



Contribution à la modélisation des écoulements diphasiques en milieu poreux et au couplage interfacial

Laëtitia Girault

► To cite this version:

Laëtitia Girault. Contribution à la modélisation des écoulements diphasiques en milieu poreux et au couplage interfacial. Equations aux dérivées partielles [math.AP]. Université de Provence (Aix Marseille 1), 2010. Français. NNT: . tel-01624467

HAL Id: tel-01624467

<https://theses.hal.science/tel-01624467>

Submitted on 26 Oct 2017

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

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

Contribution à la modélisation
des écoulements diphasiques en milieu poreux
et au couplage interfacial

Laëtitia GIRAULT
LATP, UMR CNRS 6632, Marseille

Mathématiques et Informatique de Marseille, E.D. numéro 184

Thèse préparée à:

EDF-R&D, MFEE, 6 quai Watier, 78400 Chatou

Jury:

Mme Annalisa Ambroso, Examineur
M. Frédéric Coquel, Examineur
M. Thierry Gallouët, Examineur
Mme Edwige Godlewski, Rapporteur
M. Philippe Helluy, Rapporteur
M. Jean-Marc Hérard, Directeur de Thèse
Mme Raphaele Herbin, Examineur

June 1, 2010

Contents

1	Introduction	4
2	Comparaison de schémas pour la simulation d'écoulements diphasiques bifluïdes en milieu poreux	14
3	Evaluation de conditions de couplage au niveau de l'interface fluïde/poreux et simulations multidimensionnelles	43
4	Couplage interfacial d'un modèle triphasique et d'un modèle diphasique	71
5	Conclusion	101
6	Annexe	104

1 Introduction

L'étude des écoulements multiphasiques intervient dans de nombreuses applications de la mécanique des fluides numérique. Le domaine est vaste car il s'agit d'étudier des écoulements comprenant différentes phases ayant des propriétés thermodynamiques différentes et pouvant interagir ensemble. L'industrie pétrochimique, par exemple, s'intéresse à la modélisation d'écoulements triphasiques type *eau - huile - gaz*, et la modélisation d'écoulements diphasiques de type *gaz - particules* va trouver des applications aussi bien pour l'étude d'explosifs que pour des études environnementales de type dépôts de particules. De la même manière, les écoulements diphasiques *eau liquide - vapeur d'eau* vont pouvoir être étudiés dans des domaines aussi variés que la modélisation du brouillard ou le nucléaire civil. C'est dans ce dernier domaine que se situent les travaux présentés ici.

Mieux comprendre le comportement des fluides au sein des circuits hydrauliques des centrales est un enjeu important pour la recherche et l'industrie nucléaire civile. Pour améliorer les performances et le niveau de sûreté des centrales, il est en effet nécessaire de pouvoir prédire des comportements de fluides diphasiques eau liquide - vapeur d'eau, pour ainsi prévoir l'évolution du système à la suite d'un incident d'exploitation ou d'un accident.

Remarque: par la suite, nous parlerons "d'eau", "de vapeur" et d'écoulement diphasique "eau-vapeur", sans préciser qu'il s'agit d'eau liquide et de vapeur d'eau.

Afin de clarifier le contexte industriel de cette thèse, et de mettre en évidence l'enjeu de la modélisation et de la simulation numérique, il est utile de rappeler quelques concepts sur le fonctionnement d'une centrale nucléaire, et les principales situations accidentelles pouvant avoir lieu.

Contexte industriel

Description simplifiée d'une centrale nucléaire de type REP

Il existe différents modèles - ou "filères" - de centrales nucléaires, se caractérisant par trois principaux éléments et leur association:

- le combustible : uranium naturel, uranium enrichi, plutonium,
- le modérateur (substance utilisée pour favoriser le développement de la réaction de fission en chaîne) : eau ordinaire, eau lourde, graphite,
- le caloporteur (fluide d'extraction de la chaleur produite par le combustible nucléaire) : eau ordinaire sous pression ou bouillante, eau lourde, gaz car-

bonique, sodium, hélium.

La filière des Réacteurs à Eau sous Pression (REP en français, ou PWR en anglais pour Pressurized Water Reactor) est la plus répandue au monde. Toutes les centrales nucléaires françaises en activité appartiennent à cette filière à eau sous pression (combustible : uranium légèrement enrichi ; modérateur et caloporteur : eau ordinaire sous pression), et sont réalisées par séries standardisées correspondant à différents paliers de puissance électrique des réacteurs : 900, 1300, 1450 mégawatts ¹

Une centrale nucléaire de type REP comporte trois circuits hydrauliques principaux indépendants (voir figure 1)

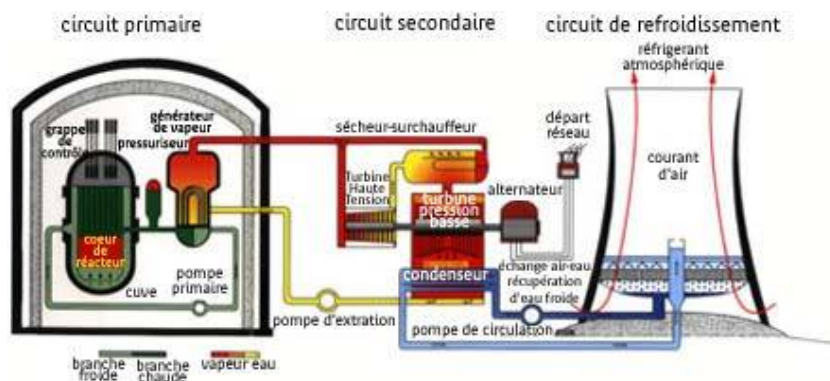


Figure 1: Schéma de fonctionnement d'une centrale nucléaire à Réacteur à Eau sous Pression¹

- **Le circuit primaire:** *pour produire de la chaleur*

il s'agit d'un circuit fermé situé dans le bâtiment réacteur dans lequel circule de l'eau maintenue sous une pression d'environ 155 bar pour l'empêcher de bouillir. En situation normale, ce circuit ne contient que de l'eau sous forme liquide. Un système de pompes envoie l'eau dans le réacteur, où la fission des atomes d'uranium produit une grande quantité de chaleur. Cette chaleur fait augmenter la température de l'eau à plus de 330 degrés C avant qu'elle rejoigne le générateur de vapeur, échangeur thermique avec le circuit secondaire.

¹"Comment fonctionne une centrale nucléaire", sur le site internet de la Société Française d'Energie Nucléaire <http://www.sfen.org/fr/intro/comment.htm> - consulté en septembre 2009

- **Le circuit secondaire:** *pour produire de la vapeur*

Au contact des tubes du générateur de vapeur parcourus par l'eau du circuit primaire, l'eau du circuit secondaire s'échauffe à son tour et est ainsi portée à ébullition pour produire de la vapeur. Cette vapeur fait tourner une turbine, qui entraîne l'alternateur produisant de l'électricité. Après son passage dans la turbine, la vapeur est refroidie, condensée dans le condenseur, et renvoyée vers le générateur de vapeur sous forme d'eau liquide pour un nouveau cycle.

- **Le circuit de refroidissement:** *pour condenser la vapeur et évacuer la chaleur*

L'énergie extraite dans le condenseur est évacuée par l'intermédiaire d'un troisième circuit indépendant des deux autres, le circuit de refroidissement. Sa fonction est de condenser la vapeur sortant de la turbine du circuit secondaire en eau. La chaleur est échangée avec une source froide (eau d'une rivière ou de la mer) et/ou à l'aide d'une tour de refroidissement ou d'aéroréfrigérant. Dans le cas d'un échange direct avec la mer, le circuit est ouvert. Dans le cas d'un aéroréfrigérant, l'essentiel de cette eau retourne vers le condenseur, une petite partie s'évapore dans l'atmosphère, ce qui provoque ces panaches blancs caractéristiques des centrales nucléaires.

Dans une centrale de type REP, seule l'eau du circuit primaire circule dans le coeur du réacteur, il est donc impératif de pouvoir déterminer ses caractéristiques. Dans tout le reste de cette thèse, nous nous intéresserons uniquement à la simulation d'écoulements fluides au sein du circuit primaire.

La problématique des situations accidentelles :

Bien que le circuit primaire soit fermé, étanche, et distinct des autres circuits afin d'éviter toute dispersion de substance radioactive à l'extérieur de la centrale en cas d'incident d'exploitation, les études de sûreté envisagent un certain nombre de situations accidentelles.

Dans le cas hypothétique d'une brèche dans le circuit primaire, une partie de l'eau qui y circule s'en échappe. On se retrouve alors dans le cas d'un *Accident de Perte de Réfrigérant Primaire* (APRP). La dépressurisation du circuit primaire entraîne une ébullition brutale, et la montée des températures dans le coeur pourraient conduire à des déformations et à des dommages importants. En effet, la montée de la température du combustible pourrait notamment entraîner la fusion de la gaine métallique qui sépare l'uranium de l'eau. Dans ce type de situation, il est donc impératif d'injecter de l'eau rapidement, afin de tout "renoyer" pour faire baisser la température à l'intérieur de la cuve et ainsi

minimiser les conséquences d'un APRP sur l'environnement.

Modélisation et simulation numérique

La simulation numérique des réacteurs nucléaires permet d'étudier de telles configurations accidentelles, difficiles voire impossibles à mettre en place en recherche expérimentale. Cependant, la complexité des phénomènes physiques mis en jeu et la vocation industrielle de telles études entraînent différents choix de modélisation d'écoulement diphasique eau - vapeur. Le choix de l'utilisation d'un modèle physique plutôt qu'un autre se fait en général en fonction de la précision dont on a besoin, et du coût en temps de calcul. Différents modèles de thermohydraulique sont ainsi utilisés dans différentes parties du circuit. Dans l'industrie on parle de différentes échelles de simulation :

- *l'échelle CFD* ou *3D local* nécessite une discrétisation assez fine du domaine de calcul pour permettre d'obtenir une simulation précise de l'écoulement dans une petite partie du réacteur nucléaire (une conduite, une pompe, par exemple)
- *l'échelle composant* s'intéresse à ce qui se passe au niveau d'un des gros composants du circuit primaire (cœur du réacteur, générateur de vapeur,...)
- *l'échelle système* quant à elle, permet d'obtenir une vision globale de l'écoulement au sein du circuit primaire.

A cette classification se superpose celle liée aux modèles choisis. Les modèles utilisés pour décrire des écoulements diphasiques eau - vapeur peuvent être classés en deux catégories :

1. **les modèles bifluïdes** qui permettent en tout point de décrire les caractéristiques physiques de l'eau et de la vapeur indépendamment, les deux phases étant représentées par deux jeux d'équations de bilan couplées,
2. **les modèles homogènes** qui considèrent les caractéristiques de l'écoulement "global" (une seule vitesse, une seule température,...etc... pour les deux phases). Le mélange diphasique est en quelque sorte assimilée à un fluide moyen équivalent.

Actuellement, les codes de calcul basés sur des modèles bifluïdes et ceux basés sur des modèles homogènes sont utilisés dans des contextes différents, en fonction d'une application donnée. On utilise généralement les modèles bifluïdes d'une part dans les codes systèmes, d'autre part dans les codes CFD. Du fait de

leur capacité à traiter toutes les situations à l'échelle composant, on utilise en général les modèles homogènes pour des raisons de compromis entre le temps de calcul et la précision nécessaire, sachant que le domaine de calcul est toujours le même.

Cependant, l'utilisation de codes de calcul basés sur des modèles homogènes ne suffit pas toujours à étudier certaines configurations industrielles à l'échelle composant dans des temps de calcul raisonnables. La géométrie du coeur du réacteur, par exemple, est extrêmement complexe. Le combustible est empilé sous forme de pastilles dans des tubes métalliques d'environ 4 mètres de long appelés "crayons combustible". Ces crayons sont regroupés en assemblages. Un assemblage comprend un faisceau carré de 264 crayons (voir la photo 2), et un réacteur de 1300 MWe contient 193 assemblages ² baignant dans l'eau sous pression contenue dans la cuve du circuit primaire. Pour pouvoir réaliser des calculs d'écoulements au sein du coeur du réacteur à une échelle très locale, il faudrait un maillage colossal ! C'est pour palier ce problème que **la formulation poreuse** a été développée dans le cadre des écoulements diphasique eau - vapeur. Cette approche d'homogénéisation permet en effet de considérer que l'écoulement diphasique s'effectue dans un milieu poreux, ce qui permet de ne pas avoir à mailler l'ensemble des petits obstacles qui composent le domaine d'étude.

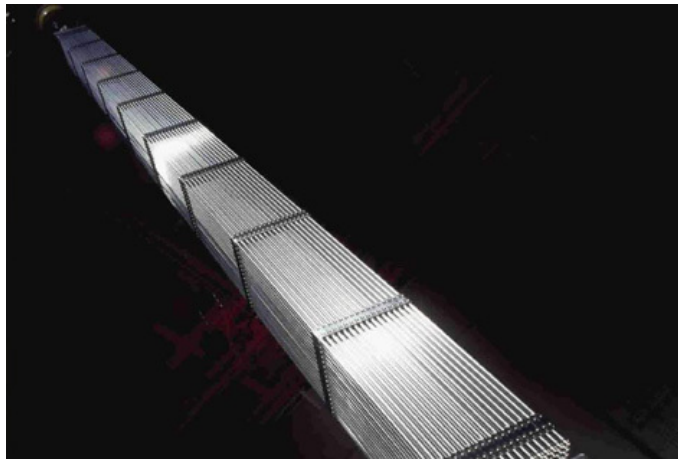


Figure 2: Photo d'un assemblage comprenant un faisceau carré de 264 crayons combustible (FRAMATOME ANP / E. Joly ²)

²source <http://www.aveva.com> consulté en décembre 2009

Les codes industriels suivant l'approche poreuse utilisent principalement des modèles poreux homogènes. Dans cette catégorie, les principaux codes français sont:

- THYC³, basé sur la méthode des volumes finis et dédié aux coeur des réacteurs nucléaires et aux générateurs de vapeur, ce code est développé par EDF,
- FLICA⁴, basé sur la méthode des volumes finis, dédié aux coeur des réacteurs nucléaires, et développé par le CEA,
- GENEPI⁵, basé sur la méthode des éléments finis, dédié aux générateurs de vapeur, et développé par le CEA.

Actuellement, le seul code bifluide et poreux est le code CATHARE⁶, dans son module 3D (les modèles bifluides étant habituellement utilisés en milieu libre). Développé par le CEA, ce code est lui aussi basé sur la méthode des volumes finis.

Le couplage interfacial de modèles

La simulation du fonctionnement de systèmes complexes nécessite parfois l'utilisation de plusieurs modèles afin de décrire finement les comportements spécifiques à chaque composant comme nous l'avons vu plus haut. Des modèles physiques très différents les uns des autres sont utilisés pour simuler les comportements fluides au sein des circuits hydrauliques d'une centrale nucléaire. Pour effectuer une simulation globale, on peut choisir de diviser le domaine d'étude en sous-domaines séparés par des interfaces fixes et extrêmement minces appelées interfaces de couplage. Des codes de calcul basés sur des modèles physiques différents sont utilisés sur ces sous-domaine. Le couplage interfacial permet alors de passer les informations d'un code de calcul à un autre au travers de l'interface de couplage les séparant, dans l'optique d'obtenir une vision globale de l'écoulement à travers un circuit donné.

La contrainte principale du développement de méthodes de couplage est de ne pas intervenir profondément dans les codes de calcul existants. Il faut mettre

³Aubry S., Cahouet J., Lequesne P., Nicolas G., Pastorini S., "THYC: Code de Thermo-hydraulique des Coeurs de Réacteurs. Version 1.0 Modélisation et Méthodes Numériques", Rapport EDF H-T10-1988-02769-FR, 1988

⁴Toumi I., Bergeron A., Gallo D., Royer E., Caruge D., "FLICA-4: a three-dimensional two-phase flow computer code with advanced numerical methods for nuclear applications", Nuclear Engineering and design, vol. 200, pp. 139-155, 2000

⁵Grandotto M., "Simulation numérique des écoulements diphasiques dans les échangeurs", Habilitation à Diriger des Recherches, Université de Provence, 2006

⁶Serre G., Bestion D., "Physical laws of CATHARE revision 6. Pipe module", rapport CEA SMTH/LMDS/EM/98-038, 1999

en place des techniques permettant de passer l'information d'un code à un autre sans pour autant les modifier, si ce n'est au niveau des *conditions aux limites* sur l'interface de couplage. Pour cela on décide d'intervenir au niveau des *conditions aux limites*. Travaillant sur des modèles discrétisés par la méthode des volumes finis, les conditions de couplage seront données sous forme de flux. Ces *flux de couplage*, définis au niveau des interfaces de couplage, devront prendre en compte les éventuelles incompatibilités entre les modèles à coupler, basés sur des systèmes d'équations différents. Le développement de techniques de couplage consiste alors en grande partie à définir des conditions de couplage pertinentes afin d'obtenir une description cohérente de l'écoulement vu dans sa globalité.

Fruit de la collaboration entre le laboratoire Jacques Louis Lions (JLL) de l'Université Pierre et Marie Curie et le CEA (Commissariat à l'Energie Atomique) de Saclay, un groupe de travail ⁷ a été créé à Paris VI en 2004 afin d'étudier les problèmes de couplages de systèmes d'équations aux dérivées partielles non linéaires. Le but de ce groupe de travail est de développer des outils théoriques et numériques pour le couplage interfacial entre des modèles provenant de la mécanique de fluides multiphasiques. Plusieurs travaux de thèses ^{8, 9, 10, 11} ont contribué à la problématique de couplage de modèles étudiée par le groupe de travail JLL-CEA et au département MFEE (Mécanique des Fluides Energie et Environnement) d'EDF.

La principale méthode de couplage développée par le groupe de travail JLL-CEA nécessite la résolution de deux problèmes de Riemann au niveau de l'interface pour pouvoir définir les flux de couplage. Une deuxième approche peut être utilisée. Proposée pour le traitement des termes sources ¹², cette approche nécessite d'introduire un "modèle père" au niveau de l'interface de couplage. Ce modèle père doit être suffisamment riche pour pouvoir "dégénérer" vers les modèles situés de part et d'autre de l'interface de couplage par une technique de relaxation instantanée. Cette deuxième approche sera utilisée dans la

⁷site internet du groupe de travail JLL-CEA <http://www.ann.jussieu.fr/groupe/cea/> - Membres : Ambroso A., Chalons C., Coquel F., Godlewski E., Lagoutière F., Raviart P.A., Seguin N.

⁸Hurisse O., "Couplage interfacial instationnaire de modèles diphasiques", Thèse de doctorat de l'Université Aix-Marseille I (2006)

⁹Caetano F., "Sur certains problèmes de linéarisation et de couplage pour les systèmes hyperboliques non linéaires", Thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie - Paris VI (2006)

¹⁰Galié T., "Couplage interfacial de modèles en dynamique des fluides. Application aux écoulements diphasiques", Thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie - Paris VI (2009)

¹¹Boutin B., "Etude mathématique et numérique d'équations hyperboliques non linéaires : couplage de modèles et chocs non classiques", Thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie - Paris VI (2009)

¹²Greenberg J.M., Leroux A.Y., "A well balanced scheme for the numerical processing of source terms in hyperbolic equations", SIAM J. Num. Anal., vol. 33(1), pp. 1-16, 1996

dernière partie des travaux présentés ici.

Cette thèse a été réalisée dans le cadre du projet de co-développement NEPTUNE, financé par le CEA, EDF, l'IRSN et AREVA_NP. Dans ce projet sont développés en particulier le code NEPTUNE_CFD¹³ (code bifluide en milieu libre) et le code CATHARE 3 (code système - bifluide à deux ou trois champs).

¹³Mechitoua N., Boucker M., Lavieville J., Hérard J.-M., Pigny S., Serre G., "An unstructured finite volume solver for two-phase water/vapour flows modelling based on an elliptic oriented fractional step method", NURETH 10, 10th International Meeting on Nuclear Reactor, Thermal-hydraulics, Seoul, South Korea, October 5-9, 2003

Plan de la thèse

Dans cette thèse nous souhaitons traiter des situations réellement instationnaires. Nous avons choisis d'utiliser des modèles en approche multifluide diphasique ou triphasique, en milieu libre ou poreux, où coexistent des échelles de temps de relaxation en vitesse, température, et pression, et bien posés à conditions initiales.

Les problèmes suivants sont abordés :

- la modélisation bifluide en milieu poreux, lorsque le champ de porosité est régulier,
- le couplage entre milieu fluide et milieu poreux, lorsque le champ de porosité présente de fortes variations locales,
- le couplage entre un modèle triphasique et un modèle diphasique.

Les deux premiers chapitres visent à mettre en évidence une méthode de couplage fluide/poreux. L'objectif du premier chapitre est de présenter différents schémas numériques monodimensionnels pour la simulation d'écoulements diphasiques dans des milieux poreux, puis d'étudier leur comportement en cas de fortes variations de porosité. L'un de ces schémas donne clairement des résultats plus satisfaisants que les deux autres. On s'y intéresse donc plus en détail dans le chapitre 2. Dans le deuxième chapitre, on commence tout d'abord par étendre ce schéma au cas tridimensionnel avant d'évaluer la pertinence des conditions de couplage au niveau de l'interface entre les milieux fluide et poreux.

Les travaux présentés dans ces deux premiers chapitres permettent d'exhiber une méthode de couplage entre milieu fluide et milieu poreux, pouvant être utilisée pour un couplage de codes de type NEPTUNE.CFD — THYC, le code NEPTUNE.CFD (modèle bifluide en milieu libre) étant alors utilisé au niveau du circuit alors que THYC (modèle homogène en milieu poreux) est utilisé au niveau du générateur de vapeur. Cette première partie permettrait aussi de définir un code bifluide poreux gérant divers niveaux de porosité.

Le troisième et dernier chapitre vise quant-à-lui à proposer une méthode de couplage interfacial instationnaire entre un modèle triphasique et un modèle diphasique.

Chapitre 1: Comparaison de schémas pour la simulation d'écoulements diphasiques bifluides en milieu poreux

Chapitre 2: Evaluation de conditions de couplage au niveau de l'interface fluide/poreux et simulations multidimensionnelles

Chapitre 3: Proposition pour un couplage interfacial instationnaire d'un modèle triphasique et d'un modèle diphasique

2 Comparaison de schémas pour la simulation d'écoulements diphasiques bifluides en milieu poreux

Le développement de codes diphasiques nécessite la construction de codes dits “composants” qui font appel à une formulation poreuse afin de réaliser des calculs réalistes de certaines configurations industrielles, sans avoir à mailler l'ensemble des petits obstacles qui les composent. Cette approche peut-être déclinée sur la base de modèles diphasiques homogènes ou d'approches à deux fluides. La construction des codes poreux existants se base sur une hypothèse de régularité de la distribution du champ spatial de porosité dans le domaine de calcul, et sur une approche poreuse homogène. Dans le cadre de la sûreté nucléaire notamment, les études au sein des coeurs de réacteurs ou des générateurs de vapeur utilisent le concept de porosité dans des volumes de contrôle. Néanmoins, dans certaines configurations, cette hypothèse de régularité est clairement mise en défaut, car l'application visée comporte des variations brusques de ce champ de porosité.

Le principal objectif de ce premier chapitre est de présenter différents schémas numériques pour la simulation d'écoulements diphasiques (eau liquide et vapeur d'eau) dans des milieux poreux, puis d'étudier leur comportement dans le cas de fortes variations de porosité.

On commence donc par présenter le modèle hyperbolique utilisé ici pour simuler des écoulements diphasiques dans un milieu poreux sur la base d'une approche bifluide, ainsi que ses propriétés. On définit ensuite des solutions analytiques simples et la construction de solutions exactes au problème de Riemann unidimensionnel, qui serviront par la suite à calculer l'erreur en norme L^1 pour les différents schémas étudiés.

Trois schémas aux Volumes Finis sont introduits dans ce chapitre:

- **Schéma de Rusanov classique** (R)
- **Schéma de Rusanov Modifié** (MR)
- **Schéma de type Well-Balanced Rusanov** (WBR)

Ce dernier schéma est plus simple que le schéma well-balanced original proposé par Greenberg-Leroux qui nécessite la résolution exacte d'un problème de Riemann à chaque interface. Le schéma WBR s'inspire du schéma proposé par Kröner et Thanh pour la simulation d'écoulements monophasiques dans des tuyaux à section variable. En effet, le schéma WBR ne requiert que la résolution de quatre équations scalaires non linéaires à chaque interface (deux pour chaque

phase), correspondant à la conservation des invariants de Riemann de l'onde stationnaire associée à la porosité. Les principales propriétés de ces schémas sont ensuite présentées, comprenant notamment la préservation de la positivité pour les taux de présence et les masses partielles, sous condition CFL, et le respect éventuel des solutions stationnaires sur maillage de taille quelconque.

Différents cas tests analytiques ont été réalisés dans le but d'évaluer, pour chacun de ces schémas, la norme L^1 de l'erreur sur des maillages allant de 100 mailles (maillage de taille industrielle) à 800 000 mailles. On s'est ensuite intéressé à des cas tests plus concrets, comme un accident de perte de réfrigérant primaire au sein d'une centrale nucléaire lors de la rupture d'une conduite (milieu non poreux) menant au coeur du réacteur (considéré comme un milieu poreux).

Les résultats fournis par le troisième schéma WBR sont stables et conduisent à des approximations convergeant vers la bonne solution pour des cas avec variation brusque de porosité, ce qui n'est pas le cas des deux premiers schémas (R et MR).

Le respect par le schéma WBR des solutions stationnaires semble donc incontournable pour obtenir une convergence correcte.

Le document qui suit a été accepté pour publication à la revue M^2AN (Mathematical Modelling and Numerical Analysis).

A two-fluid hyperbolic model in a porous medium

Laëtitia Girault *

EDF, R&D

Jean-Marc Hérard[†]

EDF, R&D

The paper is devoted to the computation of two-phase flows in a porous medium when applying the two-fluid approach. The basic formulation is presented first, together with the main properties of the model. A few basic analytic solutions are then provided, some of them corresponding to solutions of the one-dimensional Riemann problem. Three distinct Finite-Volume schemes are then introduced. The first two schemes, which rely on the Rusanov scheme, are shown to give wrong approximations in some cases involving sharp porous profiles. The third one, which is an extension of a scheme proposed by D. Kröner and M. D. Thanh (²⁷) for the computation of single phase flows in varying cross section ducts, provides fair results in all situations. Properties of schemes and numerical results are presented. Analytic tests enable to compute the L^1 norm of the error.

I. Introduction

The main purpose of the present work is to develop models and schemes that allow the computation of two-phase flows in a porous medium while focusing on the two-fluid approach, and thus considering distinct pressure, velocity and temperature fields within each phase. Following the pioneering work of Baer and Nunziatto³, Kapila et al²⁵, and more recent work^{8,13}, that deals with the two-fluid two-pressure approach in an open medium, we first provide an extension to the framework of porous medium as proposed in²⁴. As expected, the system is hyperbolic, at least for small enough Mach number within each phase, which of course seems reasonable when focusing on applications for flows in pressurised water reactors in nuclear power plants. The governing set of equations also benefits from two major features. Though it contains some non-conservative products, all jump conditions are unique in single genuinely non linear -GNL- fields. This is tightly connected with the fact that the closure law for the so-called interfacial velocity is such that the field associated with the eigenvalue $\lambda = V_I$ is linearly degenerated - LD- (see also⁸). Moreover, we emphasize that a relevant entropy inequality holds for regular solutions of the whole set of equations including source terms (and viscous terms if any).

Once the model is presented (section *II*), section *III* will provide some details on a few analytic solutions of the whole system that will be investigated in sections *V* and *VI*. We will then focus in section *IV* on three simple Finite Volume schemes in order to compute approximations of the latter model in a porous medium. The first scheme corresponds to the classical Rusanov scheme, the second one being a slight modification of the latter. The third scheme is quite different. It relies on former propositions by Greenberg and Leroux (see²⁰) revisited by Kröner and Thanh (see²⁷, and⁴ too). Actually the latter third scheme does not require solving an exact Riemann problem around each cell interface (see¹⁹), and thus is much simpler than the original well-balanced scheme²⁰. The main properties of the schemes will be given in section *V*, with special emphasis on the well-balanced properties of course, but also on positivity properties. The last two sections will be devoted to the presentation of numerical results. More precisely, section *VI* will give the opportunity to examine the convergence rate of the above mentioned schemes with respect to the mesh size. Eventually, we will focus in section *VII* on the computation of the interaction of moving waves with the standing free/porous interface. Beyond the present work, we would like to mention that we aim at investigating some possible way to ensure a relevant interfacial and unsteady coupling of existing codes associated with free and porous medium respectively. This motivates the numerical experiments that are introduced within the last

*PhD student, EDF, R&D, Fluid Dynamics, Power Generation and Environment, 6 quai Watier, 78400, Chatou, France.
Also in: Centre de Mathématique et Informatique, LATP, 39 rue Joliot Curie, 13453, Marseille cedex 13, France

[†]EDF, R&D, Fluid Dynamics, Power Generation and Environment, 6 quai Watier, 78400, Chatou, France.

two sections. For a further insight on the interfacial coupling of models, we refer to the recent work by the working group⁰, and more precisely on the early work^{17, 18}, but also to the recent review article¹⁶, and also on⁵.

II. A two-fluid model in a porous medium

We first need to present the two-fluid two-pressure model introduced in²⁴, and we shall also recall some of its properties afterwards.

A. Governing equations for the two-fluid model

We first introduce the void fraction $\alpha_k \in [0, 1]$ that complies with $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$, the porosity $\epsilon \in]0, 1]$, and (for $k = 1, 2$) the mean velocity U_k , the mean pressure P_k , the mean density ρ_k , the internal energy $e_k = e_k(P_k, \rho_k)$ in phase k . The state variable W in $\mathbf{R}^8$ is:

$$W^t = (\epsilon, \alpha_2, \epsilon m_1, \epsilon m_2, \epsilon m_1 U_1, \epsilon m_2 U_2, \epsilon E_1, \epsilon E_2) \quad (1)$$

We will also use W_ϵ defined as follows:

$$W_\epsilon^t = (\epsilon m_k, \epsilon m_k U_k, \epsilon E_k) \quad (2)$$

in $\mathbf{R}^6$, while noting $m_k = \alpha_k \rho_k$ the partial mass in phase k , and $E_k = m_k U_k^2/2 + m_k e_k$ the total energy of phase k . The equation of state (EOS) is provided through the function $e_k(P_k, \rho_k)$, which may be arbitrary. We will thus focus herein on the following two-fluid model:

$$\begin{cases} \partial_t(\epsilon) = 0 ; \\ \partial_t(\alpha_2) + V_I \partial_x(\alpha_2) = \phi_2(W) ; \\ \partial_t(\epsilon m_k) + \partial_x(\epsilon m_k U_k) = 0 ; \\ \partial_t(\epsilon m_k U_k) + \partial_x(\epsilon m_k U_k^2) + \epsilon \alpha_k \partial_x(P_k) + \epsilon(P_k - P_I) \partial_x(\alpha_k) = \epsilon D_k(W) ; \\ \partial_t(\epsilon E_k) + \partial_x(\epsilon U_k(E_k + \alpha_k P_k)) + \epsilon P_I \partial_t(\alpha_k) = \epsilon \psi_k + \epsilon V_I D_k(W) . \end{cases} \quad (3)$$

We now detail the closure laws for the source terms (ϕ_2, D_k, ψ_k) , which agree with :

$$\sum_{k=1}^2 \psi_k(W) = 0 \quad ; \quad \sum_{k=1}^2 D_k(W) = 0 \quad ; \quad \sum_{k=1}^2 \phi_k(W) = 0 . \quad (4)$$

The latter two read:

$$\begin{cases} D_k = (-1)^k \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)} (U_1 - U_2) / \tau_U ; \\ \phi_k = (-1)^k \frac{\alpha_1 \alpha_2}{|P_1| + |P_2|} (P_2 - P_1) / \tau_P . \end{cases} \quad (5)$$

where both τ_U and τ_P denote relaxation time scales. The contribution D_k refers to the drag forces. Besides, the energy interfacial transfer term :

$$\psi_k = K_T (a_k - a_{3-k}) \quad (6)$$

requires to define a_k :

$$a_k = (s_k)^{-1} (\partial_{P_k}(s_k)) (\partial_{P_k}(e_k))^{-1} \quad (7)$$

where $s_k = s_k(P_k, \rho_k)$ denotes the specific entropy, which is compelled with:

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

noting as usual:

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

The couple (V_I, P_I) is assumed to be one among the two couples (U_k, P_{3-k}) , with $k \in 1, 2$. For instance, the pair (U_2, P_1) is expected to be physically relevant when the phase 2 is dilute (and reversely the pair (U_1, P_2) when the flow is dominated by phase 2). these two pairs correspond to models investigated in^{1, 3, 25, 28, 29} among others. Note anyway that a third choice corresponding to (V_m, P_m) as defined in^{8, 13} is also meaningful, and might be considered as well.

B. Main properties of the two-fluid model

First, we focus on the homogeneous part of (3), eg:

$$\begin{cases} \partial_t (\epsilon) = 0 ; \\ \partial_t (\alpha_2) + V_I \partial_x (\alpha_2) = 0 ; \\ \partial_t (\epsilon m_k) + \partial_x (\epsilon m_k U_k) = 0 ; \\ \partial_t (\epsilon m_k U_k) + \partial_x (\epsilon m_k U_k^2) + \epsilon \alpha_k \partial_x (P_k) + \epsilon (P_k - P_I) \partial_x (\alpha_k) = 0 ; \\ \partial_t (\epsilon E_k) + \partial_x (\epsilon U_k (E_k + \alpha_k P_k)) + \epsilon P_I \partial_t (\alpha_k) = 0 . \end{cases} \quad (10)$$

Property 1 (Structure of the convective part of (3)):

The homogeneous system (10) admits the following real eigenvalues:

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= 0 \quad , \quad \lambda_1 = V_I, \\ \lambda_2 &= U_1 \quad , \quad \lambda_3 = U_1 - c_1 \quad , \quad \lambda_4 = U_1 + c_1, \\ \lambda_5 &= U_2 \quad , \quad \lambda_6 = U_2 - c_2 \quad , \quad \lambda_7 = U_2 + c_2 \end{aligned} \quad (11)$$

Associated right eigenvectors span the whole space if : $|V_I - U_k| \neq c_k$, and $|U_k| \neq c_k$, for $k = 1, 2$. Otherwise, a resonance phenomenon occurs. Fields associated with eigenvalues $\lambda_0, \lambda_2, \lambda_5$ are linearly degenerated (LD), whereas fields associated with $\lambda_3, \lambda_4, \lambda_6, \lambda_7$ are genuinely non-linear. Owing to the particular choice $V_I = U_k$, the field associated with λ_1 is also LD.

For nuclear applications with a mixture of water and vapour, resonance is very unlikely to happen, since material velocities are indeed small compared with the speed of acoustic waves in pure phases. For a more detailed investigation of resonance phenomena, we refer for instance to¹⁵ and also to⁷ which focuses on shallow-water equations with topography.

Property 2 (Entropy inequality):

Define the entropy-entropy flux pair (η, f_η) as:

$$\begin{aligned} \eta &= \epsilon(m_1 \text{Log}(s_1) + m_2 \text{Log}(s_2)) \\ f_\eta &= \epsilon(m_1 \text{Log}(s_1)U_1 + m_2 \text{Log}(s_2)U_2) \end{aligned}$$

and the following quantity:

$$m_k R_k = a_k(\psi_k + D_k(V_I - U_k) - \phi_k(P_I - P_k)) \quad (12)$$

Then smooth solutions of system (3) comply with the following entropy inequality :

$$\partial_t (\eta) + \partial_x (f_\eta) = \epsilon(m_1 R_1 + m_2 R_2) \geq 0 . \quad (13)$$

Before going further on, it may be noticed that slightly different choices of P_I might be considered (see ^{24,8,13}), which result in a dissipative contribution in the governing equation of the entropy η . We insist that these are not considered in the present paper.

Property 3 (Riemann invariants in the standing wave):

The linearly degenerated (LD) wave associated with $\lambda = 0$ admits the following Riemann invariants

$$\begin{aligned} I_1^0(W) &= \alpha_2 \quad ; \quad I_2^0(W) = s_1 \quad ; \quad I_3^0(W) = \epsilon m_1 U_1 \quad ; \\ I_4^0(W) &= e_1 + \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{U_1^2}{2} \quad ; \quad I_5^0(W) = s_2 \quad ; \\ I_6^0(W) &= \epsilon m_2 U_2 \quad ; \quad I_7^0(W) = e_2 + \frac{P_2}{\rho_2} + \frac{U_2^2}{2} \end{aligned}$$

The latter Riemann invariants will be used in practice in order to define the third scheme in section IV.

Property 4 (Riemann invariants in the V_I contact discontinuity):

We still assume that $V_I = U_k$. As a consequence, the wave associated with the eigenvalue $\lambda = V_I$ is linearly degenerated. Moreover, associated Riemann invariants are the following:

$$\begin{aligned} I_1^1(W) &= \epsilon \quad ; \quad I_2^1(W) = s_{3-k} \quad ; \\ I_3^1(W) &= U_k \quad ; \quad I_4^1(W) = m_{3-k}(U_{3-k} - U_k) \quad ; \\ I_5^1(W) &= \alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2 + m_{3-k}(U_{3-k} - U_k)^2 \quad ; \\ I_6^1(W) &= e_{3-k} + \frac{P_{3-k}}{\rho_{3-k}} + \frac{1}{2}(U_{3-k} - U_k)^2 \end{aligned}$$

The latter property is obviously extremely important. Actually, even in a free medium, thus corresponding to the uniform distribution $\epsilon = 1$, the specific closure law for the so-called interfacial velocity-pressure pair (V_I, P_I) guarantees that the non-conservative products are only active in a linearly degenerated field. Thus unique jump conditions hold field by field, which results in the crucial point that the converged approximations (w.r.t. the mesh size) obtained when computing flows with shock waves through system (3) will not depend on the scheme (see²¹), as may happen for other unsuitable choices of (V_I, P_I) .

III. Basic solutions

A. Two simple solutions

We define two basic solutions of system (3), whatever the EOS is.

- *Basic solution S_1 :*

We define solution S_1 as the following *unsteady* solution:

$$\begin{cases} \epsilon(x) = \epsilon_0 \\ P_1(x, t) = P_2(x, t) = P_0 \\ U_1(x, t) = U_2(x, t) = U_0 \end{cases} \quad (14)$$

while both ρ_k and α_2 are solutions of the governing equation:

$$\partial_t(f) + U_0 \partial_x(f) = 0$$

Note that this solution, which is only valid in a free medium, may be viewed as a solution of the sole convective part of system (3), or alternatively of the full set of equations (3).

- *Basic solution S_2 :*

We assume that the distribution $\epsilon(x)$ is arbitrary. Solution S_2 will correspond to the *steady* solution:

$$\begin{cases} P_1(x, t) = P_2(x, t) = P_0 \\ U_1(x, t) = U_2(x, t) = 0 \end{cases} \quad (15)$$

while both $m_k(x, t) = m_k(x, 0)$ and $\alpha_2(x, t) = \alpha_2(x, 0)$.

These two basic solutions will be used in order to define *a priori* suitable schemes. The second solution S_2 will also be used as a preliminary test case (test 2) in numerical experiments in section VI.

B. Solutions of the Riemann problem

We focus here the homogeneous part of system (3), and thus consider now solutions of the Riemann problem associated with system (10). *We must insist here that we do not know whether there exists a unique solution to the one dimensional Riemann problem for our problem, given left and right initial states.* However, we may proceed differently and construct exact solutions. For that purpose we simply introduce a left initial condition, and then construct intermediate states and associated single waves, choosing an initial configuration. We shall restrict here to rather simple choices involving "ghost" waves -through which no variation of the state variable occurs-, and: (i) a steady contact discontinuity, and/or (ii) a moving V_I contact discontinuity and/or (iii) a shock wave in phase 2. Solutions will be referred to as Test 1, Test 3 and Test 4 respectively.

Of course much more complex test cases might be defined that way, such as those examined in^{1,28,29} for instance, but we emphasize here once more that we want to focus on situations where the porosity varies, which explains our choices. The exact construction of intermediate states and the final right state is detailed in appendix A. Numerical values that are used in numerical experiments are recalled at the beginning of section VI, which is devoted to the measure of the L^1 norm of the error.

The figure below provides a sketch of the solution of Riemann problems that will be investigated, together with notations :

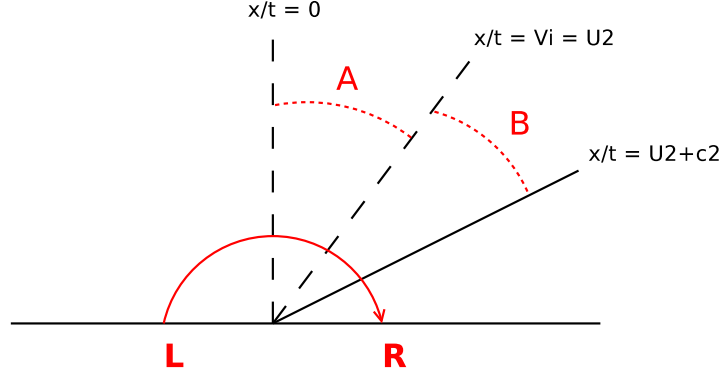


Figure 1. Sketch of the specific fan of waves in exact solutions and notations for intermediate states.

IV. Finite Volume schemes

We introduce standard notations for Finite Volume schemes (see⁹). Within each Finite Volume of size $h_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$, the mean value of W at time t^n in cell i is:

$$W_i^n = \left(\int_{[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]} W(x, t^n) dx \right) / h_i \quad (16)$$

The time step Δt^n will comply with a standard CFL condition. Moreover, we define:

$$\bar{a}_{i+1/2} = (a_i + a_{i+1})/2$$

whatever the quantity a is, and also:

$$(\Delta(\bar{a}))_i^n = (\bar{a})_{i+1/2}^n - (\bar{a})_{i-1/2}^n$$

for $k = 1, 2$.

We define the flux f_ϵ in $\mathbf{R}^6$:

$$f_\epsilon(W_\epsilon, \alpha_2, \epsilon)^t = (\epsilon m_k U_k, \epsilon m_k U_k^2, \epsilon U_k (E_k + \alpha_k P_k)) \quad (17)$$

The computation of the whole set (3) is achieved with a fractional step method which is in agreement with the overall entropy inequality. The homogeneous problem associated with (10) is computed first. Source terms are then accounted for using an implicit scheme, which is exactly the one described in reference¹³. We thus only describe the first evolution step here.

A. Classical Rusanov scheme R

The cell scheme which is used to compute the evolution step simply reads:

$$h_i((\alpha_2)_i^{n+1} - (\alpha_2)_i^n) + \Delta t^n (V_I)_i^n (\Delta(\bar{\alpha}_2))_i^n + \Delta t^n (c_{i+1/2}^n - c_{i-1/2}^n) = 0 \quad (18)$$

where $c_{i+1/2}^n = -r_{i+1/2}^n((\alpha_2)_{i+1}^n - (\alpha_2)_i^n)/2$, while:

$$h_i((W_\epsilon)_i^{n+1} - (W_\epsilon)_i^n) + \Delta t^n (F_{i+1/2}^R((W_\epsilon)_l^n, (\alpha_2)_l^n, \epsilon_l) - F_{i-1/2}^R((W_\epsilon)_l^n, (\alpha_2)_l^n, \epsilon_l)) + \Delta t^n (H_\epsilon)_i^n = 0 \quad (19)$$

where the numerical flux is defined by:

$$F_{i+1/2}^R((W_\epsilon)_l^n, (\alpha_2)_l^n, \epsilon_l) = \left(f_\epsilon((W_\epsilon)_i^n, (\alpha_2)_i^n, \epsilon_i) + f_\epsilon((W_\epsilon)_{i+1}^n, (\alpha_2)_{i+1}^n, \epsilon_{i+1}) - r_{i+1/2}^n((W_\epsilon)_{i+1}^n - (W_\epsilon)_i^n) \right) / 2 \quad (20)$$

The notation $(W_\epsilon)_l^n$ involves the stencil l that refers to cell indices $(i, i+1)$ for $F_{i+1/2}$, (respectively to $(i-1, i)$ for $F_{i-1/2}$). The scalar $r_{i+1/2}^n$ represents the maximal value of the spectral radius of the Jacobian matrices $A((W_\epsilon)_l^n, (\alpha_2)_l^n, \epsilon_l)$ for $l = i, i+1$. The contribution connected with the first-order non-conservative terms $(H_\epsilon)_i^n$ is approximated by:

$$(H_\epsilon)_i^n = (0, \epsilon_i((P_k)_i^n - (P_I)_i^n)(\Delta(\bar{\alpha}_k))_i^n + (\alpha_k)_i^n(\Delta(\bar{P}_k))_i^n, -\epsilon_i(P_I)_i^n(V_I)_i^n(\Delta(\bar{\alpha}_k))_i^n) \quad (21)$$

B. A modified Rusanov scheme *MR*

This scheme is similar to the previous one. Its main interest is that it guarantees that the steady solution S_2 will be perfectly approximated on any mesh size (see section *V* below).

The update for the void fractions is:

$$h_i((\alpha_2)_i^{n+1} - (\alpha_2)_i^n) + \Delta t^n (V_I)_i^n(\Delta(\bar{\alpha}_2))_i^n + \Delta t^n (d_{i+1/2,-}^n - d_{i-1/2,+}^n) = 0 \quad (22)$$

where :

$$\begin{aligned} d_{i+1/2,-}^n &= -(\hat{\epsilon})_{i+1/2} r_{i+1/2}^n((\alpha_2)_{i+1}^n - (\alpha_2)_i^n) / (2\epsilon_i) \\ d_{i-1/2,+}^n &= -(\hat{\epsilon})_{i-1/2} r_{i-1/2}^n((\alpha_2)_i^n - (\alpha_2)_{i-1}^n) / (2\epsilon_i) \end{aligned} \quad (23)$$

The numerical flux in (19) is replaced by:

$$F_{i+1/2}^{MR}((W_\epsilon)_l^n, (\alpha_2)_l^n, \epsilon_l) = \left(f_\epsilon((W_\epsilon)_i^n, (\alpha_2)_i^n, \epsilon_i) + f_\epsilon((W_\epsilon)_{i+1}^n, (\alpha_2)_{i+1}^n, \epsilon_{i+1}) - r_{i+1/2}^n(\hat{\epsilon})_{i+1/2} \left(\frac{(W_\epsilon)_{i+1}^n}{\epsilon_{i+1}} - \frac{(W_\epsilon)_i^n}{\epsilon_i} \right) \right) / 2 \quad (24)$$

where $(\hat{\epsilon})_{i+1/2} = \max(\epsilon_i, \epsilon_{i+1})$, or : $(\hat{\epsilon})_{i+1/2} = (2\epsilon_i\epsilon_{i+1}) / (\epsilon_i + \epsilon_{i+1})$.

