Modélisation de l'interaction combustible-réfrigérant : fragmentation et explosion de vapeur

Gabriel Gay

▶ **To cite this version:**

Gabriel Gay. Modélisation de l'interaction combustible-réfrigérant : fragmentation et explosion de vapeur. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Aix Marseille Université, 2020. Français. NNT : . tel-02968308

HAL Id: tel-02968308
https://theses.hal.science/tel-02968308

Submitted on 15 Oct 2020

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

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

Aix-Marseille Université

Ecole Doctorale 353 : Mécanique, physique, micro et nanoélectronique

Institut Universitaire des Systèmes Thermiques et Industriels (IUSTI), CNRS, Marseille

Laboratoire de Modélisation des Accidents Graves (LMAG), CEA, Cadarache

Thèse de Doctorat

Modélisation de l'interaction combustible-réfrigérant : fragmentation et explosion de vapeur

présentée par

Gabriel GAY

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université d'Aix Marseille

spécialité

Mécanique des Fluides

Exemplaire numérique

Soutenue le 3 juillet 2020 devant le jury composé de :

M. Nicolas RIMBERT	
ENSEM, Université de Lorraine	Rapporteur
M. Ashwyn CHINNAYYA	
Institut Pprime, Université de Poitiers	Rapporteur
Mme. Gloria FACCANONI	
IMATH, Université de Toulon	Examinatrice
M. Eric DA SILVA GONCALVES	
Institut Pprime, Université de Poitiers	Examinateur
M. Eric DANIEL	
IUSTI, Université Aix-Marseille	Directeur de thèse
M. Christophe FOCHESATO	
CEA Cadarache	Encadrant de thèse

À mes grands-parents.

Catherine, Leone, Suzanne, Andre, Jacques, Marcel.

Remerciements

Mes premiers remerciements vont à Christophe pour l'ensemble de ces trois années. En particulier pour avoir été un support inconditionnel au jour le jour, avec une mention spéciale pour nos discussions bien trop longues sur des sujets bien trop peu utiles. A qui je souhaite très sincèrement le meilleur pour la suite, humainement et professionnellement.

Mes remerciements vont ensuite à Eric pour son aide en tant que Directeur de Thèse. Je suis extrêmement reconnaissant de son support et de sa réactivité, en particulier pour les phases de relecture.
Merci également à Fabien pour son support technique tout au long de ma thèse, j'ai vraiment beaucoup appris de nos échanges.

Merci à Claude et Magali pour m'avoir si bien intégré dans l'équipe en partageant leurs connaissances, leur temps ainsi que leur joie et bonne humeur chaque jour.

Merci à Benoit, Mathieu et Romain pour avoir partagé leur expérience et leur maturité. Nos échanges ont été particulièrement enrichissants, que ce soit en temps de crise ou de relâchement.

Merci à Hélène et toute l'équipe de la médiathèque 2 de Cadarache avec une mention spéciale pour les troubadours Guillaume, David et Pierre.

Un grand merci à tout le Club Kiwi qui a refusé l'impossible : Clément, Adrien, Jérôme, Simon, Arnaud, Jeanne, Quentin, Guillaume, Benoit et Gaétan.

Merci à mon père, qui a eu le courage de lire et corriger ce manuscrit.

Merci à ma mère qui m'a toujours supporté quel que soit mon parcours et mes décisions.

Merci à mon frère pour le feuilleton 206 saison 2017-2020.

Thank's to Sean and Sarah for never giving up. You've always been a great inspiration for me and I trully believe your awesomeness will make the years to come beautiful as ever.

Merci au meilleur, Lucas, esprit libre et original accompli, homme d'amour et de funk.

Merci au pire, Loulou, culinairement instable et socialement innaceptable, mais fondamentalement outrecuidant.

Merci à toutes les personnes qui étaient là sans le savoir.

" I won't control or restrain
Things I do not understand
Now I realize I'm stronger, better
They gave to me, now I give to you
The means to burn the thoughts I had
Now I realize I'm stronger, better"

- *Wherein Lies Continue,* Slipknot

Table des matières

1 Contexte industriel et scientifique **14**

1.1 Introduction **14**

1.2 Contexte industriel **14**

1.3 Contexte scientifique **17**
1.3.1 Situation d'accident grave 17
1.3.2 L'explosion de vapeur 19
1.3.3 Historique des travaux, le besoin de comprendre les phénomènes locaux 20

1.4 Conclusion **22**

2 Analyse du besoin pour le développement d'un code de calcul dédié à la simulation de l'explosion de vapeur à l'échelle locale **23**

2.1 Description phénoménologique, les expériences à l'échelle locale **23**
2.1.1 Les expériences en eau 23
2.1.2 Les expériences en sodium 28
2.1.3 Remarques concernant les expériences d'explosion de vapeur à l'échelle locale 29

2.2 Prise de position, définition d'un problème minimal **30**

2.3 Analyse pour le développement d'un outil de calcul à l'échelle locale **31**
2.3.1 Effets séparés 31
2.3.2 Validation vis-à-vis d'un observable expérimental, la zone d'interaction thermique . . 33

2.4 Conclusion **34**

3 Une modélisation d'écoulement multiphasique **36**

3.1 Introduction **36**

3.2 Equations monophasiques **36**

3.3 Formulation locale instantanée **37**

3.4 Moyennes des équations locales instantanées **38**

3.5 La modélisation des termes moyennés **40**

3.6 Fermeture des termes d'échanges **43**

3.7 Relaxations et hiérarchie de modèles multiphasiques **44**

4 Architecture SCONE, application micro-SCONE **48**

4.1 Introduction **48**

4.2 Equations d'état **49**

4.3 Schéma numérique et résolution **51**
4.3.1 Description temporelle . . . 51
4.3.2 Discrétisation spatiale . . . 53
4.3.3 Tests numériques . . . 59

4.4 Multiphasique : introduction à l'approximation d'interface diffuse **61**

4.5 Conclusion **63**

5 Modèle à l'équilibre thermomécanique **65**

5.1 Description **65**

5.2 Vérification-validation du modèle UPT **66**
5.2.1 Transport diphasique, advection d'interfaces . . . 66
5.2.2 Diffusion de la chaleur . . . 67
5.2.3 Diffusion de la chaleur en milieu compressible . . . 70
5.2.4 Extension triphasique et déformation d'interface en 2D . . . 73

5.3 Conséquences de l'équilibre en température **76**
5.3.1 Introduction . . . 76
5.3.2 Condition d'uniformité des températures dans le cas de transport de discontinuité de contact . . . 78
5.3.3 Description du comportement discret . . . 80
5.3.4 Indépendance de la variation de pression initiale au maillage . . . 81
5.3.5 Etude dans la configuration d'intérêt . . . 82
5.3.6 Bilan . . . 83

5.4 Conclusion **84**

6 Modèle à l'équilibre mécanique et transferts de chaleur **85**

6.1 Description du modèle **85**

6.2 Vérification-validation du moteur d'écoulement du modèle à l'équilibre mécanique **86**
6.2.1 Transport de discontinuité de contact dans un domaine non isotherme . . . 86
6.2.2 Implosion hydrodynamique . . . 89

6.3 Transferts de chaleur dans le modèle à l'équilibre mécanique **92**
6.3.1 Modèles à équilibre de vitesse et pression avec transferts de chaleur . . . 92
6.3.2 Modélisation des termes de transfert de chaleur dans la littérature . . . 93
6.3.3 Conséquence directe de la discrétisation des termes de transfert de chaleur existants . . . 94
6.3.4 Proposition de modélisation des transferts de chaleur . . . 96
6.3.5 Formulation discrète des transferts de chaleur dans l'équation d'énergie . . . 97
6.3.6 Validation du modèle, vérification de l'implémentation de la forme discrète de l'équation d'énergie . . . 99
6.3.7 Formulation discrète de l'équation de transport de volume . . . 103
6.3.8 Validation du modèle, vérification de l'implémentation de la forme discrète de l'équation de transport de volume . . . 104
6.3.9 Bilan sur les transferts de chaleur dans le modèle à équilibre mécanique . . . 107

6.4 Application en configuration d'intérêt **108**
6.4.1 Transport d'une interface de corium . . . 108
6.4.2 Film de vapeur chauffé . . . 110

6.5 Conclusion **112**

7 Changement de phase **114**

7.1 Introduction, le modèle de changement de phase **114**

7.2 Description du principe permettant d'obtenir l'état d'équilibre **115**

7.3 Proposition de recherche de l'état d'équilibre **116**
7.3.1 Observations sur $T_+(p)$ et $T_-(p)$ . . . 117
7.3.2 Comportement de $F_{sat}(p)$ . . . 118
7.3.3 Résolution du processus de changement de phase . . . 119
7.3.4 Bilan . . . 120

7.4 Discussion sur l'emploi du modèle de changement de phase **120**
7.4.1 Le couplage de modèles à interface diffuse . . . 121
7.4.2 Discussion sur le critère de déclenchement du transfert de masse . . . 121
7.4.3 Transition entre les modèles, obtention des limites phases pures . . . 122
7.4.4 Bilan, ce qui est fait dans micro-SCONE . . . 122

7.5 Vérification et validation du modèle UP avec changement de phase **123**
7.5.1 Vérifications 0D . . . 123
7.5.1.1 Conservation de l'état d'équilibre . . . 124
7.5.1.2 Obtention d'un état d'équilibre à partir d'un état déséquilibré . . . 124
7.5.1.3 Evolution de l'état d'équilibre lors d'une variation d'énergie . . . 126
7.5.2 Validation 1D, tube à choc multiphasique . . . 127

7.6 Application en configuration d'intérêt, film de vapeur chauffé **128**

7.7 Conclusion **131**

8 Conclusion générale **132**

8.1 Bilan des travaux **132**

8.2 Perspectives **134**

9 Annexe **136**

9.1 Détermination de la forme de $\Delta(p)$ **136**

Table des figures

1 Principe de fonctionnement d'un Réacteur à Eau Pressurisée . . . 14
2 Description d'un crayon de combustible et d'un assemblage . . . 15
3 Description schématique du fonctionnement d'un RNR-Na. . . . 16
4 Coupe schématisée de la cuve montrant le combustible significativement dégradé par la fusion partielle du cœur lors de l'accident survenu aux USA le 28 mars 1979 à Three Mile Island (https ://irsn.fr). . . . 18
5 Principaux modes de défaillance sur un réacteur à eau sous pression. α interaction combustible réfrigérant explosive, β défaut d'étanchéité de l'enceinte, γ explosion d'hydrogène, δ mise en surpression lente dans l'enceinte, ϵ traversée du radier en béton par le corium (https ://irsn.fr). . . . 19
6 Photos d'une explosion de vapeur observée lors d'une coulée de lave dans l'océan . . . 20
7 Thermal Interaction Zone d'une goutte de 12 g d'étain dans de l'eau. Les ronds représentent les interactions explosives, les croix l'absence de dynamique particulière. . . . 24
8 Pression proche de la bulle de vapeur et son rayon dans le cas d'une expérience avec trigger. Les différents instants spécifiés liés aux ondes de pression générées sont : (1) collapse du film de vapeur au passage de l'onde destabilisatrice, (2) collapse de la première bulle, (3) collapse de la seconde bulle, (4) conséquence du trigger. . . . 25
9 Visualisation de trois étapes de l'explosion d'une goutte. A gauche, la situation d'ébullition en film stable. Au centre, la bulle dans la phase de croissance-collapse. A droite, le nuage de fragments formé. . . . 26
10 Visualisation directe, sous rayons X et post traitée de l'explosion d'une goutte d'étain dans de l'eau soumise à une onde de pression à $t = -3\ ms$ . . . 27
11 Historique du phénomène de croissance collapse de bulle lors d'une explosion de vapeur à l'échelle locale dans différentes conditions initiales de températures du réfrigérant. 27
12 Schéma de l'organisation des acteurs du développement du logiciel SCONE . . . 49
13 Profils de p_{sat} en fonction de T_{sat}, à gauche sur une large gamme de températures, à droite un zoom autour de 373 K. . . . 50
14 Description de l'algorithme de résolution d'un modèle monophasique usuel . . . 52
15 Description de l'algorithme de résolution d'un modèle multiphasique à interface diffuse général . . . 53
16 Description discrète, les quantités thermodynamiques sont au centre d'une maille, les vitesse normales sur les faces. . . . 54
18 **Représentation schématique d'un stencil discret 2D pour décrire la position de la vitesse upwind parallèle. C'est la vitesse normale dans le repère global sur la face de c parallèle à cd si la vitesse normale sur cd est sortante, et sur la face de d parallèle à cd si la vitesse normale sur cd est entrante.** . . . 56
19 **Représentation schématique d'un stencil discret 2D pour décrire la vitesse transverse sur cd. C'est une pondération des vitesses normales sur les faces orthogonales à cd dans son voisinage.** . . . 57
21 **Représentation schématique d'un stencil discret 2D pour décrire la position de la vitesse upwind transverse. C'est la vitesse normale dans le repère global à la face dans l'entourage de cd de même normale prise en upwind selon la vitesse transverse en cd.** . . . 57
22 **Configuration du cas test de transport monophasique** . . . 59
23 Transport à vitesse constante de discontinuités de contact séparant un fluide avec des densités différentes . . . 60
24 **Configuration du cas test de Sod monophasique** . . . 60
25 Profils de densité pour le cas test de tube à choc de Sod pour différents maillages en comparaison avec la solution exacte. . . . 61
26 **Configuration du cas test de transport diphasique** . . . 66
27 Transport d'un volume de fluide dans un milieu de densité différente . . . 67

