k \\ S_{3,k} &= D_k + \mathcal{U}\Gamma_k \\ S_{4,k} &= Q_k + \mathcal{U}D_k + \mathcal{H}\Gamma_k - p_I\Phi_k \end{aligned} \quad (5)$$

where  $\mathcal{U} = \frac{1}{2}(u_1 + u_2)$  and  $\mathcal{H} = \frac{1}{2}(u_1 u_2)$ . The different contributions are written as relaxation phenomena :

$$\begin{aligned}
\Phi_k &= \frac{1}{\tau_p p_{ref}} \alpha_k \alpha_j (p_k - p_j) \\
\Gamma_k &= \frac{1}{\tau_\mu \mu_{ref}} \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} (\mu_j - \mu_k) \\
D_k &= \frac{1}{\tau_u} \frac{m_k m_j}{m_k + m_j} (u_j - u_k) \\
Q_k &= \frac{1}{\tau_T} \frac{m_k C_{V_k} m_j C_{V_j}}{m_k C_{V_k} + m_j C_{V_j}} (T_j - T_k)
\end{aligned}
, \quad j = 3 - k \tag{6}$$

where  $C_{V_k}$  is the heat capacity at constant volume of phase  $k$ ,  $m_k = \alpha_k \rho_k$  and  $\mu_k = \frac{g_k}{T_k}$ .  $T_k$  is the temperature of phase  $k$  and  $g_k$  its specific Gibbs enthalpy :

$$\frac{1}{T_k} = (\partial_{p_k} \varepsilon_k)^{-1} (\partial_{p_k} s_k) \tag{7}$$

$$g_k = \varepsilon_k + \frac{p_k}{\rho_k} - T_k s_k \tag{8}$$

Each relaxation phenomenon involves a relaxation time scale  $\tau_\varphi$  which drives the quantity  $\varphi$  ( $\varphi = p, \mu, u, T$ ) towards the phasic equilibrium. Finally  $p_{ref}$  and  $\mu_{ref}$  are respectively a reference pressure and a reference potential. In the sequel, we focus on the mass transfer  $\Gamma_k$  and on the evaluation of the associated time scale  $\tau_\mu$ .

## 2.2 The Homogeneous Relaxation Model

The Homogeneous Relaxation Model (HRM) proposed by Bilicki and Kestin [3] consists in the usual three conservation laws for the two-phase mixture and the mass conservation law for one of the phases. Thus  $\rho$  denotes the mean density of the two-phase mixture,  $u$  its mean velocity,  $p$  its mean pressure and  $e$  its mean specific total energy. We also denote  $\alpha_k$  the mean volume fraction of phase  $k$  and  $\rho_k$  its mean density, complying with :

$$\begin{cases} \alpha_1 + \alpha_2 = 1 \\ m_1 + m_2 = \rho \\ m_k = \alpha_k \rho_k \end{cases} \tag{9}$$

The specific total energy of the mixture is given by the following relation :

$$e = \varepsilon + \frac{1}{2} u^2 \tag{10}$$

where an equation of state for the two-phase mixture is required :

$$\varepsilon = \varepsilon(\alpha_k, \rho, p) \tag{11}$$

Thanks to the different notations, the governing equations of the HRM model are the following :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k \rho_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k u) & = \Gamma_k^{HRM} \\ \partial_t (\rho) + \partial_x (\rho u) & = 0 \\ \partial_t (\rho u) + \partial_x (\rho u^2 + p) & = 0 \\ \partial_t (\rho e) + \partial_x (\rho e u + p u) & = 0 \end{cases} \quad (12)$$

Bilicki and Kestin [3] propose a simple form of closure law for the mass transfer :

$$\Gamma_k^{HRM} = -\frac{m_k - \overline{m}_k}{\theta} \quad (13)$$

where the notation  $\overline{\varphi}$  stands for the quantity  $\varphi$  at the thermodynamical and chemical equilibrium. This simple relaxation equation gives its name to the model and requires a relaxation time scale  $\theta$ . Downar-Zapolski *et al.* [8] propose the following correlation for the relaxation time scale based on the results of the Moby Dick experiments [22] :

$$\theta = \begin{cases} \theta_1 = 3.84 \times 10^{-7} \alpha_v^{-0.540} \left( \frac{p_{sat} - p}{p_{crit} - p_{sat}} \right)^{-1.76} & \text{if } p > 10^6 \text{Pa} \\ \theta_2 = 6.51 \times 10^{-4} \alpha_v^{-0.257} \left( \frac{p_{sat} - p}{p_{sat}} \right)^{-2.24} & \text{if } p \leq 10^6 \text{Pa} \end{cases} \quad (14)$$

where  $\alpha_v$  is the void fraction,  $p_{sat}$  the saturated pressure and  $p_{crit}$  the thermodynamical critical pressure. Although this correlation has been determined in the stationary case, it has been used in the transient case with both homogeneous [10] and two-fluid [11] models.

### 2.3 Evaluation of relaxation time scale $\tau_\mu$

In order to propose an evaluation of the time scale  $\tau_\mu$  based on the correlation proposed by Downar-Zapolski *et al.* [8] in the homogeneous frame, we assume that that both phases are in an homogeneous state ( $\partial_x(\varphi) = 0, \forall \varphi$ ) at rest ( $u_k = 0$ ) with a mechanical and thermal equilibrium ( $p_1 = p_2$  and  $T_1 = T_2$ ). Based on those hypothesis, the governing equations of the Baer-Nunziato model (3) become :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & = \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) & = 0 \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) & = 0 \end{cases} \quad (15)$$

We could recast this system in the following way :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & = 0 \\ \partial_t (m_k) & = \Gamma_k \\ \partial_t (m_k u_k) & = 0 \\ \partial_t (m_k \varepsilon_k) & = 0 \end{cases} \quad (16)$$

Thus, the thermodynamical variable  $\mu_k$ , whose disequilibrium drives the mass transfer  $\Gamma_k$ , could be written as a function of the partial mass  $m_k$  only. Indeed :

$$\mu_k = \mu_k(\rho_k, \varepsilon_k) = \mu_k \left( \frac{m_k}{\alpha_k^0}, \frac{m_k^0 \varepsilon_k^0}{m_k} \right)$$

where we use the notation  $\varphi^0 = \varphi(t = 0)$ . To provide a deeper analysis of the mass transfer, we assume that both phases are governed by the Stiffened Gas EOS :

$$\begin{cases} \varepsilon_k &= ((\gamma_k - 1)\rho_k)^{-1} (p_k + \gamma_k p_k^\infty) + q_k \\ T_k &= (C_{V_k}(\gamma_k - 1)\rho_k)^{-1} (p_k + p_k^\infty) \\ s_k &= C_{V_k} \ln((C_{V_k}(\gamma_k - 1)\rho_k)^{-\gamma_k} (p_k + p_k^\infty)) + q'_k \end{cases} \quad (17)$$

We also assume that  $q_k = 0$ . Based on this particular choice of the EOS, the function  $\mu_k(m_k)$  can be expressed in the following way :

$$\mu_k(m_k) = C_{P_k} + C_{P_k} \ln(m_k) - \mathcal{S}_k^0 \quad (18)$$

where we use the following constants :

$$C_{P_k} = \gamma_k C_{V_k} \quad \text{and} \quad \mathcal{S}_k^0 = C_{V_k} \ln \left( \frac{(p_k^0 + p_k^\infty) (\alpha_k^0)^{\gamma_k}}{(C_{V_k}(\gamma_k - 1))^{\gamma_k}} \right) + q'_k$$

Let us now focus on the difference  $\mu_j - \mu_k$ . An important remark is that those quantities are equal at the thermodynamical and chemical equilibrium :  $\bar{\mu}_j = \bar{\mu}_k$  since both temperatures and chemical potentials would be equal. Therefore, this difference could be written in the following way :

$$\begin{aligned} \mu_j - \mu_k &= (\mu_j - \bar{\mu}_j) - (\mu_k - \bar{\mu}_k) \\ &= (\mu_j(m_j) - \mu_j(\bar{m}_j)) - (\mu_k(m_k) - \mu_k(\bar{m}_k)) \\ &= C_{P_j} \ln \left( \frac{m_j}{\bar{m}_j} \right) - C_{P_k} \ln \left( \frac{m_k}{\bar{m}_k} \right) \end{aligned}$$

Finally, a last hypothesis is being made, we assume that the two-phase flow is close to the thermodynamical and chemical equilibrium :  $m_k \approx \bar{m}_k$ . Noticing that  $m_k + m_j = \bar{m}_k + \bar{m}_j$ , we get :

$$\begin{aligned} \mu_j - \mu_k &= C_{P_j} \ln \left( \frac{m_j}{\bar{m}_j} \right) - C_{P_k} \ln \left( \frac{m_k}{\bar{m}_k} \right) \\ &\approx C_{P_j} \frac{m_j - \bar{m}_j}{\bar{m}_j} - C_{P_k} \frac{m_k - \bar{m}_k}{\bar{m}_k} \\ &\approx -\frac{C_{P_j} \bar{m}_k + C_{P_k} \bar{m}_j}{\bar{m}_j \bar{m}_k} (m_k - \bar{m}_k) \end{aligned}$$

Thus, we obtain the following approximation of the mass transfer, defined in equation (6) :

$$\Gamma_k \approx -\frac{1}{\tau_{\mu} \mu_{ref}} \frac{C_{P_j} \bar{m}_k + C_{P_k} \bar{m}_j}{\bar{m}_k + \bar{m}_j} (m_k - \bar{m}_k) \quad , \quad j = 3 - k \quad (19)$$

If we compare it to the closure law proposed by Bilicki and Kestin [3] and given in equation (13), we have :

$$\tau_{\mu} \mu_{ref} \approx \frac{C_{P_j} \bar{m}_k + C_{P_k} \bar{m}_j}{\bar{m}_k + \bar{m}_j} \theta \quad (20)$$

Therefore, we propose the following evaluation of the time scale  $\tau_\mu$  and the reference potential  $\mu_{ref}$  :

$$\tau_\mu = \theta \quad \text{and} \quad \mu_{ref} = \begin{cases} C_{P1} & \text{if } \alpha_1 < \alpha_{min} \\ C_{P2} & \text{if } \alpha_1 > \alpha_{max} \\ \left( \frac{\alpha_{max} - \alpha_1}{\alpha_{max} - \alpha_{min}} \right) C_{P1} + \left( \frac{\alpha_1 - \alpha_{min}}{\alpha_{max} - \alpha_{min}} \right) C_{P2} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (21)$$

with a similar form as the pressure and velocity time scales proposed in [19]. In the sequel, we set  $\alpha_{min} = 0.2$  and  $\alpha_{max} = 0.8$ .

### 3 Numerical results

In order to assess the proposed modelling of the mass transfer, different experiments have been selected : the Canon experiment, the Super-Canon experiment and the Edwards pipe experiment. Those three experiments study the rapid depressurization of hot liquid water from an horizontal pipe with similar characteristics (a length of about 4 m and a constant inner diameter of about 10 cm). The pipe has a closed end at one side and a membrane on the other side. At time zero, the membrane is broken and a rarefaction wave starts propagating along the pipe. At the final time, water is fully turned into vapor therefore these are excellent test-cases to study the mass transfer. Those experiments are classical test cases for nuclear safety codes in order to study the Loss-Of-Coolant-Accident (LOCA). The main difference between the three experiments lies in the initial conditions, summarized in table 1.

TABLE 1 – Initial conditions of liquid water in the different experiments

<b>Experiment</b>	Pressure (Bar)	Temperature (°C)
<b>Canon</b>	32	220
<b>Super-Canon</b>	150	300
<b>Edwards pipe</b>	70	242

A fractionnal step method is used for the computation of the Baer-Nunziato model with source terms (system (3)). A key property of this method, proposed in [16] without mass transfer, is to be consistent with the entropy inequality of the model. It was then extended to the case with mass transfer in [6, 19]. We also use the convective solver recently proposed in [20], with a Courant number  $C_{CFL} = \max(\lambda_k) \frac{\Delta t}{\Delta x} = 0.5$  . The equation of state used in the computations is the Stiffened Gas EOS :

$$\begin{cases} \varepsilon_k &= ((\gamma_k - 1)\rho_k)^{-1} (p_k + \gamma_k p_k^\infty) + q_k \\ T_k &= (C_{V_k}(\gamma_k - 1)\rho_k)^{-1} (p_k + p_k^\infty) \\ s_k &= C_{V_k} \ln((C_{V_k}(\gamma_k - 1)\rho_k)^{-\gamma_k} (p_k + p_k^\infty)) + q'_k \end{cases} \quad (22)$$

Thus 5 thermodynamical constants are required for each phase :  $\gamma_k > 1$ ,  $C_{V_k} > 0$ ,  $p_k^\infty > 0$ ,  $q_k$  and  $q'_k$ . We also need  $(p_k + p_k^\infty) > 0$  in order to guarantee the positivity of some thermodynamical quantities. Finally, the estimations of the relaxation time scales  $\tau_\varphi$  ( $\varphi = p, \mu, u, T$ ) must be provided. For the pressure and velocity time scales,  $\tau_p$  and  $\tau_u$ , we use the estimations proposed in [19]. The choice of the time scale  $\tau_T$  as well as the estimation of  $\tau_\mu$  based on the proposal of previous section will be discussed in the sequel. All the following computations have been performed with the fast transient dynamics software Europlexus [1].

### 3.1 Canon experiment

The Canon experiment was carried out by Riegel [23] and studied the fast depressurization of hot liquid water (493.15 K and 32 bar). Figure 1 presents the experimental set-up, consisting in a 4.389 m long horizontal pipe, with an inner diameter of 102.3 mm, ending with a membrane at one side and closed on the other side. At the initial time, the membrane is fully broken and a rarefaction wave starts propagating towards the closed end. Pressure is measured at different locations along the pipe (from P1 to P5). The void fraction is also measured at location Pt (between P2 and P3 on figure 1) using a neutron scattering method.

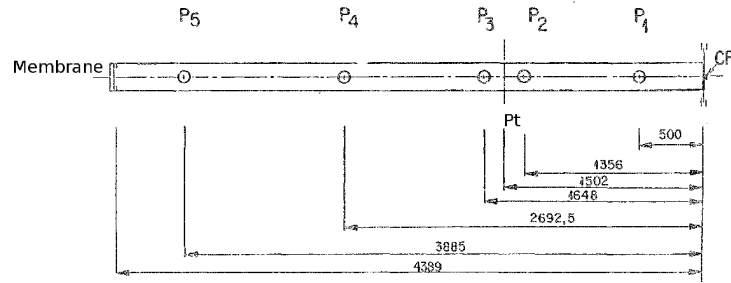


FIGURE 1 – Schematic of Canon test facility

The computational domain used for this test-case is a 1D grid with a closed end at one side, and a tank, where atmospheric conditions are applied, on the other side. Different mesh refinements are used (from  $10^3$  to  $10^4$  cells along the pipe) to study grid sensitivity. The parameters of the Stiffened Gas EOS for both phases are chosen to recover the steam-water phase diagram as in [7] and recalled in table 2. The initial conditions for the pipe and the tank are provided in table 3.

TABLE 2 – EOS parameters for Canon experiment

	$\gamma_k$	$p_k^\infty$ (Pa)	$q_k$ (J.kg <sup>-1</sup> )	$C_{V_k}$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	$q'_k$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
<b>vapor</b>	1.34	0.00	2032350.00	1162.00	2351.11
<b>liquid</b>	1.66	769317123.86	-1359570.00	2807.61	11671.61

TABLE 3 – Initial conditions for Canon experiment

		$\alpha_k$	$\rho_k$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$p_k$ (bar)	$u_k$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>Pipe</b>	<b>vapor</b>	10 <sup>-3</sup>	16.72	32	0.00
	<b>liquid</b>	1 – 10 <sup>-3</sup>	841.12	32	0.00
<b>Tank</b>	<b>vapor</b>	1 – 10 <sup>-3</sup>	0.52	1	.
	<b>liquid</b>	10 <sup>-3</sup>	837.74	1	.

### 3.1.1 Numerical results using the correlation from Downar-Zapolski *et al.* [8]

Based on the previous section, we propose to evaluate  $\tau_\mu$  and  $\mu_{ref}$  using equation (21). More precisely, we use the correlation proposed by Downar-Zapolski *et al.* [8] for high pressures,  $\tau_\mu = \theta_1$  (where  $\theta_1$  is given by equation (14)), since the vaporisation occurs above 20 bar in the experiment. For the remaining time scale  $\tau_T$ , we first propose to neglect the temperature relaxation effect and therefore set  $\tau_T = +\infty$ . As it can be seen on figure 2, this hypothesis on  $\tau_T$  appears to be irrelevant since the water remains liquid during the computation unlike the experimental data. A deeper analysis of the mass transfer modelling, particularly the energy exchange associated with the mass transfer, is provided in appendix A and may explain the poor results obtained when neglecting the temperature relaxation. Thus, we propose an alternative hypothesis and consider that the temperature relaxation is mainly driven by the mass transfer during the vaporisation. Therefore the corresponding time scales should be similar and we propose  $\tau_T = \tau_\mu$ . Figure 2 provides the results of the computation based on this alternative hypothesis. We also add a reference computation where both time scales are set to constant,  $\tau_\mu = 5 \times 10^{-5}$  s and  $\tau_T = 10^{-7}$  s, as in [19]. Both those computations give similar results as we can see on figure 2. The vaporisation starts slightly later with constant time scales but it also ends slightly earlier. When compared with the experimental data, we have the same overall behavior but the vaporisation occurs earlier in the computations.