C. A simplified well-balanced scheme *WBR*

The basic idea is the following. For the sake of simplicity, we introduce $Z \in \mathbf{R}^7$ and $f(Z) \in \mathbf{R}^7$ as follows:

$$\begin{aligned} Z^t &= (\alpha_2, m_k, m_k U_k, E_k) \\ f(Z)^t &= (0, m_k U_k, m_k U_k^2 + \alpha_k P_k, U_k(E_k + \alpha_k P_k)) \end{aligned} \quad (25)$$

Now, since ϵ is assumed to be constant within each cell, the cell scheme will read:

$$h_i(Z_i^{n+1} - Z_i^n) + \Delta t^n (F_{i+1/2,-}^{WBR}(Z_l^n, \epsilon_l) - F_{i-1/2,+}^{WBR}(Z_l^n, \epsilon_l)) + \Delta t^n H_i^n = 0 \quad (26)$$

where the numerical fluxes and the contribution H are defined by:

$$\begin{aligned} F_{i+1/2,-}^{WBR}(Z_l^n, \epsilon_l) &= \left(f(Z_i^n) + f(Z_{i+1/2,-}^n) - (r_{WB})_{i+1/2}^n(Z_{i+1/2,-}^n - Z_i^n) \right) / 2 \\ F_{i-1/2,+}^{WBR}(Z_l^n, \epsilon_l) &= \left(f(Z_i^n) + f(Z_{i-1/2,+}^n) - (r_{WB})_{i-1/2}^n(Z_i^n - Z_{i-1/2,+}^n) \right) / 2 \end{aligned} \quad (27)$$

$$H_i^n = ((V_I)_i^n(\Delta(\bar{\alpha}_2))_i^n, 0, -(P_I)_i^n(\Delta(\bar{\alpha}_k))_i^n, -(P_I)_i^n(V_I)_i^n(\Delta(\bar{\alpha}_k))_i^n) \quad (28)$$

The values $Z_{i-1/2,+}^n$ and $Z_{i+1/2,-}^n$ are obtained by solving the non-linear equations (for $m = 0$ to 6):

$$\begin{aligned} Inv_m^0(Z_{i-1/2,+}^n, \epsilon_i) &= Inv_m^0(Z_{i-1}^n, \epsilon_{i-1}) \\ Inv_m^0(Z_{i+1/2,-}^n, \epsilon_i) &= Inv_m^0(Z_{i+1}^n, \epsilon_{i+1}) \end{aligned} \quad (29)$$

In agreement with section II (property 3), we have set here:

$$\begin{aligned}
Inv_0^0(Z, \epsilon) &= \alpha_2 \\
Inv_{3k-2}^0(Z, \epsilon) &= s_k \\
Inv_{3k-1}^0(Z, \epsilon) &= \epsilon m_k U_k \\
Inv_{3k}^0(Z, \epsilon) &= e_k + P_k / \rho_k + U_k^2 / 2
\end{aligned} \tag{30}$$

for $k = 1, 2$. In practice, this requires solving two uncoupled non-linear scalar equations (one for each phase) at each cell interface $i + 1/2$, the solution of which is trivial when $\epsilon_i = \epsilon_{i+1}$, or when $(U_k)_i^n (U_k)_{i+1}^n = 0$. Details pertaining to the exact solution of the above-mentioned equations are given in appendix C. We emphasize here that:

$$\max(|(U_k)_{i+1/2,-}^n|, |(U_k)_{i+1/2,+}^n|, r_l^n) = (r_{WB})_{i+1/2}^n \quad \text{for } k = 1, 2$$

where r_l^n stands for the spectral radius of the Jacobian matrix at time t^n for $l = i, i + 1$.

We note that the update for α_2 is exactly the same as the one achieved in (18), owing to the specific value of $Inv_0^0(Z, \epsilon)$ (which implies that : $(\alpha_2)_{i+1/2,-}^n = (\alpha_2)_{i+1}^n$ and $(\alpha_2)_{i-1/2,+}^n = (\alpha_2)_{i-1}^n$). Obviously when the porosity is uniform ($\epsilon_{i-1} = \epsilon_i = \epsilon_{i+1}$), this scheme identifies with the standard Rusanov scheme, since $Z_{i-1/2,+}^n = Z_{i-1}^n$ and $Z_{i+1/2,-}^n = Z_{i+1}^n$ in that case, and it also corresponds to scheme *MR*.

V. Main properties

We wonder first whether the latter three schemes preserve basic solutions on any mesh, which is of course crucial for industrial applications. For that purpose, we need to introduce some constants $a_{k,0}$ for both phases, together with two invertible functions $g_k(\phi)$. Actually, one may easily check that:

- Property 5: *We assume that the EOS takes the form: $\rho_k e_k(P_k, \rho_k) = a_{k,0} \rho_k + g_k(P_k)$ in each phase k . The three schemes *R*, *MR* and *WBR* described above preserve the discrete form of the basic solution S_1 , whatever the mesh size is, since $(U_1)_i^n = (U_2)_i^n = U_0$ and $(P_1)_i^n = (P_2)_i^n = P_0$ imply that $(U_1)_i^{n+1} = (U_2)_i^{n+1} = U_0$ and $(P_1)_i^{n+1} = (P_2)_i^{n+1} = P_0$, if $\epsilon_i = \epsilon_0$.*

The reader is referred to appendix B, section A for proof, which is almost obvious. In practice, standard EOS such as perfect gas EOS or stiffened gas EOS belong to the above mentioned class. We recall that the stiffened gas EOS simply stands for $a_{k,0} = 0$ and $g_k(\phi) = (\phi + \gamma_k \Pi_k) / (\gamma_k - 1)$, where constants γ_k and Π_k are assumed to be such that: $\gamma_k > 1$ and $0 \leq \Pi_k$.

Of course (see¹⁰ for such a discussion in the framework of homogeneous models), it does not mean *a priori* that the schemes will - or won't- converge towards correct solutions.

The next property is also useful for practical applications, though it is not sufficient of course. It requires similar assumptions on the form of the EOS.

- Property 6: *We assume that the EOS takes the form: $\rho_k e_k(P_k, \rho_k) = a_{k,0} \rho_k + g_k(P_k)$ in each phase k . Both schemes *MR* and *WBR* preserve the discrete form of the basic solution S_2 on any mesh, since $(U_1)_i^n = (U_2)_i^n = 0$ and $(P_1)_i^n = (P_2)_i^n = P_0$ imply that $(U_1)_i^{n+1} = (U_2)_i^{n+1} = 0$ and also $(P_1)_i^{n+1} = (P_2)_i^{n+1} = P_0$, with arbitrary ϵ_i . The standard *R* scheme does not.*

A proof is detailed in appendix B, section B, which is again almost obvious, and only requires a few calculations. The structure of the scheme *MR* with respect to the void fraction is of course mandatory to ensure the result.

- Property 7: *We use notations introduced in section II pertaining to Riemann invariants. If we assume that $\epsilon_L \neq \epsilon_R$, and also that the initial conditions (W_L, W_R) of the Riemann problem comply with :*

$I_m^0(W_L) = I_m^0(W_R)$, for $m = 1$ to 7, we are ensured that the scheme *WBR* preserves steady states on any mesh. This does not hold true for schemes *R* and *MR*.

The proof for schemes *R* and *MR* is not detailed here since it is obvious. The one pertaining to scheme *WBR* is given in appendix B, section C. Actually, it is also close to some results stated in⁴. The proof is also almost the same as the one given in²⁶ in the case of Euler equations with perfect gas EOS, in a one-dimensional framework, where authors examine the particular case of flows in variable cross section ducts. It occurs in fact in the proof that, though the present system is indeed much more complex than the one examined in²⁶, both phases almost "decouple" through the interface, since the void fraction is one among the seven Riemann invariants of the standing wave associated with λ_0 (see section II). A straightforward consequence is that the governing equations for the mass, momentum and total energy within phase k in a porous medium almost behave "locally" as the Euler equations in a porous medium.

- Property 8: *The maximum principle for the void fractions holds, and positive cell values of partial masses are ensured when applying any scheme among R, MR and WBR, provided that the following CFL conditions hold:*

R scheme:

$$\frac{\Delta t^n}{2h_i}(r_{i+1/2}^n + r_{i-1/2}^n) \leq 1 \quad \forall i \quad (31)$$

MR scheme (with $(\hat{\epsilon})_{i+1/2} = \max(\epsilon_i, \epsilon_{i+1})$):

$$\frac{\Delta t^n}{2h_i} \left(\frac{(\hat{\epsilon})_{i+1/2}}{\epsilon_i} r_{i+1/2}^n + \frac{(\hat{\epsilon})_{i-1/2}}{\epsilon_i} r_{i-1/2}^n \right) \leq 1 \quad \forall i \quad (32)$$

WBR scheme:

$$\frac{\Delta t^n}{2h_i} ((r_{WB})_{i+1/2}^n + (r_{WB})_{i-1/2}^n) \leq 1 \quad \forall i \quad (33)$$

Proofs are given in appendix B, section D.

These results were expected, owing to the specific structure of the underlying Rusanov scheme. The CFL-like condition is almost classical for both *R* and *WBR* schemes, and it is slightly different for the *MR* scheme.

VI. Convergence rate for analytic solutions

We examine in this section the true convergence rate of the above mentionned schemes, when computing Riemann problems as explained in section III. We do not present all results for the three schemes in any case, but we concentrate on the main features, drawbacks and advantages of schemes.

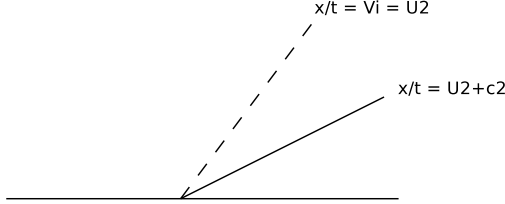
For all cases, we use uniform meshes, and the range of the mesh size will be recalled in each case. The coarser mesh contains 100 cells, whereas the finer mesh contains 8.10^5 cells. More precisely, we use:

Schemes	R	MR	WBR
Test case 1	10^2 to 2.10^5 cells		
Test case 2	10^2 to 2.10^5 cells	10^2 to 2.10^5 cells	10^2 to 2.10^5 cells
Test case 3	10^2 to 4.10^5 cells	-	-
Test case 4	10^2 to 4.10^5 cells	10^2 to 4.10^5 cells	10^2 to 8.10^5 cells

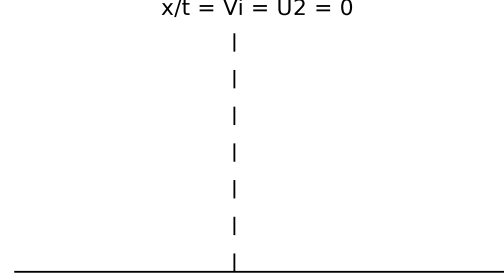
The EOS for the vapour phase ($k = 2$) and the water phase ($k = 1$) are assumed to be perfect gas EOS, and the corresponding constants will be $\gamma_1 = 1.1$ and $\gamma_2 = 1.4$.

The measure of the L^1 norm of the error will be provided, together with a "local" estimation of the convergence rate when meaningful. To be more complete, we recall that we use the pair $(V_I, P_I) = (U_2, P_1)$. In all computations, we use a CFL number 1/2 in order to compute the value Δt^n at each time step. We also recall below the main configurations that will be investigated, as explained in section III.

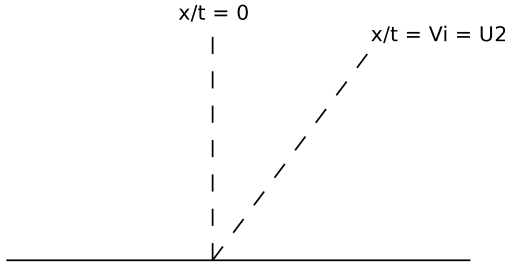
TEST 1 : Free medium



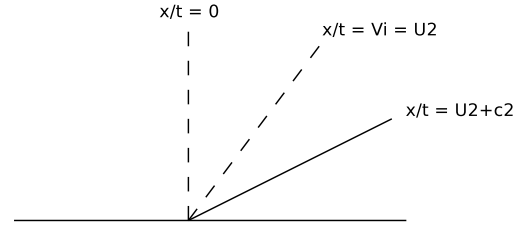
TEST 2 : Solution S_2



TEST 3 : double contact discontinuity



TEST 4 : three-wave pattern



A. Test case 1: A two-wave Riemann problem in a free medium

The first solution corresponds to a very simple flow pattern in a free medium. It only involves one void fraction contact-discontinuity (associated with $\lambda = U_2$), and a shock wave in the vapour phase corresponding to the eigenvalue $\lambda_7 = U_2 + c_2$. Thus left and right initial states are separated by an intermediate state labelled B . We provide below the exact initial data. We recall that results obtained with R, MR, WBR schemes are identical for this test case in a free medium.

	state L	state B	state R
ϵ	1		
α_1	0.95	0.05	
ρ_1	1	0.956131034	
U_1	10	-84.3587663	
P_1	100000	95185.1407	
ρ_2	0.1	0.15	0.1
U_2	15		-357.299567
P_2	10000	95044.7777	53462.6875

Computations have been performed using regular meshes with $10^2, 5.10^2, 10^3, 5.10^3, 10^4, 5.10^4, 10^5$, and 2.10^5 cells. These enable to plot the L^1 norm of the error e_h -in logarithmic coordinates- in Figure 2.

One may deduce the measure of the rate of convergence β at time $t = T$, while focusing on the four finer meshes, and enforcing the behaviour $e_h^\phi(T) = C_\phi(T)h^{\beta(\phi)}$.

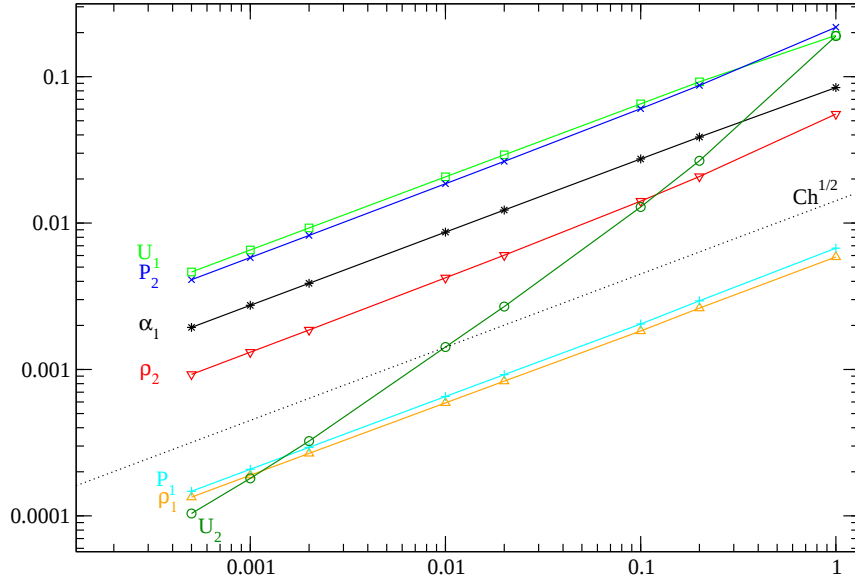


Figure 2. L_1 norm of the error for the R scheme when computing test case 1 (flow in a free medium) as a function of the mesh size.

	between 10^4 and $5 \cdot 10^4$ cells	between $5 \cdot 10^4$ and 10^5 cells	between 10^5 and $2 \cdot 10^5$ cells
α_1	0.500	0.500	0.500
ρ_1	0.494	0.496	0.497
U_1	0.499	0.500	0.500
P_1	0.497	0.498	0.498
ρ_2	0.509	0.505	0.503
U_2	0.919	0.846	0.797
P_2	0.505	0.503	0.502

These values of $\beta(\phi)$ were actually expected. When restricting to ρ_1, U_1, P_1 , and on α_1 which only vary in this test case through the void fraction contact discontinuity, an asymptotic rate of 0.5 is "perfect". Moreover, since (ρ_2, P_2) vary through both waves, the same is expected. *A contrario*, the rate $\beta(U_2)$ should be close to 1 since U_2 is a Riemann invariant through the void fraction contact discontinuity. As a matter of fact, the measured value seems to be close to 0.8, and this agrees with measurements performed in¹¹.

B. Solution S_2 : a simple steady flow with a free/porous interface

We now focus on the behaviour of schemes R , MR and WBR when computing approximations of solution labelled S_2 , whose initial data is given below:

	state L	state R
ϵ	1	0.6
α_1	0.95	0.05
ρ_1	1	
U_1	0	
P_1	100000	
ρ_2	2	0.15
U_2	0	
P_2	100000	

Results with R scheme

Simulations involve meshes with 10^2 , $5 \cdot 10^2$, 10^3 , $5 \cdot 10^3$, 10^4 , $5 \cdot 10^4$, 10^5 , and $2 \cdot 10^5$ regular cells. Figure 3 displays the L^1 norm of the error e_h .

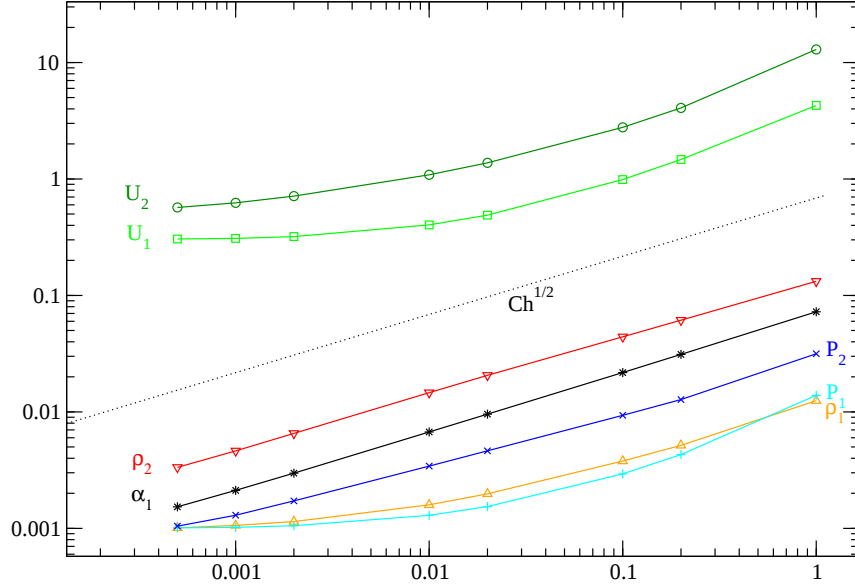


Figure 3. Test 2: L_1 norm of the error for scheme R .

The R scheme clearly no longer converges towards the correct solution when the mesh size goes to zero. The illusion that α_1 and ρ_2 still converge is due to the fact that their initial condition is discontinuous, which dissimulates the uncorrect behaviour on these "coarse" meshes (wrt to what is sought !). This renders the whole rather dangerous: if we restrict to a range of meshes with 100 up to 10000 cells (the latter represents a "fine mesh" for practical applications...), the R scheme looks almost correct, and one may expect that the pollution will reduce when h tends towards 0...which is obviously not true. Actually, estimations of "convergence rates" $\beta(\phi)$ on the finer meshes are 0.067, 0.017, 0.014 for ρ_1 , U_1 and P_1 respectively.

Results with MR scheme

The meshes are exactly the same. The L^1 norm of the error e_h has been plotted in figure 4. Restricting to the finer meshes, approximations of convergence rates $\beta(\phi)$ for ρ_2 and α_1 are clearly 1/2. Round-off errors are observed for all other variables. .

Results with WBR scheme

Meshes are still the same, and results are very similar to those obtained with the latter scheme MR . The L^1 norm of the error e_h has been plotted in figure 5. We have also plotted in figures 6 approximations of both densities ρ_1, ρ_2 that have been obtained using R, MR, WBR schemes on a rather coarse mesh with 1000 nodes. This clearly shows the poor accuracy of the Rusanov scheme: the approximations are spurious around the steady interface, and fast waves propagate on both sides apart from the coupling interface $x = 0.5$. This is of course even more astonishing when looking at the density profile in phase 1.

C. Test 3: a combination of a standing contact wave and a void fraction contact discontinuity

This test case is similar to the second one, but it also involves a contact discontinuity associated with the void fraction wave ($\lambda_5 = U_2$). The intermediate state A has been calculated using appendix A. Meshes now range from 10^2 cells up to $4 \cdot 10^5$ cells. The initial data is as follows:

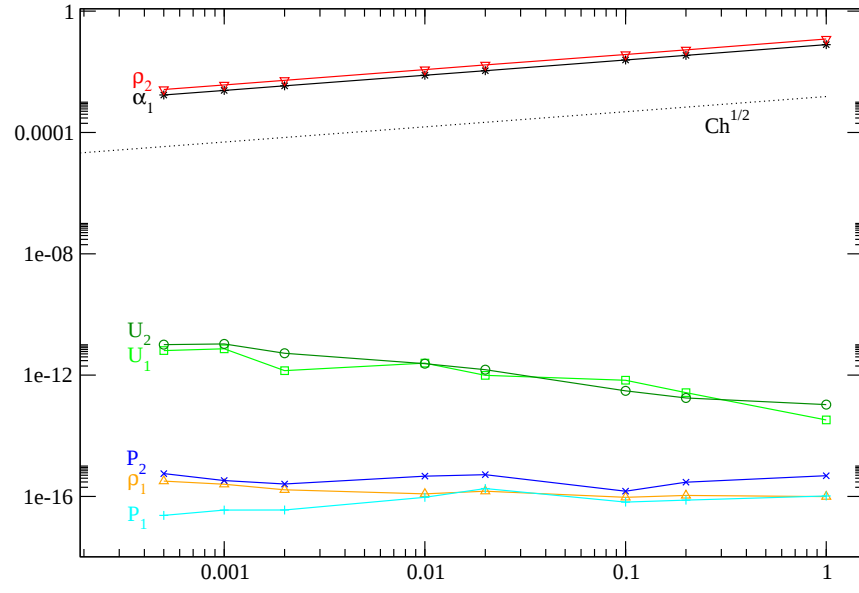


Figure 4. Test 2: L_1 norm of the error for scheme MR .

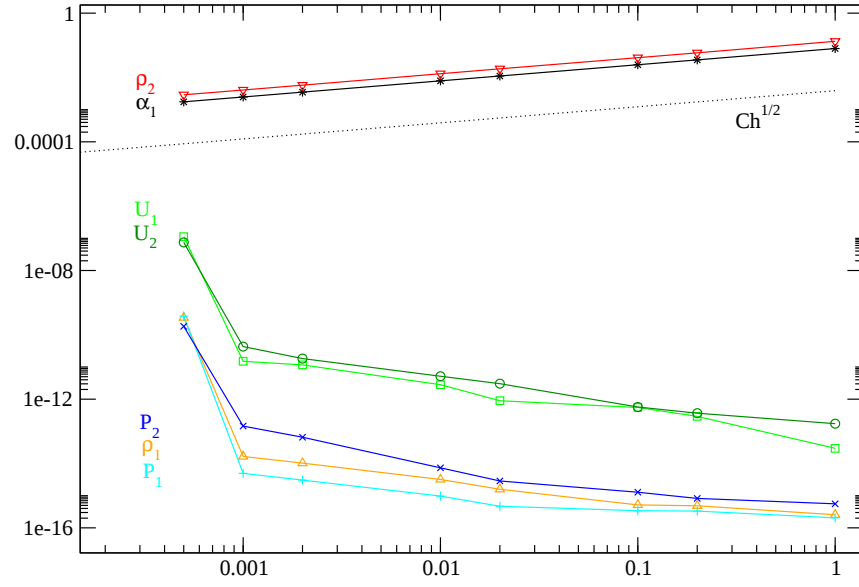


Figure 5. Test 2: L_1 norm of the error for scheme WBR .

	state L	state A	state R
ϵ	1	0.6	
α_1	0.95		0.05
ρ_1	1	0.999190167	0.853058301
U_1	10	16.6801748	-160.919041
P_1	100000	99910.922	83960.8032
ρ_2	0.1	0.0998565629	0.15
U_2	15	25.0359108	
P_2	10000	9979.92457	94534.4211

12 of 27

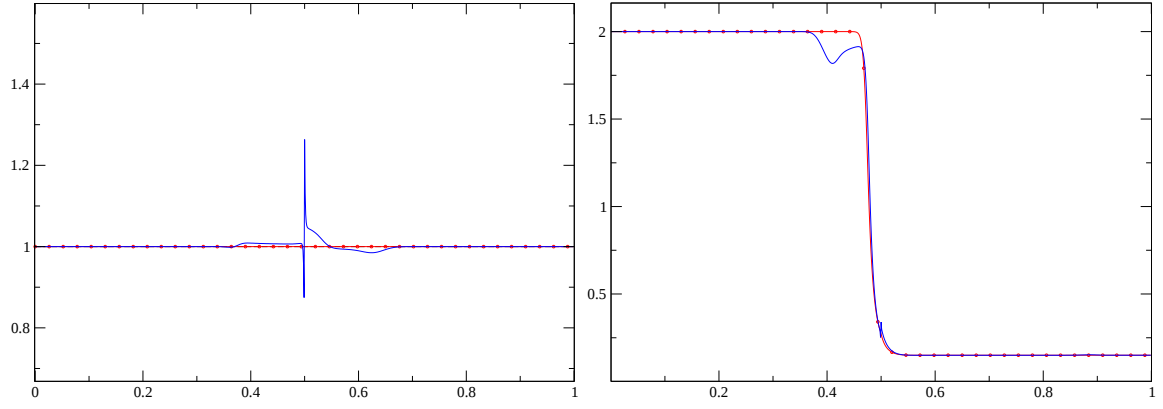


Figure 6. Test 2: density profiles ρ_1, ρ_2 when using schemes R -blue line-, MR -red line with circles-, WBR -black dotted line- on a 1000-cell mesh.

The L^1 norm of the error is plotted in figure 7 when focusing on scheme R .

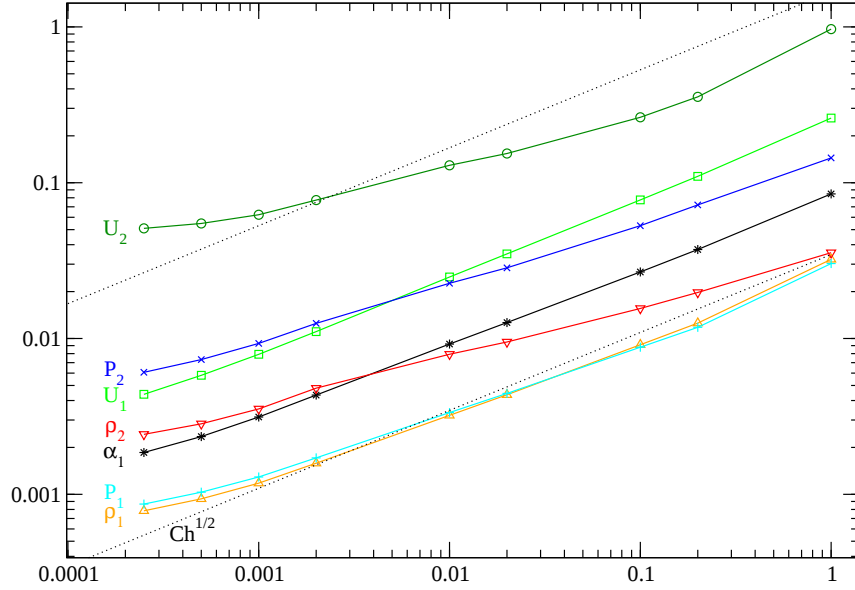


Figure 7. Test 3: L_1 norm of the error for scheme R .

Once again, we may check that the R scheme no longer converges towards the correct solution, which is of course in agreement with the results of test case 2. We emphasize again that the behaviour on the coarser meshes (on the right side in figure 7) is somewhat misleading.

D. Test4: a three-wave pattern

This solution contains two contact waves associated with $\lambda_0 = 0$ and $\lambda_1 = \lambda_5 = U_2$, and one shock wave in the vapour phase corresponding to $\lambda_7 = U_2 + c_2$. The exact initial data is given below:

	state L	state A	state B	state R
ϵ	1	0.6		
α_1	0.95		0.05	
ρ_1	1	0.999190167	0.853058301	
U_1	10	16.6801748	-160.919041	
P_1	100000	99910.922	83960.8032	
ρ_2	0.1	0.0998565629	0.15	0.1
U_2	15	25.0359108		-346.262753
P_2	10000	9979.92457	94534.4211	53175.6119

Still using meshes with 10^2 , $5 \cdot 10^2$, 10^3 , $5 \cdot 10^3$, 10^4 , $5 \cdot 10^4$, 10^5 , $2 \cdot 10^5$ and $4 \cdot 10^5$ cells, we check first that the standard Rusanov scheme does not converge towards the correct solution, and then turn to the *MR* scheme.

Results with *MR* scheme

First we provide in figure 8 results obtained for $\alpha_2 \rho_2$ when computing the test case on a regular mesh with one thousand cells, together with the exact solution. We still consider meshes used in preceeding tests, and errors computed for the *MR* scheme are given in Figure 9 -on the left side-. The crucial point that occurs is that estimations of convergence rates show evidence that the *MR* scheme no longer converges towards the correct solution. This is quite obvious when focusing on the U_2 profile in Figure 9. An approximation of the convergence rate for U_2 on the finer meshes is 0.035. It obviously means that the "static" property 6 is far from being sufficient to guarantee convergence of approximations towards the correct solution.

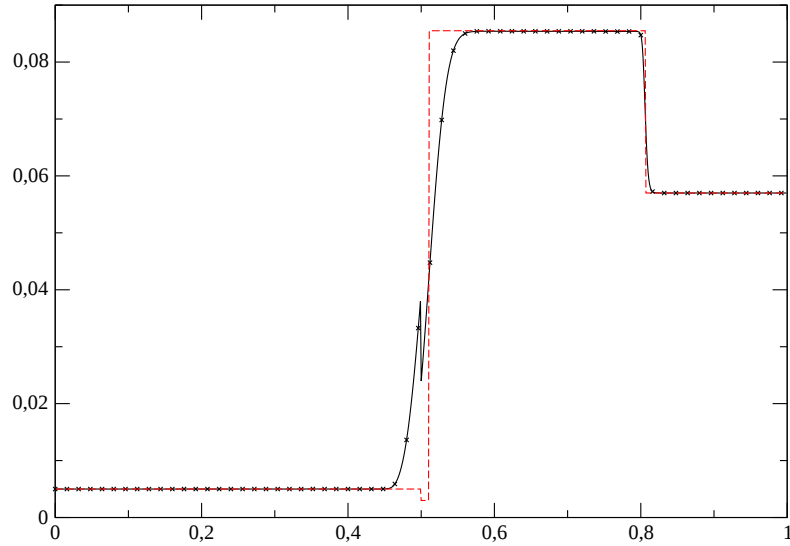


Figure 8. Test 4: mass fraction $\alpha_2 \rho_2$ when using *MR* scheme -black line with crosses- on a 1000-cell mesh, together with the exact solution - red dashed line-.

Results with *WBR* scheme

Using exactly the same meshes and a finer mesh with $8 \cdot 10^5$ cells, it occurs in Figure 9 (on the right side) that convergence towards the correct solution is now recovered with *WBR*. Moreover, we retrieve expected rates of convergence $\beta(\phi)$ that are close to $1/2$, since all components ϕ vary through at least one contact discontinuity in this fourth test case.

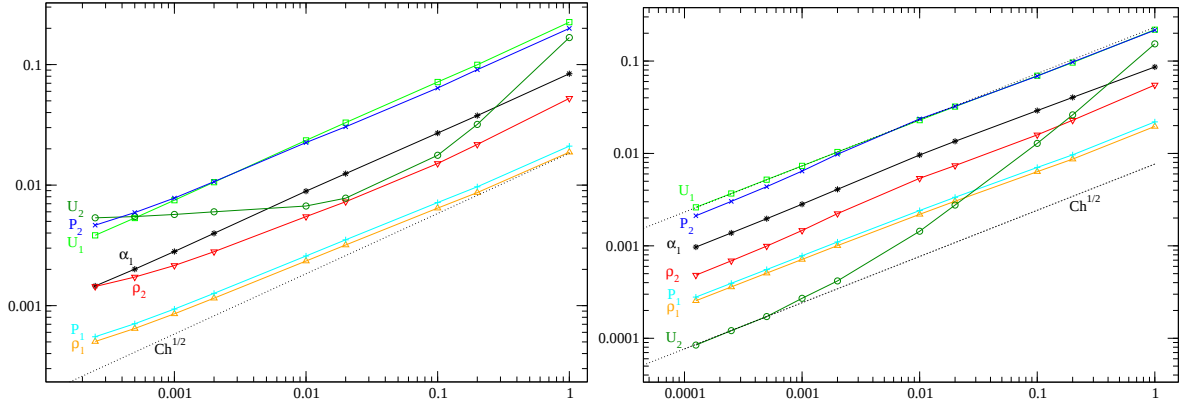


Figure 9. Test 4: L_1 norm of the error for scheme MR (left) and WBR (right) schemes.

	$5 \cdot 10^4$ to 10^5 cells	10^5 to $2 \cdot 10^5$ cells	$2 \cdot 10^5$ to $4 \cdot 10^5$ cells	$4 \cdot 10^5$ to $8 \cdot 10^5$ cells
α_1	0.535	0.521	0.512	0.506
ρ_1	0.495	0.493	0.495	0.496
U_1	0.499	0.495	0.497	0.497
P_1	0.496	0.494	0.496	0.496
ρ_2	0.607	0.562	0.529	0.516
U_2	0.625	0.655	0.505	0.521
P_2	0.607	0.560	0.529	0.516

Local behaviour around the steady interface

We show in figure 10 the behaviour of the discharge $\epsilon m_1 U_1$ around the steady interface $x = 0.5$ when computing the Riemann problem discussed above with MR and WBR schemes, while restricting to a coarse and a rather fine mesh. The WBR scheme provides a reasonable local behaviour around the steady interface, and the amplitude of the reflected wave is indeed much smaller than the one occurring with the MR scheme. Similar remarks hold for $\epsilon m_2 U_2$ and other 0-Riemann invariants.

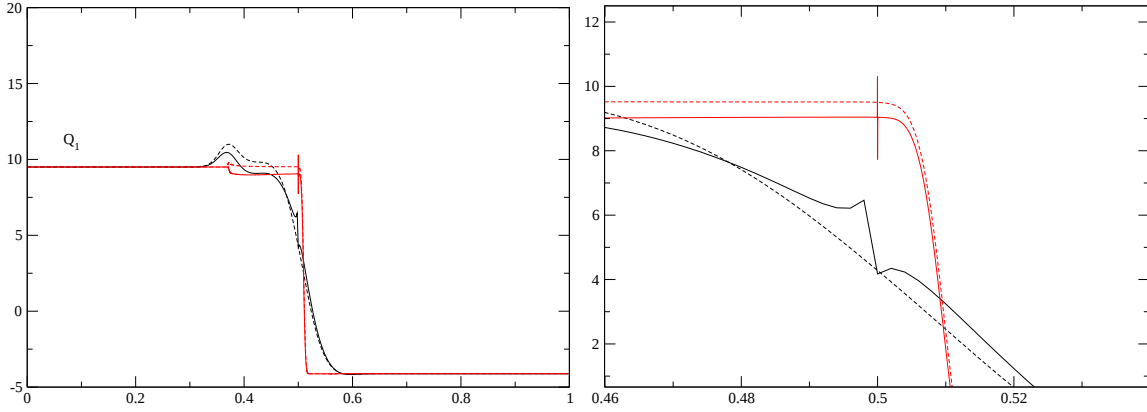


Figure 10. Mean momentum $\epsilon m_1 U_1$ obtained with MR and WBR -dotted line- schemes. The coarse and fine meshes respectively contain 500 -in black- and 50000 -in red- cells. A zoom on $[0.46, 0.54]$ on the right figure provides some more details.

VII. Interaction of fluid waves with the steady interface

We now examine two tests where waves issuing from the free medium propagate towards the porous interface and interact with it. Though we have no analytic solution available in that case, it represents some relevant pattern for industrial applications. The validation of approximations provided by schemes will be evaluated by focusing on the Riemann invariants of the steady wave *computed within each cell*, when the flow is almost steady around the interface. Once again, the CFL number is equal to $1/2$ in all cases.

Fifth test case

This test case corresponds to a rough representation of a loss of coolant accident, where we focus on the propagation of the rarefaction wave that will hit a free/porous interface separating the pipe from the steam generator. The computational domain includes a free region ($\epsilon(x < 0.35) = 1$) on the left side of an interface located at $x = 0.35$, and a porous region ($\epsilon(x > 0.35) = 0.6$) on the right side of the latter interface. The whole computational domain thus corresponds to $x \in [0; 1]$. The pipe is suddenly broken around $x = 0.30$, at the beginning of the computation ($t = 0$). Denoting by L, R the left and right states on both sides of the interface $x = 0.30$, the initial conditions are:

	Left state L	Right state R
ϵ	1	0.6
α_1	0.95	0.05
ρ_1	1	
U_1	0	
P_1	1.10^5	1.10^6
ρ_2	20	
U_2	0	
P_2	1.10^5	1.10^6

Figures 11 and 12 show the behaviour of the Riemann invariants H_1 , H_2 , s_1 and s_2 , when the rarefaction has passed the free/porous interface. The mesh contains 1000 regular cells. Subscript 2 now refers to the water phase. The best results are once again obtained with the *WBR* scheme. Those pertaining to the *MR* scheme are less spurious than those corresponding to the Rusanov scheme, but show again a non-monotone behaviour.

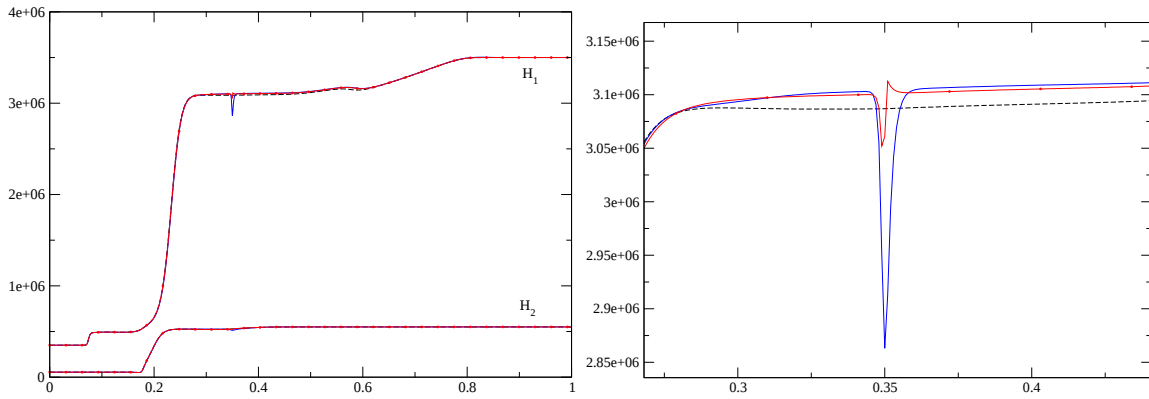


Figure 11. Test case 5: Riemann invariants H_1 and H_2 , using a mesh with 1000 cells. The blue line, the red line with circles and the dotted black line correspond to *R*, *MR* and *WBR* schemes respectively. A zoom around the steady interface is displayed on the right for H_1 .

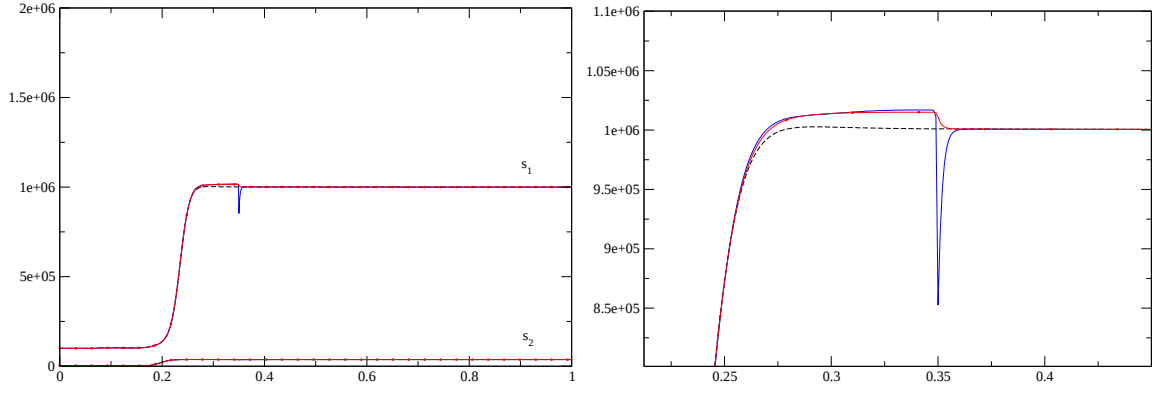


Figure 12. Test case 5: Riemann invariants s_1 and s_2 , using a mesh with 1000 cells. The blue line, the red line with circles and the dotted black line correspond to R , MR and WBR schemes respectively. A zoom around the steady interface is displayed on the right for s_1 .

Sixth test case

The initial conditions for this last test case are given in the table below. The computational domain corresponds to $x \in [0; 1]$. The interface between codes is situated at $x = 0.67$, and the porous medium is still on the right side of this interface. Both phases are at rest at the beginning of the computation, and L, R states denote the initial states on the left and right side of $x = 0.65$ respectively. Results for H_1, H_2, s_1 and s_2 are displayed in figures 13 and 14. These have been plotted after the right-going shock waves and the right-going void fraction contact discontinuity have passed the coupling interface ($x = 0.67$).

	Left state L	Right state R
ϵ	1	0.6
α_1	0.05	0.95
ρ_1	1	
U_1	0	
P_1	1.10^6	1.10^5
ρ_2	20	
U_2	0	
P_2	1.10^6	1.10^5

This last test case confirms that the behaviour of WBR scheme is indeed fair.

VIII. Conclusion

- None among the first two schemes R and MR converges towards the correct solution when refining the mesh, if one computes approximations of solutions in very simple one-dimensional Riemann problems involving distinct values of porosity, such as those introduced in section III. Actually, the continuity that is enforced by the Rusanov scheme seems to inhibit the correct convergence when focusing on models for porous media. This is not due to the complexity inherent to the two-fluid approach, and the poor behaviour of these schemes in the framework of Euler equations in variable cross section flows has already been pointed out in the literature (see²⁷ for instance). However, and to the knowledge of authors, it had never been clearly stated that this drawback was not only annoying for coarse meshes, but also when tackling very fine meshes.
- On the contrary, the WBR scheme, which inherits the spirit of well-balanced schemes combined with the inner stability of Rusanov-like fluxes, provides an extremely simple and useful tool for such computations in porous media. The expected rates of convergence are retrieved, focusing on so-called

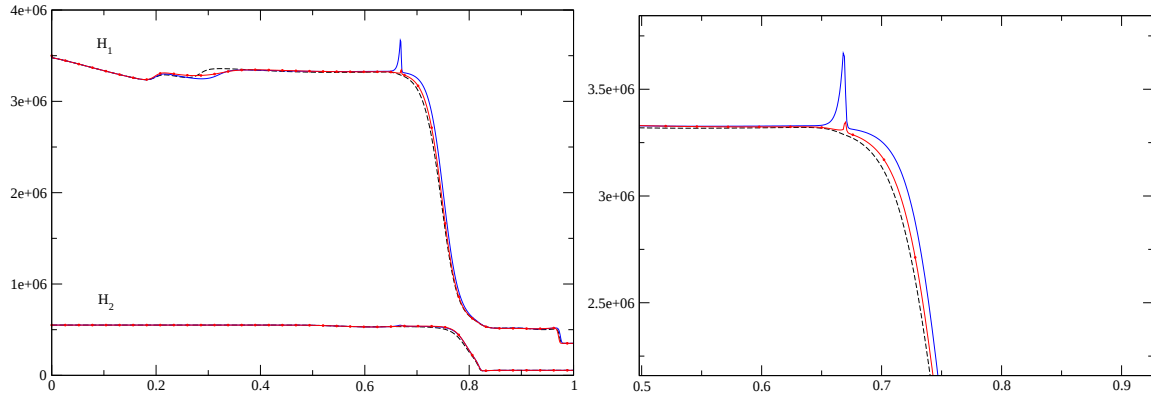


Figure 13. Test case 6: Riemann invariants H_1 and H_2 , using a mesh with 1000 cells. The blue line, the red line with circles and the dotted black line correspond to R , MR and WBR schemes respectively. A zoom around the steady interface is displayed on the right for H_1 .