28 **Configuration du test de validation de conduction de la chaleur dans un mur semi infini soumis à une condition initiale de température ou de densité de flux surfacique imposée sur sa face gauche** . . . 68
29 Conduction dans un fluide au repos . . . 69
30 Erreur relative en chaque point du domaine, pour trois maillages différents . . . 70
31 **Configuration du test de validation de conduction de chaleur en milieu monophasique compressible** . . . 70
32 Conduction dans un fluide monophasique compressible . . . 71
33 **Configuration du test de validation de conduction de chaleur en milieu diphasique compressible** . . . 72
34 Cas test de deux fluides compressibles intialement à des températures différentes. . . . 73
35 **Configuration du cas test de validation de choc triphasique** . . . 74
36 En haut, fraction massique de composant, en bas vitesse de mélange selon l'axe x pour le cas de validation de choc triphasique. . . . 75
37 **Configuration du cas test de transport diphasique avec température non homogène sur le domaine** . . . 76
38 Transport d'un volume de fluide dans un milieu de densité différente avec discontinuité de température initiale sur le domaine . . . 77
39 Conséquences du transport d'un volume de fluide avec discontinuités de température et de fractions massiques sur le profil de pression au premier pas de temps. . . . 77
40 **Schéma représentant la configuration initiale pour décrire la condition d'uniformité des températures dans le cas de transport de discontinuité de contact.** . . . 78
41 **Configuration discrète du transport de discontinuité, à gauche l'instant initial, à droite après le premier pas de temps.** . . . 80
42 **Configuration du cas de transport d'une interface de corium** . . . 82
43 Profils de vitesse à 1 μs de temps réel pour le cas de transport d'une interface de corium pour plusieurs raideurs de l'interface. . . . 83
44 **Configuration du cas test de transport diphasique avec température non homogène sur le domaine** . . . 87
45 Transport d'un volume de fluide dans un milieu de densité différente avec discontinuité de température initiale sur le domaine avec le modèle à l'équilibre mécanique. . . . 88
46 Profils de température pour le cas de transport avec non uniformité de la température sur le domaine. À gauche, la température de la phase résiduelle est initialement à la même température que la phase majoritaire. À droite, la température de chaque phase est initialement constante sur le domaine. . . . 89
47 **Configuration du test de validation d'implosion hydrodynamique** . . . 90
48 Formation d'un jet lors du cas test d'implosion hydrodynamique monophasique . . . 91
49 **Configuration initiale dans laquelle les échanges de chaleur doivent agir comme moteur thermique** . . . 95
50 **Représentation des différentes surfaces qui interviennent dans la formulation des échanges de chaleur proposée.** . . . 96
51 **Schéma illustrant la représentation 'étagée' de l'interface numérique diffuse.** . . . 98
52 **Configuration du cas test de vérification-validation des effets de conduction de la chaleur entre deux murs semi-infinis avec le modèle UP.** . . . 100
53 Profils de température pour le cas de conduction de la chaleur entre deux murs semi-infinis avec une interface initialement raide au temps $t = 10\mu s$. Le premier graphe présente les différents profils sur le domaine complet, les graphes suivants présentent les profils de part et d'autre de l'interface. Le nombre de points affichés à été réduit pour plus de clarté. . . . 101

54 Profils de température pour le cas de conduction de la chaleur entre deux murs semi-infinis avec une interface initialement diffuse au temps $t = 10\mu s$. Les graphes du haut représentent les profils de température de part et d'autre de l'interface avec une légère zone de recouvrement. Le troisième graphe présente le comportement autour de l'interface. Le nombre de points affichés à été réduit pour plus de clarté. 102
55 **Configuration du test de validation de conduction de chaleur en milieu diphasique compressible avec le modèle UP.** 105
56 Profils de pression, vitesse et masse volumique de mélange obtenus pour le cas test de conduction entre deux fluides compressibles initialement à des températures différentes avec le modèle UP. 106
57 Profils de températures phasiques obtenus pour le cas test de condution entre deux fluides compressibles initialement à des températures différentes avec le modèle UP, aux instants $t = 0$, $t = 10^{-1}\ s$ et $t_f = 5\ s$. 107
58 **Configuration du cas de transport d'une interface de corium** 108
59 Profil de vitesse généré dans le cas de transport d'une interface de corium avec transferts de chaleur avec le modèle UP. 109
60 Profils de vitesse obtenus dans le cas de transport d'une interface de corium dans de la vapeur d'eau pour différentes conductivités thermiques. A gauche avec le modèle UP, à droite avec le modèle UPT. 109
61 **Configuration du cas test de film de vapeur chauffé par conduction** 110
62 Profils de pression dans le cas de film de vapeur chauffé. Résultats présentés pour $t = 50\mu s$ à gauche et $t = 250\mu s$ à droite. 111
63 Profils de fraction volumique de la phase vapeur à l'instant initial, à $t = 50\mu s$ et $t = 250\mu s$ pour le cas où l'interface est initialement diffuse. 112
64 Profil de vitesse dans le film de vapeur pour le cas de calcul de film de vapeur avec condition de température imposée. 112
65 Evaluation des fonctions T_+ et T_- en fonction de la pression $p \in [10^3, 10^8]$ pour le mélange initial fixé $\alpha_g = 0.4, \alpha_l = 0.6, T_0 = 400K, P_0 = 10^5 Pa$. A gauche, les deux fonctions T_+ et T_- sur la gamme de pression calculée. A droite, un zoom sur la fonction T_+ autour de la pression initiale $P_0 = 10^5\ Pa$. L'abscisse est donnée en logarithme. . . . 117
66 Evaluation des valeurs $T_+(P_0)$ et $T_-(P_0)$ pour différents mélanges initiaux. 118
67 Evaluation des fonctions F_{sat,T_+} et F_{sat,T_-} en fonction de la pression $p \in [10^3, 10^8]$ pour le mélange initial fixé $\alpha_g = 0.4, \alpha_l = 0.6, T_0 = 400K, P_0 = 10^5 Pa$. A gauche, les deux fonctions F_{sat,T_+} et F_{sat,T_-} sur la gamme de pression calculée, nous avons restreint l'affichage pour plus de clarté. La courbe de F_{sat,T_-} garde la même monotonie sur la zone où elle n'est pas représentée et atteint une valeur de ~ 800000 en $p = 10^3\ Pa$. A droite, un zoom sur la fonction F_{sat,T_-} autour de la pression initiale $P_0 = 10^5\ Pa$. L'abscisse est donnée en échelle logarithmique. 119
68 Courbe de $\Delta(p)$ pour le mélange initial $\alpha_g = 0.4, \alpha_l = 0.6, T_0 = 400\ K, P_0 = 10^5\ Pa$. . . . 120
69 Description de l'algorithme de résolution du modèle UP avec changement de phase. . 123
70 Erreur absolue obtenue sur la pression après l'utilisation de l'algorithme de changement de phase pour un ensemble de mélanges $\alpha_v \in [5.10^{-5}, 1 - 5.10^{-5}]$ initialement à l'équilibre $P_0 = 10^5\ Pa$, $T_0 = 373.456\ K$. A gauche, toutes les erreurs obtenues. A droite, un focus plus proche de $\epsilon_{p_{sat}} = 0$. 124
71 Etat final obtenu après passage dans l'algorithme de changement de phase dans l'espace (p, T) pour quatres états initiaux différents. Les états initiaux (P_0, T_0) sont spécifiés sous chaque courbe. La courbe de saturation est représentée en noir et les états finaux en cercles bleu. On ne représente qu'un échantillon des points calculés pour plus de clarté. 125

72 Fraction massique de vapeur obtenue après application de l'algorithme de changement de phase pour un ensemble de mélanges initialement dans les quatre états en déséquilibre présentés. La légende correspond aux courbes précédentes, (a) ($P_0 = 10^5\ Pa, T_0 = 1000\ K > T_{sat}(P_0)$) , (b) ($P_0 = 10^5\ Pa, T_0 = 250\ K < T_{sat}(P_0)$), (c) ($T_0 = 373.456\ K, P_0 = 5.10^7\ Pa > p_{sat}(T_0)$) et (d) ($T_0 = 373.456\ K, P_0 = 10^3\ Pa < p_{sat}(T_0)$). 126
73 Fraction massique de liquide obtenue après application du changement de phase pour un ensemble de variations d'énergie sur 3 mélanges initiaux différents. 127
74 **Configuration du cas test de tube à choc multiphasique avec changement de phase.** 128
75 Profils de pression et de fraction massique de liquide pour le cas de tube à choc 1D avec changement de phase. 128
76 **Configuration du test de film de vapeur chauffé avec changement de phase** 128
77 Profils de fraction massique de la phase liquide à l'instant initial et à $t = 50\mu s$. Deux valeurs du critère de déclenchement du changement de phase ϵ_c sont testés, $\epsilon_c = 10^{-5}$ qui permet de ne repérer que l'interface et $\epsilon_c = 0$ qui autorise le changement de phase sur tout le domaine. 129
78 Profils de pression à $t = 50\mu s$ pour les cas avec interface initialement raide et diffuse. Deux valeurs du critère de déclenchement du changement de phase ϵ_c sont testés, à gauche $\epsilon_c = 10^{-5}$ qui permet de ne repérer que l'interface et à droite $\epsilon_c = 0$ qui autorise le changement de phase sur tout le domaine. 130

Liste des tableaux

1 Équivalence entre l'équation générique et les équations de conservation 37
2 Paramètres des SG EOS de l'eau liquide et sa vapeur 50
3 Correspondances entre le nom des équations bilan et la quantité évoluée dans notre schéma 51
4 Correspondances des opérateurs d'advection $\mathcal{A}$ 58
5 Correspondances des opérateurs d'effets compressibles $\mathcal{P}$ 58
6 Coefficients des équations d'état pour les tests numériques monophasiques 59
7 Fractions massiques et volumiques des phases résiduelles, pour les valeurs d'initialisation correspondantes. 62
8 Coefficients des équations d'état pour l'eau liquide et sa vapeur 66
9 Paramètres des SG EOS du liquide pour les tests de conduction de la chaleur monophasique 69
10 Coefficients pour le fluide I 71
11 Coefficients des SG EOS pour le second fluide de test 72
12 Coefficients des équations d'état pour l'eau liquide et sa vapeur 86
13 Paramètres des SG EOS du liquide pour les tests de conduction 100
14 Coefficients des SG EOS pour les fluides du cas test de validation de conduction de chaleur en milieu diphasique compressible. 105
15 Paramètres des SG EOS du corium et de la vapeur d'eau pour le cas test de transport d'une interface de corium. 108
16 Paramètres des SG EOS de l'eau liquide et vapeur pour le cas de film de vapeur chauffé. 111
17 Coefficients des équations d'états pour le cas test de tube à choc multiphasique avec changement de phase. 127
18 Paramètres des SG EOS de l'eau liquide et vapeur 129

Première partie

Contexte industriel et scientifique

1.1 Introduction

Cette partie a pour but d'introduire l'industrie nucléaire française actuelle et les besoins de R&D dans le domaine des accidents graves. Nous verrons en premier lieu le contexte industriel français, en reprenant le fonctionnement d'une centrale électrique. Puis nous introduirons la nouvelle génération de réacteurs à l'étude. Nous décrirons un accident grave et ses conséquences, en particulier l'explosion de vapeur.