In order to assess more precisely the use of the different time scales, figure 3 provides the comparison between the measured pressure at P1 and the computed mean pressure  $p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$  obtained with the different computations. The experimental results show a sudden drop from the initial pressure 32 bar to 21 bar. Then the pressure remains constant at a saturation plateau until 400 ms and finally slowly decreases towards the atmospheric pressure. The results obtained when neglecting the temperature relaxation ( $\tau_T = +\infty$ ) show a totally different behavior which confirms that this choice of time scale is irrelevant for this experiment. The reference computation that uses constant time scales provides better results with a plateau at 23 bar, the exact saturation pressure of the initial temperature, due to the fact that time scales remain very small. When compared with the experiment, this plateau appears to be slightly too high and too short. This second observation is not surprising since we notice on the previous figure that the vaporisation process occurs earlier in the computation. The last computation, with  $\tau_T = \tau_\mu = \theta_1$ , provides results that show more differences with the experimental data than the reference computation. Indeed, the pressure undershoot before the plateau is more important and the plateau is really lower than the experimental one. It suggests that the relaxation time scales are not small enough however, we emphasize the fact that those results are promising since non-constant time scales no longer impose the saturation pressure and slightly delay the vaporisation process.

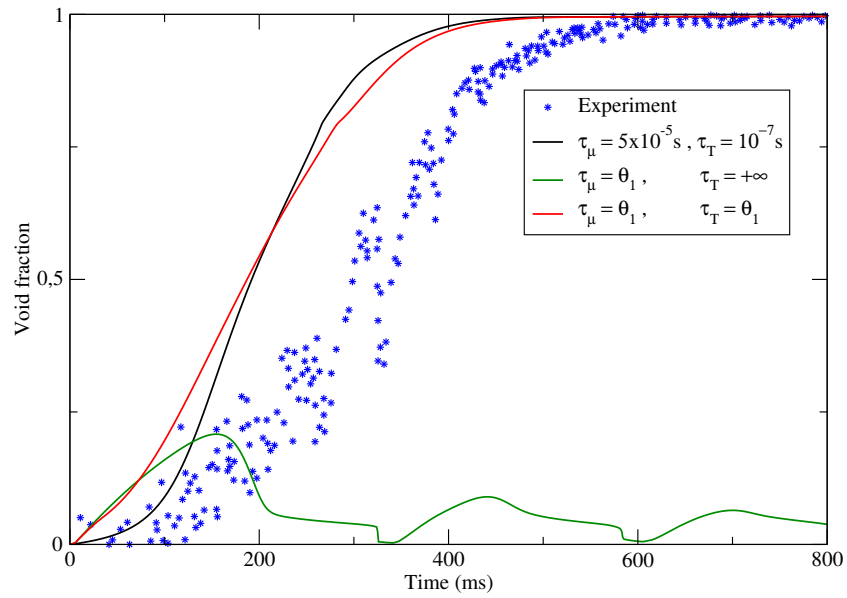


FIGURE 2 – Void fraction vs time at Pt in Canon experiment : comparison between computations on 1000-cell grid with different relaxation time scales and the experiment

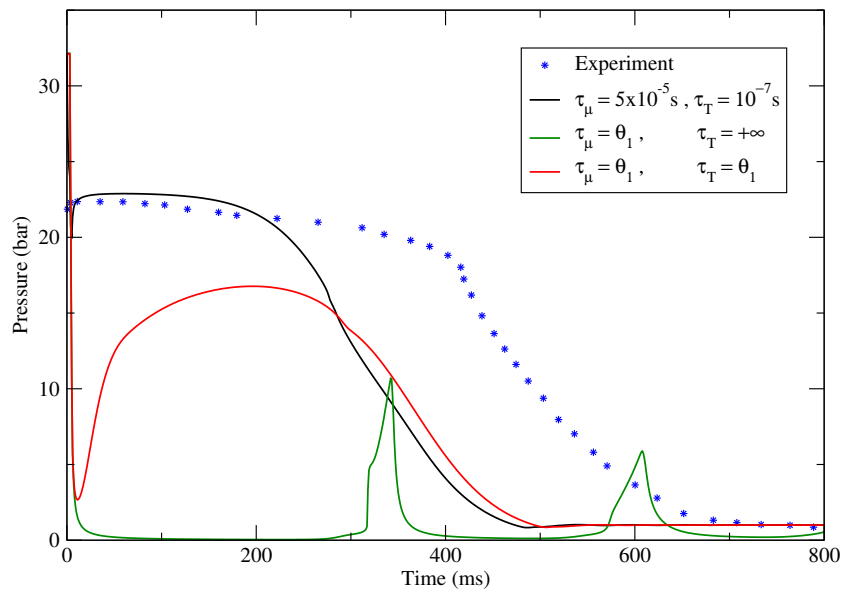


FIGURE 3 – Pressure vs time at P1 in Canon experiment : comparison between computations on 1000-cell grid with different relaxation time scales and the experiment



### 3.1.2 Proposal of a Bilicki-like mass transfer modelling and corresponding numerical results

The different comparisons from the previous section show us that the correlation proposed by Downar-Zapolski *et al.* [8] provides a promising evaluation of the relaxation time scales involved in the mass transfer. Those comparisons also suggest that the relaxation time scales should be taken smaller than the correlation therefore we propose to examine this hypothesis by using the time scales  $\tau_\mu = \frac{\theta_1}{10^n}$ ,  $n = 0, \dots, 6$  in different computations. We also extend this study to  $\tau_\mu = \frac{\theta_2}{10^n}$  where  $\theta_2$  is defined by equation (14). As proposed in the previous section, we set  $\tau_T = \tau_\mu$  in all computations. In order to compare the different time scales, we need to build a criterion. We decide to focus on the pressure plateau observed at location P1 in the Canon experiment. Thus, we define a reference experimental pressure as the mean of the measured pressures at P1 between  $t = 50$  ms and  $t = 400$  ms leading to  $p_{exp} = 21.16$  bar. Table 4 provides the  $L^2$  norm of the relative error between the reference measured pressure and the computed mean pressure  $p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$  at P1 for the 14 different computations. Only one choice of time scale ends up with an error smaller than 15% :

$$\tau_\mu = 6.51 \times 10^{-7} \alpha_v^{-0.257} \left( \frac{p_{sat} - p}{p_{sat}} \right)^{-2.24} \quad (23)$$

*The use of this time scale, together with  $\tau_T = \tau_\mu$ , will be referred as Bilicki-like mass transfer in the sequel.*

TABLE 4 –  $L^2$  norm of the relative error between the computed pressure and the reference measured pressure  $p_{exp} = 21.16$  bar at location P1 for  $50 \text{ ms} \leq t \leq 400 \text{ ms}$  with different time scales  $\tau_\mu$

	<b>n</b>	0	1	2	3	4	5	6
$\left\  \frac{p - p_{exp}}{p_{exp}} \right\ _2$	$\tau_\mu = \frac{\theta_1}{10^n}$	0.214	0.150	0.157	0.184	0.197	0.201	0.202
	$\tau_\mu = \frac{\theta_2}{10^n}$	0.475	0.285	0.185	<b>0.146</b>	0.167	0.188	0.199

Before comparing the experimental data and the numerical results obtained with the Bilicki-like mass transfer, we study the influence of the mesh refinements on the numerical results. Four different 1D grids with  $10^3$  to  $10^4$  cells are used in this study. The history of the void fraction at Pt obtained with those different grids is provided in figure 4. The gap between the results obtained with the coarsest grid and the results obtained with the finest one appears to be small. Refining the mesh only slightly delays the vaporisation process. We notice that grid independance is obtained from 5000 cells therefore the results obtained on this grid will be considered as converged results and compared with the experimental results. The comparison on the void fraction at Pt is shown on figure 5. We also add a reference numerical result without the Bilicki-like mass transfer obtained on the same grid with constant time scales,  $\tau_\mu = 5 \times 10^{-5}$  s and  $\tau_T = 10^{-7}$  s, as previously. Although the vaporisation process happens earlier for both computations, the use of the Bilicki-like mass transfer delays it which significantly improves the numerical results when compared with the experimental ones. Figure 6 provides the comparison between the measured pressure at P1 and the mean pressure  $p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$  obtained with the different computations. As expected,

the Bilicki-like mass transfer leads to a pressure plateau of 20 bar closer to the experimental one than the direct use of the correlation from Downar-Zapolski *et al.* (figure 3). Unlike the reference computation without Bilicki-like mass transfer, this plateau is slightly under the experimental one. We also notice that it is longer thanks to the proposed mass transfer although the vaporisation process is predicted earlier in both computations. Apart from an important pressure undershoot before the plateau, the overall behavior of the pressure given by the Baer-Nunziato model with the Bilicki-like mass transfer is really similar to the measured pressure. Thus the Bilicki-like mass transfer appears to bring a significant improvement on the modelling of the vaporisation process with the Baer-Nunziato model and it needs to be assessed on other experimental cases.

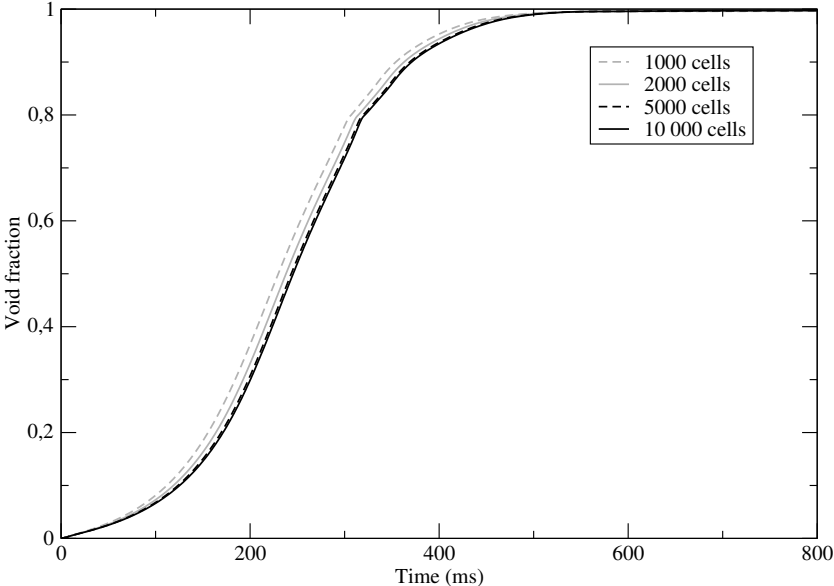


FIGURE 4 – Influence of the grid refinement on the history of the void fraction at Pt in Canon experiment

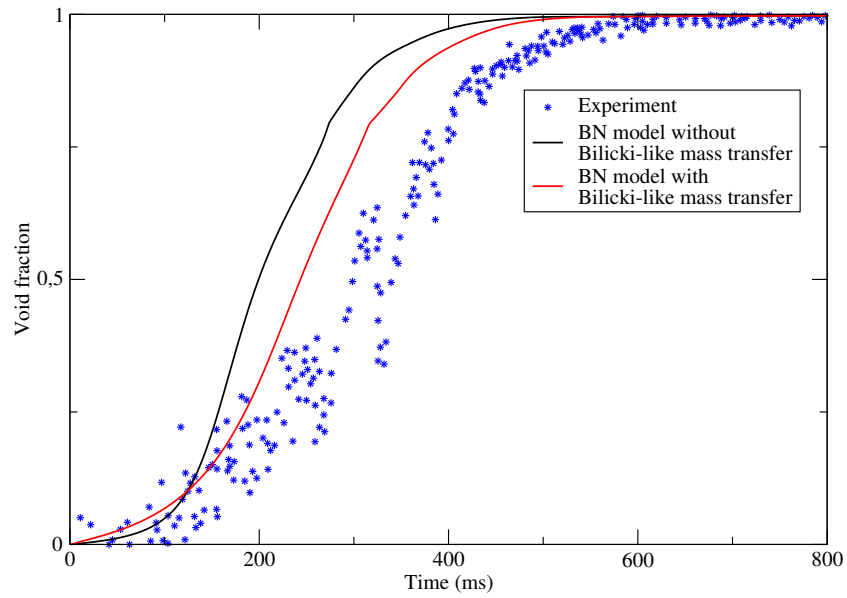


FIGURE 5 – Void fraction vs time at Pt in Canon experiment : comparison between the experimental data, converged numerical results obtained with and without Bilicki-like mass transfer

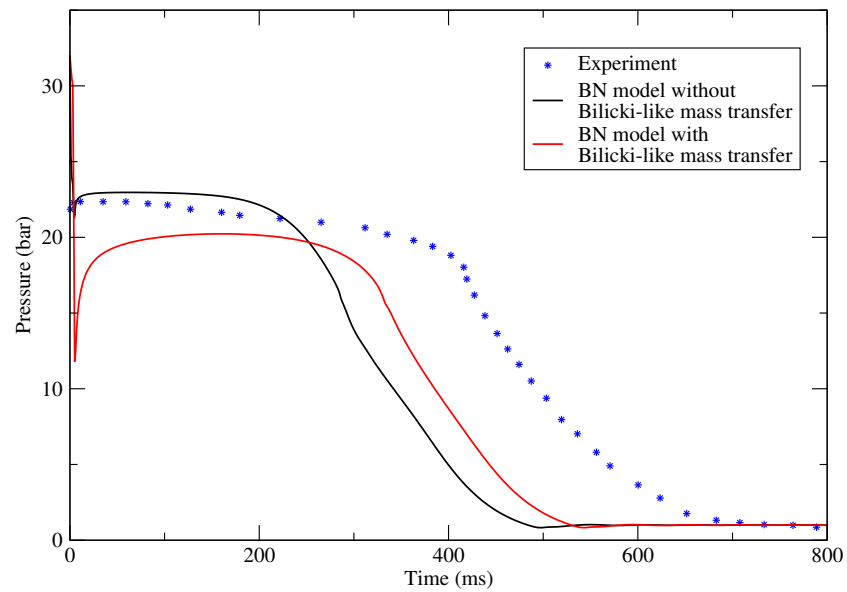


FIGURE 6 – Pressure vs time at P1 in Canon experiment : comparison between the experimental data, converged numerical results obtained with and without Bilicki-like mass transfer

### 3.2 Super-Canon experiment

The Super-Canon experiment was also carried out by Riegel [23] with the same set-up as the Canon experiment (figure 1). The main difference between the two experiments lies in the initial conditions of the liquid water in the pipe which are the standard conditions of the primary loop in Pressurized Water Reactors (PWR) : 573.15 K and 150 bar. Based on the initial temperature, the EOS parameters, gathered in table 5, are determined as before to retrieve the steam-water diagram [7]. Table 6 provides the initial conditions used in the computations.

TABLE 5 – EOS parameters for Super-Canon experiment

	$\gamma_k$	$p_k^\infty$ (Pa)	$q_k$ (J.kg <sup>-1</sup> )	$C_{V_k}$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	$q'_k$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
<b>vapor</b>	1.49	0.00	2288300.00	603.37	4829.37
<b>liquid</b>	1.38	570798395.20	-1530700.00	3612.17	-515.21

TABLE 6 – Initial conditions for Super-Canon experiment

		$\alpha_k$	$\rho_k$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$p_k$ (bar)	$u_k$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>Pipe</b>	<b>vapor</b>	10 <sup>-3</sup>	88.23	150	0.00
	<b>liquid</b>	1 – 10 <sup>-3</sup>	736.45	150	0.00
<b>Tank</b>	<b>vapor</b>	1 – 10 <sup>-3</sup>	0.59	1	.
	<b>liquid</b>	10 <sup>-3</sup>	717.72	1	.

As in the previous case, a convergence study is carried out and suggests that numerical results obtained on the 5000-cell grid can be considered as converged results. Thus, we compare those numerical results obtained with the Bilicki-like mass transfer to the experimental results and to the results of a reference computation that uses constant time scales ( $\tau_\mu = 5 \times 10^{-5}$  s and  $\tau_T = 10^{-7}$  s). Figure 7 shows the comparison between those three results on the history of void fraction at location Pt. If we first focus on the experimental data, we notice that the vaporisation process is similar as in the Canon experiment but faster. We also observe that the measurements are more disparate in this case, particularly before 100 ms. After this time, it is easier to compare the experimental data with the numerical results. As in the Canon experiment, both computations show an earlier vaporisation but Bilicki-like mass transfer significantly reduces the gap between the computed results and the experimental ones. Then we compare the measured pressure at location P1 to the mean pressure  $p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$  from the computations (figure 8). The overall behavior of the pressure in the Super-Canon experiment is the same as in the Canon experiment : a sudden drop of pressure from the initial pressure to a plateau and a final slow decrease towards the external pressure. It is important to notice that the pressure level of the plateau, *i.e.* 60 bar, is very different from the saturation pressure of the initial temperature 86 bar unlike the Canon experiment. Thus, the metastable states of water must be taken into account in the modelling process in order to retrieve the experimental data. When comparing the results of the reference computation to the experimental ones, we observe that the plateau of the computation is higher, around 80 bar, and really shorter. It shows that the use of small constant time scales is not relevant to

capture metastable states since the pressure plateau is too close to the saturation pressure of the initial temperature. On the contrary, the computation with the Bilicki-like mass transfer provides a plateau with the same pressure level as in the experiment. The main differences between those two results are the important numerical pressure undershoot before the plateau and a shorter plateau obtained by the computation. Apart from those differences, the overall behavior of the pressure history obtained with the Bilicki-like mass transfer is really close to the experimental history and so it confirms the modelling choice of the mass transfer, especially regarding metastable states of water.