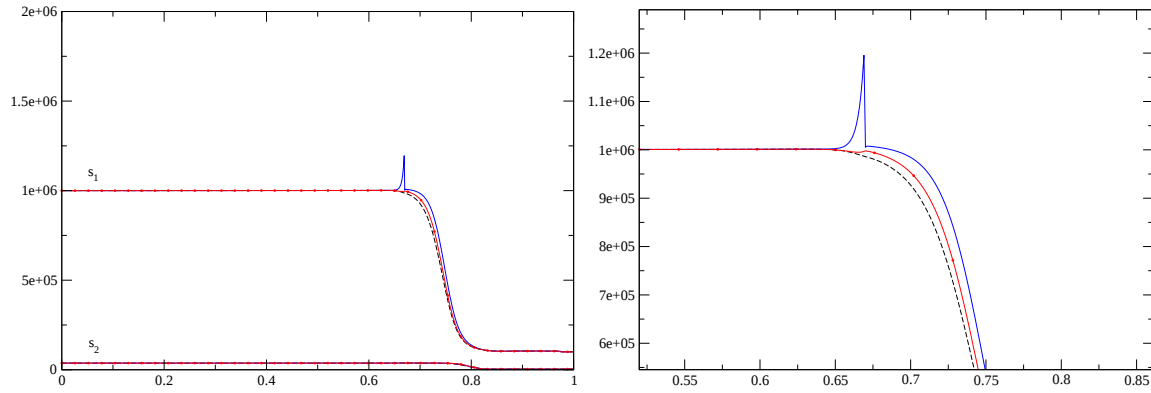


Figure 14. Test case 6: Riemann invariants s_1 and s_2 , using a mesh with 1000 cells. The blue line, the red line with circles and the dotted black line correspond to R , MR and WBR schemes respectively. A zoom around the steady interface is displayed on the right for s_1 .

first-order schemes, and the nice behaviour of the discrete cell-values of Riemann invariants of the standing wave around the free/porous interface renders the scheme quite appealing. We recall that this scheme is inspired by the scheme introduced in²⁷ for Euler equations in variable cross section ducts (see²⁶ too). It also means that the property 6 is far from being sufficient, and that the dynamical well-balanced property 7 enjoyed by WBR , the continuous counterpart of which is property 3, seems mandatory to obtain convergence towards the correct solution.

A straightforward consequence for the NEPTUNE project is that at least one meaningful scheme is available in order to perform the interfacial unsteady coupling of codes that aim at providing approximations of PDEs in free and porous medium respectively.

Among possible improvements and current work in progress in this area, we would like to mention that:

- In order to achieve a better coupling, and more precisely a more relevant treatment of the free/porous interface, we need to provide more physical coupling conditions for momentum equations that might account for the head loss of momentum. This is known to be very tricky, and it is not clear whether direct simulations will *in fine* provide useful tools in practice. A similar remark holds for heat losses through the free/porous interface.

- We also would like to emphasize that an approximate Godunov scheme that inherits a similar well-balanced property may be constructed. This one also makes use of basic ideas introduced by Greenberg and Leroux ⁽²⁰⁾, while substituting the approximate Godunov VFRoe-ncv fluxes introduced in⁶ to the exact Godunov "fluxes" through the cell interfaces, instead of Rusanov fluxes used in the present work. This of course requires using a suitable variable, as achieved for instance in ^{22,12} for shallow water equations with topography and isentropic Euler equations in a porous medium. The main advantage of the latter solver is that its accuracy is increased when compared with the scheme introduced in²⁷. Its extension to the framework of two-phase two-fluid models is currently in progress and seems feasible, and its counterpart for homogeneous flows also seems rather satisfactory ⁽²²⁾.
- The extension to the framework of three phase flows in a porous medium is also feasible, following ²³ for instance.
- The extension of the present WBR scheme to the framework of three-dimensional flows is straightforward (see¹⁴), and it provides satisfactory results, while preserving the basic positivity results given in property 8.

Acknowledgments

We would like to thank Frédéric Archambeau and Thierry Gallouët who kindly accepted to read the initial version of the manuscript, which helped much. This work has been achieved in the framework of the NEPTUNE project, with financial support from CEA (Commissariat à l'Energie Atomique), EDF, IRSN (Institut de Radioprotection et Sureté Nucléaire) and AREVA-NP. Part of the financial support of the first author is provided by ANRT (Association Nationale de la Recherche Technique, Ministère de la Recherche) through a EDF/CIFRE contract, and also by FSE (Fonds Social Européen). All computational facilities were provided by EDF.

IX. Appendix A : "Construction of solutions of the Riemann problem"

We detail here the construction of the solutions used in the main part of the paper. We start with a given state L, and then successively calculate states A, B and R. We assume here that the EOS for each phase is given by:

$$(\gamma_k - 1)\rho_k e_k = P_k$$

A. Given parameters

We assume that the left state $(\epsilon_L, \alpha_{2L}, \rho_{1L}, \rho_{2L}, P_{1L}, P_{2L}, U_{1L}, U_{2L})$ is given (with $(U_2)_L > 0$), and we also choose ϵ_R and α_{2R} , so that : $\epsilon_L \epsilon_R \neq 0$, $\alpha_{2L} \alpha_{2R} \neq 0$ and $\alpha_{1L} \alpha_{1R} \neq 0$.

B. Construction of the first intermediate state A :

We first obviously get :

$$\epsilon_A = \epsilon_R$$

Since states L and A are separated by the steady LD wave associated with $\lambda_0 = 0$, their connection is thus ensured by Riemann invariants $I_n^0(W)$, $n = 1, 2, \dots, 7$.

- Using Riemann invariant $I_1^0(W)$ provides :

$$\alpha_{2A} = \alpha_{2L}$$

due to the fact that $U_{2A} > 0$ (see below).

- Riemann invariants $I_3^0(W)$ and $I_6^0(W)$ enable to write :

$$U_{1A} = \frac{(\epsilon_L)(\rho_{1L})(U_{1L})}{(\epsilon_A)(\rho_{1A})} \quad ; \quad U_{2A} = \frac{(\epsilon_L)(\rho_{2L})(U_{2L})}{(\epsilon_A)(\rho_{2A})}$$

Moreover, using Riemann invariants $I_2^0(W)$ and $I_5^0(W)$, we can express both pressures P_{1_A} and P_{2_A} in terms of ρ_{1_A} and ρ_{2_A} respectively:

$$P_{1_A} = P_{1_L} \left(\frac{\rho_{1_L}}{\rho_{1_A}} \right)^{-\gamma_1} \quad ; \quad P_{2_A} = P_{2_L} \left(\frac{\rho_{2_L}}{\rho_{2_A}} \right)^{-\gamma_2}$$

Hence, substituting all these expressions in Riemann invariants $I_4^0(W)$ and $I_7^0(W)$, we need to find solutions of $(g_A)_k(X) = 0$ where :

$$(g_A)_k(X) = \frac{\gamma_k}{\gamma_k - 1} s_{k_L} \left(X^{\gamma_k - 1} - \rho_{k_L}^{\gamma_k - 1} \right) + \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\epsilon_L}{\epsilon_R} \right)^2 \left(\frac{\rho_{k_L}}{X} \right)^2 - 1 \right) U_{k_L}^2$$

wrt to ρ_{k_A} .

If $U_{k_L} = 0$, $(g_A)_k(X) = 0$ admits a unique solution: $\rho_{k_A} = \rho_{k_L}$. Otherwise, the function $(g_A)_k(X)$ is decreasing in $]0, X_{min_A, k}]$, and then increasing in $]X_{min_A, k}, +\infty[$, setting :

$$X_{min_A, k} = \left(\frac{U_{k_L}^2 \left(\frac{\epsilon_L}{\epsilon_R} \right)^2 (\rho_{k_L})^2}{\gamma_k (s_k)_L} \right)^{\frac{1}{\gamma_k + 1}}$$

and we also have $\lim(g_A)_k(X) = +\infty$ when X tends to 0 (or $+\infty$). Thus, $(g_A)_k(X) = 0$ may admit two solutions in the general case, no solution if $(g_A)_k(X_{min_A, k}) > 0$.

Once ρ_{k_A} has been calculated, we may use initial expressions to deduce U_{k_A} and P_{k_A} , for $k = 1, 2$.

In practice, for the test cases defined in the main section, we have used the solution ρ_{k_A} that has the same sonic regime than ρ_{k_L} .

C. Construction of the intermediate state B :

States A and B are separated by the contact discontinuity associated with $\lambda_1 = V_I = U_2$. The jump of α_2 is located here, so that : $\alpha_{2_B} = \alpha_{2_R}$.

The remaining components of the intermediate state B are calculated through Riemann invariants $I_n^1(W)$, $n = 1, 2, \dots, 6$.

- First of all, by virtue of $I_1^1(W)$, we obviously have $\epsilon_B = \epsilon_A = \epsilon_R$.

Owing to $I_3^1(W)$, we know that $U_{2_B} = U_{2_A}$. Moreover, $I_4^1(W)$ provides U_{1_B} in terms of ρ_{1_B} :

$$U_{1_B} = \frac{m_{1_A}}{m_{1_B}} (U_{1_A} - U_{2_A}) + U_{2_A}$$

and $I_2^1(W)$ enforces: $P_{1_B} = P_{1_A} \left(\frac{\rho_{1_A}}{\rho_{1_B}} \right)^{-\gamma_1}$

Eventually, the expression $I_5^1(W)$ enables to calculate P_{2_B} as:

$$P_{2_B} = \frac{1}{\alpha_{2_R}} (\alpha_{1_L} P_{1_A} + \alpha_{2_L} P_{2_A} + m_{1_A} U_{1_A} (U_{1_A} - U_{2_A}) - \alpha_{1_B} P_{1_B} - m_{1_B} U_{1_B} (U_{1_B} - U_{2_B}))$$

Hence, substituting all these expressions in the last Riemann invariant $I_6^1(W)$, we conclude that ρ_{1B} must be a solution of $g_B(X) = 0$ where:

$$g_B(X) = \frac{\gamma_1}{\gamma_1 - 1} s_{1A} \left(X^{\gamma_1 - 1} - \rho_{1A}^{\gamma_1 - 1} \right) + \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\alpha_{1L}}{\alpha_{1R}} \right)^2 \left(\frac{\rho_{1A}}{X} \right)^2 - 1 \right) (U_{1A} - U_{2A})^2$$

- Once again, if $U_{1A} = U_{2A}$, there exists only one solution $\rho_{1B} = \rho_{1A}$
- Otherwise, we need to solve $g_B(X) = 0$. The procedure is exactly the same as the one discussed in the previous section, where we solve $g_A(X) = 0$ to calculate state A.
- Obviously, owing to the structure of the LD field associated with $\lambda_1 = V_I = U_2$, we need to impose the value of ρ_{2B} . Thus, state B is completely determined.

D. Construction of the right state R :

We have assumed that states B and R are separated by a GNL wave associated with $\lambda_7 = U_2 + c_2$. We also recall that ϵ_R and α_R have already been set.

This wave is a "ghost" wave for variables in phase 1. Thus:

$$\bullet \quad \rho_{1R} = \rho_{1B} \quad ; \quad U_{1R} = U_{1B} \quad ; \quad P_{1R} = P_{1B}$$

Turning then to components in phase 2, we face a single-phase problem. Thus we get:

- $\rho_{2R} = \frac{1}{z_R} \rho_{2B}$ where $z_R \gtrless 1$ must be set, so that $\lambda_7 = U_2 + c_2$ is a shock wave.
- $U_{2R} = U_{2B} - c_{2R} \left(\frac{(\beta_2 + 1)(z_R - 1)^2}{\gamma_2 z_R (\beta_2 - z_R)} \right)^{\frac{1}{2}}$ where $\beta_2 = \frac{\gamma_2 + 1}{\gamma_2 - 1}$ and $c_{2R} = \left(\frac{\gamma_2 P_{2R}}{\rho_{2R}} \right)^{\frac{1}{2}}$
- $P_{2R} = P_{2B} \frac{\beta_2 - z_R}{\beta_2 z_R - 1}$

X. Appendix B : "Main properties of schemes R, MR, WBR"

This appendix is devoted to the proofs of main properties of section V.

A. Property 5

In a free medium, schemes R , MR and WBR are identical. Thus, if $\epsilon_i = \epsilon_0$ for all i , we check it for scheme R . Assume that for given n , $(U_k)_i^n = U_0$ and $(P_k)_i^n = P_0$ for all i ($k = 1, 2$). We prove now that $(U_1)_i^{n+1} = (U_2)_i^{n+1} = U_0$ and also: $(P_1)_i^{n+1} = (P_2)_i^{n+1} = P_0$, if $\epsilon_i = \epsilon_0$.

The discrete equations that update $(\alpha_k)_i^{n+1}, (m_k)_i^{n+1}, (m_k U_k)_i^{n+1}$ are:

$$\begin{aligned} h_i \left((\alpha_k)_i^{n+1} - (\alpha_k)_i^n \right) &+ \Delta t^n U_0 \left((\overline{\alpha k})_{i+1/2}^n - (\overline{\alpha k})_{i-1/2}^n \right) \\ &- \frac{1}{2} \Delta t^n \left(r_{i+1/2}^n ((\alpha_k)_{i+1}^n - (\alpha_k)_i^n) - r_{i-1/2}^n ((\alpha_k)_i^n - (\alpha_k)_{i-1}^n) \right) = 0 \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} h_i \epsilon_0 \left((m_k)_i^{n+1} - (m_k)_i^n \right) &+ \Delta t^n \epsilon_0 U_0 \left((\overline{m k})_{i+1/2}^n - (\overline{m k})_{i-1/2}^n \right) \\ &- \frac{1}{2} \Delta t^n \epsilon_0 \left(r_{i+1/2}^n ((m_k)_{i+1}^n - (m_k)_i^n) - r_{i-1/2}^n ((m_k)_i^n - (m_k)_{i-1}^n) \right) = 0 \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} h_i \epsilon_0 \left((m_k U_k)_i^{n+1} - (m_k U_k)_i^n \right) &+ \Delta t^n \epsilon_0 (U_0)^2 \left((\overline{m k})_{i+1/2}^n - (\overline{m k})_{i-1/2}^n \right) \\ &- \frac{1}{2} \Delta t^n \epsilon_0 U_0 \left(r_{i+1/2}^n ((m_k)_{i+1}^n - (m_k)_i^n) - r_{i-1/2}^n ((m_k)_i^n - (m_k)_{i-1}^n) \right) = 0 \end{aligned} \quad (36)$$

Multiplying (35) by U_0 , and then subtracting the result to the discrete equation of energy in phase k , and using $(U_k)_i^n = U_0$, we obtain:

$$(m_k)_i^{n+1} ((U_k)_i^{n+1} - U_0) = 0$$

which guarantees that for all i :

$$(U_k)_i^{n+1} = U_0 \quad (37)$$

Using now (37), multiplying (36) by a factor $\frac{U_0}{2}$, and subtracting the resulting equation to (36) leads to:

$$\begin{aligned} h_i \epsilon_0 ((m_k e_k)_i^{n+1} - (m_k e_k)_i^n) &+ \Delta t^n \epsilon_0 U_0 \left((\overline{m_k e_k})_{i+1/2}^n - (\overline{m_k e_k})_{i-1/2}^n \right) \\ &- \frac{1}{2} \Delta t^n \epsilon_0 \left(r_{i+1/2}^n ((m_k e_k)_{i+1}^n - (m_k e_k)_i^n) - r_{i-1/2}^n ((m_k e_k)_i^n - (m_k e_k)_{i-1}^n) \right) = 0 \end{aligned} \quad (38)$$

We now need to introduce the EOS that takes the form: $\rho_k e_k(P_k, \rho_k) = a_{k,0} \rho_k + g_k(P_k)$ in each phase k . Since $(P_k)_i^n = P_0$ for all i , this implies $(g_k(P_k))_i^n = g_k(P_0)$. Thus, replacing $m_k e_k$ by $a_{k,0} m_k + \alpha_k g_k(P_k)$ in (38), subtracting $a_{k,0}$ times (35) and also $\epsilon_0 g_k(P_0)$ times (34) to the discrete equation of energy (38), we get:

$$(\alpha_k)_i^{n+1} ((g_k(P_k))_i^{n+1} - g_k(P_0)) = 0$$

which clearly implies that for all i :

$$(P_k)_i^{n+1} = P_0 \quad (39)$$

This completes the proof of property 5, which means that the three schemes R , MR et WBR preserve the discrete form of solution S_1 on any mesh.

B. Property 6

1. Scheme MR preserves the discrete form of the basic solution S_2 on any mesh

We assume now that $(U_1)_i^n = (U_2)_i^n = 0$ and $(P_1)_i^n = (P_2)_i^n = P_0$. We successively prove that $(U_1)_i^{n+1} = (U_2)_i^{n+1} = 0$ and $(P_1)_i^{n+1} = (P_2)_i^{n+1} = P_0$, whatever ϵ_i is.

Using initial data, the discrete forms of the void fraction/partial mass/momentum take the form:

$$h_i ((\alpha_k)_i^{n+1} - (\alpha_k)_i^n) - \frac{1}{2} \Delta t^n \left(r_{i+1/2}^n \frac{\hat{\epsilon}_{i+1/2}}{\epsilon_i} ((\alpha_k)_{i+1}^n - (\alpha_k)_i^n) - r_{i-1/2}^n \frac{\hat{\epsilon}_{i-1/2}}{\epsilon_i} ((\alpha_k)_i^n - (\alpha_k)_{i-1}^n) \right) = 0 \quad (40)$$

$$h_i \epsilon_i ((m_k)_i^{n+1} - (m_k)_i^n) - \frac{1}{2} \Delta t^n \left(r_{i+1/2}^n \hat{\epsilon}_{i+1/2} ((m_k)_{i+1}^n - (m_k)_i^n) - r_{i-1/2}^n \hat{\epsilon}_{i-1/2} ((m_k)_i^n - (m_k)_{i-1}^n) \right) = 0 \quad (41)$$

Owing to the fact that both $(P_k)_i^n = P_0$ and $(U_k)_i^n = 0$, we also get:

$$h_i \epsilon_i ((m_k U_k)_i^{n+1} - (m_k U_k)_i^n) = 0 \quad (42)$$

and thus :

$$(U_k)_i^{n+1} = 0 \quad (43)$$

Still using the EOS such that: $\rho_k e_k(P_k, \rho_k) = a_{k,0} \rho_k + g_k(P_k)$, we get: $m_k e_k = a_{k,0} m_k + \alpha_k g_k(P_k)$ for $k = 1, 2$. Thus, multiplying (41) by $a_{k,0}$, and subtracting the resulting equation to the energy equation, we get:

$$\begin{aligned} h_i \epsilon_i ((\alpha_k g_k(P_k))_i^{n+1} - g_k(P_0) (\alpha_k)_i^n) \\ - \frac{1}{2} \Delta t^n g_k(P_0) \left(r_{i+1/2}^n \hat{\epsilon}_{i+1/2} ((\alpha_k)_{i+1}^n - (\alpha_k)_i^n) - r_{i-1/2}^n \hat{\epsilon}_{i-1/2} ((\alpha_k)_i^n - (\alpha_k)_{i-1}^n) \right) = 0 \end{aligned} \quad (44)$$

Hence, multiplying (40) by $\epsilon_i g_k(P_0)$ and subtracting the result to (44), we get:

$$(\alpha_k)_i^{n+1} ((g_k(P_k))_i^{n+1} - g_k(P_0)) = 0$$

which provides the expected result for all i :

$$(P_k)_i^{n+1} = P_0 \quad (45)$$

This completes the proof for scheme MR .

2. Scheme WBR preserves the discrete form of the basic solution S_2 on any mesh

The scheme WBR ensures that we have: $(\alpha_2)_{i+1/2,-}^n = (\alpha_2)_{i+1}^n$, $(\alpha_2)_{i-1/2,+}^n = (\alpha_2)_{i-1}^n$. Moreover, due to the fact that $(U_k)_i^n = 0$, we get : $(U_k)_{i+1/2,-}^n = (U_k)_{i-1/2,+}^n = 0$, and thus: $(\rho_k)_{i+1/2,-}^n = (\rho_k)_{i+1}^n$, $(\rho_k)_{i-1/2,+}^n = (\rho_k)_{i-1}^n$, together with: $(s_k)_{i+1/2,-}^n = (s_k)_{i+1}^n$, $(s_k)_{i-1/2,+}^n = (s_k)_{i-1}^n$. As a consequence, we get: $(P_k)_{i+1/2,-}^n = (P_k)_{i+1}^n = P_0$, and $(P_k)_{i-1/2,+}^n = (P_k)_{i-1}^n = P_0$. Hence, the discrete equations for the void fraction, the partial masses and the momentum can be simplified, which yields:

$$h_i \left((\alpha_k)_i^{n+1} - (\alpha_k)_i^n \right) - \frac{1}{2} \Delta t^n \left((r_{WB})_{i+1/2}^n ((\alpha_k)_{i+1}^n - (\alpha_k)_i^n) - (r_{WB})_{i-1/2}^n ((\alpha_k)_i^n - (\alpha_k)_{i-1}^n) \right) = 0 \quad (46)$$

$$h_i \left((m_k)_i^{n+1} - (m_k)_i^n \right) - \frac{1}{2} \Delta t^n \left((r_{WB})_{i+1/2}^n ((m_k)_{i+1}^n - (m_k)_i^n) - (r_{WB})_{i-1/2}^n ((m_k)_i^n - (m_k)_{i-1}^n) \right) = 0 \quad (47)$$

$$h_i \left((m_k U_k)_i^{n+1} - (m_k U_k)_i^n \right) = 0 \quad (48)$$

and eventually:

$$(U_k)_i^{n+1} = 0 \quad (49)$$

We still use the EOS in agreement with: $\rho_k e_k(P_k, \rho_k) = a_{k,0} \rho_k + g_k(P_k)$. Initial conditions are such that the discrete energy equation reduces to:

$$h_i \left((m_k e_k)_i^{n+1} - (m_k e_k)_i^n \right) - \frac{1}{2} \Delta t^n \left((r_{WB})_{i+1/2}^n ((m_k e_k)_{i+1}^n - (m_k e_k)_i^n) - (r_{WB})_{i-1/2}^n ((m_k e_k)_i^n - (m_k e_k)_{i-1}^n) \right) = 0 \quad (50)$$

Once again, we multiply (47) by $a_{k,0}$ (respectively (46) by $g_k(P_0)$), and subtract both to (50). We get:

$$(\alpha_k)_i^{n+1} \left((g_k(P_k))_i^{n+1} - g_k(P_0) \right) = 0$$

which implies that for all i :

$$(P_k)_i^{n+1} = P_0$$

C. Property 7

We assume that $\epsilon_L \neq \epsilon_R$, and also that the initial condition (W_L, W_R) of the Riemann problem complies with :

$$I_k^0(W_L) = I_k^0(W_R) \quad (51)$$

The initial condition complies with:

$$\begin{cases} W_i^n = W_L & \text{pour } i \leq j \\ W_i^n = W_R & \text{pour } i > j \end{cases} \quad (52)$$

We wish to prove that $W_i^{n+1} = W_i^n$ whatever i is. We only focus on the interface separating cells j and $j+1$.

The assumption (51) implies that:

$$(\alpha_k)_j^n = (\alpha_k)_{j+1}^n \quad (53)$$

and this is of course true for other cells so that $(\alpha_k)_{i-1}^n = (\alpha_k)_i^n = (\alpha_k)_{i+1}^n$. As a consequence, we have $(\alpha_2)_{j+1/2,-}^n = (\alpha_2)_{j+1}^n = (\alpha_2)_j^n$, and $(\alpha_2)_{j-1/2,+}^n = (\alpha_2)_{j-1}^n = (\alpha_2)_j^n$. The discrete equation for the void fraction thus yields:

$$(\alpha_k)_i^{n+1} = (\alpha_k)_i^n \quad \forall i \quad (54)$$

The WBR scheme also enforces that:

$$(\epsilon \alpha_k \rho_k U_k)_{j+1/2,-}^n = (\epsilon \alpha_k \rho_k U_k)_{j+1}^n \quad (55)$$

and thus:

$$(\epsilon)_j (\alpha_k \rho_k U_k)_{j+1/2,-}^n = (\epsilon)_{j+1} (\alpha_k \rho_k U_k)_{j+1}^n \quad (56)$$

The assumption (51) enables to state that:

$$\epsilon_{j+1} (\alpha_k \rho_k U_k)_{j+1}^n = \epsilon_j (\alpha_k \rho_k U_k)_j^n \quad (57)$$

Relations (56), (57) and (54) lead to:

$$(\rho_k)_{j+1/2,-}^n (U_k)_{j+1/2,-}^n = (\rho_k)_j^n (U_k)_j^n \quad (58)$$

A similar work with Riemann invariants s_k and h_k gives:

$$(s_k)_{j+1/2,-}^n = (s_k)_{j+1}^n = (s_k)_j^n \quad (59)$$

$$h_k((\rho_k)_{j+1/2,-}^n, (U_k)_{j+1/2,-}^n, (s_k)_{j+1/2,-}^n) = h_k((\rho_k)_{j+1}^n, (U_k)_{j+1}^n, (s_k)_{j+1}^n) = h_k((\rho_k)_j^n, (U_k)_j^n, (s_k)_j^n) \quad (60)$$

Since the scheme *WBR* retains the solution which is in the same sonic regime, we may conclude, using constraints (59) and (60), that:

$$\begin{cases} (\rho_k)_{j+1/2,-}^n = (\rho_k)_j^n \\ (U_k)_{j+1/2,-}^n = (U_k)_j^n \end{cases} \quad (61)$$

Using a similar process, we also have on the left side of cell j :

$$\begin{cases} (\rho_k)_{j-1/2,+}^n = (\rho_k)_j^n \\ (U_k)_{j-1/2,+}^n = (U_k)_j^n \end{cases} \quad (62)$$

and

$$(s_k)_{j-1/2,+}^n = (s_k)_j^n \quad (63)$$

Inserting previous results (59), (61), (62) and (63) in the scheme *WBR* implies (for all i):

$$\begin{cases} (m_k)_i^{n+1} = (m_k)_i^n \\ (m_k U_k)_i^{n+1} = (m_k U_k)_i^n \\ (E_k)_i^{n+1} = (E_k)_i^n \end{cases} \quad (64)$$

Hence *WBR* complies with property 7.

D. Property 8

1. *R* scheme

Starting with (18) we may rewrite it as:

$$\begin{aligned} (\alpha_2)_i^{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t^n}{2h_i} (r_{i+1/2}^n + r_{i-1/2}^n)\right) (\alpha_2)_i^n &+ \frac{\Delta t^n}{2h_i} (r_{i+1/2}^n - (V_I)_i^n) (\alpha_2)_{i+1}^n \\ &+ \frac{\Delta t^n}{2h_i} (r_{i-1/2}^n + (V_I)_i^n) (\alpha_2)_{i-1}^n \end{aligned} \quad (65)$$

If the following CFL constraint holds:

$$\frac{\Delta t^n}{2h_i} (r_{i+1/2}^n + r_{i-1/2}^n) \leq 1 \quad \forall i \quad (66)$$

the Rusanov scheme *R* obviously preserves positive values for α_2 . Moreover, noting that (65) remains unchanged when changing α_2 into $1 - \alpha_2$, we also conclude that α_1 remains positive under the same CFL condition. Eventually, starting from (19) and using numerical flux definition (20), discrete values of m_k comply with:

$$\begin{aligned} (m_k)_i^{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t^n}{2h_i} (r_{i+1/2}^n + r_{i-1/2}^n)\right) (m_k)_i^n &+ \frac{\Delta t^n}{2h_i} \frac{\epsilon_{i+1}}{\epsilon_i} (r_{i+1/2}^n - (U_k)_{i+1}^n) (m_k)_{i+1}^n \\ &+ \frac{\Delta t^n}{2h_i} \frac{\epsilon_{i-1}}{\epsilon_i} (r_{i-1/2}^n + (U_k)_{i-1}^n) (m_k)_{i-1}^n \end{aligned} \quad (67)$$

Since $(m_k)_i^n > 0$ for all i , partial masses also remain positive provided that the CFL condition (66) holds.

2. MR scheme

We assume here that: $(\hat{\epsilon})_{i+1/2} = \max(\epsilon_i, \epsilon_{i+1})$. Following (22), the governing equation for the void fraction α_2 in scheme *MR* reads:

$$(\alpha_2)_i^{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t^n}{2h_i} \left(\frac{(\hat{\epsilon})_{i+1/2}}{\epsilon_i} r_{i+1/2}^n + \frac{(\hat{\epsilon})_{i-1/2}}{\epsilon_i} r_{i-1/2}^n \right)\right) (\alpha_2)_i^n + \frac{\Delta t^n}{2h_i} \left(\frac{(\hat{\epsilon})_{i+1/2}}{\epsilon_i} r_{i+1/2}^n - (V_I)_i^n \right) (\alpha_2)_{i+1}^n + \frac{\Delta t^n}{2h_i} \left(\frac{(\hat{\epsilon})_{i-1/2}}{\epsilon_i} r_{i-1/2}^n + (V_I)_i^n \right) (\alpha_2)_{i-1}^n \quad (68)$$

and the counterpart for the partial mass m_k is:

$$(m_k)_i^{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t^n}{2h_i} \left(\frac{(\hat{\epsilon})_{i+1/2}}{\epsilon_i} r_{i+1/2}^n + \frac{(\hat{\epsilon})_{i-1/2}}{\epsilon_i} r_{i-1/2}^n \right)\right) (m_k)_i^n + \frac{\Delta t^n}{2h_i} \frac{(\epsilon)_{i+1}}{(\epsilon)_i} \left(\frac{(\hat{\epsilon})_{i+1/2}}{\epsilon_{i+1}} r_{i+1/2}^n - (U_k)_{i+1}^n \right) (m_k)_{i+1}^n + \frac{\Delta t^n}{2h_i} \frac{(\epsilon)_{i-1}}{(\epsilon)_i} \left(\frac{(\hat{\epsilon})_{i-1/2}}{\epsilon_{i-1}} r_{i-1/2}^n + (U_k)_{i-1}^n \right) (m_k)_{i-1}^n \quad (69)$$

Owing to inequalities $1 \leq \frac{(\hat{\epsilon})_{i+1/2}}{\epsilon_{i+1}}$ and $1 \leq \frac{(\hat{\epsilon})_{i+1/2}}{\epsilon_i}$, the CFL condition:

$$\frac{\Delta t^n}{2h_i} \left(\frac{(\hat{\epsilon})_{i+1/2}}{\epsilon_i} r_{i+1/2}^n + \frac{(\hat{\epsilon})_{i-1/2}}{\epsilon_i} r_{i-1/2}^n \right) \leq 1 \quad \forall i \quad (70)$$

guarantees that both $(\alpha_2)_i^{n+1}$ and $(m_k)_i^{n+1}$ remain positive, assuming that associated initial values are positive. A similar remark as made above enables to conclude that $(\alpha_2)_i^{n+1} \leq 1$.

3. WBR scheme

We recall first that $\max(|(U_k)_{i+1/2,-}^n|, |(U_k)_{i+1/2,+}^n|) \leq (r_{WB})_{i+1/2}^n$. The governing equation for the discrete values of α_2 is exactly the same as the one occurring in the *R* scheme. Thus, the CFL condition is the same as above and reads:

$$\frac{\Delta t^n}{2h_i} ((r_{WB})_{i+1/2}^n + (r_{WB})_{i-1/2}^n) \leq 1 \quad \forall i \quad (71)$$

We turn now to the discrete partial masses. Starting with (26) and using numerical fluxes of *WBR* as defined in (27), m_k satisfies:

$$(m_k)_i^{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t^n}{2h_i} ((r_{WB})_{i+1/2}^n + (r_{WB})_{i-1/2}^n)\right) (m_k)_i^n + \frac{\Delta t^n}{2h_i} \left((r_{WB})_{i+1/2}^n - (U_k)_{i+1/2,-}^n \right) (\alpha_k)_{i+1}^n (\rho_k)_{i+1/2,-}^n + \frac{\Delta t^n}{2h_i} \left((r_{WB})_{i-1/2}^n + (U_k)_{i-1/2,+}^n \right) (\alpha_k)_{i-1}^n (\rho_k)_{i-1/2,+}^n \quad (72)$$

Owing to the definition of $(r_{WB})_{i+1/2}^n$, $(m_k)_i^{n+1}$ is clearly a convex combination of the discrete partial mass $(m_k)_i^n$, and discrete densities $(\rho_k)_{i+1/2,-}^n$ and $(\rho_k)_{i-1/2,+}^n$, which are positive, provided that:

$$\frac{\Delta t^n}{2h_i} ((r_{WB})_{i+1/2}^n + (r_{WB})_{i-1/2}^n) \leq 1 \quad (73)$$

XI. Appendix C : Computing the interface states of WBR scheme

We first provide below the main guidelines to compute the interface state $Z_{i+1/2,-}^n$, assuming of course that $\epsilon_i \epsilon_{i+1} \neq 0$. Components of $Z_{i+1/2,-}^n$ should agree with :

$$Inv_m^0(Z_{i+1/2,-}^n, \epsilon_i) = Inv_m^0(Z_{i+1}^n, \epsilon_{i+1})$$

As a consequence, we have $(\alpha_k)_{i+1/2,-}^n = (\alpha_k)_{i+1}^n$, $(s_k)_{i+1/2,-}^n = (s_k)_{i+1}^n$ and:

$$\begin{aligned} \epsilon_i(\alpha_k)_{i+1/2,-}^n(\rho_k)_{i+1/2,-}^n(U_k)_{i+1/2,-}^n &= \epsilon_{i+1}(\alpha_k)_{i+1}^n(\rho_k)_{i+1}^n(U_k)_{i+1}^n \\ 2h_k((s_k)_{i+1/2,-}^n, (\rho_k)_{i+1/2,-}^n) + ((U_k)_{i+1/2,-}^n)^2 &= 2h_k((s_k)_{i+1}^n, (\rho_k)_{i+1}^n) + ((U_k)_{i+1}^n)^2 \end{aligned}$$

where : $\rho_k h_k(s_k, \rho_k) = \rho_k e_k(P_k(s_k, \rho_k), \rho_k) + P_k(s_k, \rho_k)$. Setting as the main unknown $X = (\rho_k)_{i+1/2,-}^n$, and substituting in the last equation, one needs to solve :

$$\psi_{i+1/2,-}^n(X) = 0 \quad (74)$$

where :

$$\psi_{i+1/2,-}^n(X) \stackrel{\text{def}}{=} 2(h_k((s_k)_{i+1}^n, X) - h_k((s_k)_{i+1}^n, (\rho_k)_{i+1}^n)) + ((U_k)_{i+1}^n)^2 \left(\frac{(\epsilon_{i+1}(\rho_k)_{i+1}^n)^2}{(\epsilon_i X)^2} - 1 \right) \quad (75)$$

The solution is obviously $X = (\rho_k)_{i+1}^n$ when $\epsilon_i = \epsilon_{i+1}$. If $\epsilon_i \neq \epsilon_{i+1}$, we proceed as follows:

- If $(U_k)_{i+1}^n = 0$, the solution of (74) is $X = (\rho_k)_{i+1}^n$.
- Otherwise, one first computes $X_{min} > 0$ solution of :

$$X_{min}^3 (\partial_{\rho_k}(h_k(s_k, \rho_k)))((s_k)_{i+1}^n, X_{min}) = \left(\frac{(U_k)_{i+1}^n \epsilon_{i+1} (\rho_k)_{i+1}^n}{\epsilon_i} \right)^2 > 0 \quad (76)$$

The following two possibilities arise:

- Either:

$$\psi_{i+1/2,-}^n(X_{min}) > 0$$

In that case, (74) has no solution. The computation is stopped. Another alternative consists in setting the solution to X_{min} .

- Otherwise, the equation (74) admits two solutions $X^- \in]0, X_{min}]$ and $X^+ \in [X_{min}, +\infty[$. The final solution is $X = X^-$ if $(\rho_k)_{i+1}^n \leq X_{min}$, and $X = X^+$ if $X_{min} \leq (\rho_k)_{i+1}^n$.

$Z_{i+1/2,+}^n$ is obtained with a similar way, using $(\rho_k)_i^n$ to determine the admissible branch of solutions.

References

- ⁰ AMBROSO A., CHALONS C., COQUEL F., GODLEWSKI E., LAGOUTIÈRE F., RAVIART P. A., SEGUIN N., Working group on the interfacial coupling of models, <http://www.ann.jussieu.fr/groupe/cea>.
- ¹ ANDRIANOV N., WARNECKE G., "the Riemann problem for the Baer-Nunziato two-phase flow model " *J. Comput. Physics*, vol. 195, pp. 434-464, 2004.
- ² AUDUSSE E., BOUCHUT F., BRISTEAU M.O., KLEIN R., PERTHAME B., "A fast and stable well-balanced scheme with hydrodynamic reconstruction for shallow water flows" *SIAM J. Sci. Comput.*, vol. 25, pp. 2050-2065, 2004.
- ³ BAER M.R., NUNZIATO J.W., "A two-phase mixture theory for the deflagration to detonation transition (DDT) in reactive granular materials", *Int. J. Multiphase Flow*, vol. 12(6), pp. 861-889, 1986.
- ⁴ BOUCHUT F., "Nonlinear stability of Finite Volume methods for hyperbolic conservation laws, and well-balanced schemes for sources", Frontiers in Mathematics series, Birkhauser, 2004.
- ⁵ BOUTIN B., COQUEL F., GODLEWSKI E., "The Dafermos regularization for the interface coupling of conservation laws", *Hyperbolic problems: Theory, Numerics, Applications*, Springer, pp. 567-575, 2008.
- ⁶ BUFFARD T., GALLOUËT T., HÉRARD J.-M., "A sequel to a rough Godunov scheme. Application to real gases ", *Computers and Fluids*, vol. 29(7), pp. 813-847, 2000.
- ⁷ CHINNAYYA A., LE ROUX A.Y., SEGUIN N., "A well-balanced numerical scheme for shallow-water equations with topography: the resonance phenomena", *Int. J. Finite Volumes (electronic)*, <http://www.latp.univ-mrs.fr/IJFV/>, vol. 1(1), 2004.
- ⁸ COQUEL F., GALLOUËT T., HÉRARD J.M., SEGUIN N., "Closure laws for a two-fluid two-pressure model", *C. R. Acad. Sci. Paris*, vol. I-332, pp. 927-932, 2002.
- ⁹ EYMARD R., GALLOUËT T., HERBIN R., "Finite Volume methods", in Handbook of Numerical Analysis, P.G. Ciarlet and J.L. Lions editors, North Holland, vol. VII, pp. 715-1022, 2000.
- ¹⁰ GALLOUËT T., HÉRARD J.-M., SEGUIN N., "A hybrid scheme to compute contact discontinuities in one dimensional Euler systems", *Math. Model. and Numer. Anal.*, vol. 36, pp. 1133-1159, 2002.

- ¹¹ GALLOUËT T., HÉRARD J.-M., SEGUIN N., "Some recent Finite Volume schemes to compute Euler equations using real gas EOS", *Int. J. Num. Meth. Fluids*, vol. 39, pp.1073-1138, 2002.
- ¹² GALLOUËT T., HÉRARD J.-M., SEGUIN N., "Some approximate Godunov schemes to compute shallow water equations with topography", *Computers and Fluids*, vol.32(3), pp. 479-513, 2003.
- ¹³ GALLOUËT T., HÉRARD J.-M., SEGUIN N., "Numerical modelling of two phase flows using the two-fluid two-pressure approach", *Math. Mod. Meth. in Appl. Sci.*, vol. 14(5), pp. 663-700, 2004.
- ¹⁴ GIRAULT L., HÉRARD J.-M., "Multidimensional computations of a two-fluid hyperbolic model in a porous medium", *AIAA paper 2009-3540*, <http://www.aiaa.org>, 2009.
- ¹⁵ GOATIN P., LE FLOCH P., "The Riemann problem for a class of resonant hyperbolic systems of balance laws", *Annales Inst. Henri Poincaré*, vol. 21(6), pp. 881-902, 2004
- ¹⁶ GODLEWSKI E., "Coupling fluid models. Exploring some features of interfacial coupling", *Invited paper, in the proceedings of Finite Volumes for Complex Applications V*, Aussois, France, June 8-13, 2008 .
- ¹⁷ GODLEWSKI E., RAVIART P.A., "The numerical interface coupling of nonlinear hyperbolic systems of conservation laws: 1.The scalar case", *Numerische Mathematik*, vol. 97, pp. 81-130, 2004.
- ¹⁸ GODLEWSKI E., LE THANH K.C., RAVIART P.A., "The numerical interface coupling of nonlinear hyperbolic systems of conservation laws: 2. The case of systems", *Math. Mod. Num. Anal.*, vol. 39, pp. 649-692, 2005.
- ¹⁹ GODUNOV S.K., "Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics", *Mat. Sb.*, vol. 47, pp. 271-300, 1959.
- ²⁰ GREENBERG J.M., LEROUX A.Y., "A well balanced scheme for the numerical processing of source terms in hyperbolic equations", *SIAM J. Num. Anal.*, vol. 33(1), pp. 1-16, 1996.
- ²¹ GUILLEMAUD V., "Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques par une approche bifluide à deux pressions", PhD thesis, Université Aix Marseille I, Marseille, France, 27th of March, 2007.
- ²² HELLUY P., HÉRARD J.-M., MATHIS H., "A well-balanced approximate Riemann solver for variable cross-section compressible flows", *AIAA paper 2009-3888*, <http://www.aiaa.org>, 2009.
- ²² HÉRARD J.M. , "A rough scheme to couple free and porous media", *Int. J. Finite Volumes (electronic)*, <http://www.latp.univ-mrs.fr/IJFV/>, vol. 3(2), pp. 1-28, 2006.
- ²³ HÉRARD J.-M., "A three-phase flow model", *Mathematical Computer Modelling*, vol. 45, pp. 432-455, 2007.
- ²⁴ HÉRARD J.-M., "Un modèle hyperbolique diphasique bi-fluide en milieu poreux", *CRAS Mécanique*, vol. 336, pp. 650-655, 2008.
- ²⁵ KAPILA A.K., SON S.F., BDZIL J.B., MENIKOFF R., STEWART D.S., "Two-phase modeling of a DDT: structure of the velocity relaxation zone", *Phys. of Fluids*, vol. 9(12), pp. 3885-3897, 1997.
- ²⁶ KRÖNER D., LE FLOCH P., THANH M.D., "The minimum entropy principle for compressible fluid flows in a nozzle with discontinuous cross section", *Math. Mod. Num. Anal.* , vol. 42(3), pp. 425-443, 2008.
- ²⁷ KRÖNER D. , THANH M.D., "Numerical solution to compressible flows in a nozzle with variable cross-section", *SIAM J. Numer. Anal.* , vol. 43(2), pp. 796-824, 2006.
- ²⁸ LOWE C.A., "Two-phase shock-tube problems and numerical methods of solution " *J. Comput. Physics*, vol. 204, pp. 598-632, 2005.
- ²⁹ SCHWENDEMAN D.W., WAHLE C.W., KAPILA A.K., "The Riemann problem and a high resolution Godunov method for a model of compressible two-phase flow" *J. Comput. Physics*, vol. 212, pp. 490-526, 2006.

3 Evaluation de conditions de couplage au niveau de l'interface fluide/poreux et simulations multidimensionnelles

Le chapitre 1 a permis de mettre en évidence la capacité du schéma WBR à gérer correctement des configurations impliquant de fortes variations de porosité contrairement aux deux autres schémas étudiés, et ce, quelque soit la taille des maillages considérés.

L'objectif de ce nouveau chapitre est double. Il s'agit d'une part d'étendre au cas tridimensionnel le schéma WBR , d'autre part d'évaluer la pertinence de la formulation poreuse dans des cas multidimensionnels, en la comparant à une approche "vraie" totalement fluide, où tous les obstacles présents dans le domaine de calcul sont maillés (on parlera dans ce cas *d'approche fluide*).

Plus précisément, nous signalons que:

- L'extension du schéma unidimensionnel (présenté au chapitre précédent), au cadre tridimensionnel est réalisée par simple prolongement du concept, en utilisant l'invariance par rotation des équations du modèle bifluide.
- L'évaluation de l'approche poreuse a été réalisée en considérant plusieurs simulations d'un même phénomène effectuées de deux manières distinctes, afin d'évaluer la pertinence des conditions de couplage sur les interfaces poreux/fluide raides.

Après avoir rappelé la définition et les principales propriétés du modèle hyperbolique utilisé pour simuler des écoulements diphasiques en milieu poreux, on présente la définition multidimensionnelle du schéma WBR , ainsi que ses propriétés dans le cadre tridimensionnel.

Pour valider l'algorithme tridimensionnel mis en place pour la simulation d'écoulements diphasiques à l'aide du schéma WBR , on commence par examiner quelques cas tests unidimensionnels présentés au chapitre précédent. Nous nous intéressons ensuite à l'évaluation de la pertinence des conditions de couplage définies à l'interface entre milieu fluide et milieu poreux. Pour cela, une première simulation est faite en considérant un ensemble de barreaux parallèles placés dans un écoulement dans une conduite fermée (approche fluide), tandis qu'une seconde simulation est réalisée en utilisant l'approche poreuse équivalente. Les effets de maillage et d'impact du nombre d'obstacles sont ex-

aminés indépendamment.

Les résultats confirment la robustesse du schéma WBR mis en oeuvre dans le cadre multidimensionnel, notamment en présence de sauts brusques de porosité.

D'autre part, la comparaison des approches fluide et poreuse semble montrer qu'une des conditions de couplage à l'interface fluide/poreux n'est pas totalement adaptée sur le plan physique, même si le formalisme mathématiques associé est très satisfaisant.

Quelques résultats supplémentaires sont présentés en annexe.

Le document qui suit a été accepté pour publication à la revue *IJFV* (International Journal on Finite Volumes).

Multidimensional computations of a two-fluid hyperbolic model in a porous medium

Laëtitia Girault *

EDF R&D

Jean-Marc Hérard[†]

EDF R&D

This paper deals with the computation of two-phase flows in a porous medium, with two main objectives. First of all, we will present a new multi-dimensional well-balanced scheme, with its advantages and drawbacks. Furthermore, we will compare results of the porous model with approximations obtained with a full two-dimensional computation, where all obstacles have been taken into account in the computational domain. The two-phase flow model is hyperbolic, and the scheme takes its roots on a modified Rusanov scheme that integrates effects due to discontinuous porous profiles. The scheme perfectly maintains steady state profiles on any structured mesh.

I. Introduction

We examine in this paper the numerical modelling of two-phase flows in a multidimensional computational domain that contains fluid and porous regions. The fluid region and the porous region are separated by a fixed coupling interface, which is assumed to be thin and plane. For clarity, we may imagine the following situation, with a plane with a given normal direction n , containing the point (x_0, y_0, z_0) ; the fluid and porous regions will respectively lie on the left and right sides of this fixed plane that will be called the coupling interface. Within both the fluid region and the porous region, a two-fluid model is considered in order to compute unsteady flow patterns. Therefore, we will need to introduce -unsteady- boundary conditions on both sides of this sharp coupling interface, in such a way that waves travelling across this coupling interface do not introduce pollution in solutions of the coupled problem (we refer to^{2,11} which describe the general framework on the coupling of distinct fluid models). In the sequel, these boundary conditions at the coupling interface will sometimes be referred to as the coupling conditions. One of the main motivations for such a work in the framework of nuclear safety in power plants is that the meshing of some tiny obstacles cannot be afforded in many practical situations. This occurs for instance in the core of the nuclear reactor, but also in steam generators. The problem then is to provide some suitable model in order to take into account in a meaningful way porous regions and sharp free/porous interfaces.