1.2 Contexte industriel

L'énergie nucléaire est la troisième source de production d'électricité dans le monde avec 10,4% de la production, derrière l'hydraulique 16.6% et les énergies fossiles 65,1% [1]. Cette énergie permet d'assurer, avec de faibles rejets de carbone, les besoins en énergie toujours plus importants des industries et des particuliers. En 2018, d'après le bilan réalisé par le réseau de transport d'électricité de France, 71.7% [2] de l'énergie produite en France était issue de l'industrie nucléaire. Cependant, l'utilisation de cette énergie n'est pas sans contraintes. Pour assurer un impact sur l'homme et l'environnement minimum, la sûreté des installations doit être assurée à chaque instant, en prenant en compte le fonctionnement nominal et les situations accidentelles. La gestion des déchets radioactifs doit également être au cœur des préoccupations des organismes de recherche de manière à proposer des solutions convenables sur le long terme. De plus, pour assurer une production d'énergie fiable et durable, une gestion du combustible doit être proposée pour pallier la diminution des ressources naturelles disponibles.

Le parc actuel

La France dispose de 58 réacteurs, répartis sur 19 sites. Tous les réacteurs du parc actuel fonctionnent sur le même principe, ce sont des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) dont le fonctionnement est schématisé sur la figure 1.

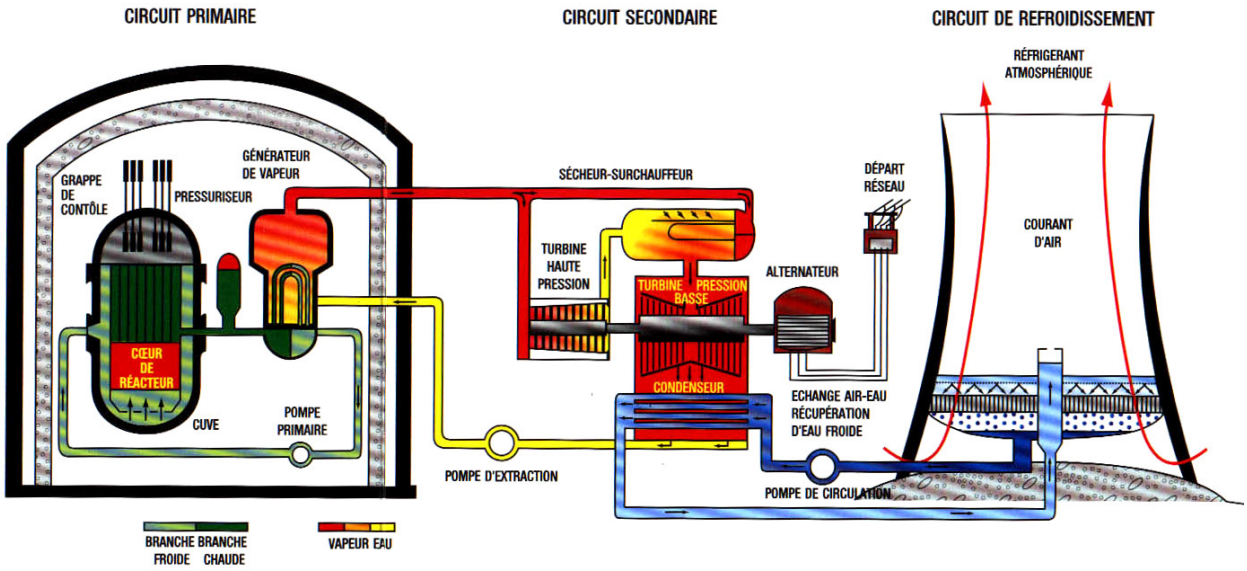


FIGURE 1 – Principe de fonctionnement d'un Réacteur à Eau Pressurisée

1. https ://www.iea.org/data-and-statistics
2. https ://bilan-electrique-2018.rte-france.com/production-totale/

Au sein du cœur, composé d'un ensemble d'assemblages combustibles présentés sur la figure 2, des réactions de fission ont lieu. Ces réactions consistent en la séparation d'un noyau lourd, principalement d'^{235}U (Uranium 235), sous l'impact de neutrons.

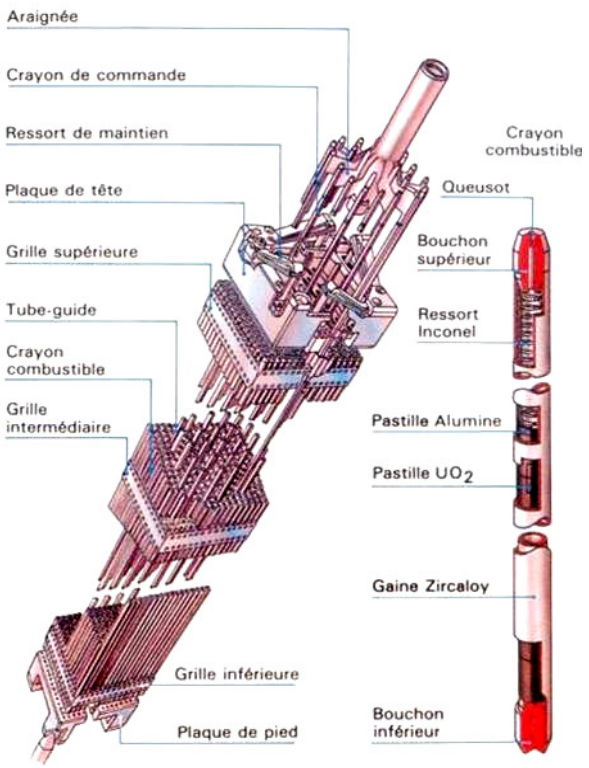


FIGURE 2 – Description d'un crayon de combustible et d'un assemblage

Lors de cette réaction, de nouveaux neutrons sont relâchés, cela s'accompagne d'un grand dégagement d'énergie et de la formation de produits de fission (PF). Les nouveaux neutrons vont à leur tour impacter d'autres noyaux, provoquant une réaction en chaîne. Les neutrons produits, lorsqu'ils sont éjectés du noyau désintégré, sont trop rapides pour permettre la fission d'autres noyaux de combustible. Il est nécessaire de les ralentir à une vitesse appropriée, rôle assuré par l'eau pressurisée présente dans le réacteur. Une partie de l'énergie est dissipée sous forme de chaleur dans le réfrigérant (ici l'eau) qui circule entre les différents crayons et assemblages du cœur. Elle est ensuite transmise via un échangeur de chaleur à un autre fluide. Les deux fluides circulent sans entrer en contact de manière à isoler les matières radioactives. L'enceinte dans laquelle le premier fluide est confiné s'appelle le circuit primaire, tandis que le second fluide s'écoule dans le circuit secondaire. Dans ce circuit secondaire, l'augmentation de température du fluide a pour but de le vaporiser, c'est la partie qu'on appelle générateur de vapeur. La vapeur générée est alors sous pression et va permettre d'entraîner des turbines, reliées à un alternateur qui permet la génération d'électricité.

Les produits de fission qui sont relachés pendant le fonctionnement du réacteur sont des composés très instables qui se désintègrent naturellement en dégageant de la chaleur. Ils sont responsables de la *puissance résiduelle*, c'est à dire la puissance générée par le cœur après l'arrêt de la réaction en chaine. C'est la raison pour laquelle il est nécessaire de maintenir le refroidissement du cœur même après son arrêt.

La génération future

Pour des objectifs de sûreté, de performances, de durabilité et de compétitivité économique, le GIF (Génération IV International Forum) [3] a identifié 6 concepts de réacteurs particulièrement prometteurs. Parmi ces concepts, la France a fait le choix de se concentrer sur le principe de RNR-Na (Reacteur

3. https ://www.gen-4.org/gif/

à Neutrons Rapides refroidi au Sodium). Le premier avantage d'un RNR sur un REP est que l'isotope d'intérêt dans un RNR est l'isotope ^{238}U. Cet isotope n'est pas naturellement sujet à la réaction de fission, mais peut capturer un neutron pour se transformer en Plutonium ^{239}Pu (élément fissible) lequel peut contribuer à la réaction en chaîne. Le RNR rend alors possible l'utilisation de ^{238}U qui est ~ 100 fois plus abondant que l'isotope ^{235}U utilisé aujourd'hui, et permet d'imaginer une production d'énergie sur un plus long terme. Le second avantage notable est que les RNR offrent la possibilité de réaliser de la transmutation d'actinides mineurs. Cela consiste à transformer ces composés, qui sont des déchets radioactifs de haute activité, en éléments moins dangereux pour l'environnement. Ces deux aspects sont particulièrement intéressants car cela permettrait de pouvoir gérer les stocks de Pu et d'envisager de meilleures solutions de traitement des déchets.

Pour permettre les réactions décrites ci-dessus, il est nécessaire de disposer de neutrons dont la vitesse est importante. Pour cela, l'emploi d'un réfrigérant tel que l'eau, qui agit comme modérateur, n'est pas souhaitable. De plus, comme dans tout design, le réfrigérant doit également respecter certains critères. Cela concerne sa conductivité thermique, sa capacité thermique et sa viscosité pour permettre d'extraire un maximum d'énergie, mais également, la marge entre la température de fonctionnement et son point d'ébullition, sa stabilité en présence d'un flux de neutrons et sa compatibilité avec les matériaux de structures pour des raisons de sûreté. Cet ensemble de critères a mené au choix de réfrigérant qui est le sodium liquide Na.

Cependant, le sodium nécessite un emploi précautionneux. Les propriétés chimiques du sodium le rendent susceptible de réagir violemment, en particulier avec l'air et l'eau [1]. Des mesures doivent donc être prises vis-à-vis de la proximité de ces composants. Ce qui explique en partie le design qui est présenté sur la figure 3 qui diffère du design de REP par la présence d'un circuit supplémentaire. Le fluide qui circule dans ce circuit est de même nature que le réfrigérant mais ne contient pas de radioactivité. Cela permet de réduire les risques de relâchement de produits contaminés en cas de dégradation dûes à une réaction sodium-eau dans le générateur de vapeur.