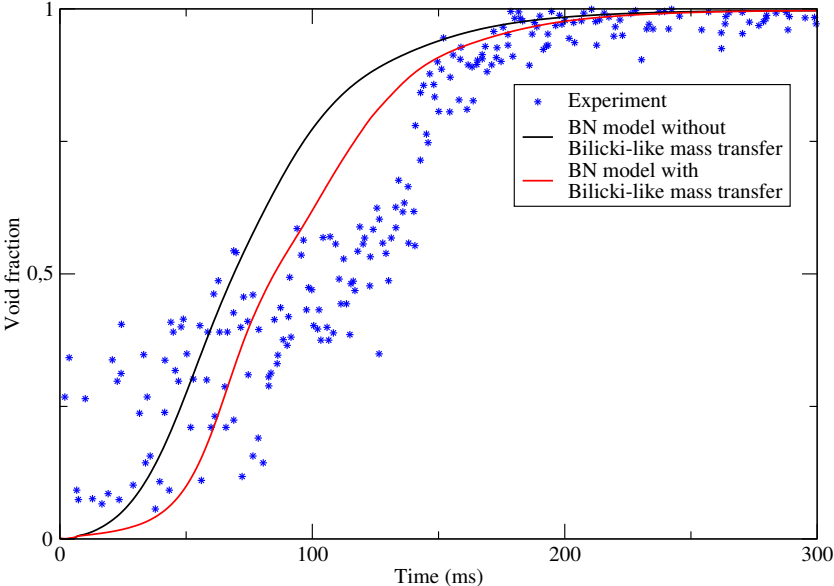


FIGURE 7 – Void fraction vs time at Pt in Super-Canon experiment : comparison between the experimental data, converged numerical results obtained with and without Bilicki-like mass transfer

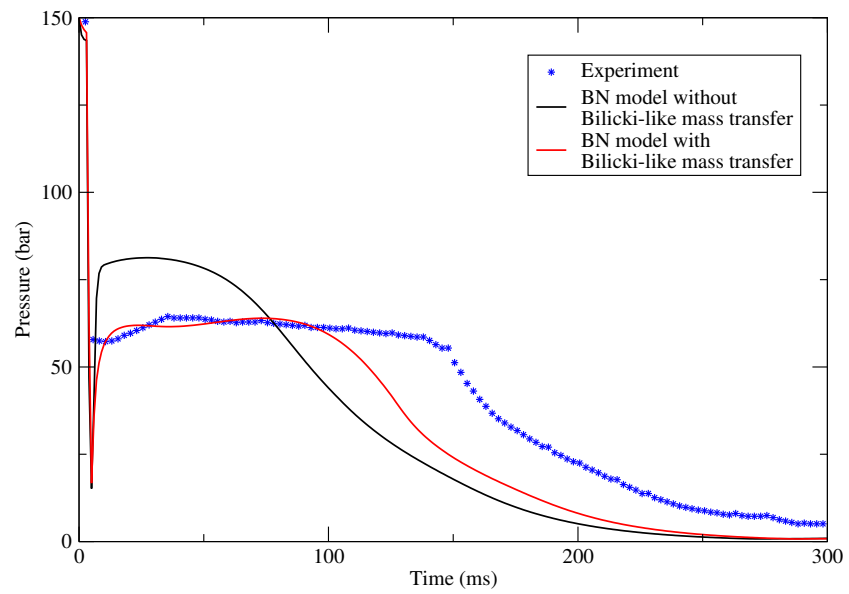


FIGURE 8 – Pressure vs time at P1 in Super-Canon experiment : comparison between the experimental data, converged numerical results obtained with and without Bilicki-like mass transfer

### 3.3 Edwards pipe experiment

We study a third experiment of rapid depressurization of water carried out by Edwards and O'Brien [9]. The horizontal pipe used in the experiment is 4.097 m long and its inner diameter is 7.315 cm. One end of the pipe is closed and the other end has a membrane which is broken at the initial time. Unlike the previous experiments, the cross section of the break is 12.5% smaller than the cross section of the pipe. Different sensors are located around the pipe as shown in figure 9. Pressure is measured at both ends of the pipe (*GS1* and *GS7*) and temperature is measured at *GS5*. A X-ray densitometer is also located at *GS5* to measure void fraction.

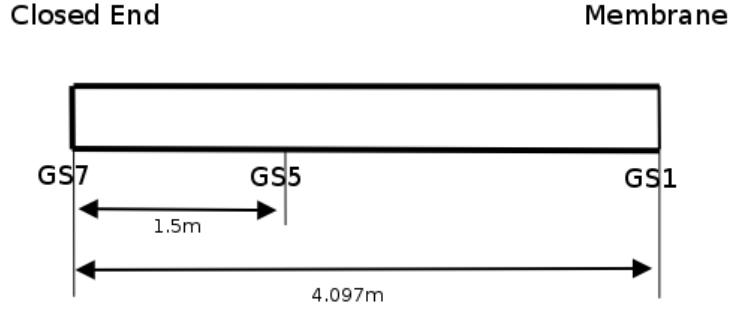


FIGURE 9 – Schematic of the Edwards pipe

The initial conditions of the water in the pipe are 515 K and 70 bar. Since the initial temperature is close to the one of Canon experiment, we use the same EOS parameters recalled in table 7. The initial conditions for the computations are provided in table 8. For simplicity, we consider a full break and use 1D grids. As previously, different mesh refinements are used showing that the results on the 5000-cell grid can be considered as mesh independant.

TABLE 7 – EOS parameters for Edwards pipe experiment

	$\gamma_k$	$p_k^\infty$ (Pa)	$q_k$ (J.kg <sup>-1</sup> )	$C_{V_k}$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	$q'_k$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
<b>vapor</b>	1.34	0.00	2032350.00	1162.00	2351.11
<b>liquid</b>	1.66	769317123.86	-1359570.00	2807.61	11671.61

TABLE 8 – Initial conditions for Edwards pipe experiment

		$\alpha_k$	$\rho_k$ (kg.m <sup>-3</sup> )	$p_k$ (bar)	$u_k$ (m.s <sup>-1</sup> )
<b>Pipe</b>	<b>vapor</b>	$10^{-3}$	35.03	70	0.00
	<b>liquid</b>	$1 - 10^{-3}$	809.40	70	0.00
<b>Tank</b>	<b>vapor</b>	$1 - 10^{-3}$	0.50	1	.
	<b>liquid</b>	$10^{-3}$	802.20	1	.

Figure 10 provides the comparison of the experimental and numerical results on the void fraction. We first notice that only a few void fraction measurements are available in this ex-

periment unlike the previous ones. Thus we only compare the overall behavior of the void fraction and we draw the same conclusion as for the Super-Canon experiment. Indeed, we observe that both numerical results have the same behavior but the Bilicki-like mass transfer delays the vaporization process which drives the results really close to the experimental data. At the same location, temperature is also measured in the experiment so we can also compare it to the numerical results. Figure 11 provides the comparison between those measurements and the mean temperature  $T = \frac{m_1 C_{V1} T_1 + m_2 C_{V2} T_2}{m_1 C_{V1} + m_2 C_{V2}}$ , corresponding to the total internal energy, obtained in the computations. We can see that all curves first show a plateau between 500 K and the initial temperature 515 K. This plateau appears to be really short for the reference computation and longer when Bilicki-like mass transfer is used but not as long as the experimental one. Then we observe a rapid decrease for both computations and the temperature finally remains still around 380 K whereas a slower regular decrease is observed on the experimental results until the final time. This faster decrease of temperature on the computational results is linked to a faster vaporization. Moreover, the final constant temperature observed on the numerical results is due to the fact that no heat diffusion is taken into account in the numerical model. Finally, we compare the experimental pressure history at GS7 with the numerical mean pressure  $p = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2$  (figure 12). This comparison appears to be really similar as the comparison of the pressure history on Super-Canon experiment. On the one hand, the reference computation with constant time scales provides a short pressure plateau at 34 bar, really close to the saturation pressure 34.5 bar at the initial temperature. On the other hand, the experimental results show a longer plateau at 27 bar and the use of Bilicki-like mass transfer leads to a pressure plateau at 28 bar. As observed on the void fraction history, Bilicki-like mass transfer also delays the vaporization and we obtain a longer pressure plateau closer to the experimental one. Thus the proposed modelling of the mass transfer provides a significant improvement of the numerical results obtained with the Baer-Nunziato model when compared with the experimental results. Some differences are still observed, particularly a slightly earlier vaporisation and a pressure undershoot in the first milliseconds of the computation.



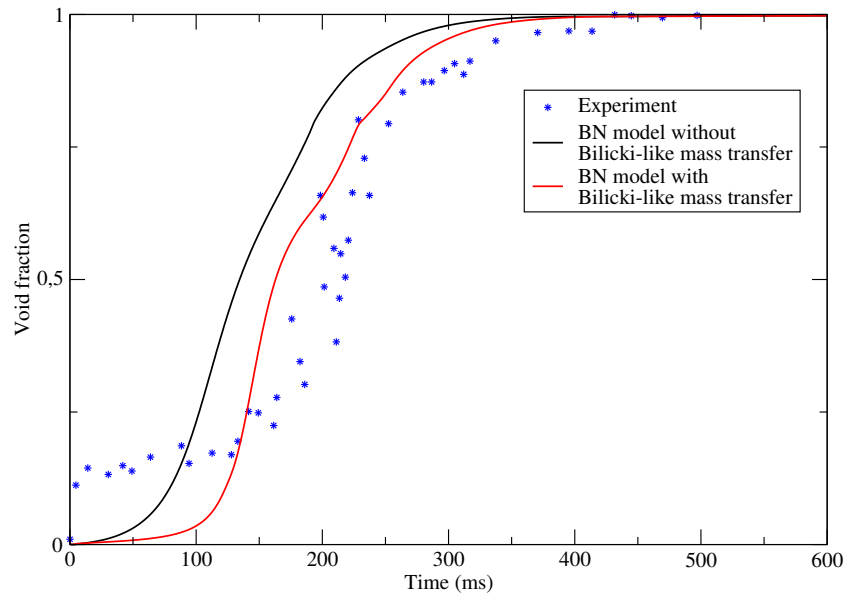


FIGURE 10 – Void fraction vs time at GS5 in Edwards pipe experiment : comparison between the experimental data, converged numerical results obtained with and without Bilicki-like mass transfer

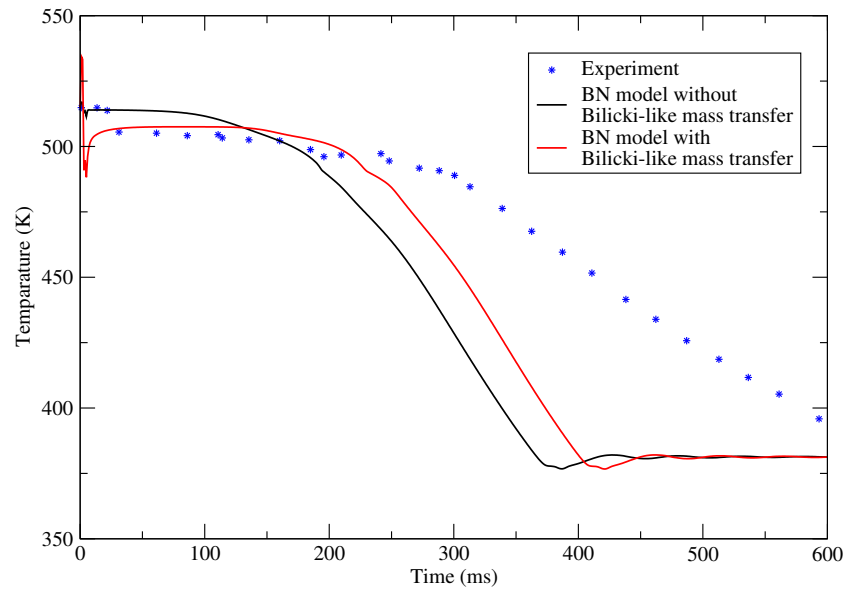


FIGURE 11 – Temperature vs time at GS5 in Edwards pipe experiment : comparison between the experimental data, converged numerical results obtained with and without Bilicki-like mass transfer

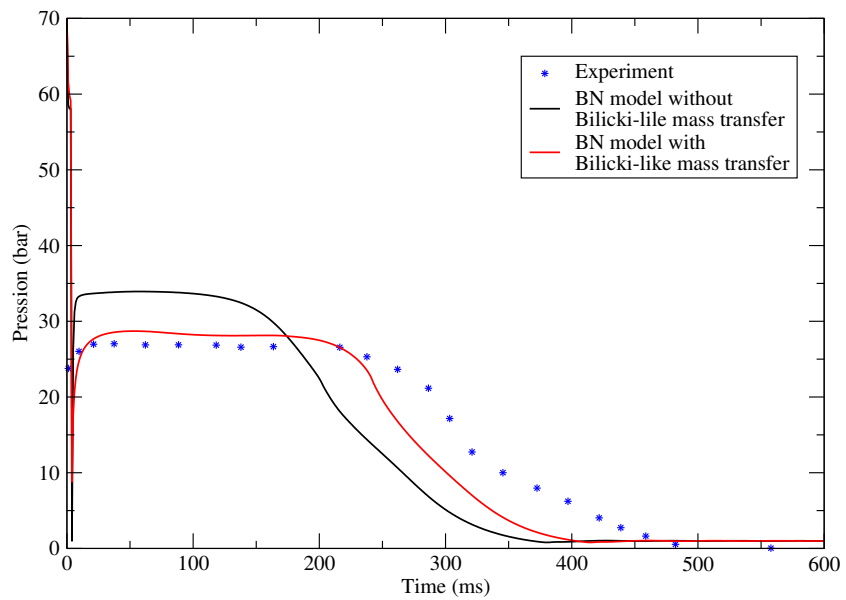


FIGURE 12 – Pressure vs time at GS7 in Edwards pipe experiment : comparison between the experimental data, converged numerical results obtained with and without Bilicki-like mass transfer

## 4 Conclusion

A new formulation of the mass transfer dedicated to fast depressurization of water has been proposed for the Baer-Nunziato model. In order to model it in a simple but physically-relevant way, the work of Bilicki and Kestin [3], based on the Homogeneous Relaxation Model, is considered. Thus, some evaluation of the corresponding time scale for the Baer-Nunziato model could be suggested. Although the preliminary results based on the direct use of the correlation proposed by Downar-Zapolski *et al.* [8] are far from satisfactory, they appear to be promising. Based on this correlation, a new evaluation of the time scale dedicated to the mass transfer of the Baer-Nunziato model is proposed. Three experiments focusing on fast depressurization of water have been chosen to assess the corresponding model : the Canon, the Super-Canon and Edwards pipe experiments. The comparisons between grid-converged computational results and experimental data show that the proposed Bilicki-like mass transfer significantly improves the results of the two-fluid model, particularly regarding pressure measurements. Moreover, it appears to be relevant for a wide range of thermodynamical states, including metastable states of water.

The assessment of the proposed modelling of the mass transfer should be extended to other steam-water transients. Applications involving Fluid-Structure Interactions should also be considered as those interactions could highly influence the mass transfer in the case of strong pressure transients. Although the use of the Stiffened Gas equation of state appears to be quite relevant in the present work, the present modelling should also be tested with more realistic equations of state. To that end, the schemes dedicated to the treatment of the source terms should be extended and the convective solver proposed in previous work [20] could be used.