As a first step, we shall assume given boundary conditions at the coupling interface (in a weak sense), and will focus on the way one should discretize governing equations, so that convergence towards exact solutions of the associated one-dimensional Riemann problem is retrieved when the mesh is refined. These exact solutions are of course tightly linked to the former -enforced- coupling conditions. More precisely, we will first detail the two-fluid hyperbolic model (2) that has been retained in order to compute approximations of solutions. This porous model issues from¹⁶, and has been examined in detail in this reference. We will only give here the main features that are needed for our purposes. The free version of this model identifies with models discussed in^{1,4,7-9,13,19}. The coupling conditions that will be assumed here simply correspond to the preservation of Riemann invariants pertaining to the steady wave associated with system (2). We emphasize that this model is different from the one which is classically used in the nuclear industry (see for instance²² and references therein), and also from those used in the oil industry⁶.

*PhD student, EDF R&D, Fluid Dynamics, Power Generation and Environment, 6 quai Watier, 78400, Chatou, France. Also in: Centre de Mathématique et Informatique, LATP, 39 rue Joliot Curie, 13453, Marseille cedex 13, France

[†]Corresponding author. Senior engineer in EDF R&D, Fluid Dynamics, Power Generation and Environment, 6 quai Watier, 78400, Chatou, France. Tel: (33)-1-30 87 70 37. Email: Jean-Marc.Herard@edf.fr

A presentation of the three-dimensional scheme will follow. We emphasize that the scheme relies in fact on Greenberg and Leroux ideas (see¹²), which have been recently revisited by Kröner and Thanh (see^{20,21}). The main idea is to integrate in the well-balanced scheme an interface flux that is easier -and cheaper- to compute than the original interface Godunov state, as it was first proposed by authors of¹². This interface flux should nonetheless be "clever enough", in order to guarantee that steady states are perfectly preserved whatever the mesh size. As it was first reported in¹⁰ to our knowledge, the preservation of well-balanced initial conditions by the scheme seems mandatory ; otherwise, convergence towards wrong solutions is observed when the mesh size h tends to 0. The main properties of the simple well-balanced scheme will be given.

Numerical results will be provided in the last section. We recall that convergence studies have been performed in the one-dimensional framework in the companion work¹⁰. Emphasis will thus be given on multi-dimensional computations. Actually, we will discuss a comparison that has been performed between two numerical experiments on *different* meshes. The first experiment corresponds to the computation of the true geometry including obstacles in the computational domain. In the second one, the region including obstacles is assumed to be a porous region. The influence of the topology of the region filled with obstacles and also of the mesh size are examined in this section devoted to numerical results. This enables us to draw some conclusions and perspectives for future work.

II. Governing equations of the two-fluid model

We start by recalling the governing equations of the two-fluid two-pressure model that we use for computations of two-phase flows in a porous medium. (see¹⁶ for a brief introduction). As usual, we define the void fraction $\alpha_k \in [0, 1]$ (such that $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$), the porosity $\epsilon \in]0, 1]$, the mean velocity U_k , the mean pressure P_k , the mean density ρ_k , and the internal energy $e_k(P_k, \rho_k)$ in phase k , for $k = 1, 2$. The state variable W in $\mathbf{R}^{12}$ is:

$$W^t = (\epsilon, \alpha_2, \epsilon m_1, \epsilon m_2, \epsilon m_1 U_1^t, \epsilon m_2 U_2^t, \epsilon \alpha_1 E_1, \epsilon \alpha_2 E_2) \quad (1)$$

that will be noted in a short way : $W^t = (\epsilon, \alpha_2, \epsilon m_k, \epsilon m_k U_k^t, \epsilon \alpha_k E_k)$ in the following. We will also note $m_k = \alpha_k \rho_k$ the partial mass in phase k , and $E_k = \rho_k \|U_k\|^2/2 + \rho_k e_k(P_k, \rho_k)$ the total energy of phase k . T_k denotes the temperature of phase k .

The two-fluid model reads:

$$\begin{cases} \partial_t(\epsilon) = 0 \\ \partial_t(\alpha_2) + V_I \cdot \nabla(\alpha_2) = \phi_2(W) \\ \partial_t(\epsilon m_k) + \nabla \cdot (\epsilon m_k U_k) = 0 \\ \partial_t(\epsilon m_k U_k) + \nabla \cdot (\epsilon m_k U_k \otimes U_k) + \epsilon \alpha_k \nabla(P_k) + \epsilon(P_k - P_I) \nabla(\alpha_k) = \epsilon D_k(W) \\ \partial_t(\epsilon \alpha_k E_k) + \nabla \cdot (\epsilon \alpha_k U_k (E_k + P_k)) + \epsilon P_I \partial_t(\alpha_k) = \epsilon \psi_k + \epsilon V_I \cdot D_k(W) \end{cases} \quad (2)$$

The contribution D_k refers to the drag forces, and the contributions ϕ_k and ψ_k respectively correspond to the return to a pressure/thermal equilibrium. Mass transfer might be included in equations (2), but it will not be considered herein.

The closure laws for the source terms (ϕ_2, D_k, ψ_k) are the following:

$$\sum_{k=1}^2 D_k(W) = 0 \quad ; \quad \sum_{k=1}^2 \psi_k(W) = 0 \quad (3)$$

where:

$$\begin{cases} D_k = (-1)^k \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)} (U_1 - U_2) / \tau_U \\ \phi_2 = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{|P_1| + |P_2|} (P_2 - P_1) / \tau_P \\ \psi_k = K_T (1/T_k - 1/T_{3-k}) \end{cases} \quad (4)$$

where τ_U and τ_P denote relaxation time scales (assuming that $0 < \tau_P < \tau_U$), while K_T is positive. We also need to define specific entropies. If we set :

$$(c_k(P_k, \rho_k))^2 = \left(\frac{P_k}{(\rho_k)^2} - \partial_{\rho_k}(e_k(P_k, \rho_k)) \right) (\partial_{P_k}(e_k(P_k, \rho_k)))^{-1} \quad (5)$$

the specific phasic entropy $s_k(P_k, \rho_k)$ complies with:

$$(c_k(P_k, \rho_k))^2 \partial_{P_k}(s_k(P_k, \rho_k)) + \partial_{\rho_k}(s_k(P_k, \rho_k)) = 0 \quad (6)$$

For liquid-vapour applications, where the vapour phase is assumed to be dilute, a meaningful couple for the interfacial velocity and the interfacial pressure is :

$$(V_I, P_I) = (U_2, P_1)$$

(see^{4,7,9,19}). The index 2 refers to the vapour phase. As recalled in the following section, the specific choice $(V_I, P_I) = (U_2, P_1)$ has a great impact on properties of the system of PDE that governs the motion of the fluids.

Though we do not consider them here, we emphasize that friction effects inside the porous medium may be taken into account in a classical way, and also that this does not modify the main properties of the whole model that are discussed below (see appendix B).

III. Main properties

We recall here that :

- the nonhomogeneous system (2) is hyperbolic;
- smooth solutions of (2) comply with a physically relevant entropy inequality;
- system (2) admits unique jump conditions within each isolated genuinely non-linear (GNL) field (see appendix C).

If we focus on the convective part -left hand side- of (2), we can first rewrite (2) in a non-conservative form as follows:

$$\partial_t (W) + A_x(W) \partial_x (W) + A_y(W) \partial_y (W) + A_z(W) \partial_z (W) = 0 \quad (7)$$

Thus, if we define the unit vector $n = (n_x, n_y, n_z)$, we may introduce $A(W, n)$ as:

$$A(W, n) = n_x A_x(W) + n_y A_y(W) + n_z A_z(W) \quad (8)$$

Hence we get:

Proposition 1a :

The matrix $A(W, n)$ admits the following real eigenvalues:

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= 0 \quad , \quad \lambda_1 = V_I \cdot n, \\ \lambda_{2-4} &= U_1 \cdot n \quad , \quad \lambda_5 = U_1 \cdot n - c_1 \quad , \quad \lambda_6 = U_1 \cdot n + c_1, \\ \lambda_{7-9} &= U_2 \cdot n \quad , \quad \lambda_{10} = U_2 \cdot n - c_2 \quad , \quad \lambda_{11} = U_2 \cdot n + c_2 \end{aligned} \quad (9)$$

We may now define a frame change introducing τ_1 and τ_2 such that (n, τ_1, τ_2) defines a fixed orthonormal basis. Taking into account the invariance under frame rotation of equations (2), and neglecting transverse derivatives of all components, thus setting:

$$\partial_{x_{\tau_k}} (\phi) = 0$$

for $k = 1, 2$, whatever ϕ is, we focus now on the corresponding one-dimensional problem in the n direction associated with :

$$\begin{cases} \partial_t (\epsilon) = 0 \\ \partial_t (\alpha_2) + (V_I \cdot n) \partial_{x_n} (\alpha_2) = 0 \\ \partial_t (\epsilon m_k) + \partial_{x_n} (\epsilon m_k (U_k \cdot n)) = 0 \\ \partial_t (\epsilon m_k U_k \cdot n) + \partial_{x_n} (\epsilon m_k (U_k \cdot n)^2) + \epsilon \alpha_k \partial_{x_n} (P_k) + \epsilon (P_k - P_I) \partial_{x_n} (\alpha_2) = 0 \\ \partial_t (\epsilon \alpha_k E_k) + \partial_{x_n} (\epsilon \alpha_k (U_k \cdot n) (E_k + P_k)) + \epsilon P_I \partial_t (\alpha_k) = 0 \\ \partial_t (\epsilon m_k (U_k \cdot \tau_1)) + \partial_{x_n} (\epsilon m_k (U_k \cdot n) (U_k \cdot \tau_1)) = 0 \\ \partial_t (\epsilon m_k (U_k \cdot \tau_2)) + \partial_{x_n} (\epsilon m_k (U_k \cdot n) (U_k \cdot \tau_2)) = 0 \end{cases} \quad (10)$$

A straightforward analysis of (10) provides the following result:

Proposition 1b :

System (10) admits real eigenvalues detailed in (9). Associated right eigenvectors span the whole space if : $|(V_I - U_k) \cdot n| \neq c_k$, and $|U_k \cdot n| \neq c_k$, for $k = 1, 2$.

Waves associated with eigenvalues $\lambda_0, \lambda_{2-4}, \lambda_{7-9}$ are linearly degenerate. If we assume that $V_I = U_k$, or $V_I = (m_1 U_1 + m_2 U_2) / (m_1 + m_2)$, the wave associated with the eigenvalue $\lambda_1 = V_I \cdot n$ is linearly degenerate. The other waves associated with $\lambda_5, \lambda_6, \lambda_{10}, \lambda_{11}$ are genuinely non-linear.

The proof is simple, and we refer to^{7,9} for similar results in a non-porous framework, and also to¹⁶ in a one-dimensional framework. The specific choice for V_I is extremely important since it guarantees well-posed jump conditions through single shock waves.

Moreover, if we define the entropy-entropy flux : (η, f_η) as follows:

$$\eta = \epsilon(m_1 \ln(s_1) + m_2 \ln(s_2))$$

$$f_\eta = \epsilon(m_1 \ln(s_1)U_1 + m_2 \ln(s_2)U_2)$$

and introduce the corresponding source term :

$$S_\eta(W) = \epsilon \sum_{k=1,2} (m_k(\psi_k - D_k(U_k - V_I) + (-1)^k \phi_2(P_I - P_k))/T_k)$$

we get the next result:

Proposition 2 :

The following entropy inequality holds for smooth solutions of system (2):

$$\partial_t(\eta) + \nabla \cdot (f_\eta) = S_\eta(W) \geq 0 . \quad (11)$$

This also is a direct consequence of the definition of the couple (V_I, P_I) given above. For shock solutions travelling at speed σ in the n direction, and separating two states W_l, W_r , the entropy inequality is :

$$-\sigma(\eta(W_r) - \eta(W_l)) + (f_\eta(W_r) - f_\eta(W_l)) \cdot n > 0 . \quad (12)$$

Eventually, we need to detail the structure of the standing wave, which corresponds to a LD wave. Actually, the following Riemann invariants will be the keystone for the definition of the simple well-balanced scheme that will be introduced hereafter.

Proposition 3 :

We focus on the one-dimensional Riemann problem associated with (10). The linearly degenerate (LD) wave associated with $\lambda_0(W)$ admits the following Riemann invariants

$$\begin{aligned} I_1^0(W) &= \alpha_2 \quad ; \quad I_2^0(W) = s_1 \quad ; \quad I_3^0(W) = \epsilon m_1 U_1 \cdot n \\ I_4^0(W) &= e_1 + \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{\|U_1\|^2}{2} \quad ; \quad I_5^0(W) = s_2 \\ I_6^0(W) &= \epsilon m_2 U_2 \cdot n \quad ; \quad I_7^0(W) = e_2 + \frac{P_2}{\rho_2} + \frac{\|U_2\|^2}{2} \\ I_8^0(W) &= U_1 \cdot \tau_1 \quad ; \quad I_9^0(W) = U_1 \cdot \tau_2 \\ I_{10}^0(W) &= U_2 \cdot \tau_1 \quad ; \quad I_{11}^0(W) = U_2 \cdot \tau_2 \end{aligned}$$

The proof is straightforward. Assuming that $r_0(W)$ denotes the right eigenvector associated with $\lambda_0(W)$, it only requires to check that $\nabla_W I_k^0(W) \cdot r_0(W) = 0$, for $k = 1, \dots, 11$.

IV. A simple well-balanced Finite Volume scheme

We describe herein the simple well-balanced Finite Volume scheme we use. This one is grounded on basic ideas of well-balanced schemes introduced by Greenberg and Leroux (see¹²). Within each Finite Volume ω_i of size Ω_i , an approximation of the mean value of W at time t^n in cell i is:

$$W_i^n \simeq (\int_{\omega_i} W(x, t^n) dx) / \int_{\omega_i} dx \quad (13)$$

The time step Δt^n will be defined later on (see Proposition 5). Moreover, we define:

$$\bar{a}_{ij} = (a_i + a_j)/2$$

where i, j refer to indexes of two neighbouring cells. S_{ij} denotes the surface of the interface connecting cells i and j .

We define the state variable $Z^t = (\alpha_2, m_k, m_k U_k, \alpha_k E_k)$ in $\mathbf{R}^{11}$. Given some unit normal vector n , we define the normal flux $f_n(Z, n)$ in $\mathbf{R}^{11}$ as follows:

$$f_n(Z, n)^t = (0, m_k U_k \cdot n, (m_k U_k \cdot n) U_k + \alpha_k P_k n, \alpha_k U_k \cdot n (E_k + P_k)) \quad (14)$$

We use a splitting technique in order to discretize convective terms and source terms. In step I, we compute explicit approximations of solutions of the homogeneous problem associated with the left-hand side of (2). Then source terms are taken into account in step II using implicit schemes. Actually, the computation of the whole set (2) complies with the overall entropy inequality (11).

The first step thus reads :

$$\begin{cases} \partial_t(\epsilon) = 0 \\ \partial_t(\alpha_2) + V_I \cdot \nabla(\alpha_2) = 0 \\ \partial_t(\epsilon m_k) + \nabla \cdot (\epsilon m_k U_k) = 0 \\ \partial_t(\epsilon m_k U_k) + \nabla \cdot (\epsilon m_k U_k \otimes U_k) + \epsilon \alpha_k \nabla(P_k) + \epsilon(P_k - P_I) \nabla(\alpha_k) = 0 \\ \partial_t(\epsilon \alpha_k E_k) + \nabla \cdot (\epsilon \alpha_k U_k (E_k + P_k)) + \epsilon P_I \partial_t(\alpha_k) = 0 \end{cases} \quad (15)$$

Numerical algorithms that are needed to compute approximations of solutions of the ODE (16) in the second step:

$$\begin{cases} \partial_t(\epsilon) = 0 \\ \partial_t(\alpha_2) = \phi_2(W) \\ \partial_t(\epsilon m_k) = 0 \\ \partial_t(\epsilon m_k U_k) = \epsilon D_k(W) \\ \partial_t(\epsilon \alpha_k E_k) + \epsilon P_I \partial_t(\alpha_k) = \epsilon \psi_k + \epsilon V_I \cdot D_k(W) \end{cases} \quad (16)$$

or alternatively :

$$\begin{cases} \partial_t(\epsilon) = 0 \\ \partial_t(\alpha_2) = \phi_2(W) \\ \partial_t(m_k) = 0 \\ \partial_t(m_k U_k) = D_k(W) \\ \partial_t(\alpha_k E_k) + P_I \partial_t(\alpha_k) = \psi_k + V_I \cdot D_k(W) \end{cases} \quad (17)$$

are detailed in^{9,17} and thus are not recalled here.

The discrete variable ϵ is assumed to be constant within each cell. The cell scheme is:

$$\Omega_i(Z_i^{n+1} - Z_i^n) + \Delta t^n \sum_{j \in V(i)} (F(Z_i^n, Z_{ij,i}^n, n_{ij}) S_{ij}) + \Delta t^n (NCT)_i^n = 0 \quad (18)$$

$V(i)$ contains all neighbouring cells of cell i , and n_{ij} is the outward normal vector pointing from cell i to cell j .

The numerical flux is defined by:

$$F(Z_i^n, Z_{ij,i}^n, n_{ij}) = (f_n(Z_i^n, n_{ij}) + f_n(Z_{ij,i}^n, n_{ij}) - (r_{WB})_{ij}^n (Z_{ij,i}^n - Z_i^n)) / 2 \quad (19)$$

where the scalar $(r_{WB})_{ij}^n$ is defined as:

$$(r_{WB})_{ij}^n \stackrel{def}{=} \max_{k=1,2} (|(U_k \cdot n)_{ij,i}^n|, |(U_k \cdot n)_{ij,j}^n|, r_i^n, r_j^n)$$

where r_i^n stands for the spectral radius of the Jacobian matrix $A(W_i^n, n)$ introduced in (8).

The contribution of non-conservative terms $(NCT)_i^n$ is a rough centered approximation as follows:

$$NCT_i^n = \left((V_I)_i^n \cdot \sum_{j \in V(i)} (\bar{\alpha}_2)_{ij} n_{ij} S_{ij}, 0, -(P_I)_i^n \sum_{j \in V(i)} (\bar{\alpha}_k)_{ij} n_{ij} S_{ij}, -(P_I)_i^n (V_I)_i^n \cdot \sum_{j \in V(i)} (\bar{\alpha}_k)_{ij} n_{ij} S_{ij} \right) \quad (20)$$

This centered scheme is admissible since the diffusion coefficient $(r_{WB})_{ij}^n$ in the flux definition takes all wave speeds of the whole convective set into account.

The values $Z_{ij,i}^n$ are obtained by solving the non-linear equations (for $m = 0$ to 10):

$$Inv_m^0(Z_{ij,i}^n, \epsilon_i) = Inv_m^0(Z_j^n, \epsilon_j) \quad (21)$$

Quantities $Inv_m^0(Z, \epsilon)$ are straightforward extensions of the eleven Riemann invariants of the standing wave introduced in Proposition 3. Thus we have:

$$\begin{aligned} Inv_0^0(Z, \epsilon) &= \alpha_2 \\ Inv_{5k-4}^0(Z, \epsilon) &= s_k(P_k, \rho_k) \\ Inv_{5k-3}^0(Z, \epsilon) &= \epsilon m_k U_k \cdot n \\ Inv_{5k-2}^0(Z, \epsilon) &= U_k \cdot \tau_1 \\ Inv_{5k-1}^0(Z, \epsilon) &= U_k \cdot \tau_2 \\ Inv_{5k}^0(Z, \epsilon) &= e_k(P_k, \rho_k) + P_k / \rho_k + \|U_k\|^2 / 2 \end{aligned} \quad (22)$$

for $k = 1, 2$. If $\epsilon_i = \epsilon_j$, then obviously $Z_{ij,i}^n = Z_j^n$ is a solution. Moreover, we also get in that case : $Z_{ij,j}^n = Z_i^n$, and thus the normal flux is continuous through the interface ij . A straightforward consequence is that, if NCT is null (assuming a constant void fraction), one retrieves the conservative form of equations when the porosity is locally uniform. In addition, the scheme identifies with the classical Rusanov scheme in that case. We must note here that the last Riemann invariant $Inv_{5k}^0(Z, \epsilon)$ may be written in a slightly different form, since:

$$Inv_{5k}^0(Z, \epsilon) = e_k(P_k, \rho_k) + P_k / \rho_k + (U_k \cdot n)^2 / 2 + (Inv_{5k-1}^0(Z, \epsilon)^2 + Inv_{5k-2}^0(Z, \epsilon)^2) / 2 \quad (23)$$

which means that the quantity $e_k(P_k, \rho_k) + P_k / \rho_k + (U_k \cdot n)^2 / 2$ should be preserved, and this is exactly equivalent to the one-dimensional formulation (see¹⁰). Details pertaining to the exact computation of the quantities $Z_{ij,i}^n$ are given in appendix D. In practice, this step requires solving two uncoupled non-linear scalar equations on both sides of the cell interface ij , for both phases. More precisely, we need to compute four quantities $(\rho_k)_{ij,i}^n$ and $(\rho_k)_{ij,j}^n$ (for $k = 1, 2$) at each cell interface ij . Each non-linear scalar equation involves a function $\psi(X)$ which is either increasing with respect to X , or decreasing and then increasing (which is the general case). Thus the computation of solutions is rather easy and it is not consuming too much CPU time. We give now the main properties of the scheme.

V. Main properties of the scheme

In the framework of one-dimensional computations, this simple well-balanced scheme preserves flows at rest, even when the porosity is not uniform (see¹⁰). Turning then to multi-dimensional flows, and assuming some restrictions on the EOS, one may check that some basic contact solutions of the form :

$$P_k(.,t) = P_0 \quad U_k(.,t) = U_0 \quad V_k(.,t) = W_k(.,t) = 0$$

are perfectly predicted on *any* structured rectangular mesh, when restricting to uniform porous profiles (the proof is obvious and similar to the one given in¹⁰ in the pure one-dimensional framework).

Moreover, based on¹⁰, it seems in practice that the well-balanced property is necessary in order to obtain convergence towards the correct one-dimensional discontinuous solutions, when the initial data contains discontinuous values of porosity. Thus the following result is indeed crucial:

- *Proposition 4:*

We consider initial data for a one-dimensional Riemann problem, such that $\epsilon_L \neq \epsilon_R$. We assume that the initial conditions (W_L, W_R) of the Riemann problem comply with : $I_m^0(W_L) = I_m^0(W_R)$, for $m = 1$ to 11. Then the scheme ((18),(21)) introduced in the previous section preserves steady states on any structured mesh.

A crucial point in the proof is linked with the exact computation of the $Z_{ij,i}$. The proof is almost the same as the one given in¹⁰. We must recall here that more classical schemes (such as Rusanov scheme for instance) do not ss enjoy this latter property, and it has been pointed out in¹⁰ that a straightforward consequence is that these schemes do not guarantee convergence towards the right solutions, when sharp discontinuities on ϵ are present in the computational domain.

Eventually, the next result provides a useful condition on the time step Δt^n :

- *Proposition 5:*

Both void fractions α_1 and α_2 and partial masses m_1, m_2 remain positive provided that the following CFL condition holds:

$$\frac{\Delta t^n}{2\Omega_i} \sum_{j \in V(i)} (r_{WB})_{ij}^n S_{ij} \leq 1 \quad \forall i \quad (24)$$

The proof is given in appendix A.

VI. Numerical results

In this section, we will first examine some one-dimensional tests in order to validate the algorithms. Afterwards, we will focus on a comparison between two different approaches. In a first series of tests, we will compute the fluid flow in a channel with a pure free medium at the inlet, followed by a sudden uniform porous region. Then, we will examine the true behaviour of the fluid when the computational domain takes obstacles into account, and thus requires no homogeneization. Hence the main objective in the second part is to examine the suitability of the coupling conditions between free and porous media. The well-balanced formalism that has been implicitly retained in the formulation of coupling boundary conditions enforces the continuity of Riemann invariants of the steady wave (see Proposition 3). Actually, we may expect that the conservation of both mass flux and total enthalpy holds through the counterpart of the sharp free/porous interface, when focusing on the true multidimensional simulation including an accurate description of obstacles. However, on the other hand, the preservation of the entropy seems questionable. Thus we will focus on three specific variables when comparing numerical results, which are : $\epsilon m_k U_k \cdot n$, s_k , and the total enthalpy H_k defined as:

$$H_k = (E_k + P_k)/\rho_k$$

All numerical experiments have been achieved using perfect gas EOS, setting $\gamma_1 = 1.1$ and $\gamma_2 = 1.4$.

A. Some one-dimensional test cases

Initial values of velocity components in y , z directions have been set to 0 in the following two test cases, and regular cubic meshes have been used.

1. Analytical test cases

- We start with a one-dimensional test case where initial conditions are well-balanced. In practice, we consider the following values:

	state L	state R
γ_1	1.1	
γ_2	1.4	
ϵ	1	0.6
α_1	0.95	
ρ_1	1000	
U_1	0	
P_1	100000	
ρ_2	100	92.0641467
U_2	10	18.1033195
P_2	100000	89069.0346

The computational domain is $[0, 1]$. The initial discontinuity is located at $x = 0.5$, and the CFL number has been set to $1/2$. We use a coarse mesh with 100 regular cells in order to emphasize differences between the present well-balanced scheme WBR which complies with Proposition 4, and the classical Rusanov scheme. We have plotted the three Riemann invariants $\epsilon m_k U_k$, S_k and H_k for both phases (see Figure 1), and also the three main variables ρ_k , U_k , P_k (see Figure 2). We can observe spurious oscillations due to the coupling interface when focusing on Rusanov scheme, whereas the well-balanced scheme performs perfectly well and maintains initial data steady. This was expected of course, owing to Proposition 4 given above. The exact solution and the WBR approximation are identical in this case. We insist that a mesh refinement does not yield convergence towards the correct solution when restricting to Rusanov scheme, which cannot be guessed when looking at results below.

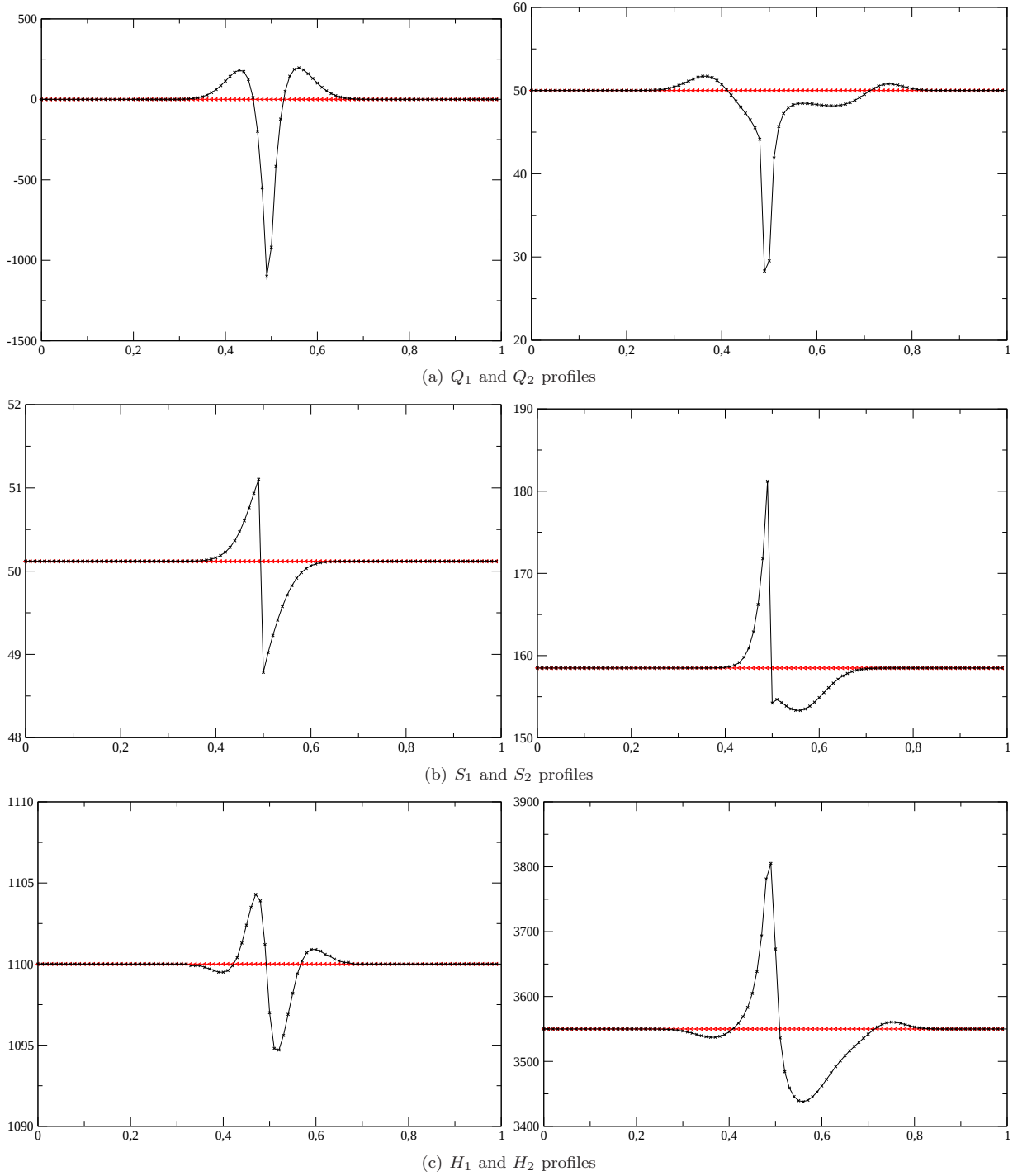


Figure 1. Riemann invariants of the steady wave for the well-balanced test case. The red line with triangles corresponds to scheme WBR, and the dark line with crosses corresponds to Rusanov approximation. Mean discharges Q_1 (left) and Q_2 (right) -top- Entropies S_1 (left) and S_2 (right) -middle- Total enthalpies H_1 (left) and H_2 (right) -bottom-

- The second test is a Riemann problem for which an exact solution is available. This test case, that has been introduced in¹⁰, corresponds to a one-dimensional Riemann problem. It involves many “ghost”

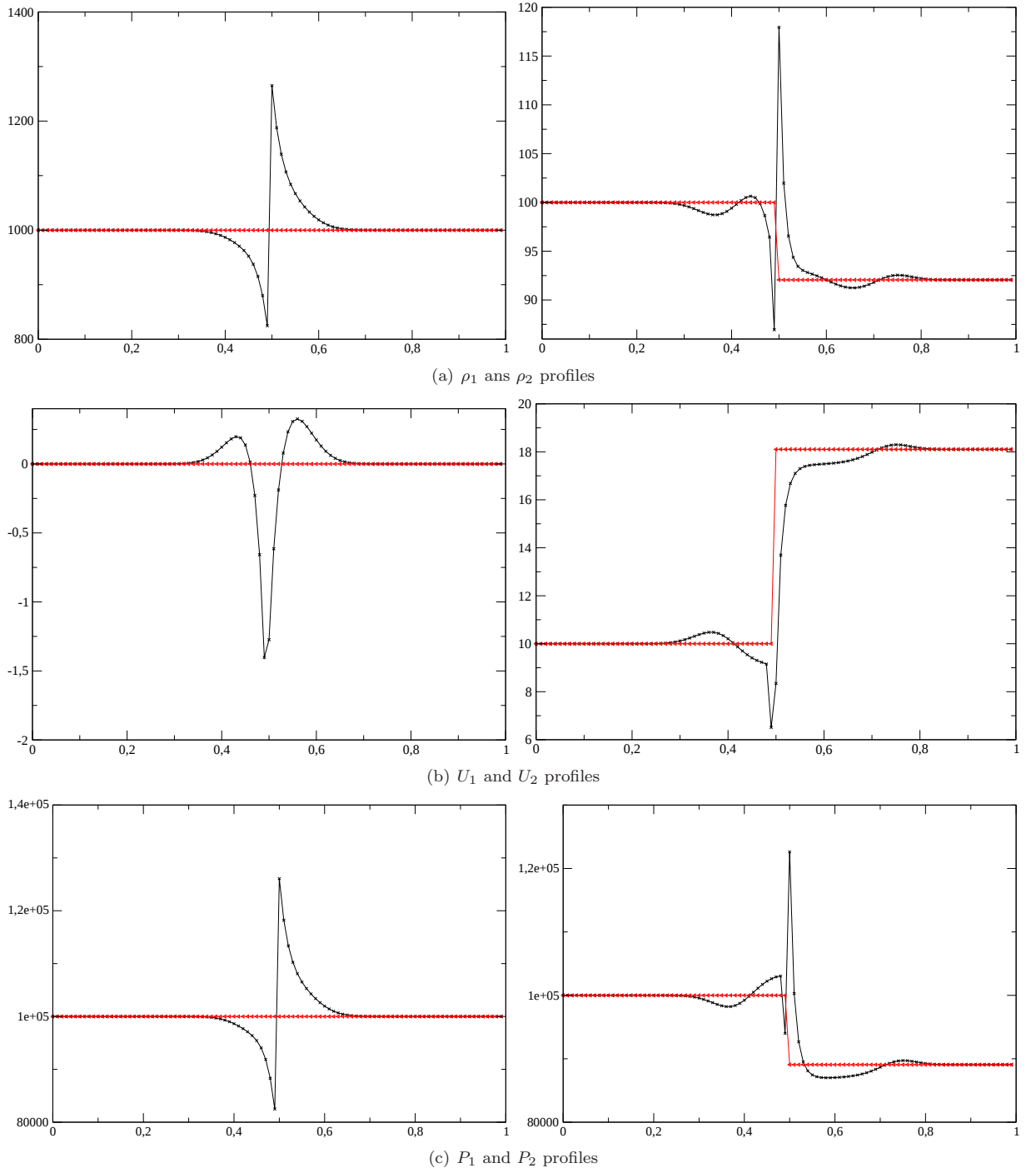


Figure 2. Variables ρ_k , U_k , P_k in the well-balanced test case, respectively on top, middle, bottom. The red line with triangles corresponds to scheme WBR, and the dark line with crosses corresponds to Rusanov approximation.

waves in the x -direction, through which no variation of the state variable occurs. The computational domain is still $[0, 1]$, and the initial discontinuity is again located at $x = 0.5$. The mesh contains 5000 cubic cells and the CFL number is set to $1/2$. Intermediate states only vary through the waves

associated with eigenvalues $\lambda_0 = 0$, $\lambda_1 = U_2 = V_i$ and $\lambda_{11} = U_2 + c_2$. Initial conditions for left and right states W_L and W_R are recalled below, together with values of the two -non trivial- intermediate states W_A and W_B .

	state L	state A	state B	state R
ϵ	1	0.6		
α_1	0.95		0.05	
ρ_1	1	0.999190167	0.853058301	
U_1	10	16.6801748	-160.919041	
P_1	100000	99910.922	83960.8032	
ρ_2	0.1	0.0998565629	0.15	0.1
U_2	15	25.0359108		-346.262753
P_2	10000	9979.92457	94534.4211	53175.6119

Setting $\xi = (x - 1/2)/t$, the analytic solution is :

$$\begin{cases} W(\xi) = W_L & \text{when: } \xi < 0 \\ W(\xi) = W_A & \text{when: } 0 < \xi < U_I \\ W(\xi) = W_B & \text{when: } U_I < \xi < \sigma_2 \\ W(\xi) = W_R & \text{when: } \sigma_2 < \xi \end{cases} \quad (25)$$

where $U_I = (U_2)_A = (U_2)_B$ and $\sigma_2 = [\rho_2 U_2]_B^R / [\rho_2]_B^R$. Figure 3 shows the behaviour of both pressures P_1, P_2 and velocities U_1, U_2 . Due to the numerical viscosity of scheme WBR, we can hardly distinguish states $(P_2)_A$ and $(P_2)_L$. This is emphasized by the fact that these two values are close to one another, and it is also due to the slow velocity of the void fraction wave V_I compared with the speed of the 2-shock. No spurious behaviour is observed through the two LD waves associated with λ_0 and $\lambda_1 = V_I$.

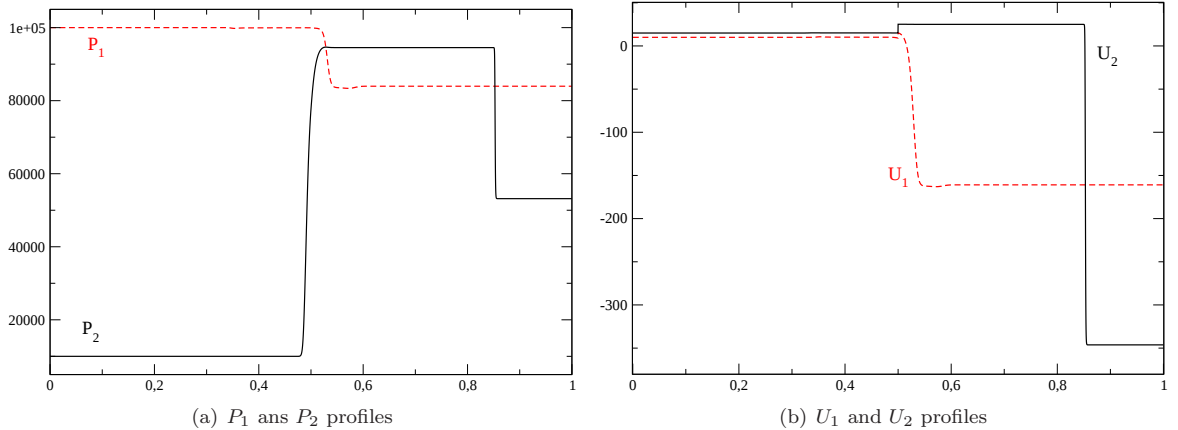


Figure 3. Pressure and velocity profiles along the x-axis of the duct for test case 1.

These results are exactly the same as those obtained with the pure 1D algorithm. We retrieve the expected $h^{1/2}$ convergence towards the exact solution, for fine enough meshes (see¹⁰).

2. Propagation of a strong shock wave in a one-dimensional duct

This second test is also the exact counterpart of another test case investigated in¹⁰. A right-going shock wave is generated at $x_r = 0.65$ in the x -direction, on the left side of a sharp free/porous interface located at

$x_p = 0.67$. The porosity profile is $\epsilon(x, y, z) = 1$ for $x < x_p$ and $\epsilon(x, y, z) = 0.6$ for $x > x_p$. We have set here $CFL = 1/2$, and the mesh contains 1000 regular cubic cells. Initial states on both sides of x_r are :

$$(\alpha_2)_L = 0.95 \quad (P_1)_L = (P_2)_L = 10^6 \quad (U_1)_L = (U_2)_L = 0 \quad (\rho_1)_L = 1 \quad (\rho_2)_L = 20$$

and :

$$(\alpha_2)_R = 0.05 \quad (P_1)_R = (P_2)_R = 10^5 \quad (U_1)_R = (U_2)_R = 0 \quad (\rho_1)_R = 1 \quad (\rho_2)_R = 20$$

In Figure 4, the solution has been plotted along the x -axis when the initial right-going shock wave is close to the right exit boundary. It may be checked that both Riemann invariants of the steady wave H_k and s_k remain uniform across the free/porous interface $x_p = 0.67$.

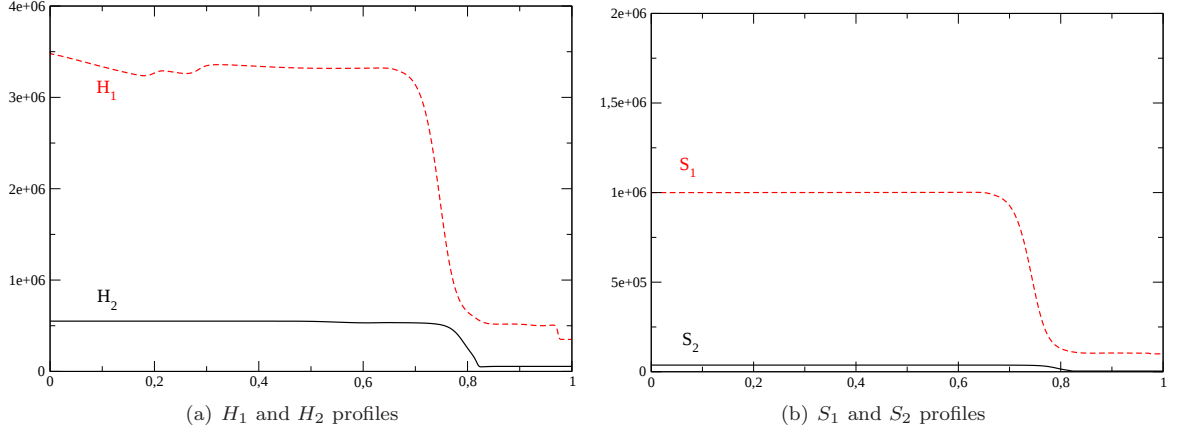


Figure 4. Enthalpy and entropy profiles along the x -axis of the duct for test case 2.

3. Comments

The computational results that have been obtained for these two test cases in the x -direction are exactly the same as the pure 1D results discussed in¹⁰. Moreover, we emphasize that the same test cases in y direction (respectively in z direction) have been computed, and provide exactly the same results.

We focus now on multidimensional computations in order to evaluate the porous approach that has been proposed before.

B. Comparing the free and the porous approaches

1. Test 3: Transition between a free medium and a porous medium

In order to compare the porous and free approaches, we compute the free flow in a rectangular computational domain $[0, 24] \times [0, 40]$ containing six identical rectangular obstacles aligned with the y -direction on the upper part of the domain (for $y \in [20, 40]$). Within this region, the fluid can flow through a surface, the aspect ratio of which is $1/2$. A sketch is given in Figure 5 with different meshes.

In a second experiment, we consider the porous approach proposed in the first section. Thus, the computational domain is now the full rectangle $(x, y) \in [0, 24] \times [0, 40]$. The porosity distribution is given by $\epsilon(x, y) = 1$, except for the upper region where $\epsilon(x, y) = 1/2$, for $y \in [20, 40]$. A very coarse mesh has been used here first (960 square cells), since it corresponds to the real mesh size that one can afford in practice for industrial computations.

The same inlet (for $y = 0$) boundary conditions are used for the free and the porous approach, and inlet states are : $P_1 = P_2 = 10^5$, $V_1 = V_2 = 100$, $\alpha_1 = 0.95$ and $\rho_1 = 1$, $\rho_2 = 1$. Homogeneous Neumann outlet (for $y = 40$) boundary conditions are imposed for both experiments. Symmetry boundary conditions

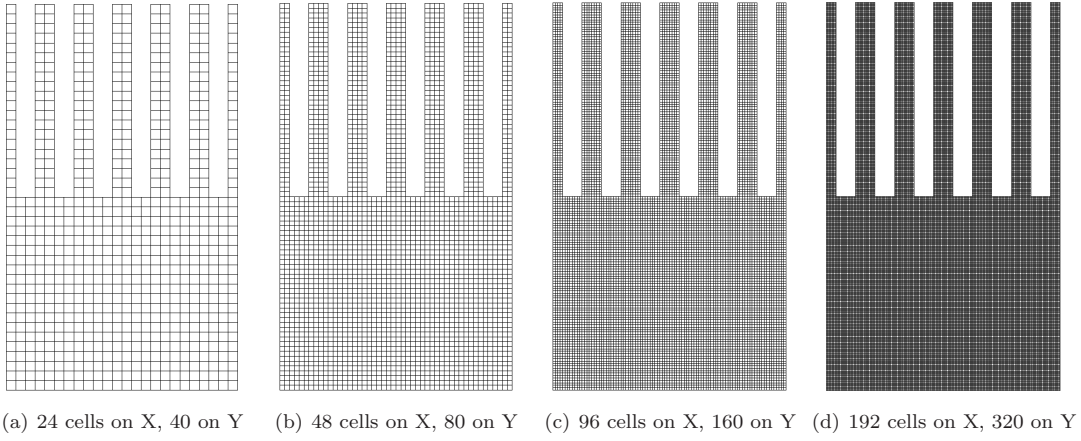


Figure 5. Computational domains used for the free approach with six identical rectangular obstacles in Test 3 (with one medium change).

are imposed on both sides ($x = 0$ and $x = 24$), using the mirror state technique. The CFL number is still $1/2$.

As explained in part IV, the simple well-balanced Finite Volume scheme described herein is based on the 0-Riemann invariants connection at each interface of the mesh. Thus we will focus here on *steady* states. Figure 6 provides the time residual:

$$R^n(a) = \sum_{i=1, N} |a_i^{n+1} - a_i^n| \Omega_i / \Delta t$$

for any variable a (N denotes the total number of cells in the computational domain). We will examine more specifically entropies S_1 and S_2 which are two among the eleven Riemann invariants of the standing wave associated with the eigenvalue $\lambda_0(W)$.

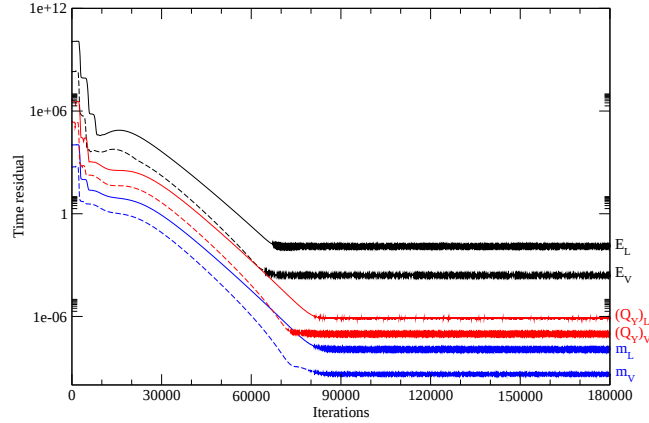


Figure 6. Test 3: Logarithm of time residual for energy, momentum and mass, for both phases, considering the finer mesh (d) (192x 320 cells). Subscript L corresponds to liquid and subscript V refers to vapour.

Figure 7 shows the liquid entropy profiles S_1 on different mesh sizes for the free approach, thus including real obstacles. Focusing on the porous approach, S_1 is constant and equal to 100000 in all the computational domain.