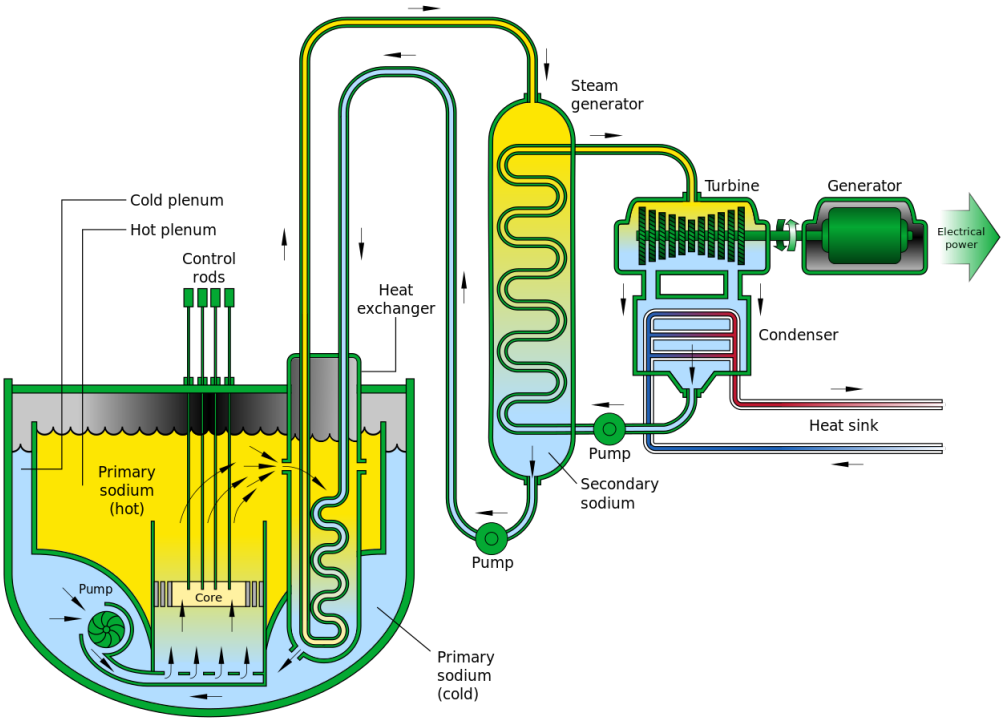


FIGURE 3 – Description schématique du fonctionnement d'un RNR-Na.

Le premier projet de ce type retenu pour la génération future portait le nom de ASTRID (Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration). Cependant, la construction de ce démonstrateur à été abandonnée en 2018. Aujourd'hui, le CEA travaille toujours au développement de nouveaux types de réacteurs, dont d'autres RNR-Na, pour assurer les différents objectifs de la

nouvelle génération : la GEN IV.

Eléments de sûreté
La sûreté repose sur la maîtrise de la réactivité du cœur à tout instant ainsi que sur le fait d'assurer un confinement des matières radioactives. Pour assurer la maîtrise de la réactivité, le fonctionnement est contrôlé par des barres de commande qui s'insèrent dans le cœur. Ces barres sont composées de matériaux absorbants, dont le but est d'inhiber la réaction de fission. La fission nucléaire dans le réacteur est donc une réaction en chaîne contrôlée. En cas d'incident, la chute complète des barres permet d'interrompre la réaction et l'énergie résiduelle disponible dans le cœur est évacuée en maintenant la circulation du réfrigérant. Pour assurer le confinement des matières radioactives, trois barrières physiques successives sont présentes dans le réacteur. Ce sont la gaine des crayons de combustibles, la cuve du réacteur (circuit primaire fermé), et l'enceinte de confinement du réacteur. Ils permettent d'assurer le contrôle des matières radioactives pour une grande partie des défaillances humaines ou physiques envisagées. À cela est couplé un ensemble de mesures préventives, réduisant les risques et les conséquences des phénomènes non maîtrisés par chacune de ces barrières.

Cependant, malgré toutes ces mesures, une accumulation d'incidents peut toujours mener à une situation dans laquelle le combustible se dégrade, jusqu'à une situation d'**accident grave**.

1.3 Contexte scientifique

1.3.1 Situation d'accident grave

Un accident grave est défini comme étant un accident dans lequel tout ou une partie du cœur a fondu. Les causes peuvent être variées mais mènent toutes à un manque de refroidissement du cœur et donc un échauffement des assemblages combustibles. La séquence qui suit dépend du type de réacteur et du type d'accident initial.

Description d'une séquence dans le cas des Réacteurs à Eau Pressurisée :
Par exemple, dans un REP, un simple manque de refroidissement sans dommages matériels du cœur va générer un échauffement initial à cause de la puissance résiduelle. Ce phénomène est relativement lent, de quelques heures à quelques jours, mais continu. En particulier, le temps nécessaire à l'obtention d'une situation d'accident grave est ici suffisamment long pour que la cuve ne contienne plus ou peu de réfrigérant, qui est alors stagnant en fond de cuve. Puis, passée une certaine limite, l'augmentation de la température va déclencher un emballement de l'oxydation des gaines. Cette réaction chimique est exothermique et prend le dessus sur la puissance résiduelle pour chauffer le système en très peu de temps à des températures supérieures à 2500°C. Finalement, si cet échauffement n'est pas endigué, la température peut dépasser la température de fusion de différents composants du cœur, c'est l'instant à partir duquel on peut parler d'accident grave. Les phénomènes de dissolution qui ont alors lieu forment un mélange appelé corium. Semblable à une lave et très liquide, la température du corium peut à terme dépasser les 3000°C. En s'écoulant, le corium peut faire fondre les éléments qu'il rencontre, sa composition est donc en constante évolution. Ainsi, le terme corium décrit une vaste gamme de mélanges. Pour le reste de ce travail, nous utiliserons le terme 'corium' pour définir un mélange au moins composé d'éléments fondus du cœur, dont la température avoisine les 3000°C. Les caractéristiques spécifiques des différents coriums (oxyde, métallique) font l'objet d'études consacrées mais ne seront pas des éléments d'intérêt dans ce travail de thèse.

Description d'une séquence dans le cas des Réacteurs à Neutrons Rapides refroidis au Sodium :
La vitesse à laquelle un RNR-Na peut entrer en situation d'accident grave à partir d'un incident similaire est très supérieure à celle d'un REP. L'ordre de grandeur correspondant est de quelques minutes seulement. Dans ce cas, les scénarios envisagés considèrent généralement que la cuve est encore pleine de sodium et la formation de corium, plus locale, peut avoir lieu à différents endroits du cœur. Les échelles de temps étant trop courtes pour que les phénomènes chimiques aient le même

rôle que dans un REP, la composition du corium est alors totalement différente.

La situation d'accident grave a été heureusement très peu observée depuis l'exploitation de l'énergie nucléaire. Cependant, les quelques exemples disponibles sont tristement célèbres. On citera les accidents de Three Mile Island (1979), dont le cœur dégradé est schématisé sur la figure 4, Tchernobyl (1986) et Fukushima Daiichi (2011). Les raisons de ces accidents sont différentes mais

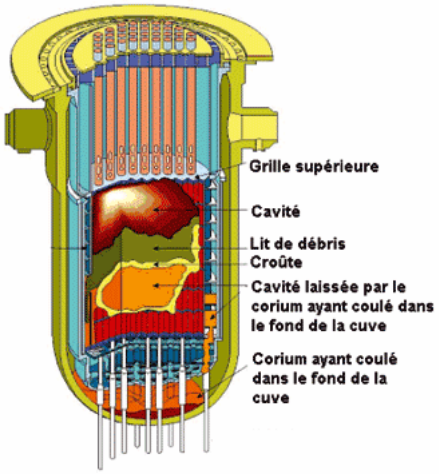


FIGURE 4 – Coupe schématisée de la cuve montrant le combustible significativement dégradé par la fusion partielle du cœur lors de l'accident survenu aux USA le 28 mars 1979 à Three Mile Island (https ://irsn.fr).

les conséquences dramatiques ont valu à la prévention et la gestion de ces phénomènes une forte attention. En particulier, la prise en compte des risques a évolué et les études ne se font plus seulement sur le design des réacteurs actuels. En effet, pour les réacteurs de la GENeration IV, la directive '2014/87/EURATOM' stipule l'objectif de "prévenir un accident et, s'il a lieu toutefois, contrôler ses conséquences", c'est-à-dire de s'assurer de pouvoir confiner l'ensemble des matières radioactives dans l'enceinte du réacteur. Les risques principaux de défaillance de l'enceinte, présentés sur la figure 5 pour un REP, sont donc pris en compte dès la phase de conception pour définir un design adapté à leur gestion. Parmi ces éléments, on trouve les interactions du corium avec les structures et le réfrigérant. Pour les interactions avec le réfrigérant, on parlera d'*Interactions Combustible Réfrigérant* (ICR ou *Fuel Coolant Interaction*, FCI), terme générique qui décrit n'importe quelle interaction entre du corium et un réfrigérant. La quantité de corium concernée peut atteindre des *centaines de kg* pour des bains de réfrigérants qui peuvent être de très grande capacité. *L'écart de température entre les deux liquides peut dépasser les* 2000°C, dans ces conditions peut apparaître un phénomène particulier que l'on appelle *explosion de vapeur*. Cette explosion est susceptible d'endommager les structures environnantes.

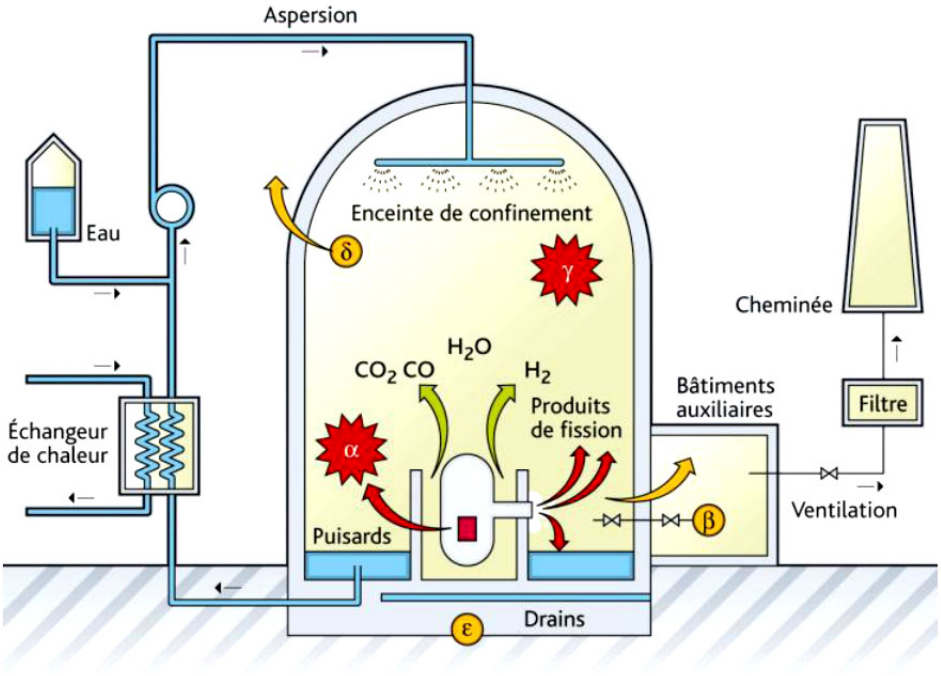


FIGURE 5 – Principaux modes de défaillance sur un réacteur à eau sous pression. α interaction combustible réfrigérant explosive, β défaut d'étanchéité de l'enceinte, γ explosion d'hydrogène, δ mise en surpression lente dans l'enceinte, ϵ traversée du radier en béton par le corium (https ://irsn.fr).

1.3.2 L'explosion de vapeur

Une explosion de vapeur est définie comme étant le résultat de l'interaction violente entre un liquide chaud et un liquide froid, plus volatil [2]. Ces explosions n'ont aucune origine chimique et sont uniquement le résultat de transferts de chaleur intenses, qui mènent à la vaporisation du liquide froid et à la pressurisation du système. Cette surpression est entretenue car les temps caractéristiques des transferts de chaleur sont plus faibles que le temps requis à la pression pour se dissiper dans le système. Finalement, l'énergie mécanique accumulée se relâche rapidement pour former une onde de choc. Ce phénomène s'accompagne d'une fragmentation très importante du liquide chaud. L'intensité des ondes de pression observées dans certaines explosions dépassent les centaines de bars.