## Appendix A. Analysis of different mass transfer modelling for the Baer-Nunziato model

This appendix is dedicated to the analysis of different formulations for the source terms of the Baer-Nunziato model. More precisely, we focus on the mass and energy transfers and compare two different models of those source terms. The first modelling is given by equations (5)-(6) and can be summarized in the following way :

$$\begin{aligned}
 S_{1,k} &= \Phi_k \\
 S_{2,k} &= \Gamma_k \\
 S_{3,k} &= D_k + \mathcal{U}\Gamma_k \\
 S_{4,k} &= Q_k + \mathcal{U}D_k + \mathcal{H}\Gamma_k - p_I\Phi_k
 \end{aligned} \tag{24}$$

where  $\mathcal{U} = \frac{1}{2}(u_1 + u_2)$  ,  $\mathcal{H} = \frac{1}{2}(u_1u_2)$  and :

$$\begin{aligned}
 \Phi_k &= K_p (p_k - p_j) \\
 \Gamma_k &= K_\mu (\mu_j - \mu_k) \\
 D_k &= K_u (u_j - u_k) \\
 Q_k &= K_T (T_j - T_k)
 \end{aligned} \quad , \quad j = 3 - k \tag{25}$$

The second modelling has been proposed in [18] :

$$\begin{aligned}
 \widetilde{S}_{1,k} &= \widetilde{\Phi}_k \\
 \widetilde{S}_{2,k} &= \widetilde{\Gamma}_k \\
 \widetilde{S}_{3,k} &= D_k + \mathcal{U}\widetilde{\Gamma}_k \\
 \widetilde{S}_{4,k} &= Q_k + \mathcal{U}D_k + (\mathcal{H} + \widetilde{g})\widetilde{\Gamma}_k - p_I\widetilde{\Phi}_k
 \end{aligned} \tag{26}$$

where  $\widetilde{g} = \delta g_1 + (1 - \delta)g_2$  ( $\delta \in [0, 1]$ ). It is very similar to the first modelling and the main difference lies in the mass transfer :

$$\widetilde{\Gamma}_k = K_g (g_j - g_k) \quad , \quad j = 3 - k \tag{27}$$

We emphasize the fact that both modelling are based on the same key requirement, the enforcement of a relevant entropy inequality. In order to compare both modellings of the mass transfer, we assume a mechanical equilibrium ( $p_1 = p_2$ ) between the phases and that they are both in an homogeneous state ( $\partial_x(\varphi) = 0, \forall \varphi$ ) at rest ( $u_k = 0$ ). We obtain the following equations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\alpha_k) = 0 \\ \partial_t(m_k) = \Gamma_k \\ \partial_t(m_k u_k) = 0 \\ \partial_t(m_k e_k) = Q_k \end{array} \right. \text{ for modelling 1} \quad \text{and} \quad \left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\alpha_k) = 0 \\ \partial_t(m_k) = \widetilde{\Gamma}_k \\ \partial_t(m_k u_k) = 0 \\ \partial_t(m_k e_k) = Q_k + \widetilde{g}\widetilde{\Gamma}_k \end{array} \right. \text{ for modelling 2} \tag{28}$$

If we also assume a thermal equilibrium (*i.e.*  $Q_k = 0$ ), we observe that no energy transfer between phases is associated to the mass transfer for the first modelling unlike the second one. This may explain the poor numerical results obtained with modelling 1 on the Canon experiment when neglecting  $Q_k$ .

This approach also suggests us some closure law for  $\tilde{g}$  which remains undetermined as long as  $\delta$  is not provided. We propose to consider a mean of internal energies  $\tilde{\varepsilon}$  instead of gibbs free energies  $\tilde{g}$  and equation (28) with  $Q_k = 0$  would give :

$$\partial_t (m_k \varepsilon_k) = \tilde{\varepsilon} \partial_t (m_k) \quad \text{with} \quad \tilde{\varepsilon} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \varepsilon_1 + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \varepsilon_2 \quad (29)$$

Thus  $\tilde{\varepsilon}$  is a constant of the computation (if there is no exterior source) and equation (29) can be easily integrated. As expected, the choice of such closure law has consequences on the entropy inequality of the model therefore we propose the following third modelling of the source terms :

$$\begin{aligned} \widetilde{S_{1,k}} &= \Phi_k \\ \widetilde{S_{2,k}} &= \widetilde{\Gamma}_k \\ \widetilde{S_{3,k}} &= D_k + \mathcal{U} \widetilde{\Gamma}_k \\ \widetilde{S_{4,k}} &= Q_k + \mathcal{U} D_k + (\mathcal{H} + \tilde{\varepsilon}) \widetilde{\Gamma}_k - p_I \Phi_k \end{aligned} \quad (30)$$

where the mass transfer is given by :

$$\widetilde{\Gamma}_k = K_f (f_j - f_k) \quad , \quad j = 3 - k \quad (31)$$

$$\text{with} \quad f_k = \frac{1}{\tilde{T}} \varepsilon_k + \frac{1}{T_k} \frac{p_k}{\rho_k} - s_k \quad \text{and} \quad \frac{1}{\tilde{T}} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{1}{T_1} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{1}{T_2}.$$

# References

- [1] Europlexus User's Manual. Technical Report, Joint Research Centre (JRC), Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), 2016.  
URL [http://europlexus.jrc.ec.europa.eu/public/manual\\_html/index.html](http://europlexus.jrc.ec.europa.eu/public/manual_html/index.html)
- [2] M. Baer and J. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6) :861–889, 1986.
- [3] Z. Bilicki and J. Kestin. Physical aspects of the relaxation model in two-phase flow. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 428(1875) :379–397, 1990.
- [4] Z. Bilicki, R. Kwidziński, and S. A. Mohammadein. Evaluation of the relaxation time of heat and mass exchange in the liquid-vapour bubble flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 39(4) :753–759, 1996.
- [5] F. Coquel, T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *Comptes Rendus Mathématique*, 334(10) :927–932, 2002.
- [6] F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, J.-M. Hérard, O. Hurisse, and Y. Liu. Validation of a two-fluid model on unsteady liquid-vapor water flows. *Computers & Fluids*, 119 :131–142, 2015.
- [7] F. Daude, P. Galon, Z. Gao, and E. Blaud. Numerical experiments using a HLLC-type scheme with ALE formulation for compressible two-phase flows five-equation models with phase transition. *Computers & Fluids*, 94 :112–138, 2014.
- [8] P. Downar-Zapolski, Z. Bilicki, L. Bolle, and J. Franco. The non-equilibrium relaxation model for one-dimensional flashing liquid flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 22(3) :473–483, 1996.
- [9] A. R. Edwards and T. P. O'Brien. Studies of phenomena connected with the depressurization of water reactors. *Journal of the British Nuclear Energy Society*, 9 :125–135, 1970.
- [10] E. Faucher, J.-M. Hérard, M. Barret, and C. Toulemonde. Computation of flashing flows in variable cross-section ducts. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 13(4) :365–391, 2000.
- [11] J. Gale, I. Tiselj, and A. Horvat. Two-fluid model of the WAHA code for simulations of water hammer transients. *Multiphase Science and Technology*, 20(3-4) :291–322, 2008.
- [12] T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Numerical Modeling Of Two-Phase Flows Using The Two-Fluid Two-Pressure Approach. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 14(05) :663–700, 2004.

- [13] S. Gavriluk and R. Saurel. Mathematical and Numerical Modeling of Two-Phase Compressible Flows with Micro-Inertia. *Journal of Computational Physics*, 175(1) :326–360, 2002.
- [14] J. Glimm, D. Saltz, and D. H. Sharp. Renormalization group solution of two-phase flow equations for Rayleigh-Taylor mixing. *Physics Letters A*, 222(3) :171–176, 1996.
- [15] J. Glimm, D. Saltz, and D. H. Sharp. Two-phase modelling of a fluid mixing layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 378 :119–143, 1999.
- [16] J.-M. Hérard and O. Hurisse. A fractional step method to compute a class of compressible gas-liquid flows. *Computers & Fluids*, 55 :57–69, 2012.
- [17] A. K. Kapila, S. F. Son, J. B. Bdzil, R. Menikoff, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of DDT : Structure of the velocity-relaxation zone. *Physics of Fluids*, 9(12) :3885–3897, 1997.
- [18] H. Lochon. Modélisation d’écoulements diphasiques : fermetures entropiques de modèles bifluïdes. Internal report H-T63-2014-10406-FR, EDF, 2014.
- [19] H. Lochon, F. Daude, P. Galon, and J.-M. Hérard. Comparison of two-fluid models on steam-water transients. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 2016.
- [20] H. Lochon, F. Daude, P. Galon, and J.-M. Hérard. HLLC-type Riemann solver with approximated two-phase contact for the computation of the Baer-Nunziato two-fluid model. *submitted for publication*, 2016.
- [21] V. H. Ransom and D. L. Hicks. Hyperbolic two-pressure models for two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 53(1) :124–151, 1984.
- [22] M. Reocreux. *Contribution à l’étude des débits critiques en écoulement diphasique eau-vapeur*. Ph.D. thesis, Université Scientifique et Médicale de Grenoble, 1974.
- [23] B. Riegel. *Contribution à l’étude de la décompression d’une capacité en régime diphasique*. Ph.D. thesis, Université Scientifique et Médicale et Institut National Polytechnique de Grenoble, 1978.
- [24] R. Saurel and R. Abgrall. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2) :425–467, 1999.

# Conclusions et perspectives

Cette thèse porte sur la modélisation et la simulation d'écoulements diphasiques transitoires eau-vapeur. Dans de nombreuses installations industrielles, des écoulements d'eau initialement monophasiques sont susceptibles de devenir diphasiques lors de situations transitoires. Deux phénomènes physiques interagissant fortement entre eux, le changement de phases et la propagation d'ondes de pression, doivent donc être pris en compte dans la modélisation. Une approche bifluide basée sur un opérateur de moyenne statistique est utilisée afin de construire des modèles pour de tels écoulements. Contrairement à l'approche homogène, aucune hypothèse d'équilibre entre phases n'est faite au cours de cette construction. Les modèles obtenus sont de type convection-source, et très similaires à celui de Baer-Nunziato [11]. La partie convective de ces modèles contient des produits non-conservatifs qui mettent en jeu un couple pression-vitesse d'interface. Les termes sources modélisent les différents échanges entre phases, sous la forme de termes de relaxation des différents déséquilibres entre phases. Une méthode à pas fractionnaires est donc utilisée pour la simulation de ces modèles [65], et une grande attention est accordée à la vérification de chacune des étapes de la méthode à l'aide d'études de convergence. Différentes fermetures pour le couple pression-vitesse d'interface ont été proposées dans la littérature. Nous choisissons trois d'entre elles grâce à des critères basés sur les propriétés mathématiques du système homogène [24] et nous les comparons entre eux en présence de relaxation en pression et vitesse. Les échelles de temps associées à ces deux phénomènes sont basées sur le comportement d'une bulle en milieu infini. Deux expériences sont choisies pour cette comparaison, l'expérience de coups de bélier de Simpson [107] et l'expérience Canon [97] de dépressurisation d'une tuyauterie d'eau sous pression. Aucune différence, entre les résultats numériques obtenus avec ces différentes fermetures, n'est observée sur ces deux cas. Fort de ce constat, un nouveau solveur convectif de type HLLC [112] pour le modèle de Baer-Nunziato est proposé. Il repose sur une hypothèse d'approximation subsonique du contact diphasique qui permet de pouvoir prendre en compte toute loi d'état. En outre, les études de convergence menées montrent la précision, l'efficacité et la robustesse du schéma proposé. Le dernier chapitre de la thèse est consacré à la modélisation du transfert de masse lors de la brusque dépressurisation d'eau liquide. Une évaluation du temps de relaxation en potentiel chimique, associé au changement de phases, est proposée à l'aide des travaux de Bilicki *et al.* [19, 35]. Cette modélisation est ensuite validée sur différents cas expérimentaux, les expériences Canon et Super-Canon [97] ainsi que l'expérience d'Edwards [38]. Les résultats montrent un bon accord entre les résultats numériques du modèle et les données expérimentales pour une large gamme de conditions thermodynamiques incluant les états métastables de l'eau.

Lorsque les écoulements transitoires eau-vapeur mettent en jeu de fortes variations de



pression, les structures environnantes sont susceptibles de se déplacer sous l'effet des chargements de pression et donc d'agir à leur tour sur l'écoulement. La prise en compte de ces Interactions Fluides-Structures est alors primordiale. Un exemple simple de telles interactions est la dilatation des tuyauteries sous l'effet de la pression. Une telle dilatation modifie alors la célérité des ondes de pression se propageant au sein de la tuyauterie. Ainsi la prise en compte de cette influence grâce à la correction d'Allievi est très importante pour la modélisation des phénomènes de coups de bélier. Elle permet de retrouver les occurrences des pics de pression dans la tuyauterie mais également les amplitudes de ces pics puisque ces dernières sont liées à la célérité des ondes à travers les relations de sauts. Cet exemple montre l'importance de la prise en compte des Interactions Fluides-Structures, cependant il est souvent nécessaire d'intégrer les structures directement dans les simulations, notamment dans le cas de géométries complexes. Dans ce but, le formalisme Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) est utilisé pour de nombreuses applications. Ce dernier a également été récemment utilisé dans le cadre des modèles bifluides de type Baer-Nunziato [32]. Ainsi, la validation du modèle proposé devrait donc être poursuivie pour des applications impliquant ces interactions et disposant de mesures expérimentales au niveau du fluide et de la structure. De telles applications se révèlent souvent exigeantes en terme de robustesse et permettraient donc d'approfondir l'examen des différents schémas numériques.

Au cours de cette thèse, des lois d'états de type Stiffened Gas ont été utilisées et les différentes comparaisons avec des expériences ont montré leur pertinence pour des écoulements transitoires eau-vapeur. Cependant, ces lois d'états nécessitent de déterminer des constantes thermodynamiques et un état thermodynamique de référence est utilisé dans ce but. Ainsi lorsque les conditions thermodynamiques considérées s'éloignent de cet état de référence, les erreurs d'approximation liées aux lois d'états peuvent devenir importantes. Afin de s'affranchir d'une telle contrainte, il serait intéressant de tester le modèle proposé avec des lois d'états plus complexes et valables pour une large gamme de conditions thermodynamiques. En outre, il serait alors également possible de tester le modèle bifluide pour d'autres substances chimiques présentes dans des écoulements diphasiques comme l'hydrogène ou le sodium par exemple. Le nouveau schéma de convection HLLAC permet l'utilisation de lois d'états complexes et il s'agirait donc de proposer des schémas numériques pour les termes sources également compatibles avec de telles lois d'états. En thermohydraulique, des lois d'états tabulées à partir de données expérimentales sont utilisées par de nombreux codes de simulation mais il convient de noter que l'utilisation de telles lois rend très délicate la phase de vérification.

Enfin, la validation du modèle proposé devrait être étendue à des applications eau-vapeur impliquant d'importants déséquilibres thermiques. En effet, cette thèse est essentiellement consacrée aux transitoires eau-vapeur initiés par des déséquilibres de pression importants mais les déséquilibres thermiques ont un rôle primordial pour de nombreuses autres applications comme l'ébullition ou les coups de bélier par condensation. De plus, l'évaluation de l'échelle de temps de relaxation en potentiel chimique, associée au phénomène de changement de phase, proposée dans le dernier chapitre est également dédiée aux déséquilibres de pression et pourrait donc s'avérer inadaptée aux déséquilibres thermiques. De nouvelles évaluations des temps de relaxation en température et potentiel chimique devraient alors être étudiées.

## Annexe A

# Un modèle bifluide turbulent simple

# A simple turbulent two-fluid model

J.-M. Hérard<sup>a,c</sup> and H. Lochon<sup>b,c,d</sup>

<sup>a</sup>EDF R&D, Département MFEE, 6 Quai Watier, 78401 Chatou Cedex, France

<sup>b</sup>EDF R&D, Département AMA, 7 Boulevard Gaspard Monge, 91120 Palaiseau, France

<sup>c</sup>I2M, UMR CNRS 7373, Technopôle Château-Gombert, 39 rue F. Joliot Curie, 13453 Marseille Cedex 13, France

<sup>d</sup>IMSIA, UMR EDF/CNRS/CEA/ENSTA 9219, 828 Boulevard des Maréchaux, 91762 Palaiseau Cedex, France

## Abstract

We present in this paper a simple turbulent two-phase flow model using the two-fluid approach. The model, that relies on the classical ensemble averaging, allows the computation of unsteady flows including shock waves, rarefaction waves and contact discontinuities. It requires the definition of adequate source terms and interfacial quantities. The hyperbolic turbulent two-fluid model is such that unique jump conditions hold within each field. Closure laws for the interfacial velocity and the interfacial pressure comply with a physically relevant entropy inequality. Moreover, source terms that account for mass, momentum and energy interfacial transfer are in agreement with the entropy inequality. Particular attention is also given to the jump conditions when assuming a perfect gas equation of state within each phase; this enables to recover expected bounds on the mean density through shock waves.

## 1 Introduction

We propose herein a turbulent two-fluid model for the prediction of two-phase flows. Actually, though we use the classical ensemble averaging [8,20], we follow here the approach used in a recent series of papers. Our main goal is to derive a two-fluid two-phase flow model that accounts for Reynolds stress tensors in a very simple way, so that the fundamental properties invoked in [7] are preserved. This means that the following specifications are enforced :

- (i) the model should be such that one could retrieve the standard Baer-Nunziato model in the laminar case ;
- (ii) an entropy inequality should hold for smooth solutions, and meanwhile it should provide some guidelines for closure laws associated with interfacial mass, momentum and energy transfer ;
- (iii) unique jump conditions should be valid so that meaningful and unique shock waves might be predicted.

These requirements are mandatory if we intend to predict relevant shock solutions in two-phase flows, such as those that arise in vapour explosions or other similar situations, while using the standard verification and validation process (see [4] for instance). A class of two-fluid models that are capable to predict unsteady situations has emerged from the recent literature, either for gas-particle flows (see [2, 3, 14, 21, 22] for instance), or for water-vapour flows (see [10, 13, 25] among others). These models essentially differ from one another through the definition of the interface pressure-velocity couple. We will thus focus here on the approach suggested in [7], that gave some new enlightenment on the admissible closure laws that enable to comply with both items (ii) and (iii) recalled above.

As we will see, the constraint (ii) will in turn provide some closure laws for the interfacial pressure (see equation (7)), whereas (iii) will enable us to define relevant closure laws for the interface velocity (see equation (6)).