On Figure 8, entropy profiles for both phases have been plotted along the y -axis, for x situated in the middle of the domain ($x = 12$). Computations (a) to (d) have been performed on the real geometry including

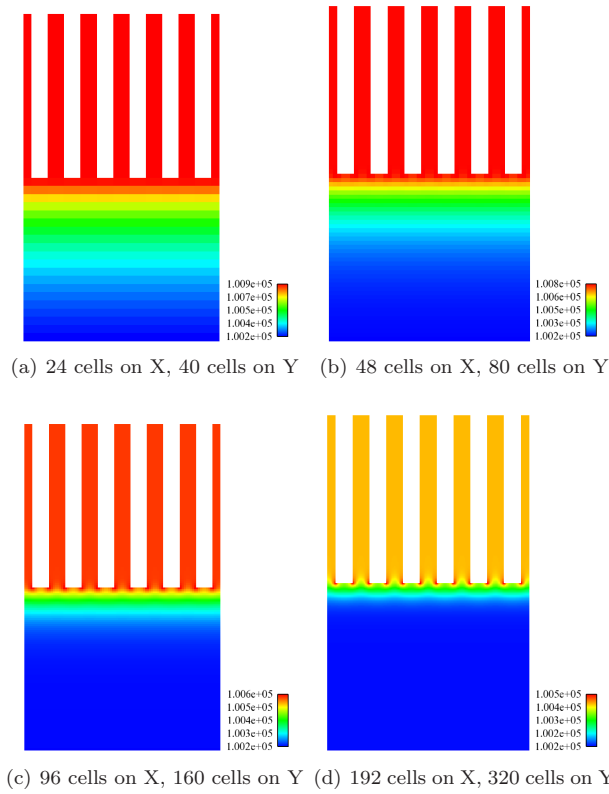


Figure 7. Test 3: Mean liquid entropy S_1 in a free medium with six obstacles, considering different meshes.

obstacles, and computation (e) has been performed with the porous approach. While entropy profiles are uniform with the porous approach, they are not constant with the free approach.

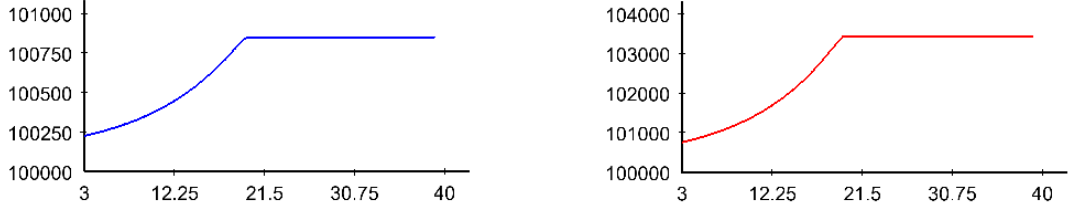
Figure 9 summarizes all liquid entropy profiles S_1 shown in Figure 8 on a same graph. The dashed black line corresponds to the porous approach on a coarse mesh, and plain lines correspond to the free approach. The brown one with crosses corresponds to the coarser mesh (a) presented on Figure 5, the blue one with stars to the second coarser mesh (b), the red one with circles to mesh (c), and the green one with triangles corresponds to the finer mesh (d) for the free approach.

Hence, both experiments obviously differ when focusing on entropy distributions. The present mesh refinement does not allow us to conclude definitely, but it seems very unlikely that the approximate solutions in the free approach would converge towards a uniform profile. It suggests that the mathematical tool provided by the well-balanced approach is fine, but that the current coupling conditions on the sharp free-porous interface, which enforce the preservation of all 0-Riemann invariants, must be improved from a physical point of view.

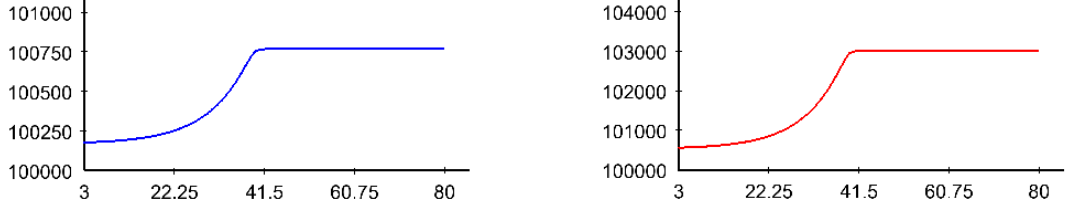
2. Test 4: Flow passing a region containing regular obstacles

We now focus on a domain which contains two medium transitions. First, we compute the free flow in a rectangular computational domain $[0, 24] \times [0, 30]$ containing six identical rectangular obstacles aligned with the y -direction in the middle of the domain (for $y \in [10, 20]$). Within this region, the fluid can flow through a surface, the aspect ratio of which is still $1/2$. A sketch is given in Figure 10 with different meshes.

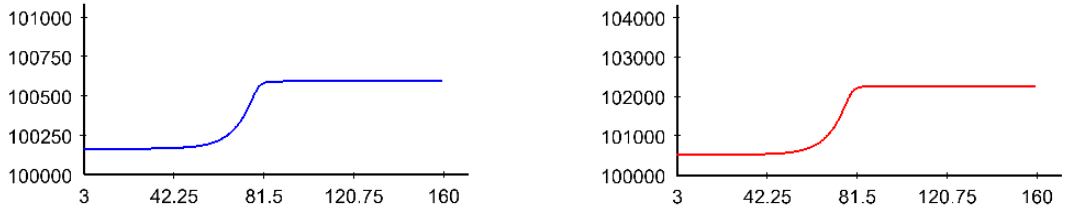
In a second experiment, we consider again the porous approach. Thus, the computational domain is now the full rectangle $(x, y) \in [0, 24] \times [0, 30]$. The porosity distribution is given by $\epsilon(x, y) = 1$, while we prescribe



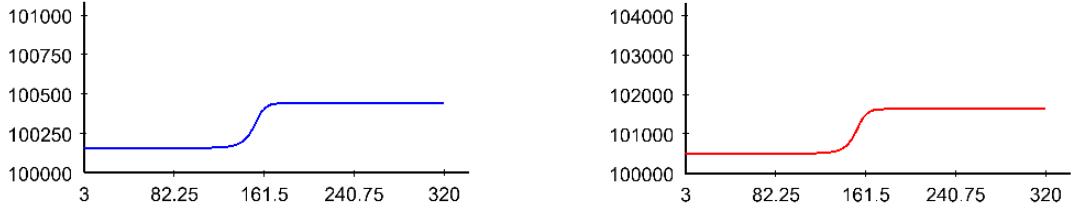
(a) Free approach. Mesh size: 24 cells on X, 40 cells on Y



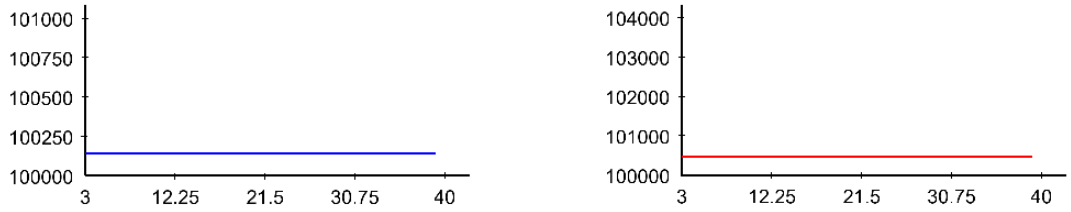
(b) Free approach. Mesh size: 48 cells on X, 80 cells on Y



(c) Free approach. Mesh size: 96 cells on X, 160 cells on Y



(d) Free approach. Mesh size: 192 cells on X, 320 cells on Y



(e) Porous approach. Mesh size: 24 cells on X, 40 on Y

Figure 8. Test 3: Liquid and vapour entropy profiles S_1 (left) and S_2 (right) along the y -axis, for x situated in the middle of the domain. Computations (a) to (d) : free approach, computation (e) : porous approach. Values on the abscissa axis of the graphs correspond to the cell number in the y -direction.

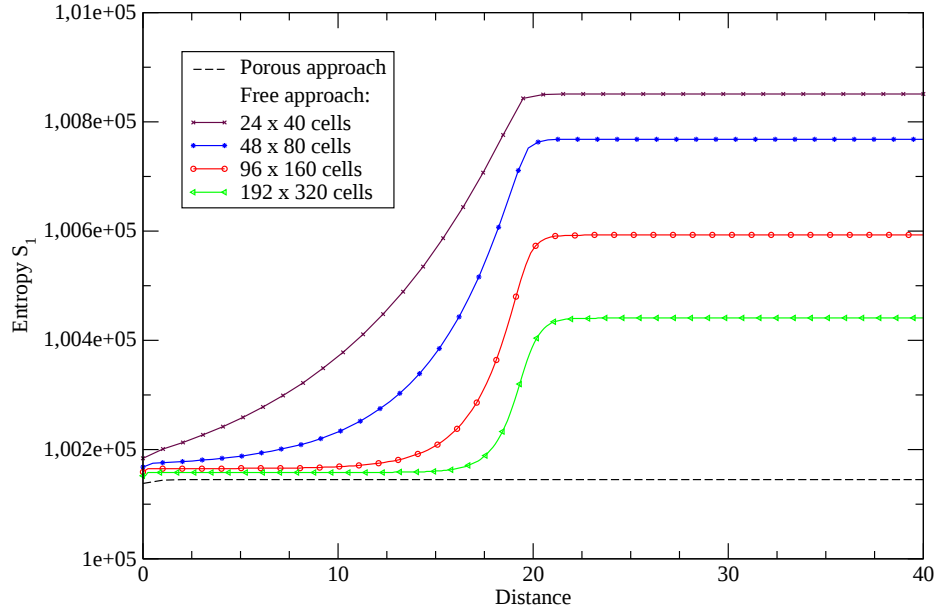


Figure 9. Test 3: Liquid entropy profiles S_1 for the porous approach (dashed black line) and the free approach (plain brown, blue, red, green lines correspond to coarse to fine mesh respectively).

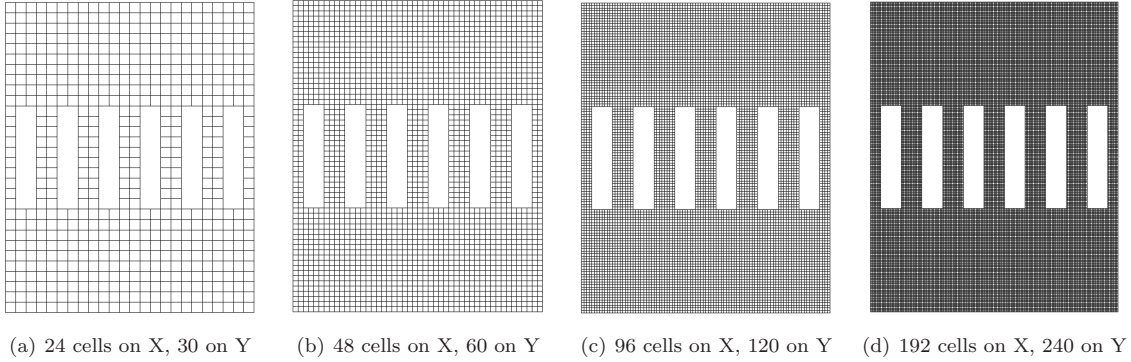


Figure 10. Computational domains used for the free approach with six identical rectangular obstacles in Test 4 (two medium changes).

$\epsilon(x, y) = 1/2$, for $y \in [10, 20]$. Two meshes have been used here. The first one corresponds to the coarser mesh (a) of the figure 10 (24 cells on X, 30 on Y), and the second one corresponds to the finer mesh (d) (192 cells on X, 240 on Y) without obstacles.

The same inlet (for $y = 0$) and outlet (for $y = 30$) boundary conditions are imposed for both experiments, and these are the same as for test 3. Symmetry conditions are enforced on both sides of the computational domain ($x = 0$ and $x = 24$). The CFL number is still $1/2$. We focus again on steady results (see Figure 11 for time residual) and we expect results that are similar to those obtained in test 3. The objective here is to make sure that discrepancies still remain, whenever the flow is incoming or outcoming the region including obstacles.

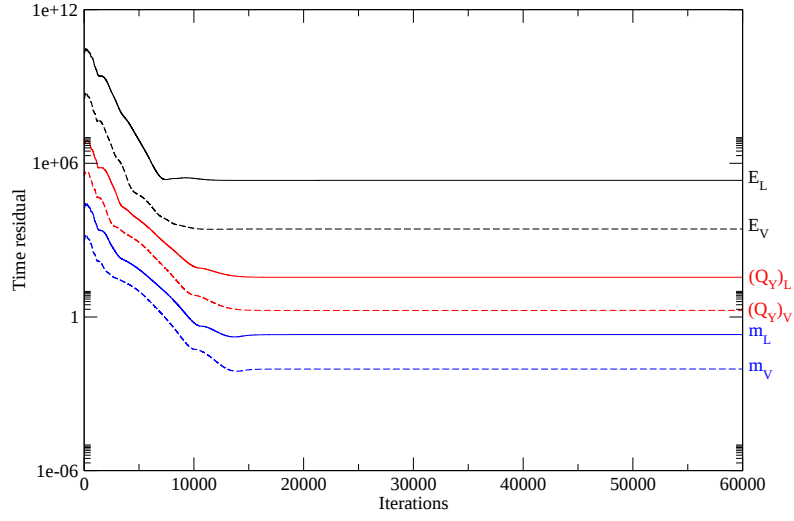


Figure 11. Test 4: Logarithm of the time residual of energy, momentum and mass for both phases for the finer mesh (d) (192×240 cells). Subscript L corresponds to the liquid and subscript V refers to the vapour.

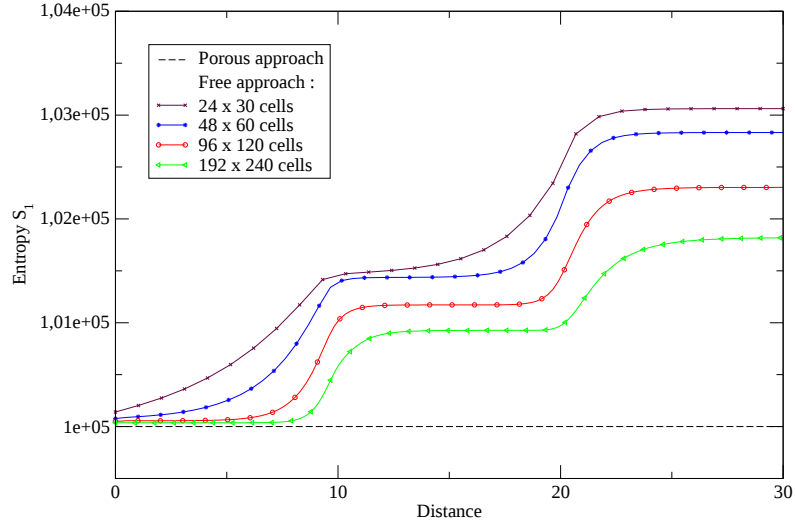


Figure 12. Liquid entropy profiles S_1 for the porous approach (dashed black line) and the free approach (plain lines) for Test 4 (including two medium changes).

We still focus on entropy profiles. Figure 12 presents on the same graph the liquid entropy S_1 along the y -axis for $x = 12$, for both the free and porous approaches, when using different meshes. The dashed black line corresponds to the porous approach (coarse and fine meshes give the same result: S_1 is constant), and plain lines correspond to the free approach. Turning then to the free approach, the brown line with crosses corresponds to the coarser mesh (a), the blue one with stars to the second coarser mesh (b), the red one with circles to mesh (c), and the green one with triangles corresponds to the finer mesh (d).

We can once more observe on Figure 12 that each transition (free medium to porous medium at $y = 10$, or the reverse at $y = 20$) leads to an increase of the entropy S_1 when focusing on the true approach with real obstacles, while the porous approach keeps the entropy constant.

C. On the influence of the number of obstacles

We now focus on the influence of the number of obstacles in the free approach. The main goal here is to make a comparison between different distributions of obstacles, while assuming a given aspect ratio $1/2$. We will also recall the comparison with the porous approach. This will help to evaluate the validity of the porous formulation.

1. Presentation of Test 5

Thus we compute again the free flow in the same computational domain as for Test 4 ($(x, y) \in [0, 24] \times [0, 30]$) with 192 cells on X and 240 cells on Y, while choosing a different number of obstacles in the porous region. The given aspect ratio is still $1/2$ in the middle of the domain (for $y \in [10, 20]$), that includes either 6, 12, 24 or 48 obstacles, when considering the free approach. A sketch is given in Figure 13.

In order to study the results obtained with the porous approach, the porosity distribution is again given by $\epsilon(x, y) = 1$ everywhere in the domain except for $y \in [10, 20]$ where $\epsilon(x, y) = 1/2$.

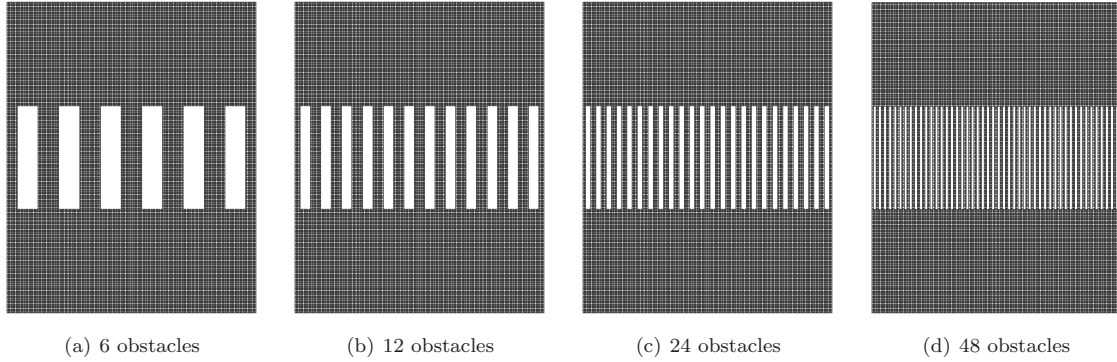


Figure 13. Computational domains used in Test 5 (192 cells on X, 240 on Y)

The same boundary conditions are imposed for both experiments (the same as for tests 3 and 4), and the CFL number is still $1/2$.

We examine steady results, focusing on the Riemann invariants of the standing wave.

2. Entropy profiles for Test 5

Figure 14 presents the liquid entropy profiles S_1 along the y -axis for $x = 12$. The dashed black line corresponds to the porous approach and plain lines correspond to the free approach with different numbers of obstacles. The green (respectively red, blue, brown) line corresponds to the simulation of the free approach including 6 (respectively 12, 24, 48) obstacles, computed with a mesh including (192×240) cells.

Whatever the number of obstacles is, the free approach leads to an increase of the liquid entropy S_1 at each medium transition, but the results obviously differ, depending on the number of obstacles. The following table presents liquid entropy values for $y = 15$ (in the porous medium) and $y = 26, 25$ (in the free medium, output). The relative error between the constant state of each computation in the free medium -

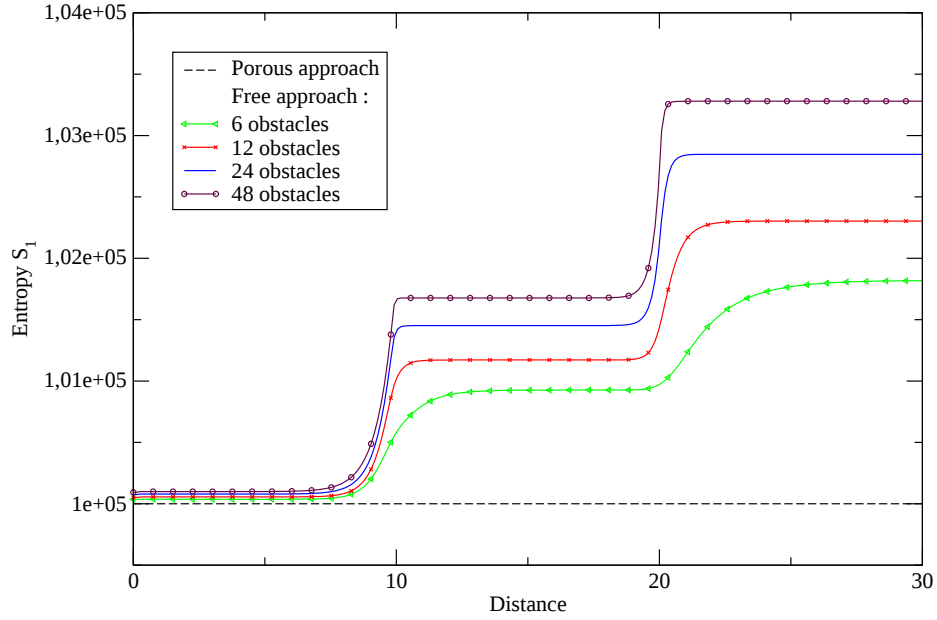


Figure 14. Liquid entropy profiles S_1 for the porous approach (dashed black line) and the free approach (plain lines) along the y -axis, using 6, 12, 24, 48 obstacles. Mesh size: 192×240 cells

on the finer mesh- and the S_1 's value for the porous approach are evaluated as follows :

$$\Delta_{S_1} = \left(\frac{(S_1(y))_{free} - (S_1(y))_{porous}}{(S_1(y))_{porous}} \right)$$

Approach	porous medium $y = 15$	fluid medium, output $y = 26, 25$
Porous	$S_1 = 100000$	
Free - 6 obstacles	$S_1 = 100926$; $\Delta_{S_1} = 0,92\%$	$S_1 = 101816$; $\Delta_{S_1} = 1,82\%$
Free - 12 obstacles	$S_1 = 101172$; $\Delta_{S_1} = 1,17\%$	$S_1 = 102303$; $\Delta_{S_1} = 2,30\%$
Free - 24 obstacles	$S_1 = 101452$; $\Delta_{S_1} = 1,45\%$	$S_1 = 102847$; $\Delta_{S_1} = 2,84\%$
Free - 48 obstacles	$S_1 = 101677$; $\Delta_{S_1} = 1,67\%$	$S_1 = 103280$; $\Delta_{S_1} = 3,28\%$

On the basis of graph 14, computational results show that the associated error is less than 3%, and we also know from Test 4 results, that the error decreases with a mesh refinement. It also clearly arises that discrepancies slightly increase with the number of obstacles, for a given number of cells in the computational domain. However, it must be emphasized that a larger mesh refinement is expected in order to reach a fair level of accuracy, for the case involving the greater number of obstacles.

3. Test 5: Mass flow rate profiles

In order to compare the porous approach results where the mass flow rates are $(Q_k)_{por} = \epsilon m_k U_k \cdot n$ on the one hand, and the free approach results where the mass flow rates are $(Q_k)_{free} = m_k U_k \cdot n$ on the other hand (since $\epsilon = 1$ everywhere), we focus on the mass flow rate integral over the x -axis, normal to the main flow direction. Thus the concept of the porous surface ϵ (equal to $1/2$ where $y \in [10, 20]$) may be taken into account in both the free and the porous approaches.

Focusing on *steady* results, we recall that the mass flow rate Q_k is a Riemann invariant in the standing wave for the porous approach. Turning then to the free approach, we note that the integral of the mass flow rate also has to be constant for steady states. This is true for *interface values for any mesh size*, and also

for cell mean values when the mesh size tends towards 0 .

The discrete form of this integral $\int_x \alpha_k \rho_k U_k \cdot n \, dS$, for a given $y \in [0, 30]$, is $\sum_i (\alpha_k \rho_k U_k \cdot n)_i S_i$ along the corresponding line indexed by j . The discrete integral of the liquid mass flow rate is plotted on Figure 15, for all meshes, when the domain contains six obstacles. We emphasize here that *the integral that has been computed takes cell values into account*.

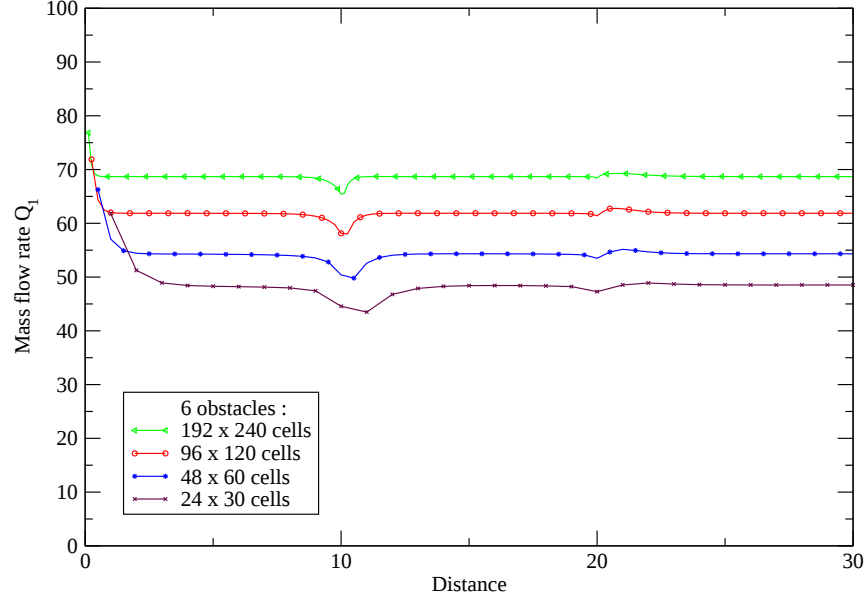


Figure 15. Discrete mass flow rate profiles Q_1 for the free approach (plain lines) along the y -axis (240 cells), focusing on Test5 including six obstacles, and for different mesh sizes.

We turn now to the influence of obstacles (see Figure 16). The dashed black line corresponds to the porous approach and plain lines correspond to the free approach. The green (respectively red, blue, brown) line corresponds to the simulation of the free approach including 6 (respectively 12, 24, 48) obstacles.

We notice that the integral mass flow rate is almost uniform around sharp transitions, whatever the mesh refinement is (see Figure 15), and also independently of the number of obstacles (see Figure 16). This is indeed confirmed by a mesh refinement. It confirms that the current coupling condition in the porous model, which enforces a constant mass flow rate on the sharp free-porous interface, is fine.

Similar results and comments pertaining to the third Riemann invariant of the standing wave (corresponding to the enthalpy H_k) hold. This again validates the basic porous approach in presence of a sharp free-porous transitions.

The last series of figures provides some velocity profiles.

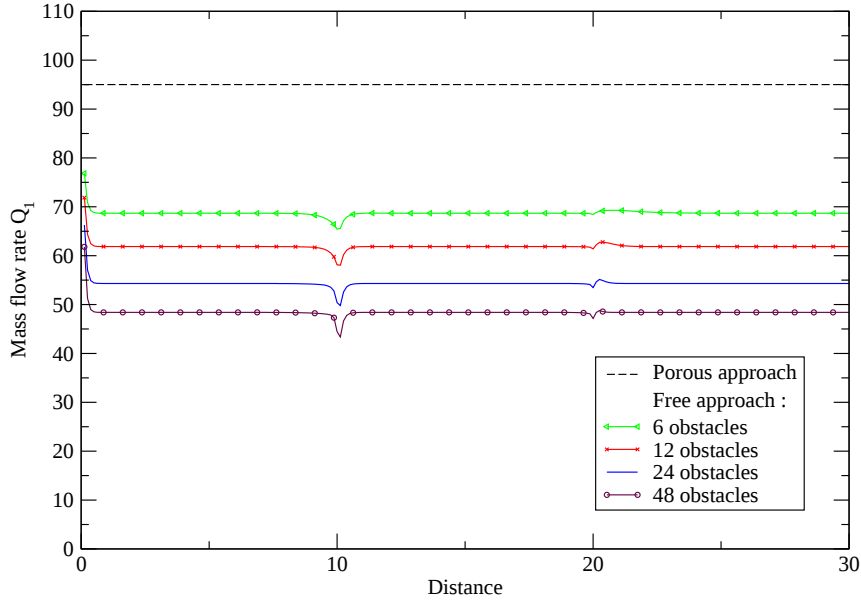


Figure 16. Profiles for liquid mass flow rates Q_1 for the porous approach (dashed black line) and the free approach (plain lines) along the y -axis (240 cells), considering 6, 12, 24, 48 obstacles.

Conclusion

One first main conclusion is that the simple well-balanced scheme described here is indeed a useful tool in order to tackle the computation of two-phase flows in domains containing porous areas. This is really interesting, since it suggests that one can now concentrate on the "ultimate" formulation for the coupling boundary conditions between a free and a porous region, and then rely on the proposed well-balanced numerical strategy in order to compute approximations of solutions that will comply with these prescribed -and enforced- boundary conditions.

Moreover, we have investigated and compared in this paper the results obtained while retaining the 3D homogenized approach (the so-called porous formulation), or alternatively the true three-dimensional approach where all obstacles are taken into account in the computational domain and meshes. More precisely, we have examined discrepancies in results connected to the flow coming from a free region and entering a domain filled with tubes or rods aligned with the mean flow direction. This corresponds to a schematic representation of the flow entering the core region or a steam generator, in the coolant circuit of a pressurized water reactor. The comparison suggests a few conclusions that are listed below.

- *Concerning competitiveness*, we may claim that for a given number of cells, the porous approach enables to reach convergence (with respect to the mesh size) much faster than the true 3D approach. This of course is interesting for industrial purposes.
- *Concerning the suitability of algorithms*, the proposed well-balanced scheme behaves well in the 3D porous approach, in terms of stability. Obviously its Rusanov flavour does not favour the accuracy, for a given mesh size, and one may expect that more accurate well-balanced approximate Riemann solvers (such as the one described in^{14,15}) might improve the accuracy of computations.
- *Turning then to the coupling boundary conditions*, the comparison suggests that the enforced coupling conditions through a free/porous interface that are implicitly provided by the Greenberg-Leroux formalism might be improved, and more precisely that the preservation of the entropy is a bit too rough. Some alternative proposals in that direction are currently investigated, which aim at providing realistic corrections such as those described in¹⁸.

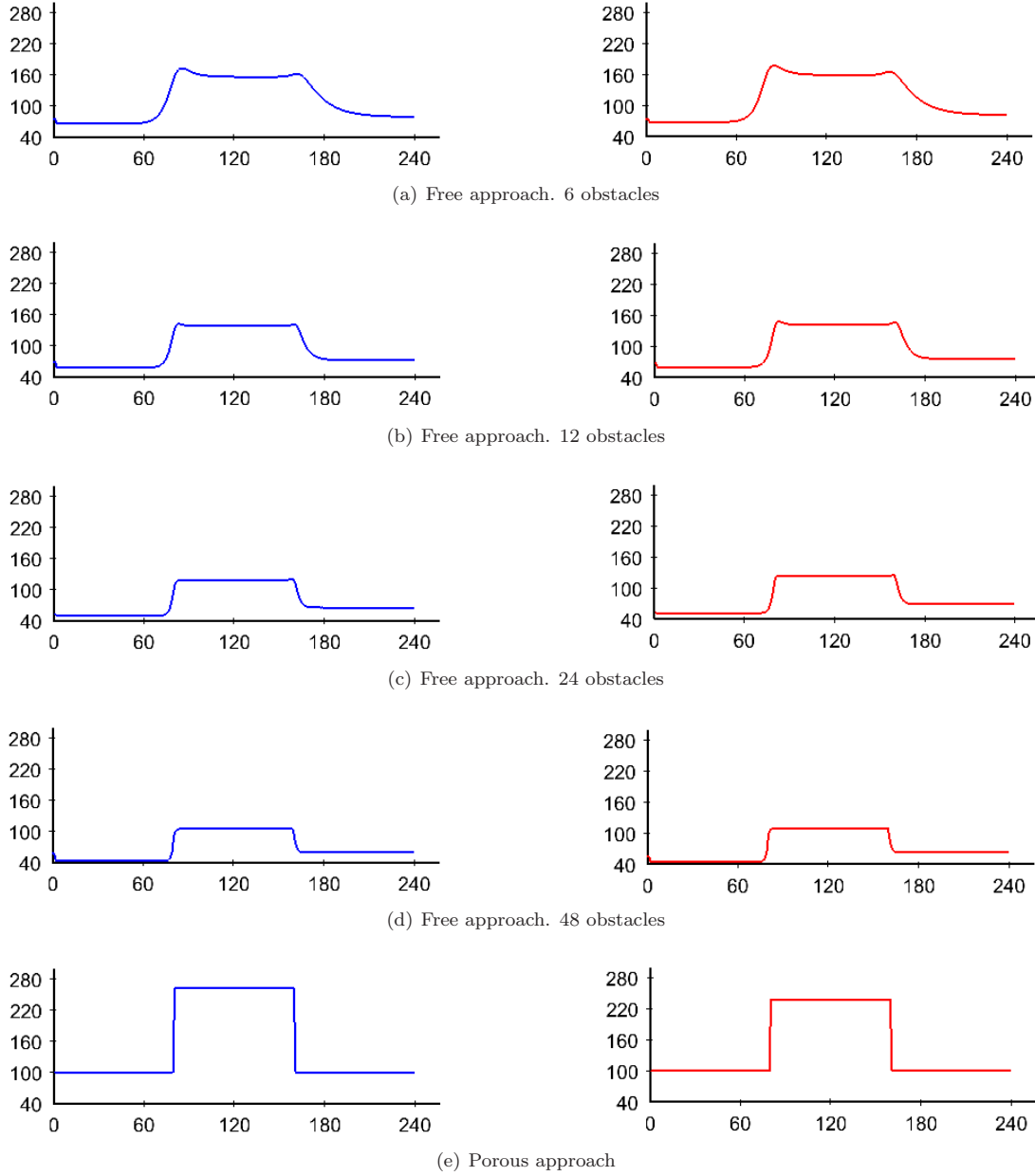


Figure 17. Liquid and vapour velocity profiles V_1 (on the left side) and V_2 (on the right side) along the y -axis, for x situated in the middle of the domain. Computations (a) to (d) : free approach, computation (e) : porous approach. Values on the abscissa axis of the graph correspond to the cell number.

Acknowledgments:

This work has been achieved in the framework of the NEPTUNE project, financially supported by CEA (Commissariat à l’Energie Atomique), EDF, IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire) and AREVA-NP. Part of the financial support of the first author is provided by ANRT (Association Nationale de la Recherche Technique, Ministère chargé de la recherche) through a EDF/CIFRE contract, and also by FSE (Fonds Social Européen). Both reviewers are also acknowledged for their remarks and suggestions which helped improving the initial manuscript.

VII. Appendix A

We give below some details of the proof for property 5, that ensures the positivity of partial masses and void fractions if some CFL condition holds.

Partial masses

The proof is easy to obtain. Starting from the cell scheme (18):

$$\Omega_i(Z_i^{n+1} - Z_i^n) + \Delta t^n \sum_{j \in V(i)} (F(Z_i^n, Z_{ij,i}^n, n_{ij}) S_{ij}) + \Delta t^n (NCT)_i^n = 0 \quad (26)$$

we know that cell values of partial masses are updated through:

$$\Omega_i((m_k)_i^{n+1} - (m_k)_i^n) + \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in V(i)} ((m_k U_k)_i^n \cdot n_{ij} + (m_k U_k)_{ij,i}^n \cdot n_{ij} - (r_{WB})_{ij}^n ((m_k)_{ij,i}^n - (m_k)_i^n)) S_{ij} = 0 \quad (27)$$

Thus:

$$\Omega_i((m_k)_i^{n+1} - (m_k)_i^n) + \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in V(i)} ((m_k U_k)_{ij,i}^n \cdot n_{ij} - (r_{WB})_{ij}^n ((m_k)_{ij,i}^n - (m_k)_i^n)) S_{ij} = 0 \quad (28)$$

since $\sum_{j \in V(i)} n_{ij} S_{ij} = 0$. Hence we get:

$$\Omega_i(m_k)_i^{n+1} = (m_k)_i^n \left(\Omega_i - \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in V(i)} (r_{WB})_{ij}^n S_{ij} \right) + \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in V(i)} (m_k)_{ij,i}^n ((r_{WB})_{ij}^n - (U_k)_{ij,i}^n \cdot n_{ij}) S_{ij} \quad (29)$$

Owing to the definition of $(r_{WB})_{ij}^n$, and to the fact that both $0 \leq (m_k)_i^n$ and $0 \leq (m_k)_{ij,i}^n$, we may conclude that $(m_k)_i^{n+1}$ is positive provided that the following CFL-like condition holds:

$$\frac{\Delta t^n}{2\Omega_i} \sum_{j \in V(i)} (r_{WB})_{ij}^n S_{ij} \leq 1$$

which concludes the proof.

Void fractions

Once again, starting from (18), we know that cell values of void fractions are governed by:

$$\Omega_i((\alpha_2)_i^{n+1} - (\alpha_2)_i^n) + \Delta t^n (V_I)_i^n \cdot \sum_{j \in V(i)} (\bar{\alpha}_2)_{ij} n_{ij} S_{ij} - \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in V(i)} (r_{WB})_{ij}^n ((\alpha_2)_{ij,i}^n - (\alpha_2)_i^n) S_{ij} = 0 \quad (30)$$

Thanks to $(\alpha_2)_{ij,i}^n = (\alpha_2)_j^n$, we deduce:

$$\Omega_i(\alpha_2)_i^{n+1} = (\alpha_2)_i^n \left(\Omega_i - \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in V(i)} (r_{WB})_{ij}^n S_{ij} \right) + \frac{\Delta t^n}{2} \sum_{j \in V(i)} (\alpha_2)_j^n ((r_{WB})_{ij}^n - (V_I)_i^n \cdot n_{ij}) S_{ij} \quad (31)$$

The definition of $(r_{WB})_{ij}^n$ and the above mentioned CFL condition enable to conclude that $(\alpha_2)_i^{n+1}$ remains positive, since all quantities $(\alpha_2)_m^n$ are assumed to be positive. A similar result holds for α_1 .

VIII. Appendix B

Friction effects may be taken into account within the porous medium. For that purpose, we need to introduce additional terms f_k, g_k in both momentum and energy governing equations. These turn out to be :

$$\begin{cases} \partial_t(\epsilon) = 0 \\ \partial_t(\alpha_2) + V_I \cdot \nabla(\alpha_2) = \phi_2(W) \\ \partial_t(\epsilon m_k) + \nabla \cdot (\epsilon m_k U_k) = 0 \\ \partial_t(\epsilon m_k U_k) + \nabla \cdot (\epsilon m_k U_k \otimes U_k) + \epsilon \alpha_k \nabla(P_k) + \epsilon(P_k - P_I) \nabla(\alpha_k) = \epsilon D_k(W) + \epsilon f_k(W) \\ \partial_t(\epsilon \alpha_k E_k) + \nabla \cdot (\epsilon \alpha_k U_k (E_k + P_k)) + \epsilon P_I \partial_t(\alpha_k) = \epsilon \psi_k + \epsilon V_I \cdot D_k(W) + \epsilon g_k(W) \end{cases} \quad (32)$$

We now wonder what is the influence of these friction terms on the entropy inequality. The derivation of the entropy time variation is straightforward. We thus only recall here the final expression:

$$\partial_t(\eta) + \nabla \cdot (f_\eta) = S_\eta(W) + \epsilon \sum_k a_k(g_k(W) - f_k(W) \cdot U_k) . \quad (33)$$

Starting from expressions arising from the literature³, we get $g_k(W) = 0$ and:

$$f_k(W) = -M_k U_k . \quad (34)$$

Obviously, the friction effects will contribute to the entropy production provided that the matrices $M_k + M_k^t$ are positive half-definite, which is guaranteed by standard closure laws (see³).

IX. Appendix C

Jump conditions in single GNL waves are simply those corresponding to a pure single phase framework, due to the decoupling of both phases on each side of the coupling wave associated to λ_1 . In a one-dimensional framework, an unsteady shock wave, separating two states W_l, W_r , and travelling at speed σ in the n direction is characterized by :

$$\begin{aligned} [\alpha_k]_l^r &= 0 \\ -\sigma[\rho_k]_l^r + [\rho_k U_k]_l^r &= 0 \\ -\sigma[\rho_k U_k]_l^r + [\rho_k U_k^2 + P_k]_l^r &= 0 \\ -\sigma[E_k]_l^r + [U_k(E_k + P_k)]_l^r &= 0 \end{aligned} \quad (35)$$

X. Appendix D

We assume that both ϵ_i and ϵ_j are non zero. On the ij interface separating cells i and j (on the left side and right side respectively), we introduce the outward unit normal n_{ij} . We also define vectors $(\tau_1)_{ij}$ and $(\tau_2)_{ij}$ in such a way that $(n, \tau_1, \tau_2)_{ij}$ is an orthonormal basis. $Z_{ij,i}$ must comply with :

$$Inv_m^0(Z_{ij,i}^n, \epsilon_i) = Inv_m^0(Z_j^n, \epsilon_j)$$

for $m = 0, \dots, 10$. Thus we get:

$$\begin{aligned} (\alpha_2)_{ij,i}^n &= (\alpha_2)_j^n \\ (s_k)_{ij,i}^n &= (s_k)_j^n \\ (U_k)_{ij,i}^n \cdot (\tau_1)_{ij} &= (U_k)_j^n \cdot (\tau_1)_{ij} \\ (U_k)_{ij,i}^n \cdot (\tau_2)_{ij} &= (U_k)_j^n \cdot (\tau_2)_{ij} \end{aligned}$$

and:

$$\begin{aligned} \epsilon_i(\alpha_k)_{ij,i}^n(\rho_k)_{ij,i}^n(U_k)_{ij,i}^n \cdot n_{ij} &= \epsilon_j(\alpha_k)_j^n(\rho_k)_j^n(U_k)_j^n \cdot n_{ij} \\ h_k((s_k)_{ij,i}^n, (\rho_k)_{ij,i}^n) + 1/2((U_k)_{ij,i}^n \cdot n_{ij})^2 &= h_k((s_k)_j^n, (\rho_k)_j^n) + 1/2((U_k)_j^n \cdot n_{ij})^2 \end{aligned}$$

where : $h_k(s_k, \rho_k) = e_k(P_k(s_k, \rho_k), \rho_k) + P_k(s_k, \rho_k)/\rho_k$. Setting $X = (\rho_k)_{ij,i}^n$, we must solve :

$$\psi_{ij,i}^n(X) = 0 \quad (36)$$

where :

$$\psi_{ij,i}^n(X) \stackrel{def}{=} (h_k((s_k)_j^n, X) - h_k((s_k)_j^n, (\rho_k)_j^n)) + 1/2((U_k)_j^n \cdot n_{ij})^2 \left(\frac{(\epsilon_j(\rho_k)_j^n)^2}{(\epsilon_i X)^2} - 1 \right) \quad (37)$$

The solution is obviously $X = (\rho_k)_j^n$ when $\epsilon_i = \epsilon_j$. If $\epsilon_i \neq \epsilon_j$, we use the following procedure :

- If $(U_k)_j^n \cdot n_{ij} = 0$, the solution of (36) is $X = (\rho_k)_j^n$.

- Otherwise, we compute $X_{min} > 0$ solution of :

$$X_{min}^3 (\partial_{\rho_k} (h_k(s_k, \rho_k))) ((s_k)_j^n, X_{min}) = \left(\frac{\epsilon_j (\rho_k)_j^n (U_k)_j^n \cdot n_{ij}}{\epsilon_i} \right)^2 > 0 \quad (38)$$

Then:

- Either:

$$\psi_{ij,i}^n(X_{min}) \leq 0$$

In that case, the equation (36) admits two solutions $X^- \in]0, X_{min}]$ and $X^+ \in [X_{min}, +\infty[$. The final solution is $X = X^-$ if $(\rho_k)_j^n \leq X_{min}$, and $X = X^+$ if $X_{min} \leq (\rho_k)_j^n$.

- Otherwise, (36) has no solution. We enforce in that case : $X = X_{min}$, thus minimizing $(\psi_{ij,i}^n(X))^2$.