Ce type d'explosion peut être observé dans la nature, la figure 6 montre une séquence d'explosion de vapeur suite à une coulée de lave dans l'eau de mer. Certaines industries sont également concernées : fonderies, papeteries et transport de gaz naturel liquide, à cause des larges gammes de températures que peuvent avoir les différents liquides manipulés. Pour réduire ce risque au maximum, l'approche naturelle a été de séparer au mieux ces liquides. Dans le contexte qui nous intéresse, les conséquences d'une telle explosion peuvent être telles que faire diminuer le risque d'occurrence ne suffit pas. C'est pourquoi ce phénomène a été plus largement étudié dans l'industrie nucléaire. En particulier, des expériences intégrales consistant à reproduire des explosions de vapeur de manière la plus complète possible ont été menées depuis les années 70. Elles permettent d'apporter des informations sur la phénoménologie à un niveau macroscopique et d'obtenir des indications sur des données telles que l'intensité de l'explosion ou la forme et la taille des débris.

Ces expériences ont permis de proposer une représentation du processus d'interaction corium-eau en trois étapes sur lesquelles il y a aujourd'hui consensus :

— le prémélange : lorsque le corium se déverse dans le réfrigérant, le jet se fragmente grossièrement pour former un mélange de réfrigérant et de gouttes de corium, c'est la fragmentation primaire. La température du corium est telle (~ 3000°C) que le réfrigérant se vaporise à proxi-

FIGURE 6 – Photos d'une explosion de vapeur observée lors d'une coulée de lave dans l'océan

mité. Pendant cette étape, le corium est suffisamment chaud pour qu'un film de vapeur se crée autour, isolant le réfrigérant de la surface du combustible,

— le déclenchement de l'explosion : une déstabilisation du film de vapeur entraîne des contacts liquide-liquide, lieu d'une vaporisation intense du réfrigérant. Cela engendre une fragmentation fine dite secondaire du combustible et génère une onde de pression,

— l'escalade et la propagation de l'explosion : l'onde de pression déstabilise le film de vapeur entourant le combustible à d'autres endroits, ce qui déclenche de nouvelles vaporisations intenses. Les ondes de pression s'accumulent jusqu'à obtenir une explosion.

Cette décomposition est naturellement retrouvée dans les études menées sur la FCI. Parmi elles, la partie prémélange est la plus largement traitée car il est convenu que l'explosion est principalement déterminée par la fragmentation du jet. Néanmoins, les besoins de compréhension des mécanismes de déclenchement de l'explosion et du comportement des différents constituants à petite échelle sont nombreux. C'est dans le cadre d'études à cette échelle, qu'on appellera échelle locale ou microscopique, que se situe ce travail de thèse.

1.3.3 Historique des travaux, le besoin de comprendre les phénomènes locaux

A l'origine, les études sur l'explosion de vapeur étaient menées de front sur les aspects locaux et intégraux. Cela permettait d'observer les conséquences d'explosions à grande échelle et d'essayer d'en expliquer les raisons grâce aux observations locales. Cependant, les études d'explosion à petite échelle ont diminué au cours du temps. Cela s'explique par le fait que les études locales sont principalement associées aux mécanismes de déclenchement et à la phase de propagation de l'explosion. Or, dans le cadre d'études de sûreté, il est nécessaire d'étudier les scénarios les plus dangereux dès lors que les probabilités d'occurence sont non négligeables, ce qui est le cas pour une explosion de vapeur à l'échelle intégrale. Ainsi, les travaux sur les conséquences de ces explosions se sont imposés sur les travaux qui visent à en expliquer les raisons : les mécanismes de déclenchement. Concernant la phase de propagation, la description la plus largement admise a longtemps été que les effets hydrodynamiques sont prépondérants et donc suffisants pour étudier la fragmentation du combustible fondu [2, 3, 4].

Ces considérations ont été généralement adoptées lors du développement de codes de calculs dédiés à la simulation de l'explosion de vapeur à l'échelle intégrale. Les conséquences sont les suivantes :

— d'une part, la méconnaissance des mécanismes de déclenchement laisse de grandes incertitudes sur l'instant d'initialisation de la séquence d'explosion. Or, l'état du système au moment du déclenchement conditionne l'amplitude de cette dernière. L'interaction en jet étant un phénomène dynamique qui ne dure pas plus de quelques secondes, l'état du système évolue en permanence et les incertitudes sur l'élément déclencheur de l'explosion peuvent donc mener à des différences de comportement importantes,

— d'autre part, les modèles de propagation de l'explosion dépendent des modes de fragmentation fine [5]. Or, des études récentes [6, 7] ont permis de constater que la fragmentation du combustible était fortement influencée par des phénomènes thermiques. Les effets hydrodynamiques et thermiques sont en réalité indissociables et il est nécessaire de déterminer de nouveaux modèles qui couplent ces phénomènes.

Il faut ajouter à cela le fait que dans la modélisation des phénomènes mis en jeu dans l'explosion de vapeur, l'une des difficultés majeures est l'établissement des lois d'échange entre les différents composants du système. Principalement empiriques, les modèles utilisés sont peu transposables à de nouvelles situations et donc peu recommandés pour des études de sûreté de nouveaux réacteurs. La compréhension des phénomènes locaux pourrait permettre de développer des modèles plus prédictifs.

Finalement, **la méconnaissance des phénomènes locaux apparaît aujourd'hui comme un verrou pour le développement de codes de calculs prédictifs et fiables.** Cette constatation a motivé un regain d'intérêt pour les études de l'explosion de vapeur à l'échelle locale. En particulier, pour le développement de son code de calcul à l'échelle intégrale SCONE, le CEA a pris la décision de se munir d'une application spécifique dédiée à l'étude de l'explosion de vapeur à l'échelle locale, micro-SCONE. Le code SCONE est destiné à évaluer les conséquences de la masse de combustible qui se trouve fragmentée et éparpillée : la granulométrie des débris générés et l'énergie mécanique dégagée par l'explosion et reçue par les structures doivent être estimés dans le but de réaliser des études de sûreté. Le code micro-SCONE aura pour objectif d'enrichir la connaissance des phénomènes locaux pour améliorer les modèles de fragmentation employés dans SCONE pour des simulations à l'échelle intégrale.

1.4 Conclusion

Dans le but de s'assurer de la sécurité des personnes et des installations, les différentes institutions impliquées dans l'industrie nucléaire prêtent une attention particulière à la situation d'accident grave. En particulier, pour la prochaine génération de réacteurs francais, la gestion de ces accidents est prise en compte dès la conception. Ainsi, la maîtrise des différentes conséquences d'un accident grave est devenue l'une des priorités. L'une de ces conséquences, l'explosion de vapeur qui fait suite à une interaction combustible-réfrigérant, peut présenter un caractère particulièrement destructeur. Ainsi, pour s'assurer de pouvoir contribuer efficacement au design et au dimensionnement des réacteurs de nouvelle génération, le CEA développe conjointement des expériences et le code de calcul SCONE dédié à l'étude des explosions de vapeur. Cependant, la méconnaissance actuelle des mécanismes de déclenchement de ces explosions est une source d'incertitudes pour réaliser des études de sûreté exigeantes. De plus, de nombreux modèles existants dans la littérature sont empiriques et donc peu prédictifs pour étudier des interactions avec des réfrigérants différents que l'on pourrait considérer dans les futures générations de réacteurs. Finalement, la décision a été prise de lancer un projet de développement d'un outil dédié à l'étude et la compréhension des phénomènes locaux de l'explosion de vapeur, appelé micro-SCONE. *La construction de cet outil est l'objectif principal de cette thèse.* Pour cela, nous allons aborder dans ce travail,

— l'identification des besoins spécifiques pour comprendre l'interaction combustible-réfrigérant à l'échelle locale au travers d'une analyse bibliographique de quelques expériences disponibles. Cela nous permettra de bien définir le problème physique qui nous intéresse et de proposer une approche constructive pour le développement de micro-SCONE. Nous aborderons en particulier les premiers éléments d'un plan de développement à plus long terme,

— la présentation d'un type de modèle mathématique qui devrait permettre de répondre aux besoins spécifiques identifiés. Nous essaierons de passer en revue leurs avantages et inconvénients et de cibler des éléments qui pourraient nécessiter un approfondissement dans la démarche de modélisation,

— la présentation du développement de l'outil micro-SCONE. Nous aborderons en particulier les aspects logiciels et le schéma numérique utilisé,

— la présentation des cas tests de vérification et de validation de l'outil et des modèles que nous aurons eu à tester. Nous verrons en particulier certaines limites pratiques de ces modèles et nous proposerons, si possible, des solutions pour y remédier.

Enfin, nous ferons un bilan sur l'état d'avancée du développement de micro-SCONE ainsi que les perspectives d'améliorations que nous aurons identifiées au cours de ce travail.

Deuxième partie

Analyse du besoin pour le développement d'un code de calcul dédié à la simulation de l'explosion de vapeur à l'échelle locale

L'objectif de cette partie est d'identifier les besoins spécifiques pour comprendre l'explosion de vapeur à l'échelle locale. Pour cela, les phénomènes impliqués dans l'interaction combustible-réfrigérant à cette échelle vont être présentés en passant en revue divers travaux de la littérature. Puis, après avoir décrit les limites des programmes expérimentaux actuels, nous définirons un problème physique précis qui permettra de cibler les besoins liés à la compréhension du comportement local. Enfin, en prenant en compte les informations que nous avons identifiées pour valider l'outil de calcul micro-SCONE, nous proposerons un ordre de priorité dans la prise en compte des phénomènes impliqués.

2.1 Description phénoménologique, les expériences à l'échelle locale

De nombreuses études à l'échelle locale ont été menées, on pourra retrouver des compilations importantes dans [2, 3, 8, 9]. Ces études ont été de plusieurs natures, certaines consistant à introduire des gouttes de liquide chaud dans des bains de réfrigérants, configuration usuelle, d'autres à des configurations dédiées, adaptées à l'étude d'un phénomène spécifique de l'interaction. C'est le cas d'études de l'ébullition en film [10, 11], d'interaction réfrigérant-combustible [12, 13, 14] et de fragmentation hydrodynamique [7].

Dans un premier temps, une partie des expériences menées avec de l'eau comme réfrigérant sera présentée. C'est le réfrigérant qui a été le plus largement utilisé dans l'industrie et qui nous permet d'avoir les informations les plus précises actuellement. Dans un second temps, nous présenterons les expériences menées avec du sodium comme réfrigérant, qui est le réfrigérant d'intérêt pour le projet ASTRID. Dans cette section, seules les observations et interprétations des auteurs seront exposées.

2.1.1 Les expériences en eau

Après avoir résumé les conclusions des compilations de travaux les plus significatives pour notre étude, nous présenterons les travaux que nous avons jugés les plus descriptifs sur le sujet.

Corradini et al., 1988

Dans leurs travaux, Corradini et al. [8] ont passé en revue plus de 120 expériences de petite échelle mettant en jeu différents couples de matériaux. C'est la plus grande compilation d'études à l'échelle locale à notre connaissance. Les conclusions principales de cette compilation, sur les expériences de chute de goutte de combustible dans un bain de réfrigérant, sont les suivantes :

- toutes les expériences montrent un temps de latence entre l'entrée de la goutte dans le bain et l'explosion,
- la solidification du liquide chaud à tendance à inhiber l'explosion, sauf pour le cuivre,
- les interactions énergétiques montrent un comportement cyclique. La probabilité d'un tel évènement augmente avec la masse de combustible,
- l'existence de gaz incondensables peut prévenir les interactions spontanées.