Moreover, in order to account for turbulent effects in a rather simple way, we will rely on the single-phase proposal introduced in [17], that inherits from the earlier work described in [1, 6, 9, 12]. As we will see, this will minimize the number of unknowns, and inlet/outlet boundary conditions, and meanwhile will allow complying with the above mentioned requirements (i,ii,iii). We also emphasize that the present work should not be confused with the one of [16], which was mainly inspired by [28] and [7]. Actually, though it agrees with the former items (i) and (ii), the latter turbulent model [16] is not suitable for shock solutions. Indeed, jump conditions are not defined in a unique way, due to the occurrence of non-conservative products that are active in genuinely non-linear fields; as a result, different mesh-converged solutions issuing from distinct schemes may emerge in practical computations, as it is now quite well-known (see [6, 15]).

The paper is organised as follows. We first provide the governing set of equations including source terms accounting for all possible transfers between phases. The choice of relevant interfacial velocity and pressure is discussed. Then we focus on the key property of the model which is the entropy inequality. It is compared with the laminar case and we underline how turbulent energy affects the different relaxation terms. A third section discusses the main properties of the convective system : hyperbolicity, structure of fields and jump conditions. For simplicity, we restrict ourselves to the Baer-Nunziato closure in this section but few remarks are given about other possible closures. Particular attention is given to the jump conditions when assuming perfect gas equation of state within each phase. In that case, we show that density ratios are bounded through shock waves and that they are in agreement with the laminar frame. Moreover turbulent energy ratios are bounded as well, unlike pressure ratios. The last section is devoted to a few remarks on the Riemann problem. Though the derivation of the model is quite different, we will also address in section 3 the differences and similarities with models proposed in [26].

## 2 Governing equations

The two-phase flow model has been obtained by a statistical averaging of the single-phase Navier-Stokes equations. One additional topological equation on the statistical void fraction is also needed (see [8]). For the sake of simplicity, we do not detail this averaging procedure here but we underline the fact that the tensor involving turbulent effects is modelled following the approach of [17] for the single-phase Reynolds stress tensor. Thus the governing set of equations takes the form (when neglecting viscous terms) :

$$\partial_t (W) + \partial_x (F(W)) + C(W)\partial_x (W) = S(W) \tag{1}$$

with  $W$ ,  $F(W)$ ,  $S(W)$  in  $\mathbb{R}^7$ , and  $C(W)$  in  $\mathbb{R}^{7 \times 7}$ . The state variable  $W$  is :

$$W = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_2 \rho_2 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 \\ \alpha_1 E_1 \\ \alpha_1 E_2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

where  $\alpha_k$ ,  $\rho_k$ ,  $u_k$ ,  $p_k$  and  $E_k$  are respectively the statistical void fraction, the mean density, the mean velocity, the mean pressure and the mean total energy of phase  $k$ ,  $k = 1, 2$ . The statistical void fractions are such that :

$$\alpha_2 = 1 - \alpha_1$$

and the mean total energy  $E_k$  is given by :

$$E_k = \frac{1}{2} \rho_k u_k^2 + \rho_k \varepsilon_k + K_k$$

where  $\varepsilon_k = \varepsilon_k(\rho_k, p_k)$  is the mean internal energy of phase  $k$  and  $K_k$  is the turbulent kinetic energy :

$$K_k = K_{k,0} \rho_k^{5/3} \quad (3)$$

(with  $K_{k,0} > 0$ ). It is important to underline the fact that the mean internal energy only depends on the mean density and the mean pressure, which is a crude assumption on the statistical thermodynamics. However, one can easily prove that it is verified in the case of simple Equation Of State (EOS) such as perfect gas or stiffened gas (see [19]). We define the set of admissible states  $\Omega$  by :

$$\Omega = \{W \in \mathbb{R}^7 ; \alpha_1 \in ]0, 1[, \rho_k > 0, \varepsilon_k > 0\} \quad (4)$$

We also introduce the celerity of density waves  $c_k$  in the pure phase  $k$  and its temperature  $T_k$  :

$$\rho_k c_k^2 = (\partial_{p_k} \varepsilon_k)^{-1} \left( \frac{p_k}{\rho_k} - \rho_k (\partial_{\rho_k} \varepsilon_k) \right)$$

$$\frac{1}{T_k} = (\partial_{p_k} \varepsilon_k)^{-1} (\partial_{p_k} s_k)$$

where  $s_k = s_k(\rho_k, p_k)$  is the specific entropy complying with the constraint :

$$c_k^2 (\partial_{p_k} s_k) + (\partial_{\rho_k} s_k) = 0$$

The convective part of the system is defined by :

$$F(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \alpha_2 \rho_2 u_2 \\ \alpha_1 (\rho_1 u_1^2 + p_1 + \frac{2}{3} K_1) \\ \alpha_2 (\rho_2 u_2^2 + p_2 + \frac{2}{3} K_2) \\ \alpha_1 u_1 (E_1 + p_1 + \frac{2}{3} K_1) \\ \alpha_2 u_2 (E_2 + p_2 + \frac{2}{3} K_2) \end{pmatrix}, \quad C(W) \partial_x (W) = \begin{pmatrix} u_I \partial_x (\alpha_1) \\ 0 \\ 0 \\ -p_I \partial_x (\alpha_1) \\ -p_I \partial_x (\alpha_2) \\ -u_I p_I \partial_x (\alpha_1) \\ -u_I p_I \partial_x (\alpha_2) \end{pmatrix} \quad (5)$$

where we use the following closure laws on interfacial velocity  $u_I$  and pressure  $p_I$  :

$$u_I = au_1 + (1 - a)u_2, \quad a \in \left\{0, \frac{m_1}{m_1 + m_2}, 1\right\} \quad (6)$$

$$p_I = b \left( p_1 + \frac{2}{3}K_1 \right) + (1 - b) \left( p_2 + \frac{2}{3}K_2 \right), \quad b = \frac{\frac{1-a}{T_1}}{\frac{1-a}{T_1} + \frac{a}{T_2}} \quad (7)$$

In the case when  $a \in \{0, 1\}$ , it corresponds to the so-called Baer-Nunziato closure [2] in the laminar case. The third choice  $a = \frac{m_1}{m_1 + m_2}$  has been proposed in [7, 10] in the laminar case too. Those 3 possibilities for  $(u_I, p_I)$  have been motivated by two requirements : the enforcement of a relevant entropy inequality which will be discussed later on, and the structure of the field associated with  $\lambda = u_I$  which is assumed to be linearly degenerate. Other closure laws could be found [5, 14, 24, 25] but they will not be considered here.

The source part of the system reads :

$$S(W) = \begin{pmatrix} \Phi \\ \Gamma \\ -\Gamma \\ D + \mathcal{U}\Gamma \\ -D - \mathcal{U}\Gamma \\ Q + \mathcal{U}D + \mathcal{H}\Gamma - p_I\Phi \\ -Q - \mathcal{U}D - \mathcal{H}\Gamma + p_I\Phi \end{pmatrix} \quad (8)$$

where  $\mathcal{U} = \frac{u_1 + u_2}{2}$ ,  $\mathcal{H} = \frac{u_1 u_2}{2}$  and the relaxation terms are given by :

$$\begin{aligned} \Phi &= \alpha_1 \alpha_2 \delta_p \left( \left( p_1 + \frac{2}{3}K_1 \right) - \left( p_2 + \frac{2}{3}K_2 \right) \right) \\ \Gamma &= m_1 m_2 \delta_\mu \left( \frac{\mu_2}{T_2} - \frac{\mu_1}{T_1} \right) \\ D &= m_1 m_2 \delta_u (u_2 - u_1) \\ Q &= m_1 m_2 \delta_T (T_2 - T_1) \end{aligned} \quad (9)$$

with :

$$\mu_k = \varepsilon_k + \frac{p_k}{\rho_k} - T_k s_k + \frac{5K_k}{3\rho_k}$$

which corresponds to the Gibbs free enthalpy in the laminar case when  $K_k = 0$ . The scalar functions  $\delta_\varphi$  are not detailed here but are assumed to be positive. For practical purposes, the pressure relaxation time scale involved in  $\delta_p$  is provided by the closure law detailed in [11]; besides, other relaxation time scales  $\delta_\mu, \delta_u, \delta_T$  embedded in mass, momentum and energy interfacial transfer terms, are taken from the classical two-fluid literature. Hence, we emphasize the fact that all possible transfers between phases (mass, momentum and energy) are accounted for in this model.

### 3 Entropy inequality

A key property of the governing set of equations (1) is the following :

**Proposition 2.** Define the entropy-entropy flux pair  $(\eta, f_\eta)$  :

$$\eta = -\alpha_1 \rho_1 s_1 - \alpha_2 \rho_2 s_2, \quad f_\eta = -\alpha_1 \rho_1 s_1 u_1 - \alpha_2 \rho_2 s_2 u_2$$

Then the following inequality holds for smooth solutions of (1) :

$$\partial_t (\eta) + \partial_x (f_\eta) \leq 0$$

*Proof.* Classical manipulations of the system give us the evolution law of the specific entropy for smooth solutions :

$$\begin{aligned} \partial_t ((\alpha_k \rho_k s_k)) + \partial_x ((\alpha_k \rho_k s_k u_k)) + \frac{1}{T_k} \left( p_I - \left( p_k + \frac{2}{3} K_k \right) \right) (u_k - u_I) \partial_x (\alpha_k) \\ = \frac{(-1)^{k+1}}{T_k} \left\{ Q + (U - u_k) D - \mu_k \Gamma + \left( \left( p_k + \frac{2}{3} K_k \right) - p_I \right) \Phi \right\} \end{aligned}$$

Then we use the closure laws on interfacial velocity and pressure (6)-(7) to get the evolution law of the global entropy :

$$\begin{aligned} \partial_t (\eta) + \partial_x (f_\eta) &= \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) Q \\ &+ \left( \frac{1}{2T_1} + \frac{1}{2T_2} \right) (u_1 - u_2) D \\ &+ \left( \frac{\mu_1}{T_1} - \frac{\mu_2}{T_2} \right) \Gamma \\ &+ \left( \frac{1-b}{T_1} + \frac{b}{T_2} \right) \left\{ \left( p_2 + \frac{2}{3} K_2 \right) - \left( p_1 + \frac{2}{3} K_1 \right) \right\} \Phi \end{aligned}$$

The conclusion is now obvious using closure laws (9). □

This entropy inequality is really close to the one in the laminar case, therefore it leads to similar source terms. Turbulent energies are involved in pressure and free enthalpy relaxation terms but one recovers the laminar source terms when turbulent kinetic energies vanish. Temperature and velocity relaxation terms remain exactly the same as in the laminar case.

*From now on, we will restrict to the case :*

$$(u_I, p_I) = \left( u_1, p_2 + \frac{2}{3} K_2 \right)$$

*in the sequel.*

**Remark 1.**

- The model discussed afterwards is in that case quite similar to the one detailed in [26], pages 298-299, equations (18a-18l), when neglecting the “turbulent entropy” dissipation  $\chi_k$  (equations 18k-18l), and thus retaining the obvious solution :  $\chi_k(x, y, z, t) = (\chi_k)^0$ , which is actually the straightforward counterpart of equation (3) in the current paper.

Note that the contribution  $\overset{\circ}{\chi}_k$  in [26], page 309, vanishes when the asymptotic pressure-velocity mechanical equilibrium is reached. We also emphasize that the problem arising in the definition of jump relations through shock waves, which is due to the occurrence of non-conservative first-order contributions in the whole system, is not addressed in [26]; this will be part of the discussion in the next section (see proposition 4).

- On the other hand, the present model should not be confused with the Discrete Equation Method (DEM), since closure laws involved in the latter for the interface velocity and the interface pressure are indeed totally different (see [26], equations (33), page 308, to be compared with equations (6),(7) in the current paper).

## 4 Main properties of the convective system

We provide below some of the main properties of the convective system of equations. Propositions 2 and 4 arise as expected.

**Proposition 3.** *The homogeneous convective subset :*

$$\partial_t(W) + \partial_x(F(W)) + C(W)\partial_x(W) = 0 \quad (10)$$

*is hyperbolic. It admits seven real eigenvalues :*

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{1,2} = u_1 \\ \lambda_3 = u_1 - \tilde{c}_1 \\ \lambda_4 = u_1 + \tilde{c}_1 \\ \lambda_5 = u_2 \\ \lambda_6 = u_2 - \tilde{c}_2 \\ \lambda_7 = u_2 + \tilde{c}_2 \end{array} \right. \quad \text{with} \quad \tilde{c}_k^2 = c_k^2 + \frac{10K_k}{9\rho_k} \quad (11)$$

*and associated vectors span the whole space  $\mathbb{R}^7$ , unless  $|u_2 - u_1|/\tilde{c}_2 = 1$ . Fields associated with eigenvalues  $\lambda_{1,2}$  and  $\lambda_5$  are linearly degenerate (LD). Other fields are genuinely non linear (GNL).*

We notice that the turbulent kinetic energy modifies the celerity of the GNL waves which is straightforward when focusing on single phase turbulent models (see [9] for instance). Thus it will also affect resonant waves of the system.

**Proposition 4** (Riemann invariants). *The five Riemann invariants of the 1-2 LD field associated with the void fraction coupling wave are the following :*

$$\begin{aligned} I_{1,2}^1(W) &= u_1 \\ I_{1,2}^2(W) &= s_2 \\ I_{1,2}^3(W) &= \alpha_2 \rho_2 (u_2 - u_1) \\ I_{1,2}^4(W) &= \alpha_1 \left( p_1 + \frac{2}{3} K_1 \right) + \alpha_2 \left( p_2 + \frac{2}{3} K_2 \right) + \alpha_2 \rho_2 (u_2 - u_1)^2 \\ I_{1,2}^5(W) &= \varepsilon_2 + \frac{p_2}{\rho_2} + \frac{5}{3} \frac{K_2}{\rho_2} + \frac{1}{2} (u_2 - u_1)^2 \end{aligned} \quad (12)$$



The Riemann invariants associated with the other waves read :

$$\begin{aligned}
I_3(W) &= \left( \alpha_1, \rho_2, u_2, \left( p_2 + \frac{2}{3}K_2 \right), s_1, u_1 + \phi_1 \right)^T \\
I_4(W) &= \left( \alpha_1, \rho_2, u_2, \left( p_2 + \frac{2}{3}K_2 \right), s_1, u_1 - \phi_1 \right)^T \\
I_5(W) &= \left( \alpha_1, \rho_1, u_1, \left( p_1 + \frac{2}{3}K_1 \right), \left( p_2 + \frac{2}{3}K_2 \right), u_2 \right)^T \\
I_6(W) &= \left( \alpha_1, \rho_1, u_1, \left( p_1 + \frac{2}{3}K_1 \right), s_2, u_2 + \phi_2 \right)^T \\
I_7(W) &= \left( \alpha_1, \rho_1, u_1, \left( p_1 + \frac{2}{3}K_1 \right), s_2, u_2 - \phi_2 \right)^T
\end{aligned} \tag{13}$$

where  $\phi_k = \int_{p_0}^{p_k} \frac{\tilde{c}_k}{\rho_k c_k^2}(p_k, s_k) dp_k$ .

Once again, we retrieve the classical results [10] when the turbulent kinetic energies are not accounted for (thus setting  $K_k = 0$ ).

**Proposition 5** (Jump conditions). *Within each isolated field, unique jump conditions hold. We denote  $[f] = f_r - f_l$  the jump between the (l)eft and (r)ight states on each side of a discontinuity travelling at speed  $\sigma$ . Turning to the genuinely non linear fields, jump conditions may be written :*

$$\begin{cases}
[\alpha_k] = 0 \\
-\sigma [\rho_k] + [\rho_k u_k] = 0 \\
-\sigma [\rho_k u_k] + \left[ \rho_k u_k^2 + p_k + \frac{2}{3}K_k \right] = 0 \\
-\sigma [E_k] + \left[ u_k \left( E_k + p_k + \frac{2}{3}K_k \right) \right] = 0
\end{cases} \tag{14}$$

Those jump conditions may be easily rewritten as follows :

$$\begin{cases}
[\alpha_k] = 0 \\
\sigma = [\rho_k u_k] / [\rho_k] \\
(\rho_k)_R (\rho_k)_L [u_k]^2 = [p_k + \frac{2}{3}K_k] [\rho_k] \\
2 \left[ \varepsilon_k + \frac{K_k}{\rho_k} \right] + \left\{ (p_k + \frac{2}{3}K_k)_r + (p_k + \frac{2}{3}K_k)_l \right\} \left[ \frac{1}{\rho_k} \right] = 0
\end{cases} \tag{15}$$

More over, looking at the case of a perfect gas EOS, we have the following :

**Proposition 6** (Jump conditions for perfect gas EOS). *We assume that phase  $k$  complies with the perfect gas EOS :  $p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k \varepsilon_k$ ,  $\gamma_k > 1$ . We also assume that the left state is admissible  $W_l \in \Omega$  according to (4) and that no vacuum occurs in the solution. Then the jump conditions (14) ensure that the right state is admissible :  $W_r \in \Omega$ . It also provides bounds for the density ratio whereas the pressure ratio has no bound :*

$$(\beta_k)^{-1} < \frac{(\rho_k)_r}{(\rho_k)_l} < \beta_k \tag{16}$$

with  $\beta_k = \frac{\gamma_k + 1}{\gamma_k - 1}$ .