References

- ¹ AMBROSIO A., CHALONS C., COQUEL F., GALIÉ T., "Relaxation and numerical approximation of a two-fluid two-pressure diphasic model", *Math. Model. Numer. Analysis*, vol. 43, pp. 1063-1097, 2009.
- ² AMBROSIO A., CHALONS C., COQUEL F., GODLEWSKI E., LAGOUTIÈRE F., RAVIART P. A., SEGUIN N., Working group on the interfacial coupling of models, <http://www.ann.jussieu.fr/groupe/cea>.
- ³ AUBRY S., CAHOUE T., LEQUESNE P., NICOLAS G., PASTORINI S., "THYC: Code de Thermohydraulique des Coeurs de Réacteurs. Version 1.0 Modélisation et Méthodes Numériques", *Rapport EDF H-T10-1988-02769-FR*, in French, 1988.
- ⁴ BAER M.R., NUNZIATO J.W., "A two-phase mixture theory for the deflagration to detonation transition (DDT) in reactive granular materials", *Int. J. Multiphase Flow*, vol. 12(6), pp. 861-889, 1986.
- ⁵ BOUCHUT F., "Nonlinear stability of Finite Volume methods for hyperbolic conservation laws, and well-balanced schemes for sources", *Frontiers in Mathematics series, Birkhauser*, 2004.
- ⁶ Z. CHEN AND R. EWING, "Comparison of various formulations of three-phase flow in porous media", *J. of Comp. Phys.*, vol. 132, pp 362-373, 1997.
- ⁷ COQUEL F., GALLOUËT T., HÉRARD J.-M., SEGUIN N., "Closure laws for a two-fluid two-pressure model", *C. R. Acad. Sci. Paris*, vol. I-332, pp. 927-932, 2002.
- ⁸ GALLOUËT T., HELLUY P., HÉRARD J.-M., NUSSBAUM J., "Hyperbolic relaxation model for granular flow", *Math. Model. Numer. Analysis*, to appear.
- ⁹ GALLOUËT T., HÉRARD J.-M., SEGUIN N., "Numerical modelling of two phase flows using the two-fluid two-pressure approach", *Math. Mod. Meth. in Appl. Sci.*, vol. 14(5), pp. 663-700, 2004.
- ¹⁰ GIRAULT L., HÉRARD J.-M., "A two-fluid hyperbolic model in a porous medium", *internal EDF report H-181-2008-1947-EN*, submitted for publication in revised form, 2009.
- ¹¹ GODLEWSKI E., "Coupling fluid models. Exploring some features of interfacial coupling", *Proceedings of Finite Volumes for Complex Applications V, ISTE-Wiley*, pp. 87-102, Aussois, France, June 8-13, 2008.
- ¹² GREENBERG J.M., LEROUX A.Y., "A well balanced scheme for the numerical processing of source terms in hyperbolic equations", *SIAM J. Num. Anal.*, vol. 33(1), pp. 1-16, 1996.
- ¹³ GUILLEMAUD V., "Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques par une approche bifluide à deux pressions", PhD thesis, Université Aix Marseille I, Marseille, France, 27th of March, 2007.
- ¹⁴ HELLUY P., HÉRARD J.-M., MATHIS H., "A well-balanced approximate Riemann solver for variable cross-section compressible flows, AIAA paper 2009-3540, see: <http://www.aiaa.org/>, 2009.
- ¹⁵ HÉRARD J.-M., "A rough scheme to couple free and porous media", *Int. J. Finite Volumes (electronic)*, <http://www.latp.univ-mrs.fr/IJFV/>, vol. 3(2), pp. 1-28, 2006.
- ¹⁶ HÉRARD J.-M., "Un modèle hyperbolique diphasique bi-fluide en milieu poreux", *EDF report H-181-2007-02622-FR*, also in *CRAS Paris Mécanique*, vol. 336, pp. 650-655, 2008.
- ¹⁷ HÉRARD J.-M., HURISSE O., "Couplage interfacial d'un modèle homogène et d'un modèle bifluide", *internal EDF report H-181-2006-04691-FR*, in French, 2006.
- ¹⁸ IDEL'CIK I., "Mémento des pertes de charges", *Collection de la Direction des Etudes et Recherches d'Electricité de France*, in French, Eyrolles, pp. 1-504, 1986.
- ¹⁹ KAPILA A.K., SON S.F., BDZIL J.B., MENIKOFF R., STEWART D.S., "Two-phase modeling of a DDT: structure of the velocity relaxation zone", *Phys. of Fluids*, vol. 9(12), pp. 3885-3897, 1997.
- ²⁰ KRÖNER D., LE FLOCH P., THANH M.D., "The minimum entropy principle for compressible fluid flows in a nozzle with discontinuous cross section", *Math. Mod. Num. Anal.*, vol. 42(3), pp. 425-443, 2008.
- ²¹ KRÖNER D., THANH M.D., "Numerical solution to compressible flows in a nozzle with variable cross-section", *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 43(2), pp. 796-824, 2006.
- ²² M. VALETTE AND S. JAYANTI, "Annular dispersed flow calculations with a two-phase three field model", *European Two phase Flow Group Meeting, Norway*, internal CEA report DTP/SMTH/LMDS/2003-085, 2003.

4 Couplage interfacial d'un modèle triphasique et d'un modèle diphasique

On examine dans cette troisième partie le problème du couplage interfacial instationnaire d'un modèle hyperbolique triphasique et d'un modèle hyperbolique diphasique. La motivation essentielle est liée aux nouvelles fonctionnalités du code de thermohydraulique nucléaire CATHARE3, qui permet d'utiliser chacun de ces deux modèles. Il s'agit donc de proposer une approche simple permettant d'envisager un calcul couplé instationnaire au sein de cette unité de code ¹⁴.

La technique utilisée s'inspire très fortement de celle associée à l'algorithme de couplage décrit dans ¹⁵, et consiste à utiliser un modèle père hyperbolique à l'interface de couplage. Une différence essentielle ici est liée au fait que les deux modèles sont plus clairement hiérarchisés que dans la référence précédente. Il n'existe en particulier aucune ambiguïté concernant les lois d'état thermodynamique des deux modèles, et leur compatibilité ¹⁶.

La mise en oeuvre est clairement faite en dimension un d'espace, mais la méthodologie s'étend naturellement au cadre multidimensionnel. On rappelle cependant que le code d'accueil est structurellement uni-dimensionnel et non visqueux, ce qui justifie l'approche retenue ici. Signalons toutefois que les modèles utilisés par la suite ne sont pas rigoureusement identiques à ceux du code considéré, puisque le code CATHARE retient par principe une hypothèse d'équilibre local instantané en pression au sein des diverses phases en présence. En outre, le code CATHARE contient un nombre important de termes sources (qui dépendent de la variable d'état, et non des ses gradients), que nous ne considérons pas dans ce qui suit. Ces différents termes font intervenir de nombreuses échelles de temps distinctes.

Il s'agit en fait de faire essentiellement une étude de faisabilité méthodologique. De nombreux points seraient *a priori* perfectibles, concernant par exemple le traitement des termes sources par une technique de décentrement adaptée, telle que celle proposée dans ¹⁷. Une technique plus précise de décentrement pourrait également être envisagée à terme.

¹⁴La note qui suit est parue comme note interne EDF R&D H-I81-2010-0355-FR

¹⁵Couplage interfacial d'un modèle homogène et d'un modèle bifluide, J.M. Hérard, O. Hurisse, note EDF R&D H-I81-2006-04691-FR

¹⁶Modélisation et simulation de fluides complexes. Annalisa Ambroso, Université Pierre et Marie Curie, Thèse d'Habilitation à Diriger des Recherches, 23 septembre 2009.

¹⁷Relaxation and numerical approximation of a two-fluid two-pressure model, A. Ambroso, C. Chalons, F. Coquel, T. Galié, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol. 43, pp. 1063-1097, 2009

Proposition pour un couplage interfacial instationnaire d'un modèle triphasique et d'un modèle diphasique

Laëtitia Girault ^{*}
EDF R&D

Jean-Marc Hérard[†]
EDF R&D

On présente dans cette note une technique de simulation pour le couplage interfacial instationnaire d'un modèle triphasique et d'un modèle diphasique. Les deux modèles sont hyperboliques sur l'espace des états admissibles. L'approche retenue pour la mise en oeuvre du couplage est similaire à celle proposée dans²⁹, et s'appuie sur l'utilisation d'un modèle père à l'interface. On présente tout d'abord les deux modèles à coupler, en rappelant leurs principales propriétés. On détaille ensuite la procédure de couplage interfacial instationnaire. On termine en présentant quelques cas tests de simulation.

I. Introduction

Certaines configurations industrielles peuvent nécessiter à la fois la modélisation d'écoulements triphasiques et diphasiques.

Dans l'industrie pétrolière par exemple, le développement et la mise en place de nouvelles techniques de récupération d'hydrocarbures mettent en jeu des écoulements triphasiques type eau-huile-gaz dans des conduites, ou au sein de milieux poreux sur les sites d'extraction.

Dans le domaine nucléaire, on est parfois amené à envisager une modélisation analogue dans le but de simuler certains accidents comme l'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP). Dans un Réacteur à Eau sous Pression (REP), l'APRP se traduit par un transitoire thermohydraulique dans le circuit primaire du réacteur pouvant aller jusqu'à l'assèchement total du coeur. La dépressurisation du circuit primaire et la montée des températures dans le coeur pourraient conduire à des déformations et à des dommages importants des crayons combustible. L'APRP, bien que peu probable, pourrait avoir des conséquences très graves vis-à-vis des relachements de produits radioactifs dans l'atmosphère. En cas de fuite de fluide caloporteur au niveau du coeur du réacteur nucléaire, il est donc impératif d'injecter de l'eau rapidement, afin de tout "renoyer" pour faire baisser la température à l'intérieur de la cuve et ainsi minimiser les conséquences d'un APRP sur l'environnement.

Dans une telle configuration de renoyage, on peut alors considérer que l'on est en présence de trois "phases" :

- une phase de *liquide continu*, dans le bas de la cuve
- une phase de *vapeur continue*, dans le haut de la cuve
- une phase de *liquide dispersé*, représentant l'ensemble des gouttelettes d'eau "éjectées" au sein la phase vapeur lorsque l'eau entre en contact avec les crayons combustibles dans le coeur du réacteur (projections). Le liquide dispersé est alors la phase la moins présente.

^{*}EDF R&D, Mécanique des Fluides, Energie et Environnement, 6 quai Watier, 78400, Chatou, France. Egalement: Centre de Mathématique et Informatique, LATP, 39 rue Joliot Curie, 13453, Marseille cedex 13, France

[†]EDF R&D, Mécanique des Fluides, Energie et Environnement, 6 quai Watier, 78400, Chatou, France. Tel: (33)-1-30 87 70 37. Email: Jean-Marc.Herard@edf.fr

Dans ce cas, on parle plutôt d'écoulement à *trois champs* que d'écoulement triphasique (parce qu'il n'y a toujours que deux phases, mais trois champs sont considérés). Dans le reste du document, on parlera indifféremment de modèle triphasique ou de modèle à trois champs ⁽³⁸⁾ .

Le modèle classiquement utilisé dans le reste du circuit primaire étant un modèle diphasique, ceci pose implicitement le problème du couplage interfacial d'un modèle à trois champs et d'un modèle diphasique, si l'on souhaite représenter l'ensemble du circuit primaire. Ce dernier chapitre présente donc une méthode de couplage, basée sur le formalisme du modèle père, présenté dans^{14,29,31} et s'inspirant des idées de Greenberg-Leroux²² . Cette problématique a également été largement examinée par les membres du groupe de travail⁴ et dans les références^{1,5-7,12,19,20,30,32} . On renvoie également le lecteur aux notes de synthèse^{1,18,33} .

Après avoir décrit les modèles hyperboliques utilisés pour simuler des écoulements diphasiques et triphasiques, on expliquera la procédure mise en place en vue d'un couplage interfacial de ces deux modèles. On s'attachera ensuite à décrire les algorithmes de simulation retenus pour chacun de ces deux modèles, en insistant bien sur le fait que le modèle diphasique est ici simulé de manière formelle à partir du modèle triphasique grâce à une étape de relaxation instantanée.

Ce sera donc après avoir présenté la cohérence des résultats obtenus grâce à cet algorithme formel de simulation d'écoulements diphasiques avec ceux obtenus par une simulation classique du modèle diphasique, que l'on présentera des résultats d'un problème de couplage interfacial à proprement parler entre le modèle triphasique et le modèle diphasique.

II. Modèle triphasique

Le modèle triphasique utilisé ici a été présenté en détail dans²⁵. Ce modèle propose de respecter un certain nombre de propriétés telles que:

- (C1) l’hyperbolicité du système convectif homogène,
- (C2) la consistance avec l’inégalité d’entropie pour les termes sources et visqueux,
- (C3) l’unicité des relations de saut champ par champ,
- (C4) le respect de la positivité des variables solutions : taux de présence, densité, énergie interne.

Contrairement aux modèles utilisés dans l’industrie pétrolière, où les lois de comportement de débit phasique sont régies par un formalisme de type ”loi de Darcy” généralisée (voir par exemple l’article⁹), les débits phasiques Q_k sont solutions d’EDP assez complexes, qui sont en outre fortement couplées aux équations de bilan d’énergie totale phasique. La dérivation du modèle triphasique utilisé ici est décrite en détail dans²⁴, nous en rappelons néanmoins les principaux éléments ci-dessous. Il s’agit en fait essentiellement de proposer des lois de transfert interfacial de quantité de mouvement et d’énergie totale phasique du premier ordre (termes de nature convective) qui soient physiquement admissibles et compatibles avec le cahier des charges défini par les contraintes (C1-C4). En imposant la contrainte (C2) du cahier des charges aux termes de transfert interfacial, et en établissant un bilan d’entropie physiquement admissible, on peut montrer que dans la phase k , tous les termes inconnus (qualifiés souvent de ”pression interfaciale”) P_{kl} (pour l différent de k), cofacteurs des gradients des taux de présence de phase l , i.e. $\partial_x(\alpha_l)$, peuvent s’exprimer de manière unique en fonction de la ”vitesse d’interface” notée V_I , celle-ci dépendant de la variable d’état W . Cette vitesse V_I est *unique*, puisqu’elle porte l’interface statistique entre les phases, et non pas dépendante de la phase k , point assez confus dans le contexte diphasique. En fait, si tel n’était pas le cas, le principe du maximum pour les taux de présence statistique ne pourrait être assuré pour toute donnée initiale admissible (C4).

Il reste à ce stade à imposer des formes physiquement admissibles pour le champ de vitesse V_I , qui vérifient bien entendu un principe d’objectivité. Il importe de remarquer que le système est alors hyperbolique (C1), pour tout choix de V_I , dès lors que les vitesses relatives $(u_k - u_l)/c_l$ ne sont pas égales à ± 1 . Si l’on retient alors pour V_I l’hypothèse de combinaison convexe en fonction des vitesses phasiques, et que l’on impose le respect de la condition (C3) du cahier des charges, on aboutit à des propositions conformes à celles proposées dans le cadre diphasique dans^{10,15}. Un choix admissible, qui permette donc d’avoir des conditions de saut uniques champ par champ, correspond au choix $V_I = U_{k_0}$, où k_0 désigne l’indice de la phase la moins présente. Le système d’EDP aura alors une propriété importante, puisque le champ associé à V_I sera alors linéairement dégénéré.

Le modèle étant fermé en ce qui concerne les termes de transfert interfacial de type convectif, on peut alors ensuite proposer des lois de fermeture pour les termes sources de transfert interfacial qui soient compatibles avec l’inégalité d’entropie globale précédemment établie. On ne retiendra ici que les termes traduisant un retour à l’équilibre en vitesse-pression-température.

Avant de poursuivre, on pourra noter que, tout comme dans le cadre diphasique, on peut ensuite assez naturellement proposer des mécanismes de relaxation instantanée en pression⁽²⁶⁾, de sorte que l’on retrouve alors formellement les modèles triphasiques de l’industrie nucléaire ne considérant qu’un champ de pression moyen (voir par exemple³⁸). Il faut cependant impérativement garder à l’esprit le fait que lorsque l’on effectue un raffinement de maillage, on retrouvera naturellement le caractère non hyperbolique du modèle à champ de pression unique, ce qui se traduira en pratique par une divergence du calcul (voir par exemple la référence²⁸), et ce quel que soit le solveur considéré dans la phase d’évolution (voir également²³).

Nous présentons donc ici le modèle avec une notation spécifique à la modélisation à trois champs, qui nous intéresse dans le cadre du couplage interfacial de ce modèle avec un modèle diphasique liquide-vapeur, et pour un choix particulier (notamment au niveau des relations de fermeture, concernant la vitesse interfaciale). Ce choix correspond à une configuration peu dense en phase ”*liquide dispersé*”.

Comme précisé dans l'introduction de ce chapitre, les trois “phases” considérées ici sont:

- la phase de **liquide continu**, notée **lc**,
- la phase de **vapeur continue**, notée **v**,
- la phase de **liquide dispersé**, notée **ld**.

Par la suite, α_{lc} , α_{ld} , et α_v désigneront les taux de présence des variables de phase lc , ld , et v respectivement, sachant que $\alpha_{lc} > 0$, $\alpha_{ld} > 0$, et $\alpha_v > 0$, et que:

$$\alpha_{lc} + \alpha_{ld} + \alpha_v = 1 \quad (1)$$

ce qui traduit que les trois phases occupent entièrement l'espace. Si on note k l'indice général de phase ($k \in \{lc, ld, v\}$), U_k représente la vitesse, P_k la pression, ρ_k la densité, et m_k la masse partielle de la phase k telle que $m_k = \alpha_k \rho_k$.

Les énergies totales phasiques E_k s'expriment sous la forme suivante:

$$\begin{aligned} E_{lc} &= \frac{1}{2} \rho_{lc} (U_{lc})^2 + \rho_{lc} e_l(P_{lc}, \rho_{lc}) \\ E_{ld} &= \frac{1}{2} \rho_{ld} (U_{ld})^2 + \rho_{ld} e_l(P_{ld}, \rho_{ld}) \\ E_v &= \frac{1}{2} \rho_v (U_v)^2 + \rho_v e_v(P_v, \rho_v) \end{aligned} \quad (2)$$

et dépendent de la définition des énergies internes e_l et e_v choisies, sachant que $e = e(P, \rho)$ vérifie:

$$\rho c^2 = \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_{|\rho}^{-1} \left(\frac{P}{\rho} - \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_{|P} \right) > 0 \quad (3)$$

L'entropie phasique s_k associée à la phase k satisfait la contrainte:

$$\frac{\partial s_k}{\partial P_k}_{|\rho_k} / \frac{\partial s_k}{\partial \rho_k}_{|P_k} = -1/c_k^2 \quad (4)$$

où c_k représente la célérité du son à l'intérieur de la phase k .

Le modèle à trois champs s'écrit alors de la manière suivante:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_{lc}) + U_{ld} \partial_x (\alpha_{lc}) = \phi_{lc} \\ \partial_t (\alpha_v) + U_{ld} \partial_x (\alpha_v) = \phi_v \\ \partial_t (m_{lc}) + \partial_x (m_{lc} U_{lc}) = 0 \\ \partial_t (m_v) + \partial_x (m_v U_v) = 0 \\ \partial_t (m_{ld}) + \partial_x (m_{ld} U_{ld}) = 0 \\ \partial_t (m_{lc} U_{lc}) + \partial_x (m_{lc} U_{lc}^2) + \alpha_{lc} \partial_x (P_{lc}) = S_{lc} \\ \partial_t (m_v U_v) + \partial_x (m_v U_v^2) + \alpha_v \partial_x (P_v) = S_v \\ \partial_t (m_{ld} U_{ld}) + \partial_x (m_{ld} U_{ld}^2) + \alpha_{ld} \partial_x (P_{ld}) + (P_{lc} - P_{ld}) \partial_x (\alpha_{lc}) + (P_v - P_{ld}) \partial_x (\alpha_v) = -S_{lc} - S_v \\ \partial_t (\alpha_{lc} E_{lc}) + \partial_x (\alpha_{lc} U_{lc} (E_{lc} + P_{lc})) + P_{lc} \partial_t (\alpha_{lc}) = U_{ld} S_{lc} + \psi_{lc} \\ \partial_t (\alpha_v E_v) + \partial_x (\alpha_v U_v (E_v + P_v)) + P_v \partial_t (\alpha_v) = U_{ld} S_v + \psi_v \\ \partial_t (\alpha_{ld} E_{ld}) + \partial_x (\alpha_{ld} U_{ld} (E_{ld} + P_{ld})) - P_{lc} \partial_t (\alpha_{lc}) - P_v \partial_t (\alpha_v) = -U_{ld} S_{lc} - U_{ld} S_v - \psi_{lc} - \psi_v \end{array} \right. \quad (5)$$

On a omis ici les termes de transfert de masse interfacial, qui ne seront pas considérés au niveau des simulations numériques. Les termes sources sont définis comme suit:

$$\begin{aligned} \phi_{lc} &= \alpha_{lc} \alpha_{ld} (P_{lc} - P_{ld}) / \tau_{lc}^P / \Pi_0 \\ \phi_v &= \alpha_v \alpha_{ld} (P_v - P_{ld}) / \tau_v^P / \Pi_0 \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} S_{lc} &= \frac{m_{lc} m_{ld}}{m_{lc} + m_{ld}} (U_{ld} - U_{lc}) / \tau_{lc}^U \\ S_v &= \frac{m_v m_{ld}}{m_v + m_{ld}} (U_{ld} - U_v) / \tau_v^U \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned}\psi_{lc} &= C_v \left(\frac{m_{lc} m_{ld}}{m_{lc} + m_{ld}} \right) (T_{ld} - T_{lc}) / \tau_{lc}^T \\ \psi_v &= C_v \left(\frac{m_v m_{ld}}{m_v + m_{ld}} \right) (T_{ld} - T_v) / \tau_{lc}^T\end{aligned}\tag{8}$$

où $\tau_k^P \geq 0$, $\tau_k^U \geq 0$, et $\tau_k^T \geq 0$ sont des temps de relaxation en pression, vitesse et température des phases k , et où Π_0 représente une pression de référence.

Afin de définir de manière symétrique le système (5), on ajoute les fermetures suivantes:

$$\begin{aligned}\phi_{lc} + \phi_{ld} + \phi_v &= 0 \\ S_{lc} + S_{ld} + S_v &= 0 \\ \psi_{lc} + \psi_{ld} + \psi_v &= 0\end{aligned}\tag{9}$$

Ces équations permettent de définir implicitement ϕ_{ld} , ψ_{ld} , et S_{ld} , absents du système (contrairement à α_{ld} présent en fait dans la définition de m_{ld}). La deuxième équation traduit le fait que la somme des transferts interfaciaux de quantité de mouvement est nulle, et ψ désigne le transfert de chaleur entre les phases (de la plus chaude vers la plus froide). Ces deux dernières équations traduisent que le système est isolé. On note une certaine similitude avec le modèle *diphasique* de Baer-Nunziatto^{8,35}

Nous renvoyons à²⁵ pour une description des propriétés de ce système. Pour des temps longs, les termes sources tendent à ramener le système sur un état d'équilibre vitesse-pression-température. Néanmoins, nous insistons sur le fait que ce modèle triphasique est hyperbolique et que les solutions régulières vérifient une inégalité d'entropie.

Propriété 1: Hyperbolicité

Les valeurs propres associées à la partie convective du système (5) sont réelles:

$$\begin{aligned}\lambda_{1,2,3} &= U_{ld} \quad ; \quad \lambda_4 = U_{lc} \quad ; \quad \lambda_5 = U_v \\ \lambda_6 &= U_{ld} - c_{ld} \quad ; \quad \lambda_7 = U_{ld} + c_{ld} \\ \lambda_8 &= U_{lc} - c_{lc} \quad ; \quad \lambda_9 = U_{lc} + c_{lc} \\ \lambda_{10} &= U_v - c_v \quad ; \quad \lambda_{11} = U_v + c_v\end{aligned}$$

et les vecteurs propres associés engendrent l'espace des états admissibles si $|U_k - U_{ld}| \neq c_k$ avec $k = lc, v$. Les champs associés aux valeurs propres λ_k (avec $k = 1, \dots, 5$) sont linéairement dégénérés. Les autres champs sont vraiment non linéaires.

La structure du système permet d'envisager des simulations réellement instationnaires. La structure des ondes apparaissant dans le problème de Riemann unidimensionnel associé au système convectif issu de (5) est examinée dans l'article²⁵. Conformément au cahier des charges, le modèle bénéficie de la propriété suivante:

Propriété 2: Inégalité d'entropie

On note $\eta_k = \text{Log}(s_k)$. Les solutions régulières de (5) vérifient l'inégalité d'entropie suivante:

$$0 \leq \partial_t (\eta) + \partial_x (F_\eta)\tag{10}$$

où le couple entropie-flux d'entropie (η, F_η) est défini par:

$$\begin{aligned}\eta &= m_{ld} \eta_{ld} + m_{lc} \eta_{lc} + m_v \eta_v \\ F_\eta &= m_{ld} \eta_{ld} U_{ld} + m_{lc} \eta_{lc} U_{lc} + m_v \eta_v U_v\end{aligned}$$

On est ainsi en mesure d'examiner le caractère physique des ondes de choc, en considérant le comportement suivant pour une onde de choc se propageant à vitesse σ séparant deux états l et r :

$$-\sigma(\eta(W_r) - \eta(W_l)) + (F_\eta(W_r) - F_\eta(W_l)) > 0.$$

III. Modèle diphasique

A. Présentation du modèle

Les modèles que nous considérons ont été développés dans le cadre de la DDT (Deflagration to Detonation Transition), par des travaux menés notamment par Baer et Nunziato⁸ pour les applications gaz-particules, mais aussi par Kapila et Menikoff³⁵, et plus récemment dans^{13,16,37}. Ces modèles bifluides, qui font intervenir une échelle de temps de relaxation en pression, ont ensuite été appliqués au cadre des écoulements diphasiques liquide-vapeur, mais aussi dans le domaine nucléaire. Le modèle utilisé dans ce chapitre a notamment été présenté en détail dans^{10,15}. Il a été construit dans l'esprit de respect du cahier des charges (C1-C4) décrit plus haut. Il correspond également au modèle¹⁷ dans le cas d'une porosité uniforme. On renvoie aussi le lecteur à^{2,11,13,16,23,37} pour des travaux assez proches.

Si on utilise la notation suivante:

- la phase **liquide** est notée **l**,
- la phase **vapeur** est notée **v**,

ce modèle diphasique s'écrit sous la forme:

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_l) + V_I \partial_x (\alpha_l) = \phi_l \\ \partial_t (m_l) + \partial_x (m_l U_l) = 0 \\ \partial_t (m_v) + \partial_x (m_v U_v) = 0 \\ \partial_t (m_l U_l) + \partial_x (m_l U_l^2) + \alpha_l \partial_x (P_l) + (P_l - P_I) \partial_x (\alpha_l) = S_l \\ \partial_t (m_v U_v) + \partial_x (m_v U_v^2) + \alpha_v \partial_x (P_v) + (P_v - P_I) \partial_x (\alpha_v) = -S_l \\ \partial_t (\alpha_l E_l) + \partial_x (\alpha_l U_l (E_l + P_l)) + P_I \partial_t (\alpha_l) = V_I S_l + \psi_l \\ \partial_t (\alpha_v E_v) + \partial_x (\alpha_v U_v (E_v + P_v)) + P_I \partial_t (\alpha_v) = -V_I S_l - \psi_l \end{cases} \quad (11)$$

α_l et α_v désignant les taux de présence des variables de phase l et v respectivement, sachant que $\alpha_l > 0$ et $\alpha_v > 0$ tels que:

$$\alpha_l + \alpha_v = 1 \quad (12)$$

U_l et U_v représentent les vitesses liquide et vapeur, P_l et P_v les pressions, ρ_l et ρ_v les densités, et m_l et m_v les masses partielles des phases l et v telles que $m_{k'} = \alpha_{k'} \rho_{k'}$ avec l'indice de phase $k' = l, v$.

Les énergies totales phasiques $E_{k'}$ s'expriment sous la forme suivante:

$$E_{k'} = \frac{1}{2} \rho_{k'} (U_{k'})^2 + \rho_{k'} e_{k'}(P_{k'}, \rho_{k'})$$

et, comme pour le modèle triphasique présenté précédemment, elles dépendent de la définition des énergies internes $e_{k'}$ choisies selon une loi de thermodynamique. On utilisera évidemment ici les mêmes lois $e_l(P, \rho)$ et $e_v(P, \rho)$ que celles utilisées pour le modèle triphasique.

Afin de définir totalement le système (11), il reste à prescrire des lois de fermeture. Les termes sources sont définis par:

$$\begin{aligned} \phi_l &= \alpha_v \alpha_l (P_l - P_v) / \tau^P / \Pi_0 \\ S_l &= \frac{m_l m_v}{m_l + m_v} (U_v - U_l) / \tau^U \\ \psi_l &= (C_v)_0 \frac{m_l m_v}{m_l + m_v} (T_v - T_l) / \tau^T \end{aligned} \quad (13)$$

où $\tau^P \geq 0$, $\tau^U \geq 0$ et $\tau^T \geq 0$ sont des temps de relaxation en pression, vitesse et température, associés à l'équilibre liquide-vapeur.

Il reste finalement à définir le couple de vitesse et pression interfaciales. Différentes modélisations ont été proposées afin de définir des couples (V_I, P_I) admissibles, dont certaines ont été recensées dans^{23,37}. Nous utiliserons ici la fermeture proposée dans^{10,15}. Afin d'assurer la cohérence avec le modèle triphasique décrit ci-dessus, la vitesse d'interface sera: $V_I = U_l$. Dès lors, le champ de pression interfacial respectant le cahier des charges, et notamment (C2), sera: $P_I = P_v$.

B. Rappel des principales propriétés du modèle diphasique

On rappelle les principales propriétés du système (11) ci-dessous:

Propriété 3: Hyperbolicité

Les valeurs propres associées à la partie convective du système (11) sont réelles:

$$\begin{aligned}\lambda_{1,2} &= U_l & ; & \quad \lambda_3 = U_v \\ \lambda_4 &= U_l - c_l & ; & \quad \lambda_5 = U_l + c_l \\ \lambda_6 &= U_v - c_v & ; & \quad \lambda_7 = U_v + c_v\end{aligned}$$

et les vecteurs propres associés engendrent l'espace des états admissibles si $|U_v - U_l| \neq c_v$. Les champs associés aux valeurs propres λ_k (avec $k \in (1, 3)$) sont linéairement dégénérés. Les autres champs sont vraiment non linéaires.

Propriété 4: Inégalité d'entropie

Les solutions régulières de (11) vérifient l'inégalité d'entropie suivante:

$$0 \leq \partial_t (\mu) + \partial_x (G_\mu) \quad (14)$$

où (μ, G_μ) est défini par:

$$\begin{aligned}\mu &= m_l \eta_l + m_v \mu_v \\ G_\mu &= m_l \mu_l U_l + m_v \mu_v U_v\end{aligned}$$

et en posant $\mu_k = \text{Log}(s_k)$ pour $k = l, v$.

C. Lien avec le modèle triphasique

Nous introduisons les variables intermédiaires suivantes, sur la base du modèle triphasique (5):

$$\begin{cases} \alpha_l^{3\phi} \stackrel{def}{=} \alpha_{lc} + \alpha_{ld} \\ m_l^{3\phi} \stackrel{def}{=} m_{lc} + m_{ld} \\ m_l^{3\phi} U_l^{3\phi} \stackrel{def}{=} m_{lc} U_{lc} + m_{ld} U_{ld} \\ \alpha_l^{3\phi} E_l^{3\phi} \stackrel{def}{=} \alpha_{lc} E_{lc} + \alpha_{ld} E_{ld} \end{cases} \quad (15)$$

Si l'on suppose être parvenu à un équilibre vitesse-pression-température au sein des phases liquide dispersé et liquide continu, on peut alors introduire les variables $P_l^{3\phi}, U_l^{3\phi}, T_l^{3\phi}$ définies par:

$$\begin{cases} P_l^{3\phi} \stackrel{def}{=} P_{lc}^{eq} = P_{ld}^{eq} \\ U_l^{3\phi} \stackrel{def}{=} U_{lc}^{eq} = U_{ld}^{eq} \\ T_l^{3\phi} \stackrel{def}{=} T_{lc}^{eq} = T_{ld}^{eq} \end{cases} \quad (16)$$

sachant que la densité sera définie par: $\rho_l^{3\phi} = \rho_l(P_l^{3\phi}, T_l^{3\phi})$. En sommant les équations de bilan de quantité de mouvement du système (5) sur les phases lc et ld , on obtient :

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_l^{3\phi}) + U_{ld} \partial_x (\alpha_l^{3\phi}) = -\phi_v \\ \partial_t (m_l^{3\phi}) + \partial_x (m_l^{3\phi} U_{lc} + m_{ld} (U_{ld} - U_{lc})) = 0 \\ \partial_t (m_l^{3\phi} U_l^{3\phi}) + \partial_x (m_l^{3\phi} U_{lc}^2 + m_{ld} (U_{ld}^2 - U_{lc}^2)) + (\alpha_l^{3\phi}) \partial_x (P_{lc}) \\ + \alpha_{ld} \partial_x (P_{ld} - P_{lc}) + (P_{lc} - P_{ld}) \partial_x (\alpha_{lc}) + (P_v - P_{ld}) \partial_x (\alpha_v) = -S_v \\ \partial_t (\alpha_l^{3\phi} E_l^{3\phi}) + \partial_x (\alpha_{lc} U_{lc} (E_{lc} + P_{lc}) + \alpha_{ld} U_{ld} (E_{ld} + P_{ld})) - P_v \partial_t (\alpha_v) = -U_{ld} S_v - \psi_v \end{cases} \quad (17)$$

ce qui conduit formellement, à l'équilibre, au système suivant:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \left(\alpha_l^{3\phi,eq} \right) + U_l^{eq} \partial_x \left(\alpha_l^{3\phi,eq} \right) = -\phi_v^{eq} \\ \partial_t \left(m_l^{3\phi,eq} \right) + \partial_x \left(m_l^{3\phi,eq} U_l^{3\phi} \right) = 0 \\ \partial_t \left(m_l^{3\phi,eq} U_l^{3\phi} \right) + \partial_x \left(m_l^{3\phi,eq} (U_l^{3\phi})^2 \right) + (\alpha_l^{3\phi,eq}) \partial_x \left(P_l^{3\phi} \right) + (P_v^{eq} - P_l^{3\phi}) \partial_x (\alpha_v^{eq}) = -S_v^{eq} \\ \partial_t \left(\alpha_l^{3\phi,eq} E_l^{3\phi,eq} \right) + \partial_x \left(\alpha_l^{3\phi,eq} U_l^{3\phi} (E_l^{3\phi,eq} + P_l^{3\phi}) \right) - P_v^{eq} \partial_t (\alpha_v^{eq}) = -U_l^{3\phi} S_v^{eq} - \psi_v^{eq} \end{array} \right. \quad (18)$$

sachant que : $\alpha_l^{3\phi,eq} + \alpha_v^{eq} = 1$, et que: $\alpha_l^{3\phi,eq} E_l^{3\phi,eq} = m_l^{3\phi,eq} \left(e_l(P_l^{3\phi}, \rho_l^{3\phi}) + (U_l^{3\phi})^2/2 \right)$. On retrouve ainsi formellement, en supposant un équilibre local instantané associé aux échelles de temps de relaxation $\tau_{lc}^{U,P,T}$, les équations d'évolution de la phase liquide du système liquide-vapeur (11). Il est dès lors intéressant d'examiner le comportement des approximations des solutions du système triphasique, lorsque ces échelles de temps tendent vers 0. Ce sera l'objet du premier paragraphe de la prochaine section.

IV. Procédure de couplage et algorithmes de simulation

Afin de coupler les modèles triphasiques et diphasiques présentés précédemment, on s'appuie ici sur la méthode de couplage dite du *modèle père*, présentée dans^{14, 29, 31, 34} et basée sur les idées introduites dans.²²

Le principe de cette méthode est d'utiliser un système hyperbolique qui permette de calculer des approximations des solutions de chacun des deux modèles à coupler grâce à une technique de relaxation instantanée. Ce système hyperbolique est appelé modèle père. Il s'agit du modèle d'interface qui, grâce à sa structure hyperbolique et via la résolution d'un problème de Riemann, permettra de calculer les conditions aux limites instationnaires pour les codes situés à gauche et à droite de l'interface de couplage. Notons que dans cette méthode, seule la partie convective du modèle père intervient dans l'algorithme de couplage.

Dans la suite, on supposera que l'interface de couplage est située en $x = 0$, que le code situé à gauche de l'interface (c'est-à-dire pour les x négatifs) est basé sur le modèle à trois champs, et que le code situé à droite de l'interface (pour les x positifs) simule quant à lui le modèle diphasique. Le couplage interfacial de ces deux modèles sera assuré par le modèle "père" qui est le modèle triphasique hyperbolique présenté en première partie.

Le modèle triphasique sera donc utilisé de trois manières différentes:

- pour simuler le modèle à trois champs,
- pour simuler le modèle diphasique grâce à une étape de relaxation instantanée en vitesse, température et pression,
- en tant que modèle de couplage interfacial instationnaire.

Il sera donc utilisé à la fois pour le calcul des flux sur l'interface de couplage et pour le calcul des approximations des solutions de chacun des deux modèles à coupler (modèle à trois champs et modèle diphasique).

Bien que cela n'ait pas d'impact sur la démarche utilisée, les énergies internes e_k seront définies par:

$$e_{l,v}(P, \rho) = \frac{P}{(\gamma_{l,v} - 1)\rho} \quad (19)$$

A. Simulation du modèle triphasique

La simulation du modèle triphasique est réalisée en considérant une méthode à pas fractionnaires classique, composée d'une phase de convection pure, et d'un pas permettant de prendre en compte les termes sources physiques. L'objectif ici n'est absolument pas d'optimiser la précision de la méthode, mais plutôt de disposer d'un algorithme simple et stable sur chaque sous-domaine. Des algorithmes moins diffusifs tels que ceux proposés dans² pourraient clairement être considérés. En outre, la discrétisation des termes sources est faite de manière analogue à celle présentée dans.¹⁵ On renvoie donc le lecteur à cette référence pour plus de détails. Nous décrivons donc ici l'étape d'évolution, dans un contexte unidimensionnel.

Nous notons Z le vecteur d'état:

$$Z = (\alpha_{lc}, \alpha_v, m_{lc}, m_v, m_{ld}, m_{lc}U_{lc}, m_vU_v, m_{ld}U_{ld}, \alpha_{lc}E_{lc}, \alpha_vE_v, \alpha_{ld}E_{ld})$$

et $g(Z)$ le flux associé:

$$(\mathbf{0}, (mU)_{lc}, (mU)_v, (mU)_{ld}, (mU^2 + \alpha P)_{lc}, (mU^2 + \alpha P)_v, (mU^2 + \alpha P)_{ld}, (\alpha U(E + P))_{lc}, (\alpha U(E + P))_v, (\alpha U(E + P))_{ld})$$

Le schéma utilisé est formellement identique à celui décrit au *chapitre précédent*. La partie convective du système triphasique peut en effet s'écrire sous la forme suivante:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_{lc}) + U_{ld} \partial_x (\alpha_{lc}) = 0 \\ \partial_t (\alpha_v) + U_{ld} \partial_x (\alpha_v) = 0 \\ \partial_t (m_{lc}) + \partial_x (m_{lc} U_{lc}) = 0 \\ \partial_t (m_v) + \partial_x (m_v U_v) = 0 \\ \partial_t (m_{ld}) + \partial_x (m_{ld} U_{ld}) = 0 \\ \partial_t (m_{lc} U_{lc}) + \partial_x (m_{lc} U_{lc}^2) + \partial_x (\alpha_{lc} P_{lc}) - P_{lc} \partial_x (\alpha_{lc}) = 0 \\ \partial_t (m_v U_v) + \partial_x (m_v U_v^2) + \partial_x (\alpha_v P_v) - P_v \partial_x (\alpha_v) = 0 \\ \partial_t (m_{ld} U_{ld}) + \partial_x (m_{ld} U_{ld}^2) + \partial_x (\alpha_{ld} P_{ld}) + P_{lc} \partial_x (\alpha_{lc}) + P_v \partial_x (\alpha_v) = 0 \\ \partial_t (\alpha_{lc} E_{lc}) + \partial_x (\alpha_{lc} U_{lc} (E_{lc} + P_{lc})) - P_{lc} U_{ld} \partial_x (\alpha_{lc}) = 0 \\ \partial_t (\alpha_v E_v) + \partial_x (\alpha_v U_v (E_v + P_v)) - P_v U_{ld} \partial_x (\alpha_v) = 0 \\ \partial_t (\alpha_{ld} E_{ld}) + \partial_x (\alpha_{ld} U_{ld} (E_{ld} + P_{ld})) + P_{lc} U_{ld} \partial_x (\alpha_{lc}) + P_v U_{ld} \partial_x (\alpha_v) = 0 \end{array} \right. \quad (20)$$

Si Z_i^n représente l'approximation de la variable Z sur la maille i à l'instant t^n , le schéma de maille s'écrit:

$$h_i(Z_i^{n+1} - Z_i^n) + \Delta t^n (G_{i+1/2}(Z_i^n, Z_{i+1}^n) - G_{i-1/2}(Z_{i-1}^n, Z_i^n)) + \Delta t^n (TNC)_i^n = 0 \quad (21)$$

où h_i désigne la taille de la maille i , et le pas de temps Δt^n est régi par la condition CFL. Le flux numérique $G_{i+1/2}$ est un flux de Rusanov défini par:

$$G_{i+1/2}(Z_i^n, Z_{i+1}^n) = \left(g(Z_i^n) + g(Z_{i+1}^n) - (r)_{i+1/2}^n (Z_{i+1}^n - Z_i^n) \right) / 2 \quad (22)$$

sachant que:

$$(r)_{i+1/2}^n \stackrel{def}{=} \max_{k \in \{lc, v, ld\}} (|(U_k)_i^n| + (c_k)_i^n, |(U_k)_{i+1}^n| + (c_k)_{i+1}^n)$$

L'évaluation sur la maille i des termes non-conservatifs TNC ,

$$(\mathbf{0}, -P_{lc} \partial_x (\alpha_{lc}), -P_v \partial_x (\alpha_v), P_{lc} \partial_x (\alpha_{lc}) + P_v \partial_x (\alpha_v), -P_{lc} U_{ld} \partial_x (\alpha_{lc}), -P_v U_{ld} \partial_x (\alpha_v), U_{ld} (P_{lc} \partial_x (\alpha_{lc}) + P_v \partial_x (\alpha_v)))$$

notée $(TNC)_i^n$, est purement centrée, puisque l'on adopte l'approximation suivante

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} a \partial_x (b) dx = a_i (\bar{b}_{i+1/2} - \bar{b}_{i-1/2})$$

sachant que:

$$\bar{\phi}_{i+1/2} = (\phi_i + \phi_{i+1}) / 2$$

B. Simulation du modèle diphasique

La technique retenue pour la simulation du modèle diphasique comportera deux étapes:

1. une étape d'évolution du modèle triphasique, qui tient compte des effets convectifs et des termes sources physiques associés aux échelles de temps de relaxation non nulles;
2. une étape de relaxation instantanée en vitesse-température-pressure associée aux échelles de temps $\tau_{lc}^{U,P,T}$.

1. Etape d'évolution

Il s'agit en fait d'une étape d'évolution du système homogène triphasique, pour une donnée initiale à l'instant t^n , fournissant une approximation à l'instant $t^{n+1,-}$. Cette étape est simulée en deux temps, en ayant recours à une technique à pas fractionnaires.

On utilise tout d'abord pour la simulation du modèle triphasique homogène 20 le schéma de Rusanov adapté au cadre non conservatif détaillé ci-dessus. A ce stade, on dispose d'une approximation de la variable

$$(\alpha_{lc}, \rho_{lc}, U_{lc}, P_{lc}, \alpha_v, \rho_v, U_v, P_v, \rho_{ld}, U_{ld}, P_{ld})$$

à l'instant $t^{n+1,*}$.

On prend ensuite en compte les termes sources physiques en intégrant numériquement les EDO couplées associées au système suivant (23):

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_{lc}) = 0 \\ \partial_t (\alpha_v) = \phi_v \\ \partial_t (m_{lc}) = 0 \\ \partial_t (m_v) = 0 \\ \partial_t (m_{ld}) = 0 \\ \partial_t (m_{lc}U_{lc}) = 0 \\ \partial_t (m_vU_v) = S_v \\ \partial_t (m_{ld}U_{ld}) = -S_v \\ \partial_t (\alpha_{lc}E_{lc}) = 0 \\ \partial_t (\alpha_vE_v) + P_v\partial_t (\alpha_v) = U_{ld}S_v + \psi_v \\ \partial_t (\alpha_{ld}E_{ld}) - P_v\partial_t (\alpha_v) = -U_{ld}S_v - \psi_v \end{array} \right. \quad (23)$$

On dispose dès lors d'une approximation de la variable précédente $(\alpha_{lc}, \rho_{lc}, U_{lc}, P_{lc}, \alpha_v, \rho_v, U_v, P_v, \rho_{ld}, U_{ld}, P_{ld})$ à l'instant $t^{n+1,-}$. Les vitesses, pressions et températures des phases *liquide dispersé* et *liquide continu* sont alors clairement distinctes.

2. Etape de relaxation instantanée

Dans cette étape de relaxation instantanée en vitesse-température-pression au sein de la phase liquide globale, on impose l'équilibre triple à l'instant t^{n+1} :

$$\begin{aligned} P_{lc}^{n+1} &= P_{ld}^{n+1} \stackrel{def}{=} P_l^{n+1} \\ U_{lc}^{n+1} &= U_{ld}^{n+1} \stackrel{def}{=} U_l^{n+1} \\ T_{lc}^{n+1} &= T_{ld}^{n+1} \stackrel{def}{=} T_l^{n+1} \end{aligned}$$

sachant que l'on retient le processus stationnaire associé suivant:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t (\alpha_{lc} + \alpha_{ld}) = 0 \\ \partial_t (\alpha_v) = 0 \\ \partial_t (m_{lc}) = 0 \\ \partial_t (m_v) = 0 \\ \partial_t (m_{ld}) = 0 \\ \partial_t (m_{lc}U_{lc} + m_{ld}U_{ld}) = 0 \\ \partial_t (m_vU_v) = 0 \\ \partial_t (\alpha_{lc}E_{lc} + \alpha_{ld}E_{ld}) = 0 \\ \partial_t (\alpha_vE_v) = 0 \end{array} \right. \quad (24)$$

On rappelle que les temps de relaxation $\tau_{lc}^{U,P,T}$ sont ici formellement nuls. Au sein de cette étape, les variables de phase vapeur sont totalement stationnaires, soit:

$$m_v^{n+1} = m_v^{n+1,-} \quad \alpha_v^{n+1} = \alpha_v^{n+1,-} \quad (mU)_v^{n+1} = (mU)_v^{n+1,-} \quad (\alpha E)_v^{n+1} = (\alpha E)_v^{n+1,-}$$

Le point d'équilibre triple s'obtient en considérant les lois d'état imposées, et en imposant successivement les équilibres en vitesse-pression-température. On donne ci-dessous le résultat des ces calculs.

Relaxation instantanée en vitesse liquide

$$U_l^{n+1} = \frac{(m_{lc}U_{lc} + m_{ld}U_{ld})^{n+1,-}}{(m_{lc} + m_{ld})^{n+1,-}} \quad (25)$$

Relaxation instantanée en température liquide

$$T_l^{n+1} = \frac{(m_{lc}e_l(P_{lc}, \rho_{lc}) + m_{ld}e_l(P_{ld}, \rho_{ld}))^{n+1,-}}{(C_v)_l(m_{lc} + m_{ld})^{n+1,-}} \quad (26)$$

Relaxation instantanée en pression liquide

$$P_l^{n+1} = \frac{(\alpha_{lc}P_{lc} + \alpha_{ld}P_{ld})^{n+1,-}}{(1 - \alpha_v)^{n+1,-}} \quad (27)$$

$$\alpha_{lc}^{n+1} = (\alpha_{lc})^{n+1,-} \frac{P_{lc}^{n+1,-} + (\gamma_l - 1)P_l^{n+1}}{\gamma_l P_l^{n+1}} \quad (28)$$

$$\alpha_{ld}^{n+1} = 1 - \alpha_v^{n+1,-} - \alpha_{lc}^{n+1} \quad (29)$$

Pour obtenir le résultat (27), il est nécessaire d'introduire le schéma en temps suivant:

$$\begin{aligned} m_{lc}^{n+1} \left(e_l(P_l^{n+1}, \rho_l^{n+1}) - e_l(P_{lc}^{n+1,-}, \rho_{lc}^{n+1,-}) \right) + P_l^{n+1} \left(\alpha_{lc}^{n+1} - \alpha_{lc}^{n+1,-} \right) &= 0 \\ m_{ld}^{n+1} \left(e_l(P_l^{n+1}, \rho_l^{n+1}) - e_l(P_{ld}^{n+1,-}, \rho_{ld}^{n+1,-}) \right) - P_l^{n+1} \left(\alpha_{lc}^{n+1} - \alpha_{lc}^{n+1,-} \right) &= 0 \end{aligned}$$

traduisant les deux équations de bilan d'énergie totale des phases *liquide dispersé* et *liquide continu*.