Dullforce et al., 1976

En ne réalisant que des essais sans élément déclencheur, Dullforce et al. [15] se sont intéressés à évaluer dans quelles conditions il pouvait y avoir déclenchement spontané. Ils définissent alors la

TIZ (Thermal Interaction Zone) illustré sur la figure 7. C'est un graphe qui représente, en fonction de la température initiale des deux liquides, si il y a eu ou non déclenchement de l'explosion. Cela

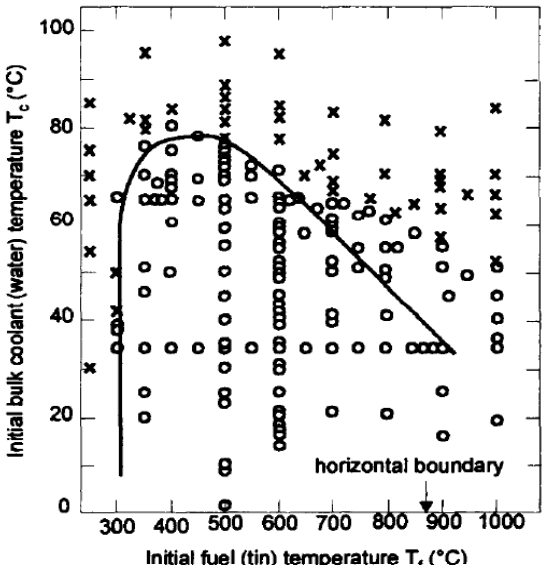


FIGURE 7 – Thermal Interaction Zone d'une goutte de 12 g d'étain dans de l'eau. Les ronds représentent les interactions explosives, les croix l'absence de dynamique particulière.

permet d'identifier quelles sont les conditions minimales en termes de températures pour déclencher une explosion de vapeur. Les bordures du domaine d'explosivité sont associées au gel des deux composants pour les limites horizontales et verticales, et à la stabilité de l'ébullition en film pour la limite diagonale. Il a en particulier été observé que le temps de latence entre l'entrée en contact des constituants et l'explosion augmentait lorsque l'on se rapprochait de la limite diagonale.

Nelson et al., 1981

Les travaux de Nelson et al. [16] sont les premières expériences munies d'une instrumentation adaptée à des températures dépassant les 2000 K. La configuration expérimentale dans ces essais permet de faire chuter des gouttes d'oxyde de fer d'une hauteur de 8 à 50mm dans un bassin d'eau de 152 ou 457mm de profondeur. Les gouttes pèsent initialement $\sim 55mg$ et leur température est de ~ 2233 K. Tout d'abord sans élément déclencheur, la goutte chute sans être déviée, sans déformation significative de sa surface. Si la goutte est lâchée à moins de 15 mm du bain, la goutte s'entoure d'un film de vapeur sphérique lors de sa pénétration dans l'eau. Pour des distances supérieures, la goutte se retrouve dans un sac de vapeur attribué à l'entrainement de l'air environnant lors de l'immersion. L'épaisseur de film sur le front de la goutte semble être constant quelle que soit la taille de ce sac. La taille du film de vapeur, dans les cas avec le moins possible de gaz capturé, est comprise entre 140μm et 275μm. Dans le cas d'une chute de faible hauteur $< 11mm$, la goutte coule quelques centimètres dans l'eau puis sa surface commence à se déformer, très peu de temps après, la goutte explose spontanément sans avoir eu recours à une onde destabilisatrice. Malheureusement, il n'y a pas de visualisation de ce phénomène dans ces essais. Lorsque la goutte chute d'une hauteur plus importante $>> 15mm$, elle coule jusqu'au fond du réservoir et se solidifie en gardant sa forme sphérique. Dans les cas avec déclenchement de l'explosion, que l'on appellera 'trigger', pour une chute d'une hauteur de 15 à 20 mm, un phénomène de croissance-collapse de bulle de vapeur a été observé. La figure 8 illustre ce comportement. Lors de la première phase de croissance de bulle, il y a également formation de filaments dans les directions radiales à la goutte. Une concentration plus importante de filaments est remarquée à l'équateur (mouvement orthogonal à l'onde destabilisatrice) tandis que la bulle s'étend verticalement. La bulle commence ensuite à s'effrondrer sur elle même, probablement à cause de la dépression et de la condensation de la vapeur, jusqu'à disparition totale, ce qui génère une autre onde de pression. Cette onde déclenche plusieurs petites explosions des filaments qui se sont

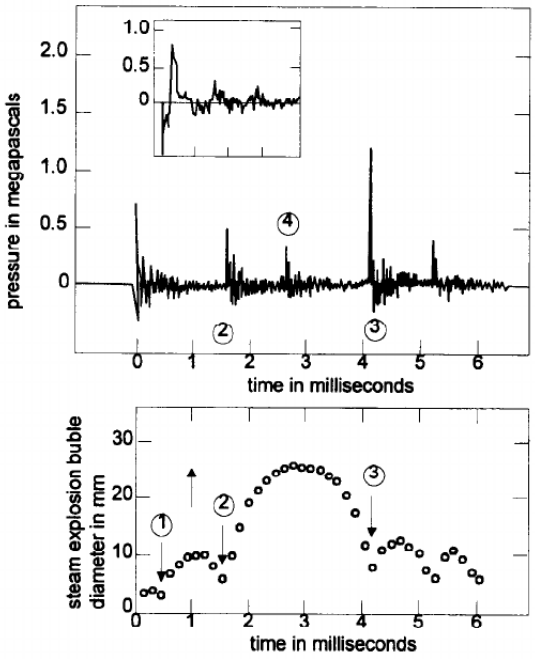


FIGURE 8 – Pression proche de la bulle de vapeur et son rayon dans le cas d'une expérience avec trigger. Les différents instants spécifiés liés aux ondes de pression générées sont : (1) collapse du film de vapeur au passage de l'onde destabilisatrice, (2) collapse de la première bulle, (3) collapse de la seconde bulle, (4) conséquence du trigger.

retrouvés noyés dans le réfrigérant lors de la disparition de la bulle. La vapeur générée par ces petites explosions se combine avec celle générée par l'explosion principale pour créer une bulle plus grosse que la première. Cette seconde bulle s'effondre également, laissant un nuage de fragments fins en suspension dans l'eau environnante. Les principales étapes sont illustrées sur la figure 9. L'amplitude de l'onde de pression générée par l'effondrement de la bulle principale, qui peut atteindre plusieurs centaines de Bar près de la bulle, n'a pas été corrélée avec l'amplitude de l'onde destabilisante. Cependant l'amplitude du trigger joue sur le comportement du système. Si l'onde initiale est inférieure à 0.2 MPa, on observe seulement quelques oscillations qui s'atténuent rapidement. La fragmentation de la goutte donne de grosses particules cohérentes entre $0.1 et 1 mm$ de diamètre qui gèlent rapidement. Au dessus de 0.4 MPa, les explosions sont générées instantanément. Entre les deux, il y a des déformations importantes du système, parfois jusqu'à éjection de petites bulles de gaz du film de vapeur. Lors d'une explosion, qui ne dure que quelques ms, la goutte d'un diamètre initial de $2.9 mm$ se fragmente en plusieurs millions de particules dont la taille est comprise entre quelques μm et $100 \mu m$ de diamètre. Les particules présentent des formes variées, certaines relativement larges sont sphériques alors que les plus petites sont généralement difformes. Les fragments ne présentent pas de formes tranchantes ou de bords cassés comme s'ils avaient été issus de fragmentation thermique à l'état solide. Ils restent arrondis, indicateurs d'une fragmentation à l'état liquide. Cela suppose que les fragments sont formés par de violentes déformations et qu'ils gèlent rapidement au cours de ce processus. Seuls les plus gros auraient le temps de reprendre une forme sphérique.

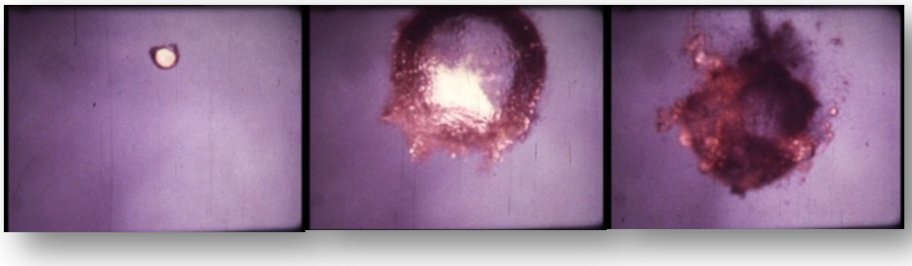


FIGURE 9 – Visualisation de trois étapes de l'explosion d'une goutte. A gauche, la situation d'ébullition en film stable. Au centre, la bulle dans la phase de croissance-collapse. A droite, le nuage de fragments formé.

Hansson et al., 2009

Dans leurs travaux, Hansson et al. ont étudié l'interaction de gouttes d'étain [6] dans un réservoir d'eau. Le dispositif expérimental (MISTEE) permet d'avoir des observations directes et des visualisations par rayons X. La superposition de ces images permet d'observer la position des différents constituants tout au long de l'interaction et donc de mieux localiser les différentes phases. Des thermocouples donnent la température de la goutte avant d'être lâchée ainsi que la température du réfrigérant. La destabilisation du film de vapeur est forcée à l'aide d'un piston qui permet de générer une onde de 0.15 MPa. Les essais avec les deux matériaux présentent des observations très similaires, nous ne présenterons donc que ceux obtenus avec l'étain. Dans ces essais, des gouttes de 0.5 à 0.7 g d'étain à 1000°C sont introduites dans de l'eau avec différents sous-refroidissements. La figure 10 présente l'interaction complète d'une goutte de 0.56 g à 1000°C dans de l'eau à 73°C dont on déstabilise le film de vapeur à -3 ms. Ces essais ont permis d'observer de manière detaillée la dynamique de la bulle et du combustible. Concernant la bulle, de un à trois cycles de croissance-collapse de bulle ont été identifiés. En synchronisant le temps auquel la première bulle collapse, les autres cycles ont la même durée, indépendament de la température du réfrigérant. C'est ce que l'on peut voir sur l'image 11. Le premier cycle est celui qui suit l'impact de l'onde de pression sur le film de vapeur, sa phase de croissance est la plus lente des trois, signe d'une interaction peu énergétique. La vitesse de la phase de collapse est affectée par le sous redroidissement de l'eau, un sous refroidissement faible mène à une vitesse d'interface plus importante lors du collapse et une plus grande quantité de mouvement à l'approche du contact avec le combustible fondu. Le second cycle se déclenche lorsque le collapse du premier cycle permet l'apparition de contacts avec la surface du combustible fondu. Il est caractérisé par la formation d'un mélange combustible-réfrigérant et par des interactions intenses. Dans cette partie, le réfrigérant est piégé dans le combustible, formant une configuration opposée à la précédente : des gouttes de réfrigérant entourées du milieu chaud. Le temps de contact ne peut pas être précisément déterminé mais il a été évalué de l'ordre de 200 μs ce qui est estimé suffisant pour que le réfrigérant chauffe bien au dessus de sa température d'ébullition, entrainant sa vaporisation rapide. La pression augmente et une autre bulle se forme, bien plus rapidement que la première, traduction d'une interaction énergétique. Les cycles qui peuvent apparaitre par la suite sont une répétition de ce phénomène, avec une énergie disponible dans la goutte qui diminue et donc des interactions moins importantes. Pour décrire le comportement de la bulle, les auteurs proposent une description du phénomène basé sur un comportement purement inertiel. Cependant, en notant la différence entre les observations expérimentales et la description proposée, il est conclu que la dynamique de la bulle seule ne permet pas de déterminer la physique clé dans l'explosion de goutte. En particulier, cela ne permet pas d'expliquer l'effet du sous-refroidissement sur l'interaction.