*Proof.* We note  $z_k = (\rho_k)_r / (\rho_k)_l$  the density ratio and  $\pi_k = (p_k)_r / (p_k)_l$  the pressure ratio. The third equation of (15) gives the following relation between states through genuinely non linear fields associated with  $\lambda_3$  or  $\lambda_6$  :

$$\pi_k (\beta_k - z_k) + 1 - \beta_k z_k - g_k(z_k) = 0$$

where  $g_k(z) = \frac{2}{3} \frac{(K_k)_l}{(p_k)_l} (z^{8/3} - 4z^{5/3} + 4z - 1)$ . Moreover  $z_k > 1$  and it implies  $g_k(z_k) > 0$ . Then we get the pressure ratio :

$$\pi_k = \frac{\beta_k z_k - 1 + g_k(z_k)}{\beta_k - z_k}$$

and the conclusion is thus straightforward. A similar proof holds through fields associated with  $\lambda_4$  or  $\lambda_7$ .  $\square$

We first note that we recover the bounds arising in the pure laminar case (see for instance [27]). This was expected since the instantaneous inequality :

$$\beta^{-1} \phi_L < \phi_R < \beta \phi_L \quad (17)$$

(where  $\beta$  is constant with respect to the statistics) obviously provides the following relation between the *mean* quantities :

$$\beta^{-1} < \phi_L > \leq < \phi_R > \leq \beta < \phi_L > \quad (18)$$

It is important to notice that, unlike in [9, 16], we do not require any approximate jump condition. Eventually, we can easily check that the ratio of left and right turbulent kinetic energies is also bounded.

We recall that all the properties described here suppose that the Baer-Nunziato closure holds  $(u_I, p_I) = (u_1, p_2 + \frac{2}{3} K_2)$ . In the case when  $a = \frac{m_1}{m_1 + m_2}$ , proposition 3 is slightly different since there is another distinct linearly degenerate field associated with  $\lambda = u_I$ , where  $(u_I - u_1)(u_I - u_2) \neq 0$ . Therefore proposition 4 is also different since other Riemann invariants arise. This implies a more intricate coupling wave associated with the eigenvalue  $\lambda = u_I$ , as it already happens in the laminar case ( $K_k = 0$ ).

## 5 Remarks

We now make a few remarks on the one-dimensional Riemann problem :

$$\begin{cases} \partial_t (W) + \partial_x (F(W)) + C(W) \partial_x (W) = 0 \\ W(t = 0, x) = \begin{cases} W_L, & \text{if } x < 0 \\ W_R, & \text{if } x > 0 \end{cases} \end{cases} \quad (19)$$

where  $W_L$  and  $W_R$  are admissible states :  $W_L, W_R \in \Omega$ .

First of all, we remind that one cannot provide the solution of the general Riemann problem in the laminar case, even when a perfect gas EOS is assumed within each phase (see [10]). Nonetheless, a simple result may be given, which is the straightforward counterpart of what happens in the laminar case :

**Remark 2.** *We assume that  $(\alpha_1)_L = (\alpha_1)_R$  and that a perfect gas EOS holds within each phase :  $p_k = (\gamma_k - 1) \rho_k \varepsilon_k$ ,  $\gamma_k > 1$ . The Riemann problem (19) has a unique entropy consistent*

solution involving constant states separated by shocks, rarefaction waves and contact discontinuities if and only if :

$$(u_k)_R - (u_k)_L < \int_0^{(p_k)_L} \frac{\tilde{c}_k}{\rho_k c_k^2}(p_k, s_k) dp_k + \int_0^{(p_k)_R} \frac{\tilde{c}_k}{\rho_k c_k^2}(p_k, s_k) dp_k \quad (20)$$

for  $k = 1, 2$ .

*Proof.* Since  $(\alpha_1)_L = (\alpha_1)_R$ , phases evolve independently. Therefore, we can use the property from [17] on the monophasic Riemann problem.  $\square$

In order to consider real void fraction coupling waves, we have to use the connection through the 1,2-wave given by the Riemann invariants  $I_{1,2}$  in property 4. This leads to the following :

**Remark 3.** We now suppose that  $(\alpha_1)_L \neq (\alpha_1)_R$ . Assume that a perfect gas EOS holds within each phase and that  $W(x, t)$  is the solution of the Riemann problem (19). Then the connection of two constant states separated by a simple wave (either a shock, a rarefaction wave or a contact discontinuity) guarantees that all states of  $W(x, t)$  are admissible :  $W(x, t) \in \Omega$ ,  $\forall x, t$ .

Our last remark addresses the problem of defining  $K_{k,0}$ . At the initial time, we have :

$$K_{k,0} = \frac{K_k}{\rho_k^{5/3}}(x, t = 0)$$

Thus, a natural choice of  $K_{k,0}$  using the initial data is the mean value :

$$K_{k,0} = \frac{1}{|V|} \int_V \left( K_k \rho_k^{-5/3} \right) (x, t = 0) dx$$

The turbulent two-phase flow model introduced in this paper is in agreement with requirements (i,ii,iii), and thus allows the computation of shock solutions in turbulent two-phase flows. The extension of the current results to the framework of multiphase flows seems feasible, considering [18, 23], but this point has not been investigated yet.

# References

- [1] B. Audebert. *Contribution à l'analyse des modèles aux tensions de Reynolds pour l'interaction choc turbulence*. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2006. URL <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00850928>
- [2] M. Baer and J. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6) :861–889, 1986.
- [3] J. B. Bdzil, R. Menikoff, S. F. Son, A. K. Kapila, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : A critical examination of modeling issues. *Physics of Fluids*, 11(2) :378–402, 1999.
- [4] R. Berry, L. Zou, H. Zhao, D. Andrs, J. Peterson, H. Zhang, and R. Martineau. Relap-7 : Demonstrating Seven-Equation, Two-Phase Flow Simulation in a Single-Pipe, Two-Phase Reactor Core and Steam Separator/Dryer. Technical Report INL/EXT-13-28750, Idaho National Laboratory (INL), 2013. URL <https://inldigitallibrary.inl.gov/sti/5712467.pdf>
- [5] R. A. Berry, R. Saurel, and O. LeMetayer. The discrete equation method (DEM) for fully compressible, two-phase flows in ducts of spatially varying cross-section. *Nuclear Engineering and Design*, 240(11) :3797–3818, 2010.
- [6] C. Berthon. *Contribution à l'analyse numérique des équations de Navier-Stokes compressibles à deux entropies spécifiques. Applications à la turbulence compressible*. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 1999.
- [7] F. Coquel, T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *Comptes Rendus Mathématique*, 334(10) :927–932, 2002.
- [8] D. A. Drew and S. L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer Verlag, 1999.
- [9] A. Forestier, J.-M. Hérard, and X. Louis. Solveur de type Godunov pour simuler les écoulements turbulents compressibles. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series I - Mathematics*, 324(8) :919–926, 1997.
- [10] T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Numerical Modeling Of Two-Phase Flows Using The Two-Fluid Two-Pressure Approach. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 14(05) :663–700, 2004.
- [11] S. Gavriluk. The structure of pressure relaxation terms : one-velocity case. Internal report H-I83-2014-00276-EN, EDF R&D, 2014.
- [12] S. Gavriluk and H. Gouin. Geometric evolution of the Reynolds stress tensor. *International Journal of Engineering Science*, 59 :65–73, 2012.

- [13] S. Gavriluk and R. Saurel. Mathematical and Numerical Modeling of Two-Phase Compressible Flows with Micro-Inertia. *Journal of Computational Physics*, 175(1) :326–360, 2002.
- [14] J. Glimm, D. Saltz, and D. H. Sharp. Renormalization group solution of two-phase flow equations for Rayleigh-Taylor mixing. *Physics Letters A*, 222(3) :171–176, 1996.
- [15] V. Guillemaud. *Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques par une approche bifluide à deux pressions*. Ph.D. thesis, Université de Provence - Aix-Marseille I, 2007.  
URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00169178/document>
- [16] J.-M. Hérard. Numerical Modelling of Turbulent Two Phase Flows Using the Two Fluid Approach. In *16th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2003.  
URL <http://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.2003-4113>
- [17] J.-M. Hérard. Problème de Riemann pour un modèle simple de turbulence monophasique compressible. Internal report CR-I81-2014-006, EDF, 2014.
- [18] J.-M. Hérard. A class of compressible multiphase flow models. *Comptes Rendus Mathématique*, 354(9) :954–959, 2016.
- [19] J.-M. Hérard and Y. Liu. Une approche bifluide statistique de modelisation des écoulements diphasiques à phases compressibles. Internal report H-I81-2013-01162-FR, EDF, 2013.
- [20] M. Ishii. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flows*. Collection de la Direction des Etudes et Recherches d’Electricité de France, 1975.
- [21] H. Jin, J. Glimm, and D. H. Sharp. Compressible two-pressure two-phase flow models. *Physics Letters A*, 353(6) :469–474, 2006.
- [22] A. K. Kapila, S. F. Son, J. B. Bdzil, R. Menikoff, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of DDT : Structure of the velocity-relaxation zone. *Physics of Fluids*, 9(12) :3885–3897, 1997.
- [23] S. Müller, M. Hantke, and P. Richter. Closure conditions for non-equilibrium multi-component models. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, pages 1–33, 2015.
- [24] V. H. Ransom and D. L. Hicks. Hyperbolic two-pressure models for two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 53(1) :124–151, 1984.
- [25] R. Saurel and R. Abgrall. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2) :425–467, 1999.
- [26] R. Saurel, S. Gavriluk, and F. Renaud. A multiphase model with internal degrees of freedom : application to shock–bubble interaction. *Journal of Fluid Mechanics*, 495 :283–321, 2003.
- [27] J. Smoller. *Shock waves and reaction diffusion equations*. Springer Verlag, 1983.
- [28] P. Spalart and S. Allmaras. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows. In *30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1992.  
URL <http://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.1992-439>

## Annexe B

# Caractérisations entropiques de modèles d'écoulements diphasiques

# Caractérisations entropiques de modèles d'écoulements diphasiques

H. Lochon<sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup>EDF R&D, Département AMA, 7 Boulevard Gaspard Monge, 91120 Palaiseau, France

<sup>b</sup>IMSIA, UMR EDF/CNRS/CEA/ENSTA 9219, 828 Boulevard des Maréchaux, 91762 Palaiseau Cedex, France

<sup>c</sup>I2M, UMR CNRS 7373, Technopôle Château-Gombert, 39 rue F. Joliot Curie, 13453 Marseille Cedex 13, France

## 1 Introduction

Cette annexe est dédiée à la caractérisation entropique de différents modèles diphasiques. Le cas des modèles bifluïdes à deux pressions a été présenté en détails dans des travaux précédents [4] ainsi, deux autres modèles diphasiques classiques sont étudiés ici : le modèle bifluïde à une pression et le modèle à une vitesse et une pression proposé par Kapila *et al.* [3]. Comme dans [4], la caractérisation entropique est un outil permettant de proposer des lois de fermetures pour le système ouvert obtenu grâce à un opérateur de moyenne statistique. Ce processus de moyenne ne sera pas repris ici, en revanche, les fermetures entropiques des termes sources et des éventuels termes non conservatifs sont présentées en détails.

Introduisons tout d'abord les notations utilisées dans la suite. Les deux modèles étudiés supposent un équilibre de pression entre les phases ainsi  $p$  désigne la pression moyenne,  $\alpha_k$  le taux de présence statistique de la phase  $k$  (vérifiant  $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ ),  $\rho_k$  sa densité moyenne,  $u_k$  sa vitesse moyenne (ou seulement  $u$  dans le cas du modèle de Kapila qui suppose un équilibre de vitesse) et  $e_k$  son énergie totale spécifique. Cette dernière est donnée par la relation suivante :

$$e_k = \frac{1}{2}u_k^2 + \varepsilon_k \quad (1)$$

où  $\varepsilon_k$  est l'énergie interne spécifique de la phase  $k$  reliée aux variables thermodynamiques  $\rho_k$  et  $p$  par une loi d'état que nous supposerons générale :  $\varepsilon_k = \varepsilon_k(\rho_k, p)$ . La vitesse des ondes de pression  $c_k$  dans la phase  $k$  est définie grâce à la loi d'état de la manière suivante :

$$\rho_k c_k^2 = (\partial_p \varepsilon_k)^{-1} \left( \frac{p}{\rho_k} - \rho_k (\partial_{\rho_k} \varepsilon_k) \right) \quad (2)$$

La température  $T_k$  de la phase  $k$  et son enthalpie libre (ou énergie libre de Gibbs) spécifique  $g_k$  sont données par :

$$\frac{1}{T_k} = (\partial_p \varepsilon_k)^{-1} (\partial_p s_k) \quad (3)$$

$$g_k = \varepsilon_k + \frac{p}{\rho_k} - T_k s_k \quad (4)$$

où  $s_k = s_k(\rho_k, p)$  est l'entropie spécifique de la phase  $k$  vérifiant la relation suivante :

$$c_k^2 (\partial_p s_k) + (\partial_{\rho_k} s_k) = 0 \quad (5)$$

Introduisons enfin le couple entropie, flux d'entropie du système, clé de voûte de la caractérisation :

$$(\eta, f_\eta) = \left( \sum_k \alpha_k \rho_k s_k, \sum_k \alpha_k \rho_k s_k u_k \right) \quad (6)$$

## 2 Caractérisation entropique de modèles bifluides à une pression

Les équations moyennées de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie pour chacune des phases dans le cas d'un modèle bifluide à une pression sont les suivantes :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k \rho_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) & = \Gamma_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p) & = \Lambda_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k e_k) + \partial_x (u_k (\alpha_k \rho_k e_k + \alpha_k p)) & = \Psi_k \end{cases} \quad (7)$$

En l'absence de sources extérieures, on a également :

$$\sum_k \Gamma_k = \sum_k \Lambda_k = \sum_k \Psi_k = 0$$

On s'intéresse donc à la loi d'évolution de l'entropie totale  $\eta$  du système. Pour cela, on écrit tout d'abord l'équation d'évolution des densités phasiques de la manière suivante :

$$\partial_t (\rho_k) + u_k \partial_x (\rho_k) + \rho_k \partial_x (u_k) + \frac{\rho_k}{\alpha_k} \left( \partial_t (\alpha_k) + u_k \partial_x (\alpha_k) \right) = RHS_{\rho_k} \quad (8a)$$

$$\text{avec } RHS_{\rho_k} = \frac{1}{\alpha_k} \Gamma_k \quad (8b)$$

L'équation d'évolution des énergies internes spécifiques s'obtient à partir des équations de conservation d'énergies par phases auxquelles on a ôté les énergies cinétiques :

$$\partial_t (\varepsilon_k) + u_k \partial_x (\varepsilon_k) + \frac{p}{\rho_k} \partial_x (u_k) = RHS_{\varepsilon_k} \quad (9a)$$

$$\text{avec } RHS_{\varepsilon_k} = \frac{1}{\alpha_k \rho_k} \left( \Psi_k - u_k \Lambda_k + \left( \frac{1}{2} u_k^2 - \varepsilon_k \right) \Gamma_k \right) \quad (9b)$$

On en déduit l'équation d'évolution de l'unique pression du modèle, à l'aide des équations précédentes (8)-(9) :

$$\partial_t (p) + u_k \partial_x (p) + \rho_k c_k^2 \partial_x (u_k) - (\partial_p \varepsilon_k)^{-1} (\partial_{\rho_k} \varepsilon_k) \frac{\rho_k}{\alpha_k} \left( \partial_t (\alpha_k) + u_k \partial_x (\alpha_k) \right) = RHS_p \quad (10a)$$

$$\text{avec } RHS_p = (\partial_p \varepsilon_k)^{-1} \left( RHS_{\varepsilon_k} - (\partial_{\rho_k} \varepsilon_k) RHS_{\rho_k} \right) \quad (10b)$$

Grâce aux lois d'évolution de la pression (10) et des densités phasiques (8), on obtient l'équation d'évolution des entropies phasiques :

$$\partial_t (s_k) + u_k \partial_x (s_k) - \frac{1}{T_k} \frac{p}{\alpha_k \rho_k} \left( \partial_t (\alpha_k) + u_k \partial_x (\alpha_k) \right) = RHS_{s_k} \quad (11a)$$

$$\text{avec } RHS_{s_k} = \frac{1}{T_k} \left( RHS_{\varepsilon_k} - \frac{p}{\rho_k^2} RHS_{\rho_k} \right) \quad (11b)$$



On la réécrit sous la forme suivante :

$$\partial_t (\alpha_k \rho_k s_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k s_k) = \frac{1}{T_k} \left( \Psi_k - u_k \Lambda_k + \left( \frac{1}{2} u_k^2 - g_k \right) \Gamma_k + p \left( \partial_t (\alpha_k) + u_k \partial_x (\alpha_k) \right) \right) \quad (12)$$

On en déduit le bilan d'entropie du système :

$$\partial_t (\eta) + \partial_x (f_\eta) = RHS_\eta \quad (13a)$$

$$\begin{aligned} \text{avec } RHS_\eta = & \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \left\{ \left( \Psi_1 + p \partial_t (\alpha_1) \right) - \frac{u_1 + u_2}{2} \left( \Lambda_1 - p \partial_x (\alpha_1) \right) + \frac{u_1^2 + u_2^2}{4} \Gamma_1 \right\} \\ & + (u_1 - u_2) \left( \frac{1}{2T_1} + \frac{1}{2T_2} \right) \left\{ - \left( \Lambda_1 - p \partial_x (\alpha_1) \right) + \frac{u_1 + u_2}{2} \Gamma_1 \right\} \\ & + \left( \frac{g_1}{T_1} - \frac{g_2}{T_2} \right) \left\{ - \Gamma_1 \right\} \end{aligned} \quad (13b)$$

Ainsi la caractérisation entropique du système  $RHS_\eta \geq 0$  suggère les fermetures suivantes :

$$\begin{cases} \Gamma_k & = K_g \left( \frac{g_j}{T_j} - \frac{g_k}{T_k} \right) \\ \Lambda_k - p \partial_x (\alpha_k) & = D_k + \mathcal{U} \Gamma_k \\ \Psi_k + p \partial_t (\alpha_k) & = Q_k + \mathcal{U} D_k + \mathcal{H} \Gamma_k \end{cases}, \quad j = 3 - k \quad (14)$$

avec  $\mathcal{U} = \frac{u_1 + u_2}{2}$ ,  $\mathcal{H} = \frac{u_1 u_2}{2}$  et :

$$\begin{aligned} D_k & = K_u (u_j - u_k) \\ Q_k & = K_T (T_j - T_k) \end{aligned}, \quad j = 3 - k$$

Les grandeurs  $K_g$ ,  $K_u$  et  $K_T$  sont des scalaires positifs liés aux phénomènes de retour à l'équilibre que nous ne détaillerons pas ici. Ces lois de fermetures sont très proches de celles des modèles bifluïdes à deux pressions [4]. En outre, elles exhibent les termes non conservatifs classiques pour les modèles bifluïdes comme pour les modèles d'écoulements en conduite à section variable.