On vérifie trivialement que la pression d'équilibre P_l^{n+1} définie par (27) est positive et donc admissible. De même, le taux de présence statistique α_{lc}^{n+1} issu de (28) est structurellement positif. Enfin, d'après (29), on déduit que:

$$\alpha_{ld}^{n+1} = \frac{\alpha_{ld}^{n+1,-} ((\gamma_l - 1)\alpha_{lc}P_{lc} + (\alpha_{lc} + \gamma_l\alpha_{ld})P_{ld})^{n+1,-}}{\gamma_l P_l^{n+1}(1 - \alpha_v)^{n+1,-}} \quad (30)$$

et donc que α_{ld}^{n+1} est positif. Il reste alors simplement à réactualiser les variables "conservatives" $m_k, m_k U_k, \alpha_k E_k$, pour $k = lc, ld, v$. Le schéma est utilisé sous condition CFL associée aux valeurs propres du système (20).

V. Résultats numériques

A. Comparaison d’une simulation diphasique classique et d’une simulation par relaxation

On s’intéresse ici à un *cas test analytique*. On considère un domaine de calcul: $[0, 1]$, sur lequel on effectue la simulation d’un problème de Riemann diphasique unidimensionnel, dont les conditions initiales sont données ci-dessous, la discontinuité initiale étant située en $x = 0,5$. La solution est constituée d’une onde de contact se déplaçant à vitesse U_l et d’un 3-choc en phase liquide se propageant vers la droite. L’état intermédiaire A donné dans le tableau ci-dessous se situe entre ces deux ondes.

	Etat L	Etat A	Etat R
γ_l	1.1		
γ_v	1.4		
α_l	0.95	0.2	
α_v	0.05	0.8	
ρ_l	1	0.15	1/10
ρ_v	1/10	1/9.999	
U_l	10		-336, 7179
U_v	15	10.3124972	
P_l	10^5	99995.6055	63931.6166
P_v	10^5	100001.245	

Conditions initiales et états intermédiaires pour le problème de Riemann diphasique.

On compare ensuite la solution diphasique approchée à la solution analytique d’une part, mais surtout à l’approximation obtenue à l’aide du modèle triphasique, lorsque les temps de relaxation $\tau_{lc}^{U,P,T}$ sont nuls. Tous les calculs sont effectués à $CFL = 0.45$. On considère successivement des maillages réguliers comportant 100, 1000, 10000, 50000 et 100000 mailles.

Les résultats concernant le taux de présence, la densité, la vitesse et la pression de la phase liquide recomposée, sont présentés sur les figures 2,3,4. On introduit l’”erreur” suivante, correspondant en fait à un écart sur les approximations de la vitesse liquide:

$$e_{U_l}^{L^1}(t^n, \Delta x) = \left(\sum_{i=1, N} |(U_l^{2\phi})_i^n - (U_l^{3\phi})_i^n| \right) \Delta x$$

sachant que $\Delta x = 1/N$. La mesure de l’écart en norme L^1 entre la solution triphasique recomposée et la solution diphasique fait apparaître une convergence à l’ordre 1. Ceci s’explique par le fait que les discontinuités de contact sont transparentes dans ce cas test, et donc que l’ordre ne soit pas plutôt 1/2. On peut visualiser cet écart sur la figure 1. Les valeurs obtenues sur ce cas test, à l’instant $T = 1.5 \times 10^{-4}$, pour l’écart entre vitesse liquide diphasique et vitesse liquide recomposée issue du calcul triphasique, sont:

	Erreur
100 mailles	32.0359×10^{-5}
1000 mailles	7.38981×10^{-5}
10000 mailles	8.148151×10^{-6}
50000 mailles	2.00322×10^{-6}
100000 mailles	1.30893×10^{-6}

Mesure de l’écart entre les deux approximations de la vitesse liquide.

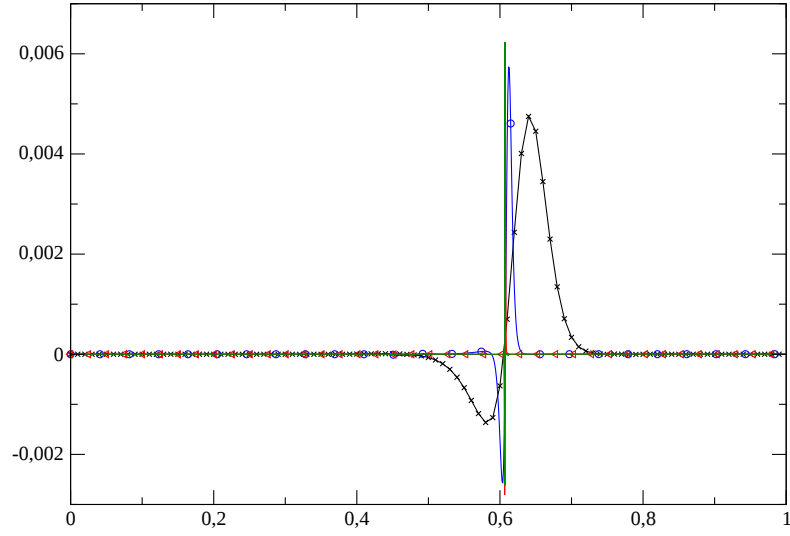


Figure 1. Cas Test analytique 1 : écart observé entre la solution approchée issue de l'approximation diphasique et l'approximation triphasique relaxée ($\tau_{lc}^U = \tau_{lc}^P = \tau_{lc}^T = 0$), en fonction du pas de maillage. Les maillages comportent 100 mailles -ligne noire-, 1000 mailles -ligne bleue avec cercles-, 10000 mailles -ligne rouge avec triangles-, 50000 mailles -ligne verte-.

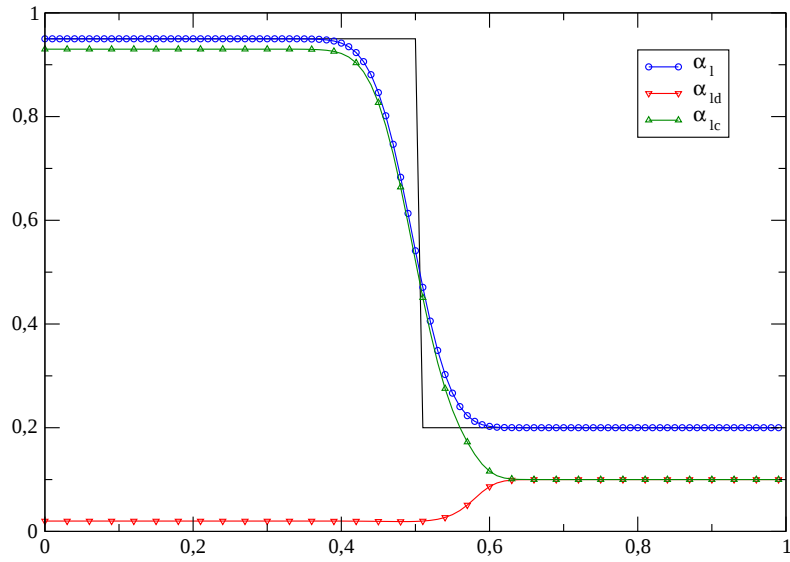
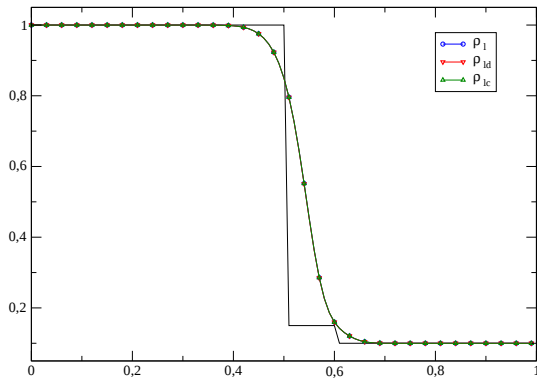
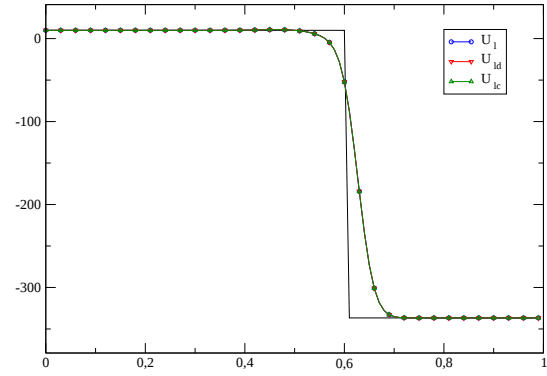


Figure 2. Cas Test analytique 1 : Taux de présence des phases liquides. Solution analytique en trait continu noir, simulation classique du modèle diphasique en bleu avec des cercles, et simulation du modèle diphasique à partir du modèle triphasique relaxé. Ligne rouge avec des triangles dirigés vers le bas pour la phase ld et ligne verte avec des triangles dirigés vers le haut pour la phase lc . On rappelle que: $\alpha_l = \alpha_{lc} + \alpha_{ld}$.

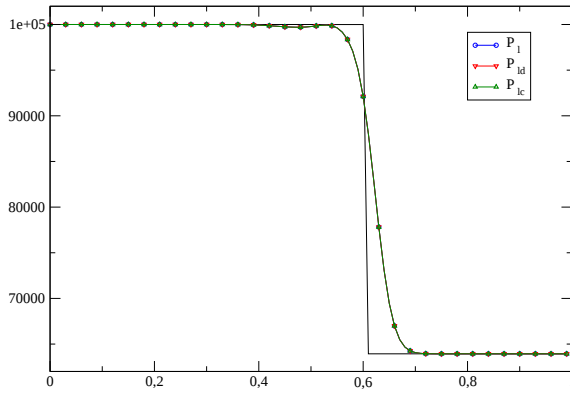


(a) densités phases liquides

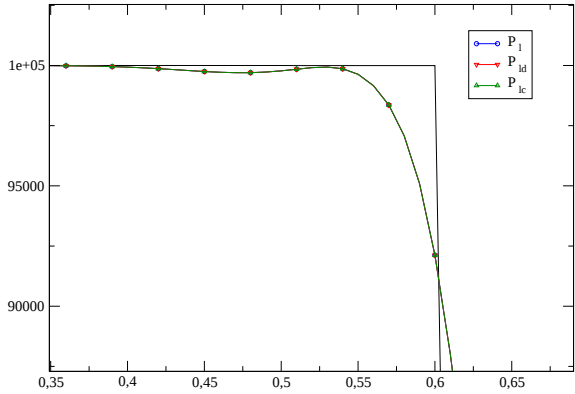


(b) vitesses phases liquides

Figure 3. Cas Test analytique 1 : densités (à gauche) et vitesses (à droite) des phases liquides. Solution diphasique analytique (trait continu noir), simulation classique du modèle diphasique en bleu avec des cercles, et simulation du modèle diphasique à partir du modèle triphasique relaxé. Ligne rouge avec des triangles dirigés vers le bas pour la phase ld et en vert avec des triangles dirigés vers le haut pour la phase lc .



(a) profils généraux des pressions



(b) zoom sur les pressions

Figure 4. Cas Test 1 : Pressions des phases liquides. Vue du domaine complet et zoom. Solution analytique (trait continu noir), simulation classique diphasique (bleu, cercles), et simulation du modèle diphasique à partir du modèle triphasique relaxé (trait rouge avec des triangles dirigés vers le bas pour la phase ld et en vert avec des triangles dirigés vers le haut pour la phase lc .)

B. Simulations couplées

On présente dans la suite deux simulations couplées distinctes. Dans la première, des ondes issues du milieu triphasique vont venir franchir l'interface de couplage et se propager dans le milieu diphasique. La seconde est duale, et correspond à la propagation d'ondes générées dans la partie droite du domaine (zone diphasique), se déplaçant vers la gauche, qui viennent franchir l'interface de couplage. On s'attend clairement à un comportement correct dans le second cas, les ondes passant dans un milieu moins contraint. Par contre, une pollution est attendue au voisinage de l'interface de couplage dans le premier cas. Dans tous les cas, l'algorithme retenu assure la conservativité globale, sur la variable m_v , mais aussi sur m_l (avec la convention $m_l = m_{lc} + m_{ld}$ dans le milieu triphasique), sur la quantité de mouvement globale $\Sigma_k m_k U_k$, et sur l'énergie totale du mélange $\Sigma_k \alpha_k E_k$ (la sommation s'entend sur les trois phases dans la zone triphasique -respectivement sur les deux phases dans la zone diphasique-).

1. Cas test couplé 1

L'interface de couplage entre les deux modèles se situe en $x = 0.525$. Les modèles triphasique et diphasique sont situés respectivement à gauche et à droite de cet interface. Les termes sources physiques ne sont pas considérés dans cette simulation, afin de maximiser les écarts entre phases. Cela correspond, dans un contexte réel, à des temps de simulation faibles devant les échelles de temps de relaxation. Cette configuration nous intéresse particulièrement, puisque l'on cherche ici à déterminer les défauts de la procédure de couplage.

A l'instant initial, on déclenche un problème de Riemann en $x = 0.5$, et donc **au sein de la zone triphasique**. Celui-ci est associé à un simple déséquilibre de pression de part et d'autre de $x = 0.5$. De chaque côté, les phases sont en équilibre vitesse-pression-température. Les conditions initiales retenues sont donc les suivantes, les états L, R désignant les états initiaux de part et d'autre de $x = 0.5$:

	Etat L	Etat R
γ_l	1.1	
γ_v	1.4	
α_{lc}	0.5	0.8
α_v	0.3	0.1
$\rho_{lc} = \rho_{ld}$	500	1000
ρ_v	11.9792	23.9583
$U_{lc} = U_{ld} = U_v$	0	
$P_{lc} = P_{ld} = P_v$	$1, 2 \cdot 10^6$	$1 \cdot 10^6$

Conditions initiales pour le premier cas couplé.

La température initiale à gauche de l'interface de déclenchement du problème de Riemann est distincte de celle à droite de cette interface. Le pas de temps est régi par la condition $CFL = 0.45$, et les résultats sont présentés aux deux instants $t_1 = 0.00065$ et $t_2 = 0.0011$. Le domaine de calcul considéré ici est : $[0, 1]$, et les maillages réguliers comportent 100 ou 50000 mailles. On présente les résultats obtenus pour les taux de présence et les densités au dernier instant ($t = 0.0011$). Les autres variables (vitesses, pressions) sont présentées aux deux instants, en incluant un zoom sur les phases liquide dispersé et liquide continu.

On observe sur la figure 5 une perturbation au niveau de l'interface de couplage, qui est particulièrement visible sur le taux de présence α_{ld} , sur le maillage le plus fin comportant 50000 mailles, alors que le maillage grossier ne permet pas d'observer ce défaut de comportement. Ce défaut devient transparent sur la variable $\alpha_{lc} + \alpha_{ld}$. Les variables vitesse et pression ne font pas apparaître cette perturbation (voir les figures 6,7,8). Ce point n'est pas trivial, puisque les profils de vitesse en phase liquide continu et liquide dispersé sont nettement distincts à gauche de l'interface de couplage, d'autant plus que la simulation effectuée ici ne retient aucun terme de relaxation tendant à ramener vers le point d'équilibre (puisque $1/\tau_{lc}^U = 1/\tau_{lc}^P = 1/\tau_{lc}^T = 0$ dans la zone triphasique). On observe en fait sur ces deux dernières figures le respect de la structure de relaxation instantanée: en effet, la vitesse U_l en $x = 0.525^+$ apparaît bien comme une combinaison convexe des -valeurs extrapolées- des vitesses U_{lc} et U_{ld} à gauche de l'interface de couplage, soit en $x = 0.525^-$. Ce point est

donc conforme à la formule (25). Cette remarque vaut également pour la variable pression (voir les figures 8,9), qui est en accord avec la formule d'équilibre (27). Pour conclure, il faut cependant noter qu'aucune explication du comportement de la variable taux de présence ne semble pouvoir être avancée.

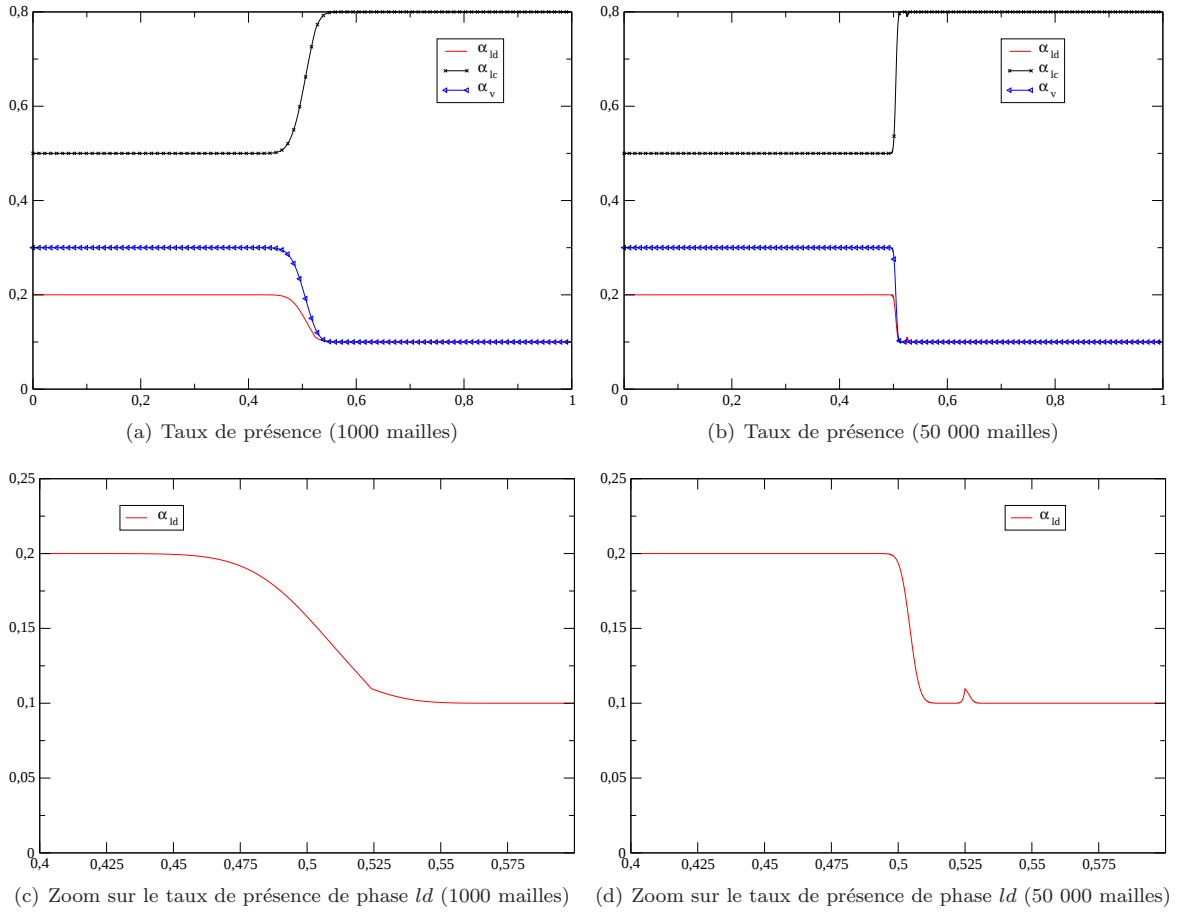


Figure 5. Cas couplé 1. Taux de présence des phases liquide dispersé (rouge), liquide continu (noir avec croix) et vapeur (bleu avec triangle), pour des maillages comportant 1000 et 50000 points à l'instant $t_2 = 0.0011$. Zooms sur l'intervalle $[0.4; 0.6]$ pour la phase liquide dispersé sur maillage grossier (1000 points) et sur maillage fin (50000 points).

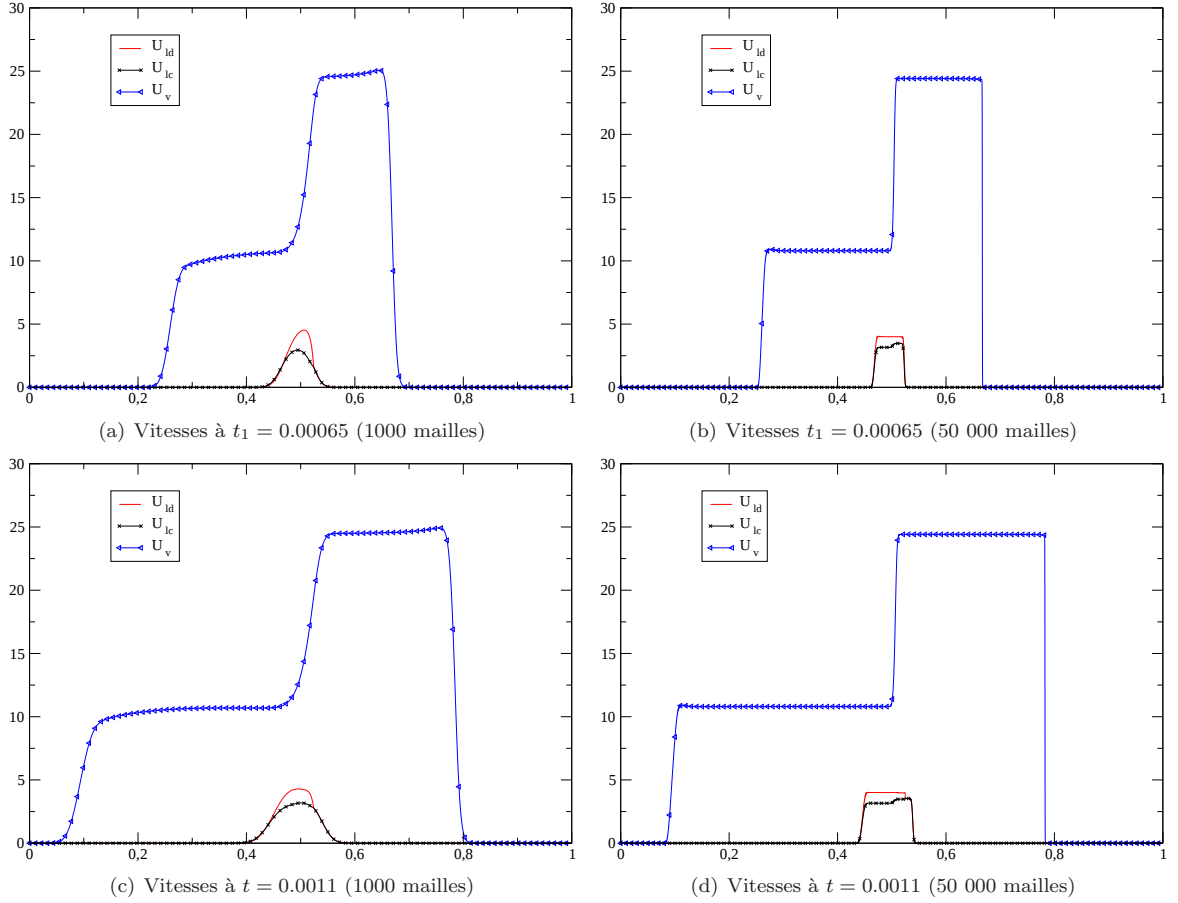


Figure 6. Cas couplé 1. Vitesses aux instants $t_1 = 0.00065$ et $t_2 = 0.0011$, sur maillage à 1000 points, et maillage à 50000 points. Phases liquide dispersé (rouge), liquide continu (noir avec croix) et vapeur (bleu avec triangle)

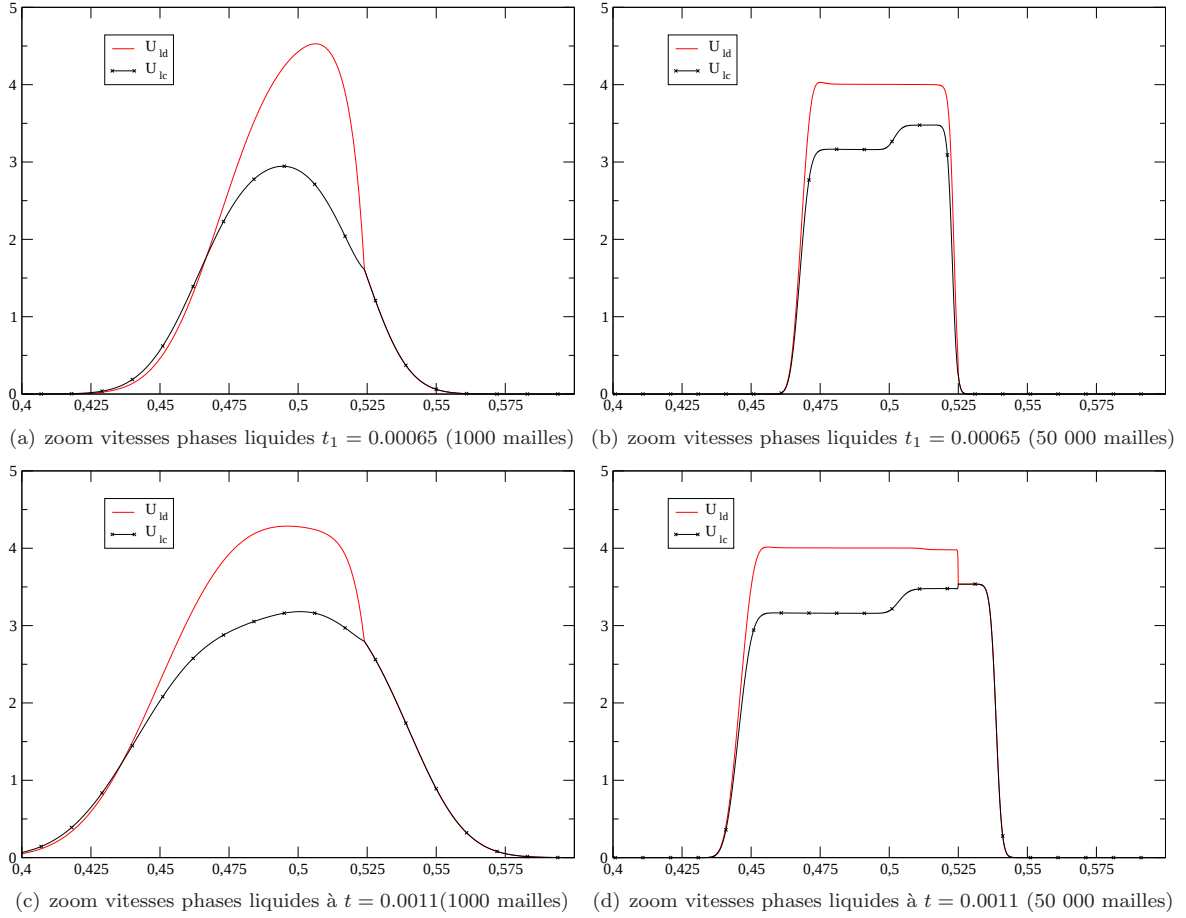


Figure 7. Cas couplé 1. Zooms sur les vitesses sur $[0.4; 0.6]$ aux instants $t_1 = 0.00065$ et $t_2 = 0.0011$ pour des maillages à 1000 et 50000 points. Vitesses des phases liquide dispersé en rouge et liquide continu en noir avec des croix.

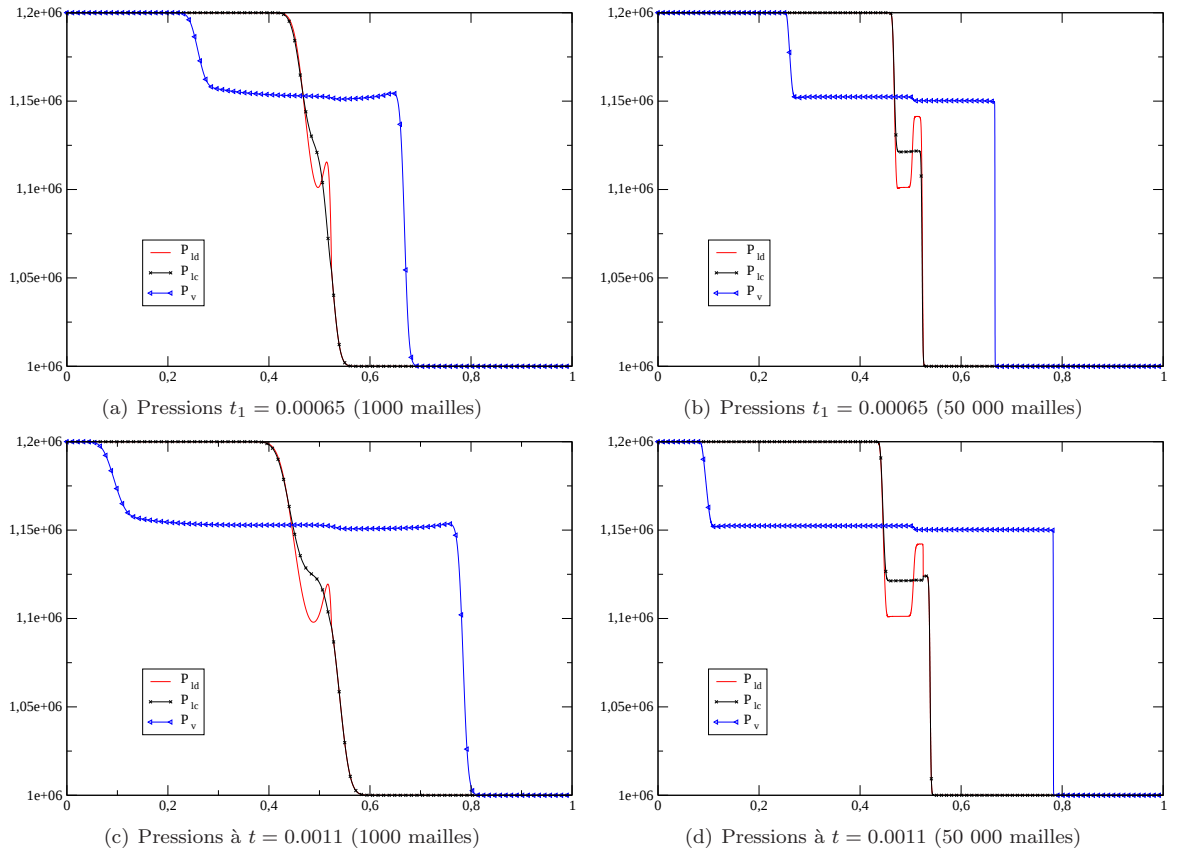
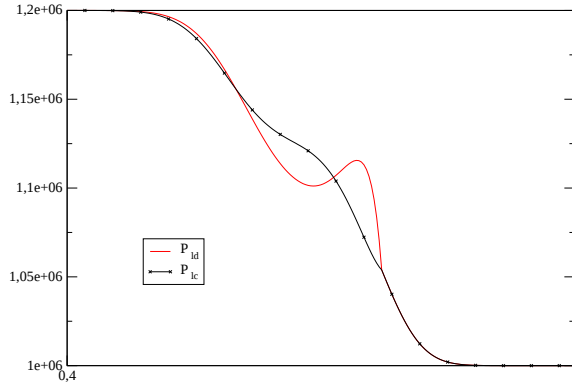
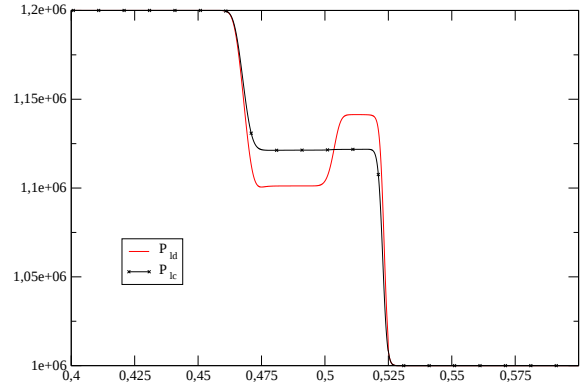


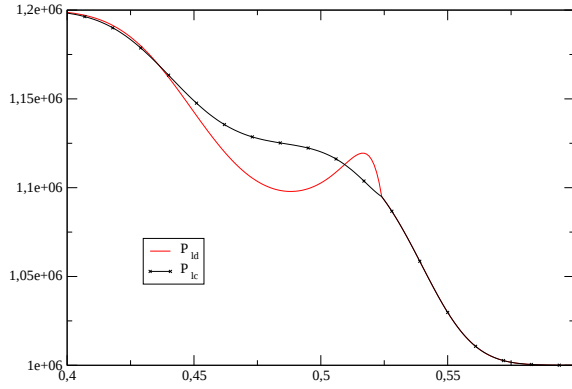
Figure 8. Cas couplé 1. Pressions aux instants $t_1 = 0.00065$ et $t_2 = 0.0011$, sur maillage à 1000 points, et maillage à 50000 points. Phases liquide dispersé (rouge), liquide continu (noir avec croix) et vapeur (bleu avec triangle)



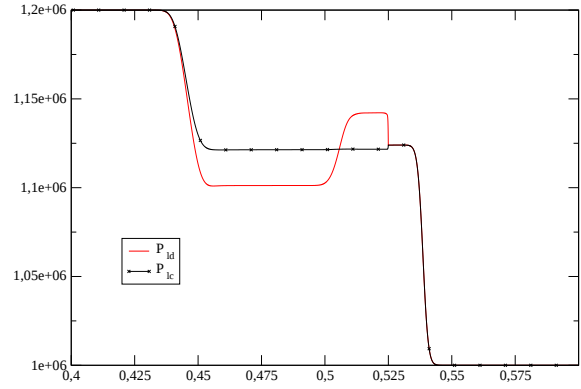
(a) zoom $t_1 = 0.00065$ pressions phases liquides (1000 mailles)



(b) zoom $t_1 = 0.00065$ pressions phases liquides (50 000 mailles)



(c) zoom à $t = 0.0011$ pressions phases liquides (1000 mailles)



(d) zoom à $t = 0.0011$ pressions phases liquides (50 000 mailles)

Figure 9. Cas couplé 1. Zooms sur les pressions sur $[0.4; 0.6]$ aux instants $t_1 = 0.00065$ et $t_2 = 0.0011$ pour des maillages à 1000 et 50000 points. Pressions des phases liquide dispersé en rouge et liquide continu en noir avec des croix.

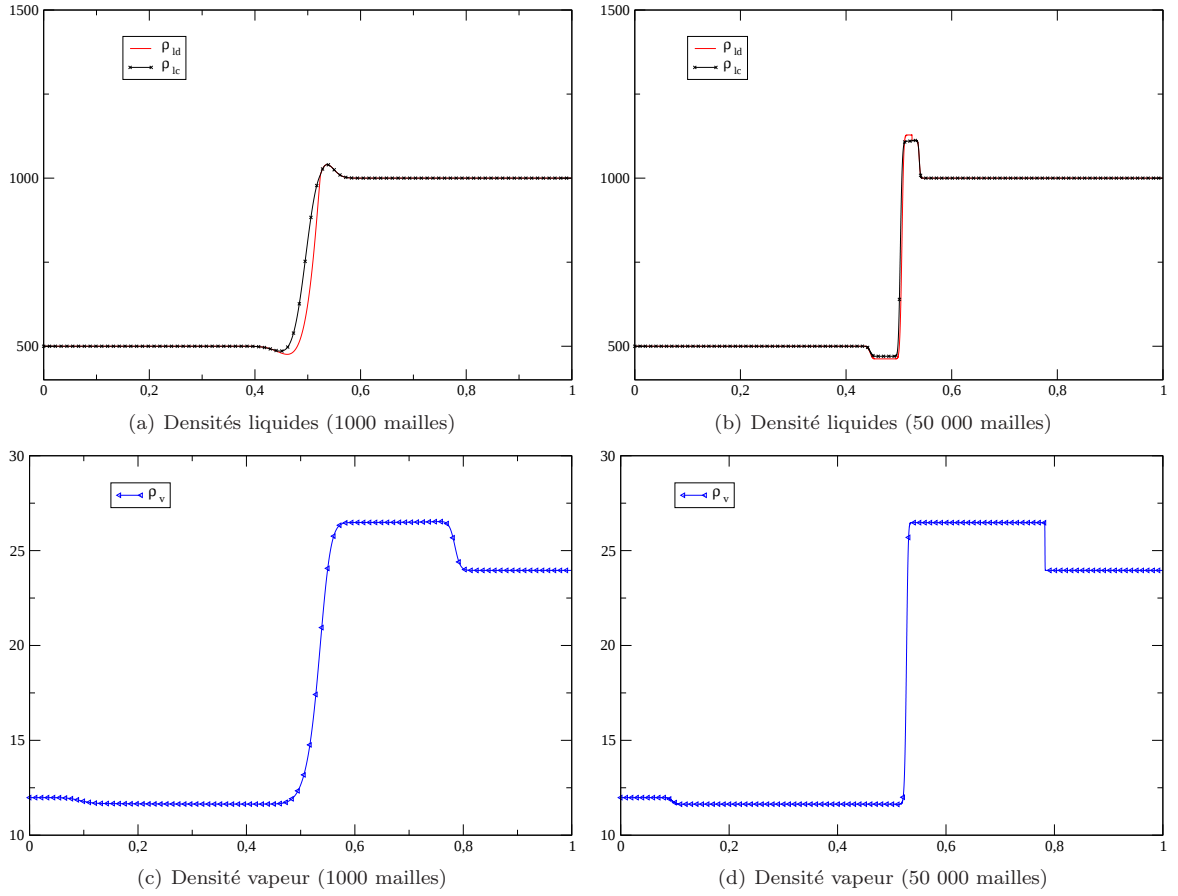


Figure 10. Cas couplé 1. Densités des phases liquide dispersé (rouge), liquide continu (noir avec croix) et vapeur (bleu avec triangle) sur maillage à 1000 points, et maillage à 50000 points.

2. Cas test couplé 2

On conserve le même domaine de calcul $[0, 1]$, et on considère cette fois un déclenchement de problème de Riemann **au sein de la zone diphasique** en $x = 0.5$, sachant que l'interface de couplage se trouve en $x = 0.475$. Ce problème est donc analogue au problème de couplage du premier cas couplé. La discontinuité initiale en pression de part et d'autre de $x = 0.5$ va produire des ondes de choc qui vont se propager vers la gauche et impacter assez rapidement l'interface de couplage.

Les conditions initiales retenues sont les suivantes :

	Etat L	Etat R
γ_l	1.1	
γ_v	1.4	
α_{lc}	0.8	0.5
α_v	0.1	0.3
$\rho_{1c} = \rho_{1d}$	1000	500
ρ_v	23.9583	11.9792
$U_{1c} = U_{1d} = U_v$	0	
$P_{1c} = P_{1d} = P_v$	1.10^6	$1, 2.10^6$

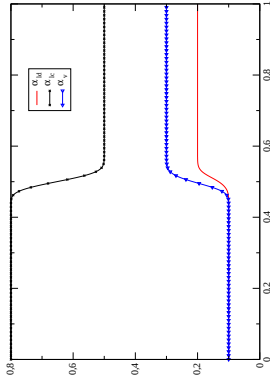
Conditions initiales pour le second cas couplé.

Ici encore, les fluides sont initialement au repos, et donc en équilibre sur les variables vitesse, pression et température. Par contre les taux de présence et les densités sont distincts. Les simulations ont été réalisées sur des maillages comportant 1000 à 50000 mailles, et la valeur du pas de temps est ajustée sur la contrainte $CFL = 0.45$. Les résultats sont présentés à l'instant $t_2 = 0.0011$.

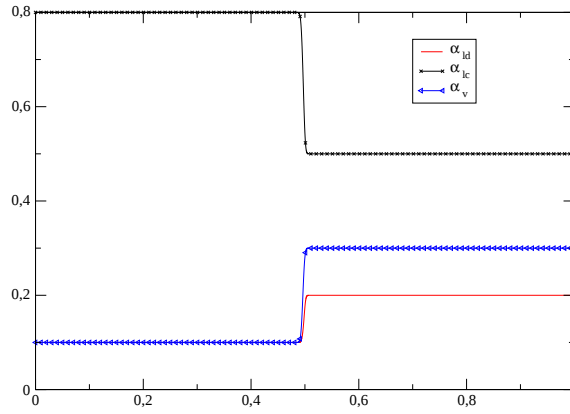
On ne reprend pas dans le détail l'ensemble des résultats, mais on donne ici quelques éléments de synthèse.

- Les résultats sont assez sensiblement meilleurs que ceux correspondant au cas couplé précédent, et l'effet de raffinement de maillage conforte cette tendance ; les zooms des figures 12,13 permettent de confirmer ce point.
- Le défaut visible sur le taux de présence α_{ld} , dans le cas couplé précédent, au voisinage de l'interface de couplage, n'est pas observable ici, même sur le maillage fin.
- Sur maillage grossier, l'approximation de la solution couplée, dans la zone triphasique ($x < 0.475$), n'est pas assimilable à la solution diphasique, notamment en ce qui concerne les variables U, P . Par contre, sur maillage fin, l'écart entre les variables U_{lc} et U_{ld} (respectivement P_{lc} et P_{ld}) est fortement réduit.

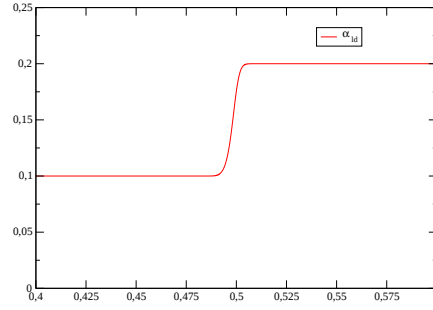
Ce très bon comportement du calcul couplé était attendu, puisque les ondes passent ici d'un milieu contraint ($\tau_{lc}^{U,P,T} = 0$) à un milieu non contraint. En outre, l'identité des lois d'état thermodynamique dans les phases lc et ld contribue fortement à ce résultat. On rappelle (voir¹) que l'inverse peut conduire à des comportements très perturbés pour les calculs couplés.



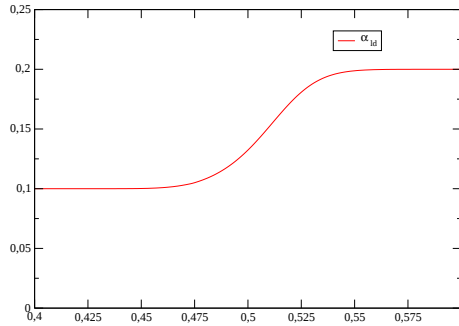
(a) taux de présence (1000 mailles)



(b) taux de présence (50 000 mailles)



(d) zoom taux de présences phase ld (50 000 mailles)



(c) zoom taux de présences phase ld (1000 mailles)

Figure 11. Cas couplé 2. Taux de présences des phases liquide dispersé (rouge), liquide continu (noir avec croix) et vapeur (bleu avec triangle) sur maillage à 1000 points, et maillage à 50000 points. Zooms sur $[0.4; 0.6]$ pour la phase liquide dispersé sur maillage grossier (1000 points) et fin (50000 points).

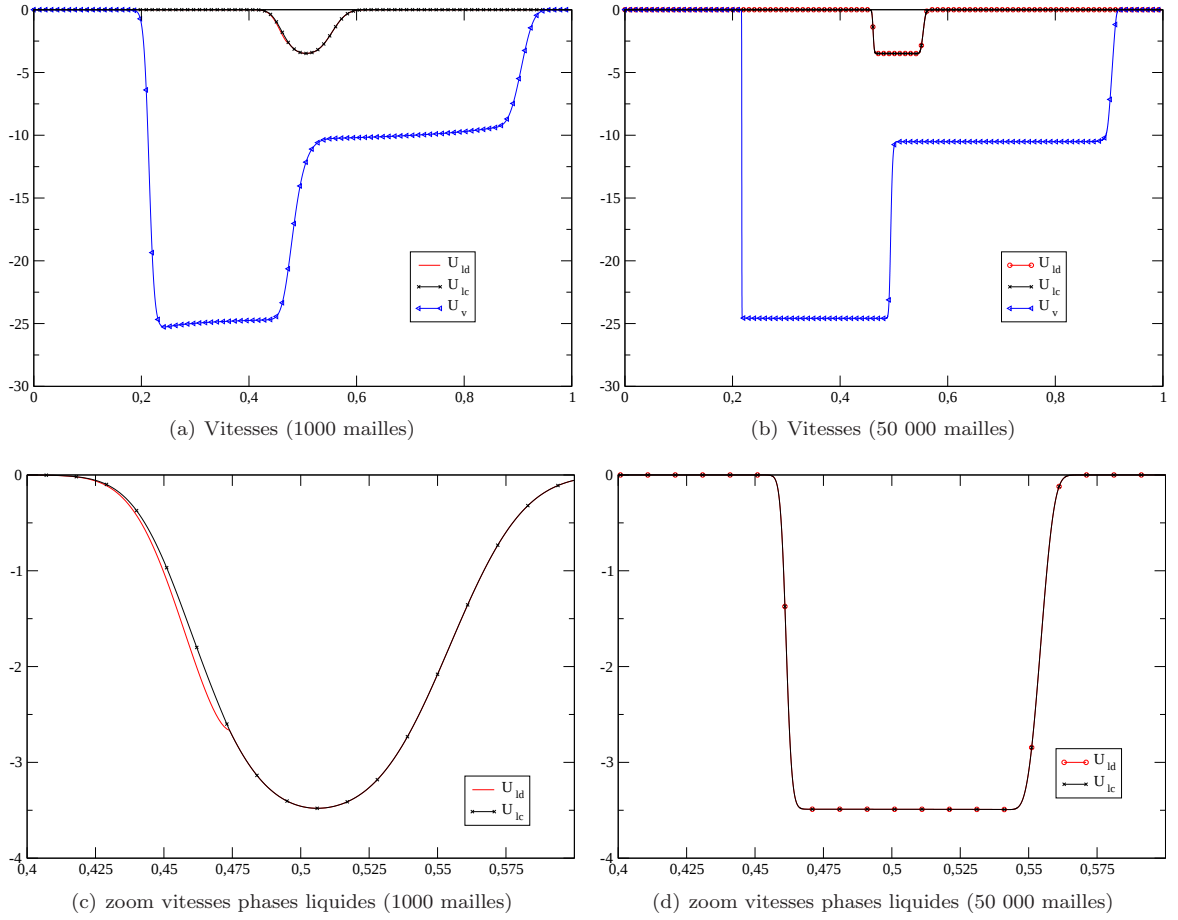


Figure 12. Cas couplé 2. Vitesses des phases liquide dispersé (rouge), liquide continu (noir avec croix) et vapeur (bleu avec triangle) sur maillage à 1000 points, et maillage à 50000 points. Zooms sur $[0.4; 0.6]$ pour les phases liquides sur maillage grossier (1000 points) et fin (50000 points).