Concernant la dynamique du combustible fondu, la goutte initialement cohérente subit plusieurs fragmentations. La première est associée au passage de l'onde de pression et aux premiers contacts liquide-liquide. La vaporisation du réfrigérant lors de ces contacts crée des surpressions qui préfragmentent le combustible en même temps que le premier cycle de bulle. Cette fragmentation est répartie de manière uniforme sur toute la goutte. Si le collapse de cette bulle se fait avec une

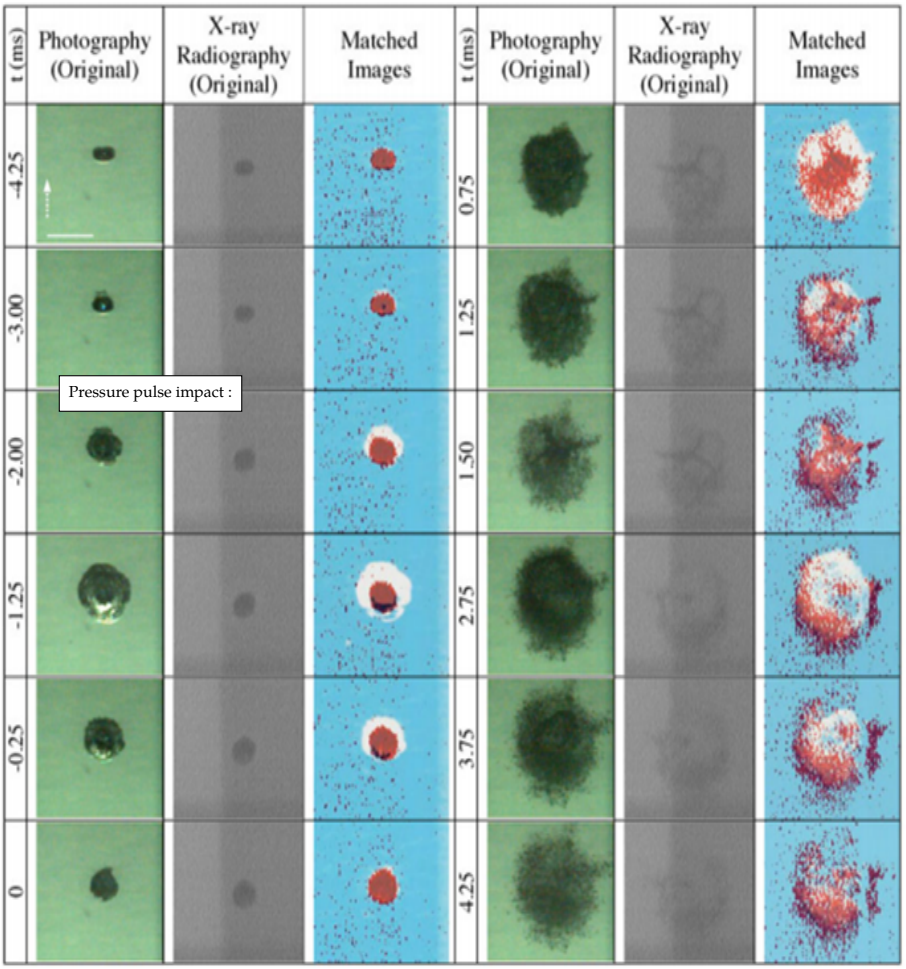


FIGURE 10 – Visualisation directe, sous rayons X et post traitée de l'explosion d'une goutte d'étain dans de l'eau soumise à une onde de pression à $t = -3\ ms$

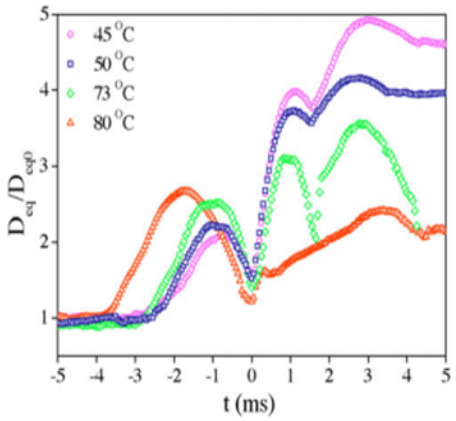


FIGURE 11 – Historique du phénomène de croissance collapse de bulle lors d'une explosion de vapeur à l'échelle locale dans différentes conditions initiales de températures du réfrigérant.

vitesse suffisante alors le réfrigérant se retrouve pendant un court instant dans une situation de mélange intime avec les premiers fragments de combustible. A ce moment, la vaporisation intense du réfrigérant piégé entraine la dispersion du combustible fondu. Les fragments fins sont éjectés radialement de la surface de la goutte alors que la partie interne de la goutte semble être comprimé par la surpression. Puis, pendant le collapse de la seconde bulle, une partie des fragments fins se relocalise au centre de la position initiale de la goutte. De la même manière que précédemment, l'accélération du réfrigérant vers l'intérieur du combustible fondu restant entraine les fragments existants et reforme un mélange. Cela génère la seconde vaporisation explosive et une fragmentation fine du reste du combustible.

Ces travaux ont mis en évidence l'influence de la phase de fragmentation lors de la formation de la première goutte, appelé 'préconditionnement', sur la suite de l'explosion qui présente les aspects énergétiques importants.

D'autres expériences ont été menées en eau, cependant, les observations sont moins detaillées ou redondantes, par exemple [17, 18].

2.1.2 Les expériences en sodium

Une série d'études motivées par le développement de réacteurs refroidis au Sodium (Phénix et Superphénix en France) ont eu lieu dans les années 1970. Depuis, l'utilisation du sodium a été écartée au profit d'autres réfrigérants puis des études ont commencé à ré-émerger dans les années 2010 avec le projet ASTRID. Ces études ont porté dans un premier temps sur les aspects intégraux, puis plus récemment sur les aspects locaux. Cependant, la mise en place de ces nouvelles études ne profitent pas d'un grand retour d'expérience, en particulier sur les méthodes d'acquisition. Ainsi, les travaux récents portent principalement sur la mise en place de nouvelles expériences et ne permettent pas d'alimenter une base de données expérimentale utilisable dans l'immédiat.

Amblard et al., 1970

En 1970, Amblard et al. [19] ont étudié la fragmentation de petites quantités de dioxyde d'uranium UO_2 dans du sodium. Ils attribuent la forme longiligne des fragments obtenus à une solidification superficielle lors de l'entrée de la goutte dans le sodium. En se solidifiant, la goutte se déformerait en forme de creuset et le sodium entrerait par le haut pour se retrouver piégé. Finalement, le sodium à l'intérieur se vaporiserait et ferait se fragmenter la surface solide.

Armstrong et al., 1971

En 1971, Armstrong et al. [20] ont étudié l'interaction entre du sodium et de l'UO_2 ou de l'acier inoxydable fondu sous forme de gouttes ou de petits jets. Ils ont noté certaines différences entre l'UO_2 et l'acier inoxydable, par exemple le temps de pressurisation. Pour toutes les expériences en UO_2, la goutte a eu le temps d'être totalement immergée dans le sodium avant d'exploser alors que l'acier a toujours explosé plus rapidement, entre autre toujours avant d'être complètement submergé. L'énergie dégagée avec l'UO_2 a une légère tendance à augmenter avec la température du sodium. L'énergie dégagée avec l'acier montre une tendance plus importante à diminuer avec l'augmentation de la température du sodium. Les auteurs ont fait la différence entre les fragments éjectés pendant l'explosion et ceux récupérés au fond de la cuve et ont observé que ces derniers avaient des formes angulaires et une surface rugueuse, indicateurs d'une fragmentation à l'état solide alors que les fragments éjectés avaient une forme arrondie avec une surface lisse, indicateurs d'une framentation à l'état liquide.

Mizuta et al., 1974

En 1974, Mizuta et al. [21] ont réalisé une trentaine d'essais de chute d'UO_2 fondu dans du sodium. Pendant ces essais, ils ont pu mesurer un délais compris entre 2 et 7 ms avant la vaporisation du sodium. En particulier, ils ont observé que dans le cas des explosions, les gouttes d'UO_2 entraient totalement dans le bain jusqu'à ce que l'explosion les éjecte. Ils ont observé une augmentation rapide de la température du bain de sodium qui refroidit lentement par la suite. Les pics de pression ob-

servés ne semblent pas être liés à l'introduction de chaque goutte dans le bain, en effet il n'y a pas explosion pour chaque goutte, ils relient plutôt les pics à la température de surface des gouttes. Ils constatent également que les pics de pression les plus violents étaient liés à une taille de fragments plus faible. Les fragments récupérés ont un diamètre compris entre 50 μm et 5 mm de diamètre. Les gros fragments apparaissent sous forme sphérique ou de larmes. Les plus petits fragments (50 microns) ont des formes plus diverses : sphériques, ellipsoidales ou applaties mais bien souvent avec une surface lisse. La présence de trous dans les fragments a été observée de manière récurrente, sans justification apportée de la part des auteurs.

D'autres travaux sont disponibles, on pourra citer, Zhang et al. 2011 [22] qui ont étudié la fragmentation de gouttes d'acier inoxydable dans du sodium et en 2012 [23] de gouttes de cuivre dans du sodium sans visualisation. En 2010, Nishimura et al. [24] qui ont étudié une configuration de jet de cuivre dans du sodium. Mis à part des résultats spécifiques aux configurations étudiées, les observations sont redondantes avec les expériences précédentes.

2.1.3 Remarques concernant les expériences d'explosion de vapeur à l'échelle locale

Première remarque, les expériences sont particulièrement difficiles à mettre en œuvre et à traiter. On rappelle qu'en condition réacteur le combustible est radioactif et sa température peut excéder 3000°C. Dans le cadre sodium, il faut disposer d'une cuve de dimensions suffisantes et dans laquelle on maintient le liquide à une température supérieure à 400°C. Le sodium est extrêmement réactif avec l'air et l'eau, ce qui complique sa manipulation. Ainsi, l'utilisation de simulants du corium est naturelle et nécessaire pour comprendre certains mécanismes ou en découvrir de nouveaux. Néanmoins, il faut prendre garde à ne pas transposer les résultats à la situation réelle sans précaution. En effet, le choix des simulants est fait en fonction de deux critères : la représentativité et la faisabilité. Concernant le premier critère, il est choisi pour un des axes d'étude de l'interaction, i.e. lorsque l'on veut observer les effets hydrodynamiques par exemple, les propriétés thermiques sont alors bien souvent négligées. Cela signifie qu'une partie du problème est toujours négligée et le couplage des phénomènes disparait en partie. Le second critère impose des changements d'échelle dont la représentativité n'est pas totalement connue. De plus, la problématique des moyens d'observation est toujours présente. En pratique, les données récupérées sont très généralement des données macroscopiques ou post mortem. Il arrive que même les conditions initiales ou finales ne soient pas facilement accessibles (pour connaître la température de surface d'une goutte entrant dans le réfrigérant par exemple), ce qui résulte en une complexité d'exploitation suplémentaire. Concernant la phase transitoire, l'instrumentation des expériences est généralement composée de visualisations directes en eau ainsi que de capteurs de pression et de température dans le réfrigérant. Cependant, ces capteurs sont placés à une certaine distance de l'interaction pour ne pas la perturber. De plus, le phénomène étant fortement tridimensionnel et triphasique, les visualisations directes, même avec rayons X, ne fournissent pas d'observations suffisamment fines qui permettraient de décrire le phénomène avec précision.

Dans la suite, on parlera de combustible pour décrire le liquide chaud, que ce soit un simulant du corium ou non.

Seconde remarque, la très grande majorité des essais a été réalisée de manière indépendante les uns des autres. Ainsi, bien que l'on dispose de certaines études systématiques d'un paramètre pour des essais réalisés au sein d'une même équipe, il n'existe pas à notre connaissance de travaux provenant de différentes équipes dans lesquelles on peut isoler l'influence d'une variable du problème. Dans la grande variété d'expériences répertoriées, il est extrêmement difficile de recouper les résultats pour en tirer des interprétations. Pour pouvoir le faire, il est nécessaire d'être capable d'identifier des essais comparables, or, les paramètres variables sont très vite nombreux. Il faudrait pouvoir étudier l'influence d'un paramètre à la fois, toutes choses égales par ailleurs, or les dispositifs expérimentaux et les conditions expérimentales ne sont pas nécessairement identiques. De plus, des

combustibles différents ont très généralement des propriétés thermiques et hydrodynamiques différentes, ce qui crée une multiplicité des variables modifiées entre deux expériences. Pour illustrer l'une des conséquences du manque de coordination dans les essais, on peut évoquer le fait que dans leur review, Corradini et al. [8] auraient recensé, d'après [2], plus de 40 mécanismes de déclenchement de l'explosion de vapeur. Tous ces mécanismes sont cohérents vis-à-vis des expériences sur lesquels ils sont basés, mais non-transposables au cas général. En particulier, de tous les modèles proposés pour justifier le déclenchement de l'explosion ou bien les modes de fragmentations associés, aucun n'a été suffisamment validé pour le moment [3, 9].