### 3 Caractérisation entropique du modèle de Kapila

Le modèle de Kapila est construit à partir du modèle de Baer-Nunziato [1] en supposant des équilibres en pression et vitesse entre les phases [3]. Il fait donc intervenir les équations de conservation classiques ainsi qu'une équation topologique sur le taux de présence [2] :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k) & + u \partial_x (\alpha_k) & = \Phi_k \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k) & + \partial_x (\alpha_k \rho_k u) & = \Gamma_k \\ \partial_t (\rho u) & + \partial_x (\rho u^2 + p) & = 0 \\ \partial_t (\rho e) & + \partial_x (\rho e u + p u) & = 0 \end{cases} \quad (15)$$

où les grandeurs de mélange suivantes sont utilisées :  $\rho = \sum_k \alpha_k \rho_k$ ,  $\rho e = \sum_k \alpha_k \rho_k e_k$  et  $\rho \varepsilon = \sum_k \alpha_k \rho_k \varepsilon_k$ . Les taux de présence vérifiant  $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ , on en déduit  $\sum_k \Phi_k = 0$ . En l'absence de sources extérieures, on a également  $\sum_k \Gamma_k = 0$ . Afin d'obtenir la loi d'évolution

de l'entropie totale  $\eta$  du système, on commence par écrire l'équation d'évolution des densités phasiques sous la forme suivante :

$$\partial_t (\rho_k) + u \partial_x (\rho_k) + \rho_k \partial_x (u) = RHS_{\rho_k} \quad (16a)$$

$$\text{avec } RHS_{\rho_k} = \frac{1}{\alpha_k} (\Gamma_k - \rho_k \Phi_k) \quad (16b)$$

Puis on s'intéresse à l'énergie interne du mélange :

$$\partial_t (\rho\varepsilon) + \partial_x (\rho\varepsilon u) + p\partial_x (u) = 0 \quad (17)$$

En faisant intervenir les énergies internes phasiques, on obtient :

$$\sum_k \left\{ \alpha_k \rho_k \left( \partial_t (\varepsilon_k) + u \partial_x (\varepsilon_k) + \varepsilon_k \Gamma_k \right) \right\} + p\partial_x (u) = 0 \quad (18)$$

On peut alors en déduire l'équation d'évolution de la pression en utilisant les équations (16)-(18) :

$$\partial_t (p) + u \partial_x (p) + \frac{\sum A_k \rho_k c_k^2}{\sum A_k} \partial_x (u) = RHS_p \quad (19a)$$

$$\text{avec } RHS_p = \frac{(-1)}{\sum A_k} \sum_k \left\{ \left( \alpha_k \frac{p}{\rho_k} - A_k c_k^2 \right) RHS_{\rho_k} + \varepsilon_k \Gamma_k \right\} \quad (19b)$$

où on a utilisé la notation  $A_k = \alpha_k \rho_k (\partial_p \varepsilon_k)$ . On obtient ainsi l'équation d'évolution de l'entropie globale du système à l'aide des équations sur les densités phasiques (16) et sur la pression (19) :

$$\partial_t (\eta) + \partial_x (f_\eta) = RHS_\eta \quad (20a)$$

$$\text{avec } RHS_\eta = \frac{\sum A_k}{\tilde{T}} \left( \partial_t (p) + u \partial_x (p) \right) - \sum_k \left\{ \frac{A_k}{T_k} c_k^2 \left( \partial_t (\rho_k) + u \partial_x (\rho_k) \right) \right\} + \sum_k \left\{ s_k \Gamma_k \right\} \quad (20b)$$

où  $\frac{1}{\tilde{T}} = \frac{1}{\sum A_k} \sum \frac{A_k}{T_k}$ . On peut réécrire  $RHS_\eta$  sous la forme suivante :

$$RHS_\eta = \sum_k \left\{ A_k c_k^2 \left( \frac{1}{T_k} - \frac{1}{\tilde{T}} \right) \left( \rho_k \partial_x (u) - RHS_{\rho_k} \right) + \left( s_k - \frac{1}{\tilde{T}} \left( \varepsilon_k + \frac{p}{\rho_k} \right) \right) \Gamma_k \right\} \quad (21)$$

On définit  $\tilde{g}_k = \varepsilon_k + \frac{p}{\rho_k} - \tilde{T} s_k$  et on obtient enfin :

$$RHS_\eta = \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \kappa \left\{ \beta_1 \partial_x (u) + \Phi_1 - \frac{1}{\tilde{\rho}} \Gamma_1 \right\} + \frac{1}{\tilde{T}} (\tilde{g}_2 - \tilde{g}_1) \Gamma_1 \quad (22)$$

avec les notations suivantes :

$$\kappa = \frac{\sum \frac{\rho_k c_k^2}{\alpha_k}}{\sum \frac{1}{A_k}}, \quad \tilde{\rho} = \frac{\sum \frac{\rho_k c_k^2}{\alpha_k}}{\sum \frac{c_k^2}{\alpha_k}}, \quad \beta_j = (-1)^j \frac{\sum (-1)^k \rho_k c_k^2}{\sum \frac{\rho_k c_k^2}{\alpha_k}} \quad (23)$$

La caractérisation entropique du système  $RHS_\eta \geq 0$  suggère donc les fermetures suivantes :

$$\begin{cases} \Gamma_k &= K_g (\tilde{g}_j - \tilde{g}_k) \\ \Phi_k &= -\beta_k \partial_x(u) + \frac{1}{\tilde{\rho}} \Gamma_k + \frac{1}{\kappa} Q_k \end{cases} \text{ avec } Q_k = K_T (T_j - T_k) \quad , \quad j = 3 - k \quad (24)$$

où  $K_g$  et  $K_T$  sont des scalaires positifs. Dans le cas d'un équilibre thermique et chimique entre les phases, on obtient donc le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \partial_t(\alpha_k) &+ u \partial_x(\alpha_k) &= -\beta_k \partial_x(u) \\ \partial_t(\alpha_k \rho_k) &+ \partial_x(\alpha_k \rho_k u) &= 0 \\ \partial_t(\rho u) &+ \partial_x(\rho u^2 + p) &= 0 \\ \partial_t(\rho e) &+ \partial_x(\rho e u + p u) &= 0 \end{cases} \quad (25)$$

Il s'agit de la partie convective du modèle proposé et étudié par Kapila *et al* [3], avec notamment le terme non conservatif dans l'équation d'évolution du taux de présence. Ce système est strictement hyperbolique et exhibe les vitesses d'ondes suivantes :  $\lambda_1 = u - \tilde{c}$ ,  $\lambda_{2,3,4} = u$  et  $\lambda_5 = u + \tilde{c}$  où  $\tilde{c}$  est la vitesse du son dans le mélange vérifiant la formule de Wood [6] :

$$\frac{1}{\rho \tilde{c}^2} = \frac{\alpha_1}{\rho_1 c_1^2} + \frac{\alpha_2}{\rho_2 c_2^2} \quad (26)$$

De plus, on note que les fermetures des termes sources données par l'équation (24) sont strictement identiques à celles proposées par Saurel *et al* [5], sur des critères entropiques également.

# Bibliographie

- [1] M. Baer and J. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6) :861–889, 1986.
- [2] D. A. Drew and S. L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer Verlag, 1999.
- [3] A. K. Kapila, R. Menikoff, J. B. Bdzil, S. F. Son, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : Reduced equations. *Physics of Fluids*, 13(10) :3002–3024, 2001.
- [4] H. Lochon. Modélisation d’écoulements diphasiques : fermetures entropiques de modèles bifluïdes. Internal report H-T63-2014-10406-FR, EDF, 2014.
- [5] R. Saurel, F. Petitpas, and R. Abgrall. Modelling phase transition in metastable liquids : application to cavitating and flashing flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 607 :313–350, 2008.
- [6] A. B. Wood. *A testbook of sound*. G. Bell and Sons Ltd, London, 1930.



# Bibliographie Générale

- [1] RELAP5-3D Code Manual Volume IV : Models and Correlations. Technical Report INEEL-EXT-98-00834, Idaho National Laboratory (INL), 2012.
- [2] Démarche générale de prévention des accidents. Base de Connaissances IRSN, 2016.  
URL [http://www.irsn.fr/FR/connaissances/Installations\\_nucleaires/La\\_sur\\_ete\\_Nucleaire/risque-nucleaire/demarche-prevention/Pages/sommaire.aspx](http://www.irsn.fr/FR/connaissances/Installations_nucleaires/La_sur_ete_Nucleaire/risque-nucleaire/demarche-prevention/Pages/sommaire.aspx)
- [3] Europlexus User's Manual. Technical Report, Joint Research Centre (JRC), Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), 2016.  
URL [http://europlexus.jrc.ec.europa.eu/public/manual\\_html/index.html](http://europlexus.jrc.ec.europa.eu/public/manual_html/index.html)
- [4] Les critères de sûreté RIA et APRP. Base de Connaissances IRSN, 2016.  
URL [http://www.irsn.fr/FR/connaissances/Installations\\_nucleaires/Les-centrales-nucleaires/criteres\\_surete\\_ria\\_aprp/Pages/sommaire.aspx](http://www.irsn.fr/FR/connaissances/Installations_nucleaires/Les-centrales-nucleaires/criteres_surete_ria_aprp/Pages/sommaire.aspx)
- [5] L'accident de Tchernobyl et les accidents graves. Base de Connaissances IRSN, 2016.  
URL [http://www.irsn.fr/FR/connaissances/Installations\\_nucleaires/Les-accidents-nucleaires/accident-tchernobyl-1986/2011-Tchernobyl-25ans-apres-experience-accident-grave/Pages/0-Tchernobyl-2011-25ans-apres-surete-accident-grave.aspx](http://www.irsn.fr/FR/connaissances/Installations_nucleaires/Les-accidents-nucleaires/accident-tchernobyl-1986/2011-Tchernobyl-25ans-apres-experience-accident-grave/Pages/0-Tchernobyl-2011-25ans-apres-surete-accident-grave.aspx)
- [6] G. Allaire, S. Clerc, and S. Kokh. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *Journal of Computational Physics*, 181(2) :577–616, 2002.
- [7] A. Ambroso, C. Chalons, F. Coquel, and T. Galié. Relaxation and numerical approximation of a two-fluid two-pressure diphasic model. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 43(06) :1063–1097, 2009.
- [8] A. Ambroso, C. Chalons, and P.-A. Raviart. A Godunov-type method for the seven-equation model of compressible two-phase flow. *Computers & Fluids*, 54 :67–91, 2012.
- [9] N. Andrianov and G. Warnecke. The Riemann problem for the Baer-Nunziato two-phase flow model. *Journal of Computational Physics*, 195(2) :434–464, 2004.
- [10] B. Audebert. *Contribution à l'analyse des modèles aux tensions de Reynolds pour l'interaction choc turbulence*. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2006.  
URL <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00850928>
- [11] M. Baer and J. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6) :861–889, 1986.
- [12] T. Barberon and P. Helluy. Finite volume simulation of cavitating flows. *Computers & Fluids*, 34(7) :832–858, 2005.

- [13] F. Barre and M. Bernard. The CATHARE code strategy and assessment. *Nuclear Engineering and Design*, 124(3) :257–284, 1990.
- [14] P. Batten, N. Clarke, C. Lambert, and D. Causon. On the Choice of Wavespeeds for the HLLC Riemann Solver. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 18(6) :1553–1570, 1997.
- [15] J. B. Bdzil, R. Menikoff, S. F. Son, A. K. Kapila, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : A critical examination of modeling issues. *Physics of Fluids*, 11(2) :378–402, 1999.
- [16] R. Berry, L. Zou, H. Zhao, D. Andrs, J. Peterson, H. Zhang, and R. Martineau. Relap-7 : Demonstrating Seven-Equation, Two-Phase Flow Simulation in a Single-Pipe, Two-Phase Reactor Core and Steam Separator/Dryer. Technical Report INL/EXT-13-28750, Idaho National Laboratory (INL), 2013.  
URL <https://inldigitallibrary.inl.gov/sti/5712467.pdf>
- [17] R. A. Berry, R. Saurel, and O. LeMetayer. The discrete equation method (DEM) for fully compressible, two-phase flows in ducts of spatially varying cross-section. *Nuclear Engineering and Design*, 240(11) :3797–3818, 2010.
- [18] C. Berthon. *Contribution à l'analyse numérique des équations de Navier-Stokes compressibles à deux entropies spécifiques. Applications à la turbulence compressible*. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 1999.
- [19] Z. Bilicki and J. Kestin. Physical aspects of the relaxation model in two-phase flow. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 428(1875) :379–397, 1990.
- [20] Z. Bilicki, R. Kwidziński, and S. A. Mohammadein. Evaluation of the relaxation time of heat and mass exchange in the liquid-vapour bubble flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 39(4) :753–759, 1996.
- [21] G. Bruck, P. Zysk and T. Esselman. July 18, 2007 Steam Incident Investigation at East 41st Street and Lexington Avenue New York, NY. Technical Report 1763931-R-001, ABS Consulting, 2007.  
URL <http://www.coned.com/messages/ABSReport.pdf>
- [22] A. Chinnayya, E. Daniel, and R. Saurel. Modelling detonation waves in heterogeneous energetic materials. *Journal of Computational Physics*, 196(2) :490–538, 2004.
- [23] S. Clerc. Numerical simulation of the homogeneous equilibrium model for two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 161(1) :354–375, 2000.
- [24] F. Coquel, T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *Comptes Rendus Mathématique*, 334(10) :927–932, 2002.
- [25] F. Coquel, J.-M. Hérard, K. Saleh, and N. Seguin. A robust entropy-satisfying finite volume scheme for the isentropic Baer-Nunziato model. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 48(1) :165–206, 2014.
- [26] F. Coquel, J.-M. Hérard, K. Saleh, and N. Seguin. A Positive and Entropy-Satisfying Finite Volume Scheme for the Baer-Nunziato Model, 2016. Preprint.  
URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01261458>
- [27] F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, P. Helluy, J.-M. Hérard, O. Hurisse, and Y. Liu. Approximate solutions of the Baer-Nunziato Model. *ESAIM : Proceedings*, 40 :63–82, 2013.

- [28] F. Crouzet, F. Daude, P. Galon, J.-M. Hérard, O. Hurisse, and Y. Liu. Validation of a two-fluid model on unsteady liquid-vapor water flows. *Computers & Fluids*, 119 :131–142, 2015.
- [29] G. Dal Maso, P. G. LeFloch, and F. Murat. Definition and weak stability of nonconservative products. *Journal de mathématiques pures et appliquées*, 74(6) :483–548, 1995.
- [30] S. Dallet. A comparative study of numerical schemes for the Baer-Nunziato model. *submitted to International Journal On Finite Volumes*, 2016.
- [31] F. Daude and P. Galon. Développement d’un modèle diphasique à deux pressions dans Europlexus et vérifications numériques - Partie convective. Internal report H-T63-2012-01003-FR, EDF, 2012.
- [32] F. Daude and P. Galon. On the computation of the Baer-Nunziato model using ALE formulation with HLL- and HLLC-type solvers towards fluid-structure interactions. *Journal of Computational Physics*, 304 :189–230, 2016.
- [33] F. Daude, P. Galon, Z. Gao, and E. Blaud. Numerical experiments using a HLLC-type scheme with ALE formulation for compressible two-phase flows five-equation models with phase transition. *Computers & Fluids*, 94 :112–138, 2014.
- [34] V. Deledicque and M. V. Papalexandris. An exact Riemann solver for compressible two-phase flow models containing non-conservative products. *Journal of Computational Physics*, 222(1) :217–245, 2007.
- [35] P. Downar-Zapolski, Z. Bilicki, L. Bolle, and J. Franco. The non-equilibrium relaxation model for one-dimensional flashing liquid flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 22(3) :473–483, 1996.
- [36] D. A. Drew and S. L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer Verlag, 1999.
- [37] M. Dumbser and E. F. Toro. A Simple Extension of the Osher Riemann Solver to Non-conservative Hyperbolic Systems. *Journal of Scientific Computing*, 48(1-3) :70–88, 2010.
- [38] A. R. Edwards and T. P. O’Brien. Studies of phenomena connected with the depressurization of water reactors. *Journal of the British Nuclear Energy Society*, 9 :125–135, 1970.
- [39] P. Embid and M. Baer. Mathematical analysis of a two-phase continuum mixture theory. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 4(4) :279–312, 1992.
- [40] G. Faccanoni. *Study of a Fine Model of Liquid-Vapor Phase Change. Contribution to the Boiling Crisis Study*. Ph.D. thesis, Ecole Polytechnique X, 2008. Thèse en cotutelle entre l’École Polytechnique et l’Università di Trento (Italie).  
URL <https://pastel.archives-ouvertes.fr/tel-00363460>
- [41] E. Faucher, J.-M. Hérard, M. Barret, and C. Toulemonde. Computation of flashing flows in variable cross-section ducts. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 13(4) :365–391, 2000.
- [42] A. Favre. Equations des gaz turbulents compressibles. Méthodes des vitesses moyennes, méthode des vitesses macroscopiques pondérées par la masse volumique. *Journal de mécanique*, 4(4) :391, 1965.