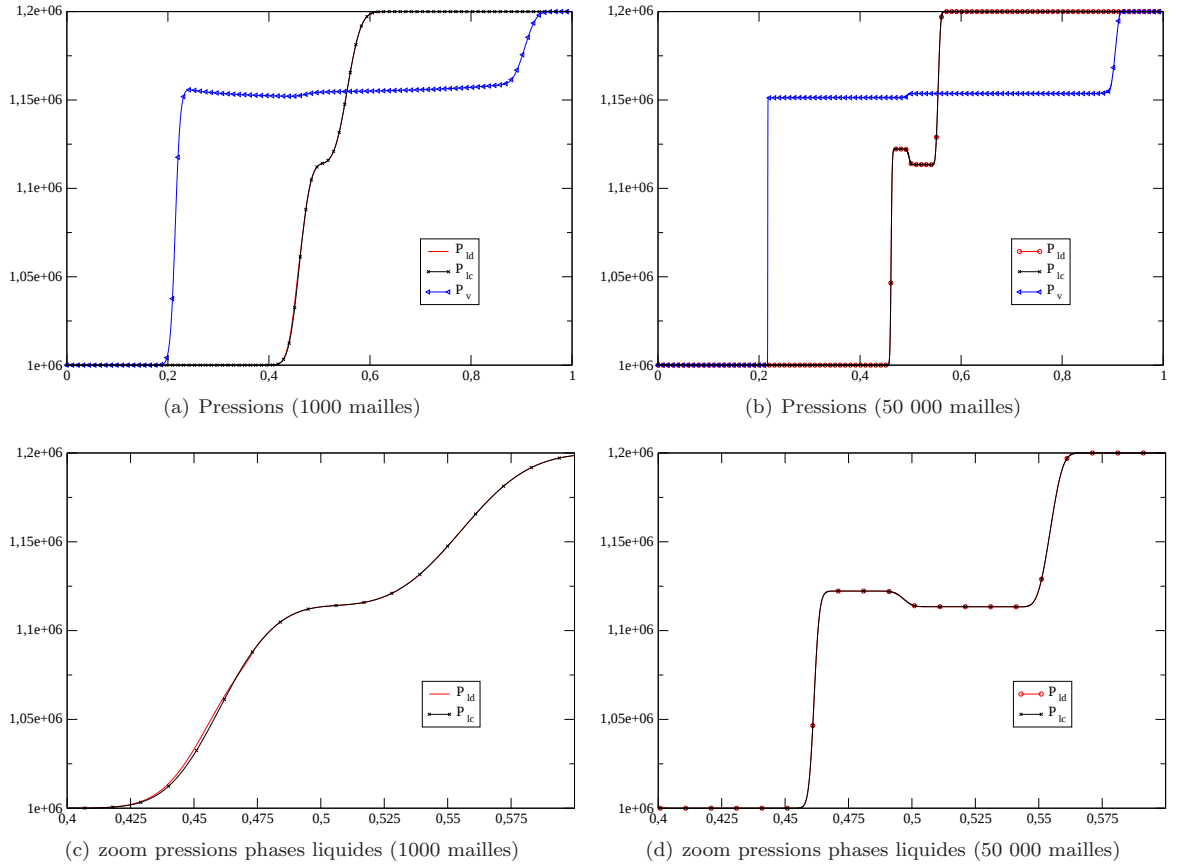


Figure 13. Cas couplé 2. Pressions des phases liquide dispersé (rouge), liquide continu (noir avec croix) et vapeur (bleu avec triangle) sur maillage à 1000 points, et maillage à 50000 points. Zooms sur $[0.4; 0.6]$ pour les phases liquides sur maillage grossier (1000 points) et fin (50000 points).

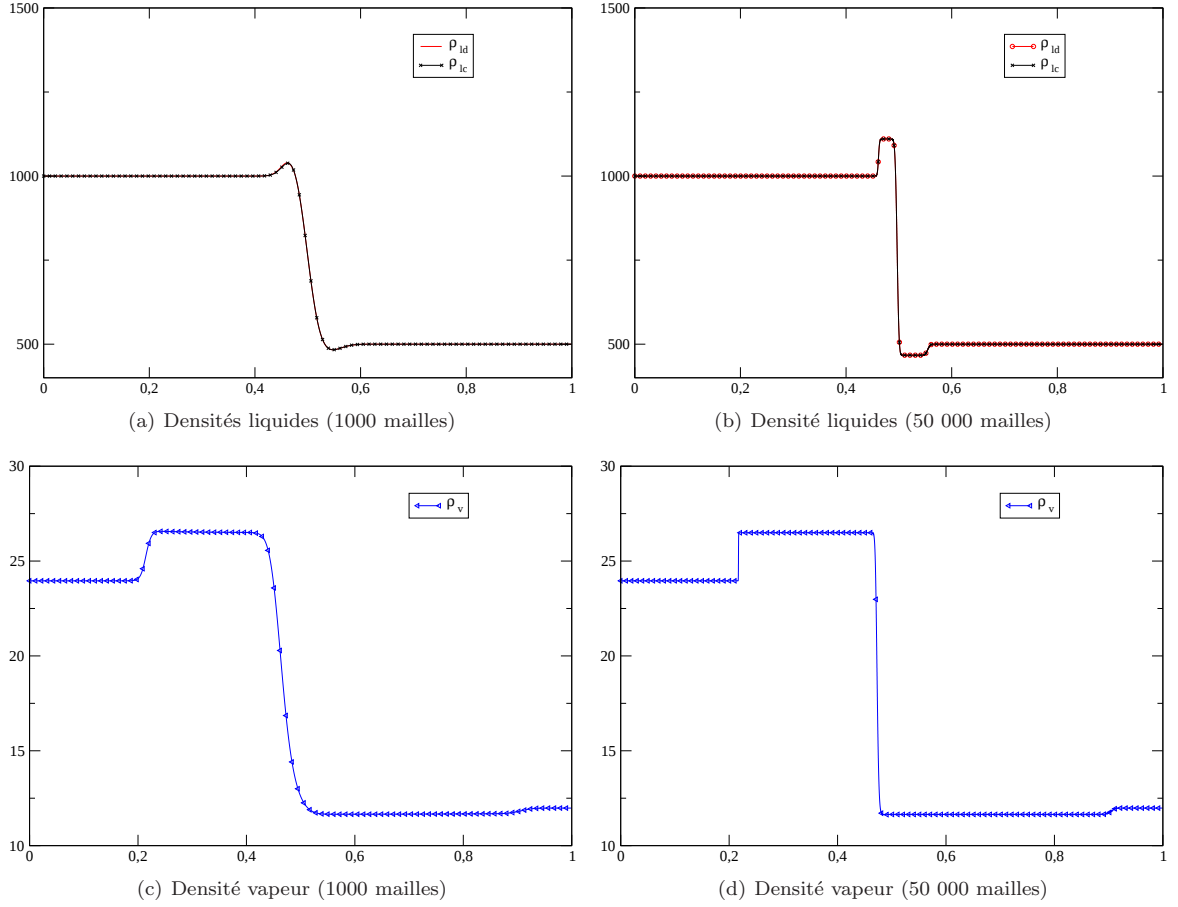


Figure 14. Cas couplé 2. Densités des phases liquide dispersé (rouge), liquide continu (noir avec croix) et vapeur (bleu avec triangle) sur maillage à 1000 points, et maillage à 50000 points.

Conclusion

On a présenté dans cette note une approche possible pour le couplage interfacial instationnaire d'un modèle à trois champs et d'un modèle diphasique. Plus précisément, les modèles se situant de part et d'autre de l'interface sont un modèle triphasique à 11 EDP, et un modèle diphasique à sept EDP, tous deux considérant des échelles de temps de relaxation en pression non nulles. La technique de couplage interfacial retenue est semblable à celle proposée dans^{29,31,33}. Elle consiste en pratique à introduire formellement à l'interface un modèle père (ici le modèle triphasique), afin de prescrire des conditions aux limites à gauche et droite de l'interface de couplage, associées au système de convection sous-jacent. La mise en oeuvre a été effectuée en utilisant une technique de relaxation pour gérer les sous-équilibres instantanés. La structure hyperbolique des deux modèles permet d'effectuer des raffinements de maillage, sans introduire les limitations inhérentes au cadre du couplage décrit dans³⁰. Les résultats obtenus sont dans l'ensemble satisfaisants. On note en particulier le très bon comportement des solutions couplées comportant des perturbations se propageant du milieu diphasique vers le milieu triphasique. Dans le cas des solutions couplées évoluant du milieu triphasique vers le milieu diphasique, les effets brusques de relaxation instantanée en pression liquide polluent très peu la zone d'interface, et la solution est conforme aux configurations d'équilibre local instantané.

En ce qui concerne les perspectives de poursuite de ce travail, il reste clairement à conforter la validation de l'approche de couplage interfacial. Ulérieurement, il serait intéressant d'évaluer l'apport potentiel de la stratégie proposée au cadre industriel du code CATHARE3, sachant que dans ce code, les échelles de temps de relaxation en pression sont nulles. En se basant sur les expériences de couplage^{2,3,12,29,31}, et sur les travaux présentés ici, on peut raisonnablement s'attendre à un comportement correct, d'autant plus que la phase liquide fait intervenir une seule loi d'état thermodynamique.

Dans un registre très différent, il serait utile d'examiner une approche du renoyage sensiblement distincte, qui s'appuie sur un modèle diphasique autorisant des transitions internes de régime d'écoulement, tel que celui proposé dans²⁷.

References

- ¹ AMBROSO A., "Modélisation et simulation d'écoulements de fluides complexes", *Université Pierre et Marie Curie, Paris, France*, Thèse d'Habilitation à Diriger des Recherches, September 23, 2009.
- ² AMBROSO A., CHALONS C., COQUEL F., GALIÉ T., "Relaxation and numerical approximation of a two-fluid two-pressure diphasic model", *Math. Model. Numer. Analysis*, vol. 43, pp. 1063–1097, 2009.
- ³ AMBROSO A., CHALONS C., COQUEL F., GALIÉ T., GODLEWSKI E., RAVIART P.-A., SEGUIN N., "The drift-flux asymptotic limit of barotropic two-phase two-pressure models", *Communications Math. Sciences*, vol. 6(2), pp. 521–529, 2008.
- ⁴ AMBROSO A., CHALONS C., COQUEL F., GODLEWSKI E., RAVIART P.-A., SEGUIN N., "Working group on the interfacial coupling of fluid models", <http://www.ann.jussieu.fr/groupe/cea/>.
- ⁵ AMBROSO A., CHALONS C., COQUEL F., GODLEWSKI E., LAGOUTIÈRE F., RAVIART P.-A., SEGUIN N., "The coupling of homogeneous models for two-phase flows", *Int. J. Finite Volumes*, vol. 4(1), pp.1–39, 2007.
- ⁶ AMBROSO A., CHALONS C., COQUEL F., GODLEWSKI E., LAGOUTIÈRE F., RAVIART P.-A., SEGUIN N., "Coupling of general Lagrangian systems", *Math. Comp.*, vol. 77, pp.909–941, 2008.
- ⁷ AMBROSO A., CHALONS C., COQUEL F., GODLEWSKI E., LAGOUTIÈRE F., RAVIART P.-A., SEGUIN N., "Relaxation methods and coupling procedures", *Int. J. Num. Meth. Fluids*, vol. 56(8), pp.1123–1129, 2008.
- ⁸ BAER M.R., NUNZIATO J.W., "A two-phase mixture theory for the deflagration to detonation transition (DDT) in reactive granular materials", *Int. J. Multiphase Flow*, vol. 12(6), pp. 861–889, 1986.
- ⁹ CHEN Z., EWING R., "Comparison of various formulations of three-phase flow in porous media", *J. of Comp. Phys.*, vol. 132, pp 362–373, 1997.
- ¹⁰ COQUEL F., GALLOUËT T., HÉRARD J.-M., SEGUIN N., "Closure laws for a two-fluid two-pressure model", *C. R. Acad. Sci. Paris*, vol. I-332, pp. 927–932, 2002.
- ¹¹ DELEDICQUE V., PAPAEXANDRIS M.V., "A conservative approximation to compressible two-phase flow models in the stiff mechanical relaxation limit", *J. Comp. Physics*, vol. 227, pp. 9241–9270, 2008.
- ¹² GALIÉ T., "Couplage interfacial de modèles en dynamique des fluides. Application aux écoulements diphasiques", *Université Pierre et Marie Curie, Paris, France*, Thèse de Doctorat, March 31, 2009.
- ¹³ GALLOUËT T., HELLUY P., HÉRARD J.-M., NUSSBAUM J., "Hyperbolic relaxation model for granular flow", *Math. Model. Numer. Analysis*, 2010.
- ¹⁴ GALLOUËT T., HÉRARD J.-M., SEGUIN N., "Some approximate Godunov schemes to compute shallow-water equations with topography", *Computers and Fluids*, vol. 32(4), pp. 479–513, 2003.

- ¹⁵ GALLOUËT T., HÉRARD J.-M., SEGUIN N., "Numerical modelling of two phase flows using the two-fluid two-pressure approach", *Math. Mod. Meth. in Appl. Sci.*, vol. 14(5), pp. 663-700, 2004.
- ¹⁶ GAVRILYUK S., SAUREL R., "Mathematical and numerical modelling of two-phase compressible flows with micro-inertia", *J. Comp. Phys.*, vol. 175, pp. 326-360, 2002.
- ¹⁷ GIRAULT L., HÉRARD J.-M., "A two-fluid model in a porous medium", *Rapport interne EDF H-I81-2008-1947-EN*, soumis à publication, 2008.
- ¹⁸ GODLEWSKI E., "Coupling fluid models. Exploring some features of interfacial coupling", *Proceedings of Finite Volumes for Complex Applications V, ISTE-Wiley*, pp. 87-102, Aussois, France, June 8-13, 2008.
- ¹⁹ GODLEWSKI E., RAVIART P.A., "The numerical interface coupling of nonlinear hyperbolic systems of conservation laws. I. The scalar case.", *Numer. Math.*, vol. 97(1), pp. 81-130, 2004.
- ²⁰ GODLEWSKI E., LE THANH K.C., RAVIART P.A., "The numerical interface coupling of nonlinear hyperbolic systems of conservation laws. II. The case of systems.", *Math. Model. Numer. Analysis*, vol.39(4), pp. 649-692, 2005.
- ²¹ GODUNOV S.K., "Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics", *Mat. Sb.*, vol. 47, pp. 271-300, 1959.
- ²² GREENBERG J.M., LEROUX A.Y., "A well-balanced scheme for the numerical processing of source terms in hyperbolic equations", *SIAM J. of Num. Anal.*, vol. 33, pp. 1-16, 1996.
- ²³ GUILLEMAUD V., "Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques par une approche bifluide à deux pressions", Thèse de Doctorat, Université Aix Marseille I, Marseille, France, 27th of March, 2007.
- ²⁴ HÉRARD J.-M., "An hyperbolic three-phase flow model", *CRAS Mathématique*, vol. I-342, pp. 779-784, 2006.
- ²⁵ HÉRARD J.-M., "A three-phase flow model", *Mathematical and Computer Modelling*, vol. 45, pp. 732-755, 2007.
- ²⁶ HÉRARD J.-M., "A relaxation scheme to compute three-phase flow models", *AIAA paper 2007-4455*, <http://www.aiaa.org/>, 2007.
- ²⁷ HÉRARD J.-M., "Une extension des modèles de type Baer-Nunziatto", *Rapport interne EDF*, à paraître.
- ²⁸ HÉRARD J.-M., HURISSE O., "A simple method to compute standard two-fluid models", *Int. J. Comput. Fluid Dyn.*, vol. 19 (7), pp. 475-482, 2005.
- ²⁹ HÉRARD J.-M., HURISSE O., "Couplage interfacial d'un modèle homogène et d'un modèle bifluide", *Rapport interne EDF H-I81-2006-04691-FR*, 2006.
- ³⁰ HÉRARD J.-M., HURISSE O., "Coupling two and one-dimensional unsteady Euler equations through a thin interface", *Computers and Fluids*, vol. 36(4), pp. 651-666, 2007.
- ³¹ HÉRARD J.-M., HURISSE O., "Boundary conditions for the coupling of two-phase flow models", *AIAA paper 2007-4458*, <http://www.aiaa.org/>, 2007.
- ³² HÉRARD J.-M., HURISSE O., "Some recent numerical advances for two-phase flow modelling in NEPTUNE project", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, vol. 59, pp 285-307, 2009.
- ³³ HÉRARD J.-M., HURISSE O., "Some attempts to couple distinct fluid models", *Rapport interne EDF H-I81-2009-3000-EN*, soumis à publication, 2010.
- ³⁴ HURISSE O., "Couplage interfacial instationnaire de modèles diphasiques", Thèse de Doctorat, Université Aix Marseille I, Marseille, France, Septembre, 2006.
- ³⁵ KAPILA A.K., SON S.F., BDZIL J.B., MENIKOFF R., STEWART D.S., "Two-phase modeling of a DDT: structure of the velocity relaxation zone", *Phys. of Fluids*, vol. 9(12), pp. 3885-3897, 1997.
- ³⁶ MUNKEJORD S.T., "Comparison of Roe-type methods for solving the two-fluid model with and without pressure relaxation", *Computers and Fluids*, vol. 36, pp. 1061-1080, 2007.
- ³⁷ PAPIN M., ABGRALL R., "Fermetures entropiques pour les systèmes bifluides à sept équations", *CRAS Mécanique*, vol. 333, pp. 838-842, 2005.
- ³⁸ VALETTE M., JAYANTI S., "Annular dispersed flow calculations with a two-phase three field model", *European Two-phase Flow Group Meeting, Norway*, Rapport interne CEA DTP/SMTH/LMDS/2003-085, 2003.

5 Conclusion

Plusieurs aspects de la modélisation d'écoulements diphasiques en milieu poreux ont pu être abordés dans cette thèse. Trois schémas ont d'abord été utilisés pour pouvoir simuler un modèle bifluide d'écoulement diphasique en milieu poreux dans des domaines à une dimension d'espace. Le premier est un schéma classique, il s'agit du schéma de *Rusanov* (R), alors que les deux autres, le schéma de *Rusanov Modifié* (MR) et le schéma de type *Well-Balanced Rusanov* (WBR), ont été introduits dans le cadre de cette thèse. Différents cas tests analytiques ont été réalisés afin d'évaluer l'erreur en norme L^1 entre la solution exacte à un problème de Riemann donné (solution analytique construite) et la solution approchée fournie par chacun de ces schémas. On s'est ensuite attaché à l'étude de cas tests plus concrets, comme un Accident de Perte de Réfrigérant Primaire suite à la rupture soudaine d'une conduite (milieu non poreux) menant au coeur du réacteur (milieu poreux). Les résultats de ces différents cas tests ont été présentés dans le premier chapitre.

A porosité régulière, les schémas proposés donnent de bons résultats. Il a cependant été mis en évidence que lorsque qu'il y a une variation brusque de porosité, seul le schéma WBR reste stable et converge vers la bonne solution quelque soit la taille de maillage considéré. Ce résultat est basé sur le respect des solutions stationnaires par le schéma WBR , qui semble donc incontournable pour obtenir une convergence correcte. Nous voulons insister une fois de plus ici sur le fait que, sur des maillages grossiers uniquement, les schémas R et MR *semblent* donner de bons résultats eux aussi. Seule une réelle étude de convergence en maillage permet de se rendre compte de la mauvaise gestion des variations brusques de porosité par ces deux schémas.

Dans la seconde partie de ce manuscrit, on s'est attaché à étendre le schéma WBR au cas tridimensionnel avant d'évaluer la pertinence de la formulation poreuse et des conditions de couplage au niveau des interfaces raides entre milieu poreux et milieu fluide. Pour cela deux types d'approches ont été utilisées pour simuler des écoulements diphasiques dans une conduite. La première approche, l'approche fluide, consistait à considérer qu'un ensemble de barreaux parallèles étaient placés dans la conduite. Les résultats obtenus par cette approche ont ensuite été comparés à ceux obtenus par l'approche poreuse équivalente en étudiant les effets de maillage et l'impact du nombre d'obstacles dans la conduite.

Ces études ont permis de confirmer la robustesse du schéma WBR dans le cas tridimensionnel. *Ce schéma peut donc être un outil numérique performant pour simuler des écoulements diphasiques dans un milieu comportant des variations de porosité même brusques.* D'autre part, pour des études à caractère industriel, il est intéressant de souligner la rapidité de convergence de

la simulation par approche poreuse par rapport au même problème traité par une approche fluide pour laquelle tous les obstacles sont maillés. Les travaux présentés ici permettent donc d'envisager la définition d'un code bifluide poreux gérant divers niveaux de porosité, quelque soit la finesse du maillage utilisé. Il faut cependant noter que même si le formalisme mathématique associé aux conditions de couplage à l'interface fluide/poreux est très satisfaisant, la condition de couplage associée à la préservation de l'entropie n'est pas totalement adaptée sur le plan physique. Une des suites de ce travail serait de proposer des conditions de couplage alternatives, plus pertinentes sur le plan physique.

Le schéma *WBR* est plus simple que le schéma well-balanced original proposé par Greenberg-Leroux car il ne nécessite pas la résolution exacte d'un problème de Riemann à chaque interface o la porosité admet une variation importante. Il pourrait cependant être intéressant d'essayer de développer d'autres schémas capables de gérer convenablement des variations brusques de porosité, toujours grce à cette approche "well-balanced", mais en se basant sur un schéma plus précis que le schéma de Rusanov tout en gardant la simplicité du schéma *WBR*.

La dernière partie de ce manuscrit a été consacrée au couplage interfacial instationnaire d'un modèle triphasique et d'un modèle diphasique. La proposition retenue ici est basée sur le formalisme du "modèle père" à l'interface de couplage. On a ainsi utilisé la richesse du modèle triphasique pour pouvoir simuler les deux modèles (le modèle diphasique étant simulé de manière formelle à partir du modèle triphasique grce à une étape de relaxation instantanée), et ainsi fournir des conditions aux limites adaptées aux deux modèles à coupler. Les résultats obtenus sont satisfaisants dans l'ensemble. Il est important de noter que la propagation des solutions couplées du milieu diphasique vers le milieu triphasique est beaucoup mieux gérée que dans le cas inverse, au niveau de l'interface de couplage. Dans le cas d'une propagation de solutions couplées du milieu triphasique vers le milieu diphasique, les effets brusques de relaxation instantanée en pression liquide polluent cependant très peu la zone d'interface, et la solution est conforme aux configurations d'équilibre local instantané.

Cette proposition de couplage interfacial d'un modèle diphasique et d'un modèle triphasique semble donc prometteuse. Une poursuite directe de ce travail serait d'effectuer ce même couplage en simulant directement le modèle diphasique. Par la suite, on pourrait aussi envisager d'autres couplages avec notamment un code diphasique monopression, en utilisant une étape de relaxation instantanée en pression supplémentaire.

Une perspective générale des travaux présentés ici est de se servir des prin-

cipaux résultats qui viennent d'être mis en évidence pour envisager un couplage entre deux codes industriels tels que NEPTUNE.CFD et THYC. Le code NEPTUNE.CFD (modèle bifluide en milieu fluide) serait utilisé au niveau des conduites du circuit primaire alors que le code THYC (modèle homogène en milieu poreux) serait utilisé au niveau du générateur de vapeur. On pourrait alors exploiter la richesse du modèle bifluide poreux utilisé dans toute la première partie de ce manuscrit en tant que modèle père pour effectuer une procédure de couplage interfacial similaire à celle développée pour le couplage interfacial entre les modèles diphasique et triphasique, en utilisant une étape de relaxation instantanée.

6 Annexe

L'annexe qui suit est associée à la simulation d'un générateur de vapeur schématisé, en dimension deux en espace. Elle complète le chapitre deux de cette thèse.

Ecoulement diphasique en milieu poreux au sein d'un Générateur de Vapeur

Dans le circuit primaire d'une centrale nucléaire, la simulation d'écoulements diphasiques au sein du générateur de vapeur nécessite l'introduction d'un concept de porosité afin de ne pas mailler l'ensemble des tubes qui le composent (ce qui augmenterait considérablement le nombre de mailles et donc le temps de calcul).

Le schéma well balanced *WBR* permet de simuler un écoulement diphasique en milieu poreux à partir du modèle hyperbolique bifluide poreux présenté dans le chapitre 1 et le précédent chapitre. Basé sur un schéma de Rusanov modifié, ce schéma stable conserve parfaitement les états stationnaires et est capable de prendre en compte de manière cohérente des variations brusques du champ de porosité. Au sein d'un générateur de vapeur, le fluide passe soudainement d'un milieu totalement libre en entrée à un milieu poreux, avant de retourner dans un milieu libre en sortie. C'est donc le schéma *WBR* que nous allons utiliser pour simuler un écoulement diphasique au sein d'un générateur de vapeur.

I. Modélisation d'un Générateur de Vapeur

A. Caractéristiques d'un Générateur de Vapeur

La figure (1) schématise un générateur de vapeur à économiseur axial.

Nous nous intéressons uniquement aux écoulements dans la partie concernant le circuit primaire de ce type de générateur de vapeur. Elle est composée de:

- une entrée de fluide primaire,
- un faisceau de tubes en U à section cylindrique constante de diamètre $22mm$,
- une sortie de fluide primaire.

L'entrée et la sortie du générateur sont non encombrées, ce sont des milieux libres dans lesquels le fluide primaire peut s'écouler sans rencontrer d'obstacle. Le concept de porosité est introduit pour modéliser le faisceau tubulaire sans avoir à mailler les 3388 tubes qui le composent.

Le schéma (2) représente de manière simplifiée la partie du circuit primaire située au coeur du générateur de vapeur à laquelle nous nous intéressons, et en précise les dimensions. Par la suite, nous appellerons GV cette partie du circuit primaire.

B. Maillage et porosité

Afin de calculer la porosité associée à ce faisceau tubulaire, on calcule le rapport entre la *Surface de passage du fluide primaire* (S_p) et la *Surface totale* (S_{tot}) de l'entrée du GV, où:

$$S_p = \text{nombre de tubes} \times \text{surface de passage à l'intérieur d'un tube}$$

On a donc:

$$\epsilon = \frac{S_p}{S_{tot}} = \frac{3388 \pi 11^2}{\frac{1}{2} \pi 1500^2} = 0,3644 \quad (1)$$

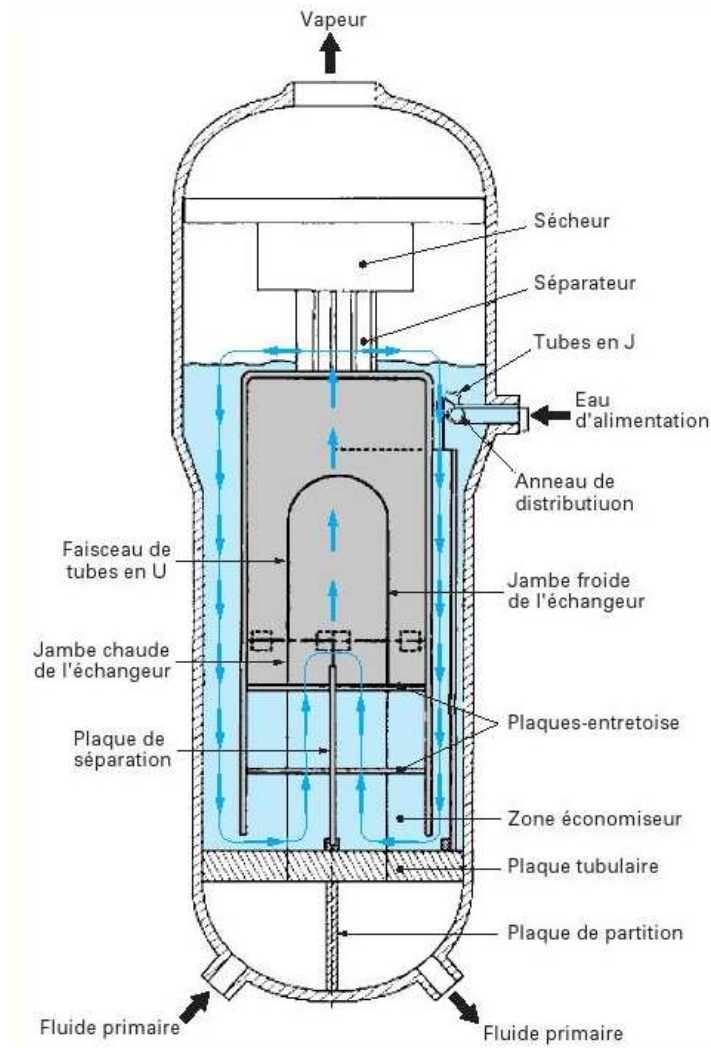


Figure 1. Générateur de vapeur à économiseur axial (schéma tiré de “*Construction des centrales REP*”, Techniques de l’Ingénieur, traité Génie énergétique, par P. Boiron et B. Monnier)

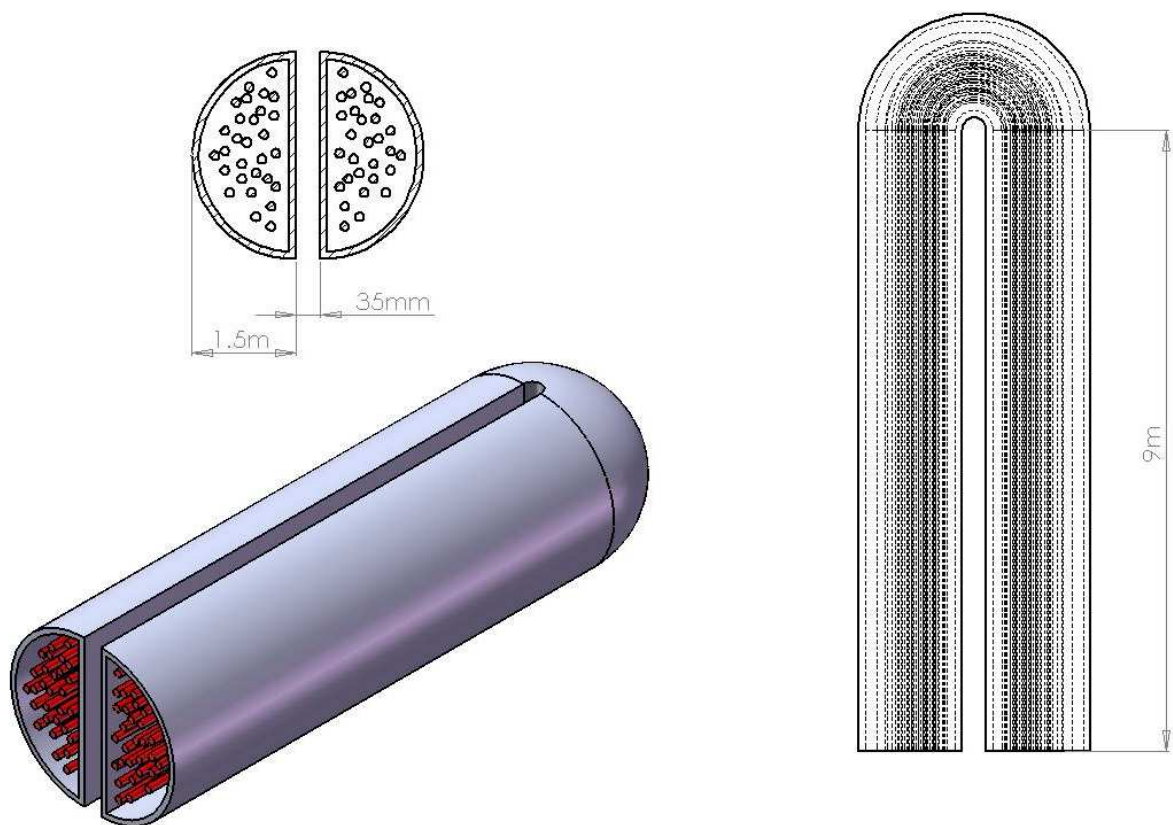


Figure 2. Partie du circuit primaire située au coeur du générateur de vapeur. Le fluide primaire s'écoule au sein des 3388 tubes qui la composent (en rouge sur le schéma 3D). Coupe transversale (en haut) et longitudinale (à droite).

Le maillage utilisé pour la simulation des écoulements diphasiques au sein du GV est présenté figure (3.a). Il comporte 13 368 mailles. La figure (3.b) représente la répartition de la porosité au sein de ce domaine de simulation: $\epsilon = 1$ en entrée et en sortie (zone rouge) et $\epsilon = 0,3644$ au niveau du faisceau tubulaire (zone bleue).

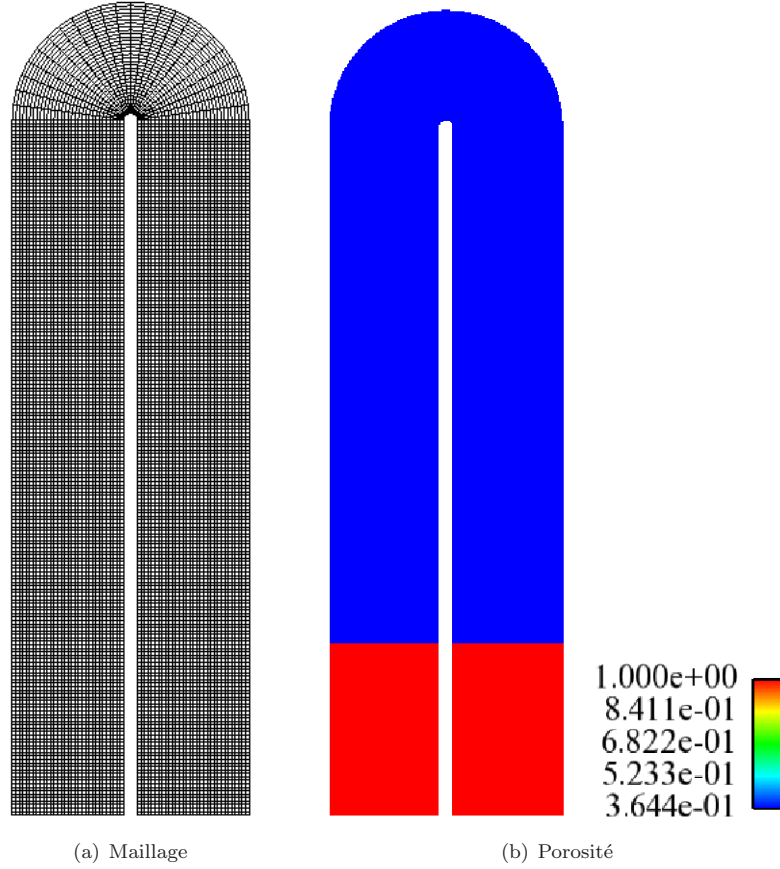


Figure 3. Maillage d'un GV (13 368 mailles) et répartition de la porosité au sein de ce domaine.

C. Conditions de simulation

Comme dans la partie précédente, les simulations d'écoulements diphasiques au sein de ce GV sont obtenues en utilisant le schéma *WBR* pour obtenir des approximations numériques des solutions du modèle diphasique hyperbolique poreux.

Les conditions d'entrée permettent le calcul d'un flux de Rusanov (classique) pour chaque cellule de bord située en entrée de domaine. Les conditions initiales considérées sont uniformes sur l'ensemble du domaine de calcul.

L'indice k représentant indifféremment les phases liquide L ou vapeur V , les conditions de simulation sont les suivantes:

	Conditions Initiales	Conditions d'entrée
α_L	0.95	
ρ_L	670	
ρ_V	60	
$U_k = W_k$	0	
V_k	0	10
P_k	155.10^5	

D'autre part, la loi d'état utilisée est celle des Gaz Parfaits, avec $\gamma_L = 1.01$ et $\gamma_V = 1.4$.

Le calcul stationnaire est effectué sur 600 000 itérations avec une CFL de 0,45. Les résidus temporels des variables d'état peuvent être visualisés sur la figure (4).

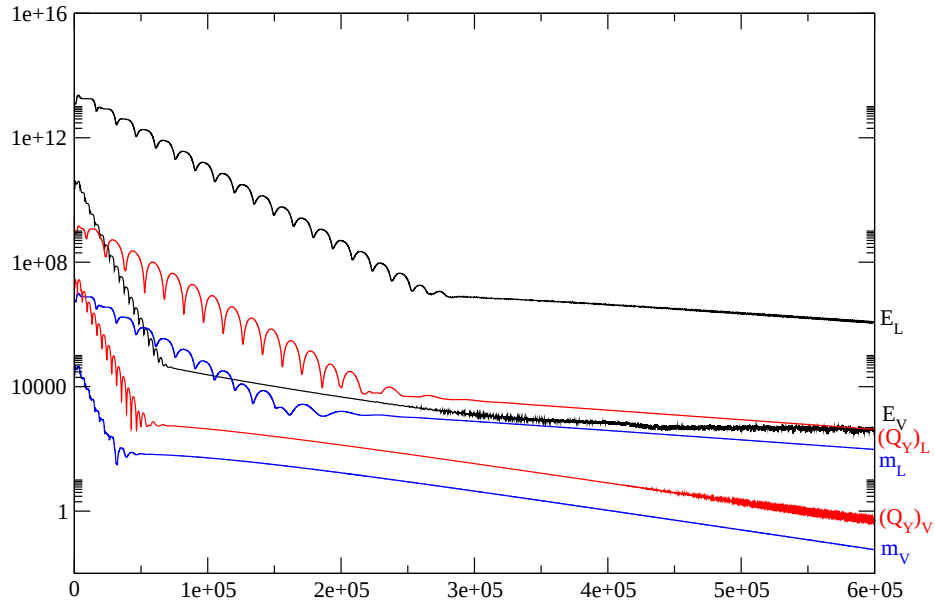
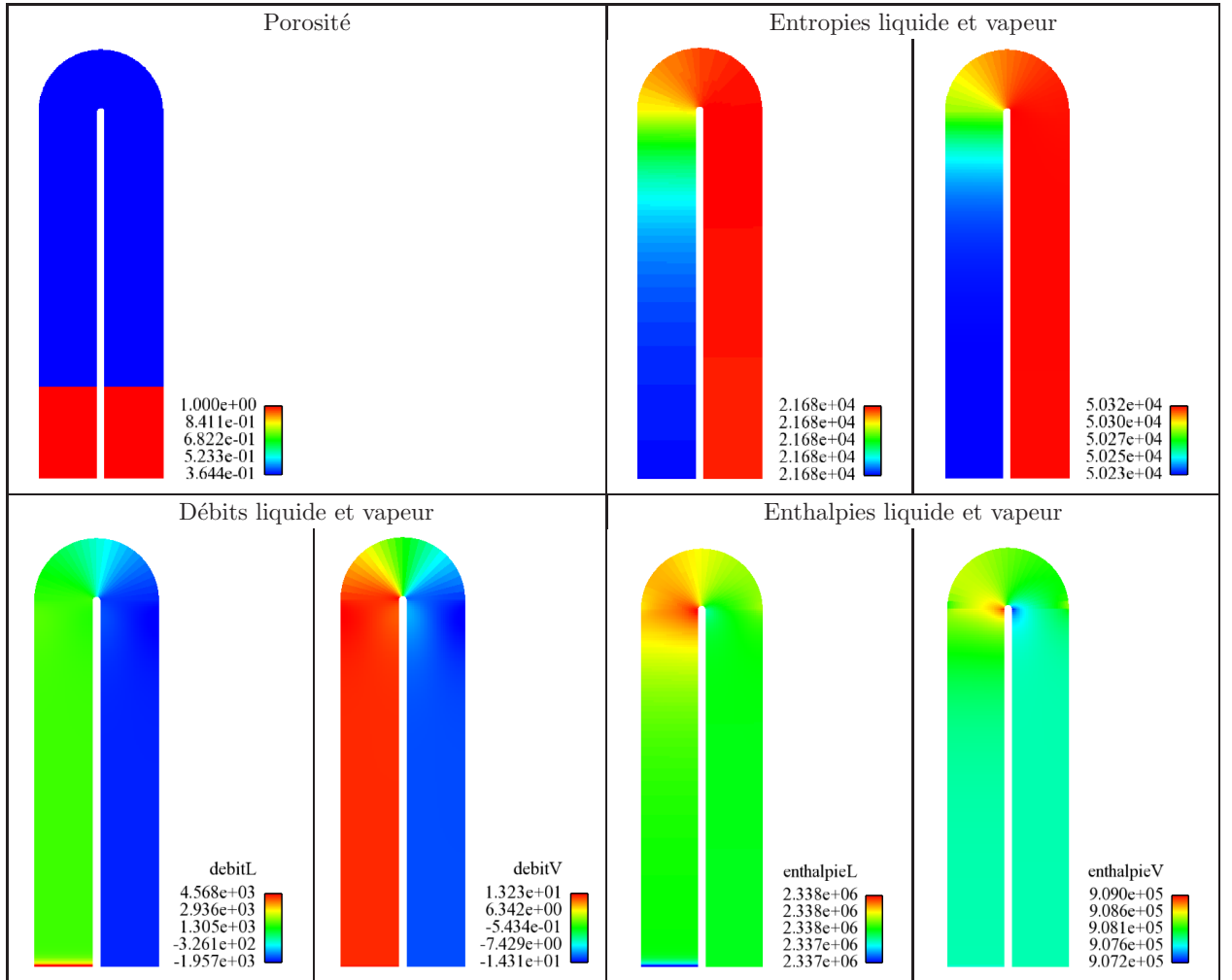


Figure 4. Résidus temporels des variables d'états m_k , Q_k et E_k , pour $k = 1, 2$.

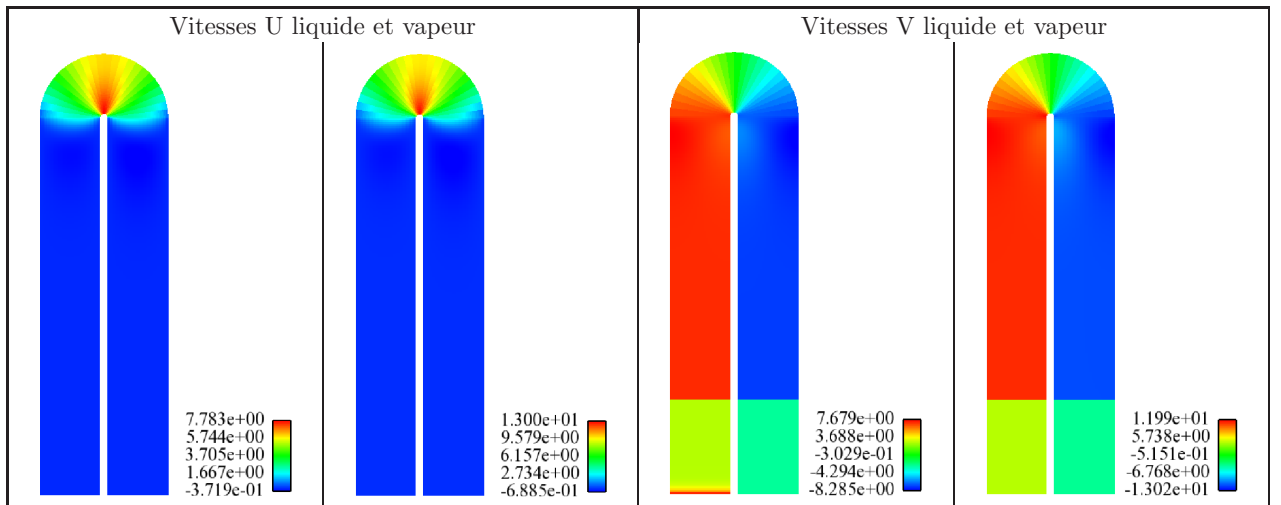
II. Résultats numériques

Nous présentons ici un certain nombre des résultats numériques obtenus.

Les figures ci-dessous présentent les invariants de Riemann associés à l'onde stationnaire : entropies S_L et S_V , débits Q_L et Q_V , ainsi que enthalpies H_L et H_V . La répartition de la porosité dans le domaine est rappelée afin d'insister sur le fait que les invariants de Riemann de l'onde stationnaire sont parfaitement conservés au niveau de l'interface entre les parties fluides (entrée et sortie du GV) et poreuse (simulation des tubes en U du GV).



On affiche ensuite les profils de vitesse V (dans l'axe du GV, dans le sens de l'entrée du fluide) et U (perpendiculaire au GV). Quelle que soit la phase considérée, l'écoulement est accéléré lors de son entrée dans la partie poreuse du GV et ralenti en sortie de ce milieu poreux. On retrouve bien les caractéristiques d'un écoulement au sein du faisceau de tubes en U du GV.



Le tableau suivant présente les valeurs prises par ces mêmes variables le long de 2 axes situés au centre de chacun des pieds du GV, c'est-à-dire en entrée ($x = -90$) et en sortie ($x = +90$) du GV. Les valeurs des variables sont données en fonction du nombre de cellules le long de ces axes. Les graphiques sont donnés sur l'intervalle $[150; 350]$, le changement de porosité se faisant en 250 (comme rappelé sur le premier graphique, présentant la porosité en entrée de GV).

Les invariants de Riemann restent constants quelque soit le changement brusque de porosité : d'un milieu fluide à un milieu poreux (en entrée de GV, quand $x = -90$), ou d'un milieu poreux à un milieu fluide (en sortie de GV). En revanche, le changement de milieu entraîne immédiatement un changement important de vitesse dans l'axe de l'écoulement.