- [43] T. Flåtten and H. Lund. Relaxation two-phase flow models and the subcharacteristic condition. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 21(12) :2379–2407, 2011.
- [44] A. Forestier, J.-M. Hérard, and X. Louis. Solveur de type Godunov pour simuler les écoulements turbulents compressibles. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series I - Mathematics*, 324(8) :919–926, 1997.
- [45] D. Furfaro and R. Saurel. A simple HLLC-type Riemann solver for compressible non-equilibrium two-phase flows. *Computers & Fluids*, 111 :159–178, 2015.
- [46] J. Gale, I. Tiselj, and A. Horvat. Two-fluid model of the WAHA code for simulations of water hammer transients. *Multiphase Science and Technology*, 20(3-4) :291–322, 2008.
- [47] T. Gallouët, P. Helluy, J.-M. Hérard, and J. Nussbaum. Hyperbolic relaxation models for granular flows. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 44(2) :371–400, 2010.
- [48] T. Gallouët, J.-M. Hérard, and N. Seguin. Numerical Modeling Of Two-Phase Flows Using The Two-Fluid Two-Pressure Approach. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 14(05) :663–700, 2004.
- [49] S. Gavriljuk. The structure of pressure relaxation terms : one-velocity case. Internal report H-I83-2014-00276-EN, EDF R&D, 2014.
- [50] S. Gavriljuk and H. Gouin. Geometric evolution of the Reynolds stress tensor. *International Journal of Engineering Science*, 59 :65–73, 2012.
- [51] S. Gavriljuk and R. Saurel. Mathematical and Numerical Modeling of Two-Phase Compressible Flows with Micro-Inertia. *Journal of Computational Physics*, 175(1) :326–360, 2002.
- [52] J. Glimm, D. Saltz, and D. H. Sharp. Renormalization group solution of two-phase flow equations for Rayleigh-Taylor mixing. *Physics Letters A*, 222(3) :171–176, 1996.
- [53] J. Glimm, D. Saltz, and D. H. Sharp. Two-phase modelling of a fluid mixing layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 378 :119–143, 1999.
- [54] J. W. Grove and R. Menikoff. Anomalous reflection of a shock wave at a fluid interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 219 :313–336, 1990.
- [55] A. Guelfi, D. Bestion, M. Boucker, P. Boudier, P. Fillion, M. Grandotto, J.-M. Hérard, E. Hervieu, and P. Péturaud. Neptune : a new software platform for advanced nuclear thermal hydraulics. *Nuclear Science and Engineering*, 156(3) :281–324, 2007.
- [56] V. Guillemaud. *Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques par une approche bifluide à deux pressions*. Ph.D. thesis, Université de Provence - Aix-Marseille I, 2007.  
URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00169178/document>
- [57] J.-F. Haas and B. Sturtevant. Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities. *Journal of Fluid Mechanics*, 181 :41–76, 1987.
- [58] A. Harten, P. Lax, and B. van Leer. On Upstream Differencing and Godunov-Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Review*, 25(1) :35–61, 1983.
- [59] J.-M. Hérard and O. Hurisse. A simple method to compute standard two-fluid models. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 19(7) :475–482, 2005.

- [60] J.-M. Hérard. Numerical Modelling of Turbulent Two Phase Flows Using the Two Fluid Approach. In *16th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2003.  
URL <http://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.2003-4113>
- [61] J.-M. Hérard. A three-phase flow model. *Mathematical and Computer Modelling*, 45(5–6) :732–755, 2007.
- [62] J.-M. Hérard. Une classe de modèles diphasiques bifluides avec changement de régime. Internal report H-I81-2010-00486-FR, EDF, 2010.
- [63] J.-M. Hérard. Problème de Riemann pour un modèle simple de turbulence monophasique compressible. Internal report CR-I81-2014-006, EDF, 2014.
- [64] J.-M. Hérard. A class of compressible multiphase flow models. *Comptes Rendus Mathématique*, 354(9) :954–959, 2016.
- [65] J.-M. Hérard and O. Hurisse. A fractional step method to compute a class of compressible gas-liquid flows. *Computers & Fluids*, 55 :57–69, 2012.
- [66] J.-M. Hérard and Y. Liu. Une approche bifluide statistique de modelisation des écoulements diphasiques à phases compressibles. Internal report H-I81-2013-01162-FR, EDF, 2013.
- [67] J.-M. Hérard and H. Lochon. A simple turbulent two-phase flow model. *in preparation*, 2014.
- [68] M. Ishii. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flows*. Collection de la Direction des Etudes et Recherches d’Electricité de France, 1975.
- [69] S. Jaouen. *Etude mathématique et numérique de stabilité pour des modeles hydrodynamiques avec transition de phase*. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2001.
- [70] H. Jin, J. Glimm, and D. H. Sharp. Compressible two-pressure two-phase flow models. *Physics Letters A*, 353(6) :469–474, 2006.
- [71] H. Jin, J. Glimm, and D. H. Sharp. Entropy of averaging for compressible two-pressure two-phase flow models. *Physics Letters A*, 360(1) :114–121, 2006.
- [72] A. K. Kapila, R. Menikoff, J. B. Bdzil, S. F. Son, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : Reduced equations. *Physics of Fluids*, 13(10) :3002–3024, 2001.
- [73] A. K. Kapila, S. F. Son, J. B. Bdzil, R. Menikoff, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of DDT : Structure of the velocity-relaxation zone. *Physics of Fluids*, 9(12) :3885–3897, 1997.
- [74] S. Kokh and F. Lagoutière. An anti-diffusive numerical scheme for the simulation of interfaces between compressible fluids by means of a five-equation model. *Journal of Computational Physics*, 229(8) :2773–2809, 2010.
- [75] J. J. Kreeft and B. Koren. A new formulation of Kapila’s five-equation model for compressible two-fluid flow, and its numerical treatment. *Journal of Computational Physics*, 229(18) :6220–6242, 2010.
- [76] M. Labois. *Modélisation des déséquilibres mécaniques pour les écoulements diphasiques : approches par relaxation et par modèle réduit*. Ph.D. thesis, Université de Provence -

Aix-Marseille I, 2008.

URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00338818>

- [77] J. Lavieville, M. Boucker, E. Quemerais, S. Mimouni, and N. Mechtoua. NEPTUNE\_CFD V1.0 - Theory Manual. Internal report H-I81-2006-04377-EN, EDF R&D, 2006.
- [78] G. Le Coq, S. Aubry, J. Cahouet, P. Lequesne, G. Nicolas, and S. Pastorini. Le logiciel THYC. modélisation en volume finis des écoulements tridimensionnels diphasiques dans les faisceaux de tubes. *Bulletin de la Direction des études et recherches-Electricité de France. Série A, nucléaire, hydraulique, thermique*, (1) :61–76, 1989.
- [79] O. Le Métayer, J. Massoni, and R. Saurel. Élaboration des lois d'état d'un liquide et de sa vapeur pour les modèles d'écoulements diphasiques. *International Journal of Thermal Sciences*, 43(3) :265–276, 2004.
- [80] O. Le Métayer, J. Massoni, and R. Saurel. Dynamic relaxation processes in compressible multiphase flows. Application to evaporation phenomena. *ESAIM : Proceedings*, 40 :103–123, 2013.
- [81] D. Lhuillier, C.-H. Chang, and T. G. Theofanous. On the quest for a hyperbolic effective-field model of disperse flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 731 :184–194, 2013.
- [82] S. Liang, W. Liu, and L. Yuan. Solving seven-equation model for compressible two-phase flow using multiple GPUs. *Computers & Fluids*, 99 :156–171, 2014.
- [83] T. G. Liu, B. C. Khoo, and K. S. Yeo. The simulation of compressible multi-medium flow : II. Applications to 2d underwater shock refraction. *Computers & Fluids*, 30(3) :315–337, 2001.
- [84] Y. Liu. *Contribution à la vérification et à la validation d'un modèle diphasique bifluide instationnaire*. Ph.D. thesis, Aix-Marseille Université, 2013.  
URL <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00864567>
- [85] H. Lochon. Modélisation d'écoulements diphasiques : fermetures entropiques de modèles bifluides. Internal report H-T63-2014-10406-FR, EDF, 2014.
- [86] H. Lochon, F. Daude, P. Galon, and J.-M. Hérard. Comparison of two-fluid models on steam-water transients. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 2016.
- [87] H. Lochon, F. Daude, P. Galon, and J.-M. Hérard. HLLC-type Riemann solver with approximated two-phase contact for the computation of the Baer-Nunziato two-fluid model. *submitted for publication*, 2016.
- [88] H. Lund. A hierarchy of relaxation models for two-phase flow. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 72(6) :1713–1741, 2012.
- [89] Z. Ma, D. Causon, L. Qian, H. Gu, C. Mingham, and P. M. Ferrer. A GPU based compressible multiphase hydrocode for modelling violent hydrodynamic impact problems. *Computers & Fluids*, 120 :1–23, 2015.
- [90] A. Murrone and H. Guillard. A five equation reduced model for compressible two phase flow problems. *Journal of Computational Physics*, 202(2) :664–698, 2005.
- [91] S. Müller, M. Hantke, and P. Richter. Closure conditions for non-equilibrium multi-component models. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, pages 1–33, 2015.

- [92] W. L. Oberkampf and T. G. Trucano. Verification and validation in computational fluid dynamics. *Progress in Aerospace Sciences*, 38(3) :209–272, 2002.
- [93] W. L. Oberkampf and T. G. Trucano. Verification and validation benchmarks. *Nuclear Engineering and Design*, 238(3) :716–743, 2008.
- [94] M. Pelanti and K.-M. Shyue. A mixture-energy-consistent six-equation two-phase numerical model for fluids with interfaces, cavitation and evaporation waves. *Journal of Computational Physics*, 259 :331–357, 2014.
- [95] V. H. Ransom and D. L. Hicks. Hyperbolic two-pressure models for two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 53(1) :124–151, 1984.
- [96] M. Reocreux. *Contribution à l'étude des débits critiques en écoulement diphasique eau-vapeur*. Ph.D. thesis, Université Scientifique et Médicale de Grenoble, 1974.
- [97] B. Riegel. *Contribution à l'étude de la décompression d'une capacité en régime diphasique*. Ph.D. thesis, Université Scientifique et Médicale et Institut National Polytechnique de Grenoble, 1978.
- [98] P. J. Roache. Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 29(1) :123–160, 1997.
- [99] P. J. Roache. Code verification by the method of manufactured solutions. *Journal of Fluids Engineering*, 124(1) :4–10, 2002.
- [100] P. J. Roache, K. N. Ghia, and F. M. White. Editorial policy statement on the control of numerical accuracy. *Journal of Fluids Engineering*, 108(1) :2–2, 1986.
- [101] K. Saleh. *Analysis and Numerical Simulation of Compressible Two-Phase Flows Using Relaxation Methods. Contribution to the Treatment of Vanishing Phases*. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2012.  
URL <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00761099>
- [102] R. Saurel and R. Abgrall. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2) :425–467, 1999.
- [103] R. Saurel, S. Gavriluk, and F. Renaud. A multiphase model with internal degrees of freedom : application to shock–bubble interaction. *Journal of Fluid Mechanics*, 495 :283–321, 2003.
- [104] R. Saurel, F. Petitpas, and R. Abgrall. Modelling phase transition in metastable liquids : application to cavitating and flashing flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 607 :313–350, 2008.
- [105] R. Saurel, F. Petitpas, and R. A. Berry. Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures. *Journal of Computational Physics*, 228(5) :1678–1712, 2009.
- [106] D. W. Schwendeman, C. W. Wahle, and A. K. Kapila. The Riemann problem and a high-resolution Godunov method for a model of compressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 212(2) :490–526, 2006.
- [107] A. R. Simpson. *Large water hammer pressures due to column separation in sloping pipes*. Ph.D. thesis, University of Michigan, 1986.
- [108] J. Smoller. *Shock waves and reaction diffusion equations*. Springer Verlag, 1983.

- [109] P. Spalart and S. Allmaras. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows. In *30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1992.  
URL <http://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.1992-439>
- [110] H. B. Stewart and B. Wendroff. Two-phase flow : Models and methods. *Journal of Computational Physics*, 56(3) :363–409, 1984.
- [111] I. Tiselj and S. Petelin. Modelling of two-phase flow with second-order accurate scheme. *Journal of Computational Physics*, 136(2) :503–521, 1997.
- [112] S. Tokareva and E. Toro. HLLC-type Riemann solver for the Baer-Nunziato equations of compressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 229(10) :3573–3604, 2010.
- [113] E. F. Toro, M. Spruce, and W. Speares. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver. *Shock Waves*, 4(1) :25–34, 1994.
- [114] I. Toumi, A. Bergeron, D. Gallo, E. Royer, and D. Caruge. FLICA-4 : a three-dimensional two-phase flow computer code with advanced numerical methods for nuclear applications. *Nuclear Engineering and Design*, 200(1) :139–155, 2000.
- [115] A. B. Wood. *A testbook of sound*. G. Bell and Sons Ltd, London, 1930.
- [116] W. Xie, T. Liu, and B. Khoo. Application of a one-fluid model for large scale homogeneous unsteady cavitation : The modified Schmidt model. *Computers & Fluids*, 35(10) :1177–1192, 2006.



## Résumé

Cette thèse traite de la modélisation et de la simulation des écoulements diphasiques transitoires eau-vapeur. Dans de nombreuses installations industrielles, des écoulements monophasiques d'eau liquide sont susceptibles de devenir diphasiques lors de certaines situations transitoires. La modélisation de ces écoulements peut s'avérer délicate car deux phénomènes physiques interagissant fortement entre eux, le changement de phase et la propagation d'ondes de pression, sont alors à prendre en compte. Une approche bifluide statistique, ne supposant aucun équilibre entre les phases, est utilisée afin de modéliser de tels écoulements. Les modèles obtenus sont de type convection-source et s'apparentent au modèle de Baer-Nunziato. Différentes lois de fermeture pour ces modèles sont comparées sur des cas expérimentaux de transitoires eau-vapeur tels que les coups de bélier et la dépressurisation d'une tuyauterie d'eau liquide suite à une rupture. La simulation numérique des différents modèles est effectuée grâce à une méthode à pas fractionnaires. Un nouveau schéma de convection, robuste et efficace, capable de gérer toute équation d'état est utilisé dans la première étape de cette méthode. La seconde étape est dédiée au traitement des termes sources et requiert différents schémas implicites. Une grande attention est accordée à la vérification de tous les schémas numériques utilisés grâce à des études de convergence. Une nouvelle modélisation du transfert de masse est également proposée, sur la base de travaux dédiés à la brusque dépressurisation d'eau liquide en approche homogène. La validation du modèle est effectuée grâce de nombreuses comparaisons calcul-expérience.

**Mots-clés** : transitoires eau-vapeur, modèles bifluides, systèmes hyperboliques, schémas de convection, transfert de masse

## Abstract

This thesis deals with the modelling and the computation of steam-water two-phase flows. Liquid water flows are involved in many industrial facilities and a second phase may appear in some transients situations. Thus, pressure wave propagation and mass transfer are physical phenomena that need to be properly included in the modelling of such two-phase flows. A statistical two-fluid approach is used, leading to models similar to the Baer-Nunziato one. They include both convective and source terms without any assumption on the equilibrium between phases. Different closure laws for such models are compared on steam-water transient experiments including water-hammers and fast depressurization of liquid water. The computation of the different models is based on a fractional step method. A new convective scheme, able to deal with any Equation Of State, is used in the first step of the method. When compared with other schemes, it appears to be accurate, efficient and very robust. The second step of the method is dedicated to the treatment of source terms and requires several implicit schemes. Particular attention is paid to the verification of every scheme involved in the method. Convergence studies are carried out on test-cases with analytical solutions to that purpose. Based on existing work on fast depressurization of liquid water in an homogeneous approach, a new formulation of the mass transfer is proposed. Many comparisons between computational and experimental results are detailed in order to validate the models.

**Keywords** : steam-water transients, two-fluid models, hyperbolic systems, convective schemes, mass transfer