Ces remarques permettent de souligner la nécessité de développer des expériences plus analytiques, permettant de réduire le nombre de paramètres et d'améliorer les méthodes d'acquisition [25, 26]. Les expériences futures seront à définir en suivant une démarche dans laquelle les variables d'intérêt auront été identifiées et isolées. Dans ce cadre, le CEA a fait le choix d'adopter une démarche de développement conjoint du code de calcul micro-SCONE et de nouvelles expériences locales [27]. Les expériences permettront d'avoir des observables et des moyens de validation. Le code de calcul permettra de s'affranchir de certaines limites expérimentales et de définir les besoins des futures campagnes d'essais.

Cependant, le développement du code de calcul ne doit pas reposer sur des résultats hypothétiques de nouvelles expériences non encore réalisées. Cette contrainte a motivé la proposition d'une démarche constructive, qui va au-delà du périmètre de cette thèse, au terme de laquelle nous devrions être en mesure d'améliorer la compréhension des phénomènes locaux impliqués dans l'interaction combustible-réfrigérant et les reproduire par le calcul.

2.2 Prise de position, définition d'un problème minimal

Dans l'état actuel des connaissances, les objectifs qui reposent sur la construction de micro-SCONE sont ambitieux. En pratique, on cherche à comprendre des mécanismes pour lesquels les observations directes n'existent pas, et qui sont très sensibles à une grande variété de paramètres [9]. De plus, l'influence de chacun de ces paramètres sur l'interaction n'est pas ou peu documentée.

Nous allons dans un premier temps définir un *problème minimal* c'est-à-dire identifier un problème précis qui comporte les aspects fondamentaux de l'explosion de vapeur dans un espace de paramètres restreint. Pour cela, on propose de classer l'ensemble des paramètres en fonction de leur dépendance à l'un des quatre éléments suivants,

— le combustible,
— le réfrigérant,
— le dispositif expérimental,
— les conditions expérimentales.

Réduire l'espace des paramètres du problème c'est identifier les observables communs indépendamment de l'un ou de plusieurs de ces éléments. Les observables notables retenus sont que le combustible se déplace dans le bain de réfrigérant entouré d'un film de vapeur de réfrigérant et qu'il est susceptible de se fragmenter à l'état liquide, phénomène qui s'accompagne d'un dégagement d'énergie mécanique. Cette observation a été faite pour plusieurs combustibles, dans différentes configurations expérimentales et nous sommes en mesure de penser que c'est également le cas pour différents réfrigérants en fonction des conditions expérimentales uniquement. Cela nous permet de faire l'hypothèse que les mécanismes fondamentaux qui expliquent l'explosion de vapeur sont indépendants du couple combustible-réfrigérant et de la configuration expérimentale. Ainsi, nous ferons abstraction des phénomènes spécifiques qui leur sont liés. Cela permet d'écarter les réactions chimiques, en particulier l'oxydation, la présence d'incondensables et les phénomènes qui interviennent à l'entrée de la goutte dans le bain de réfrigérant. Il est également nécessaire de distinguer les expériences qui consistent à forcer la déstabilisation du système de celles qui autorisent une déstabilisation spontanée. Ces différentes configurations expérimentales correspondent aux situations que peut rencontrer une goutte de combustible lors d'une explosion à grande échelle, avec les relations suivantes,

— la déstabilisation spontanée correspond à l'initiation naturelle de l'explosion,

— la déstabilisation forcée à l'aide d'une onde d'amplitude modérée correspond à la phase d'escalade,

— la déstabilisation forcée à l'aide d'une onde de forte amplitude correspond à la fin de la phase de propagation dans laquelle les effets hydrodynamiques prédominent en première approximation.

Les phénomènes qui interviennent dans la première situation sont un sous-ensemble de ceux qui interviennent lors de déstabilisations forcées. On dira que ce sont les mécanismes de déclenchement minimum. Le problème minimal sera donc défini comme étant le problème dans lequel le système composé d'une goutte de liquide chaud en situation d'ébullition en film qui chute dans un bain de réfrigérant se déstabilise spontanément jusqu'à fragmentation du combustible. Être capable de comprendre les phénomènes impliqués dans le problème minimal est un pré-requis pour aborder les spécificités des combustibles, des réfrigérants ou des dispositifs expérimentaux.

L'un des objectifs majeurs de micro-SCONE sera donc, à terme, de pouvoir simuler le problème minimal. C'est-à-dire que nous serons à ce moment en mesure d'étudier les mécanismes fondamentaux qui génèrent la fragmentation d'une goutte de combustible initialement en situation d'ébullition en film sans intervention extérieure.

Conscients que le problème complet met en jeu de nombreux phénomènes supplémentaires, nous essaierons autant que possible d'avoir une approche qui permettra l'extension de la modélisation et des développements informatiques à ces phénomènes.

2.3 Analyse pour le développement d'un outil de calcul à l'échelle locale

Le but de cette section est de construire la base du plan de développement d'un outil de calcul dédié à la compréhension des mécanismes de déclenchement de l'explosion de vapeur. Le choix a été fait de suivre une démarche logique dans laquelle la validation occupe une place centrale. C'est donc au travers des différents éléments qui nous permettront de valider micro-SCONE que nous allons aborder les phénomènes à prendre en compte et proposer un ordre de priorité. La phase de validation doit présenter deux aspects fondamentaux,

— validation des effets séparés et couplages intermédiaires,

— validation vis-à-vis d'observables expérimentaux.

Le premier paragraphe présentera les effets physiques à prendre en compte pour la simulation de l'explosion de vapeur ainsi que quelques domaines complémentaires qui permettraient de disposer de résultats expérimentaux intermédiaires utiles. Cela nous permettra de faire les premiers choix pour le développement de micro-SCONE.

Le second paragraphe présentera un observable que nous avons jugé particulièrement utile dans l'exploitation des données d'explosion de vapeur. Cela nous permettra de définir une priorité dans les effets physiques à intégrer à micro-SCONE.

La portée des orientations que nous allons proposer va au delà de ce travail de thèse dans lequel seuls les effets physiques identifiés comme étant prioritaires auront été pris en compte.

2.3.1 Effets séparés

L'explosion de vapeur, même à l'échelle locale, met en jeu de nombreux effets physiques. Ces effets agissent à différents niveaux de l'interaction, ceux que l'on retiendra pour traiter du problème minimal sont décrits ci-après.

La diffusion de la chaleur :
Lorsque la goutte chute dans le réfrigérant, les effets thermiques (dont la diffusion de la chaleur) sont responsables du maintien de la situation d'ébullition en film [28]. De plus, lorsque les deux

liquides entrent en contact, la vaporisation intense du réfrigérant indique des transferts de chaleur par conduction importants. Finalement, la répartition de l'énergie thermique dans le combustible est conditionnée par la diffusion de la chaleur.

Le rayonnement :
La contribution du rayonnement est certaine, en particulier du fait que l'on traite de fluides à très hautes températures (3000 K pour le combustible réel). Cependant, mis à part que les effets radiatifs contribuent à des dynamiques de vaporisation différentes [28, 29] son impact est difficilement cernable sur l'ensemble de l'interaction.

Le changement de phase liquide-vapeur :
La situation d'ébullition en film est naturellement conditionnée par l'existence de changement de phase liquide-vapeur. De plus, il n'est pas exclu que la déstabilisation spontanée du film fasse intervenir la condensation du réfrigérant. Par la suite, l'origine même du comportement explosif provient de la vaporisation du réfrigérant. Certains travaux proposent également de prendre en compte la possibilité de cavitation du combustible [30].

Les effets compressibles :
Lors de la vaporisation intense du réfrigérant à la suite des contacts liquide-liquide, les effets compressibles vont conditionner la dynamique du dégagement d'énergie. Les phénomènes de croissance et effondrement de la bulle en sont également dépendants. De plus, les ondes de pression sont un des observables du système qui nous intéressent.

Tension de surface / effets capillaires :
Lors de la chute de la goutte dans le réfrigérant, la cohésion de la goutte est assurée par les effets de tension de surface. Par la suite, ces effets vont avoir tendance à atténuer les instabilités qui peuvent se former sur les différentes interfaces ou encore à agir comme une force de rappel lors de l'effondrement d'une bulle. Enfin, la fragmentation du combustible et les caractéristiques des fragments obtenus dépendent directement des effets capillaires.

La viscosité :
Les effets visqueux affectent les déformations et la fragmentation du combustible. De plus, des travaux [31] indiquent que la viscosité du réfrigérant a une influence sur l'interaction.

La validation des effets présentés précédemment, indépendamment les uns des autres est assez bien documentée dans la littérature, il sera donc nécessaire de s'y intéresser lors du développement du code de calcul. Cependant, l'étude multi-physique complète reste aujourd'hui difficile à aborder, autant au niveau expérimental que de la modélisation. Ainsi, dans le but d'apporter des cas test de validation d'effets couplés et de s'approprier au mieux les différents phénomènes qui peuvent intervenir lors du déclenchement d'une explosion de vapeur, il est nécessaire de s'intéresser à des domaines annexes [3]. Les domaines dans lesquels il est possible de maîtriser les configurations expérimentales en particulier. L'intérêt provient du fait que les phénomènes qui interviennent peuvent être moins nombreux, mieux documentés ou bien présentent des comportements similaires à l'interaction combustible-réfrigérant. L'utilisation de surfaces solides pour émuler l'effet thermique du combustible en est l'exemple le plus simple. C'est cette approche qui a été retenue pour étudier l'ébullition en film en sodium [11, 28]. Ces travaux relèvent du domaine de la trempe et permettent d'éliminer le comportement hydrodynamique du combustible. Parmi les travaux sur le sujet, il est intéressant de noter que des phénomènes tels que le 'golf boiling' [32, 33] et l'ébullition en film à haute densité de chaleur [34] présentent des aspects très similaires à la zone d'ébullition en film instable repérée par [28] qui pourrait expliquer la déstabilisation du film de vapeur.

Les travaux consistant à étudier une configuration opposée au problème minimal, chute d'une goutte de réfrigérant dans un bain de combustible, présentent également des aspects intéressants. Dans des études récentes [13, 14], les observations directes permettent des visualisations de très bonne

qualité de certains phénomènes. Sous cette forme, cela reste une configuration tri-phasique complexe. Toutefois, le sous-ensemble qu'est l'étude de l'effet Leidenfrost (surface solide en lieu et place du combustible liquide) permet de réduire le problème et dispose d'une documentation plus complète, tant sur le plan des expériences que sur les travaux de simulation numérique [35].

Quel que soit le sous-ensemble choisi pour valider les effets couplés, deux éléments particuliers vont affecter le développement et sont à prendre en compte en priorité, les aspects multi-phasiques et compressibles. Concernant les autres aspects, nous ne pensons pas pouvoir négliger, a priori, un effet par rapport à un autre. En effet, pour suivre le comportement du combustible tout au long de l'interaction, il faut être capable de laisser des instabilités naturelles se développer durant la phase d'ébullition en film, mais aussi de suivre la fragmentation et les déformations du combustible sur des instants très courts. Les phénomènes qui interviennent ont des temps caractéristiques variés et ne sont pas nécessairement prépondérants sur l'ensemble de l'interaction. Le fait de négliger l'un d'entre eux pourra s'avérer limitant pour retrouver la dynamique complète de l'explosion de vapeur. Ainsi, conscient qu'il faudra ajouter un ensemble conséquent de phénomènes, on adoptera une démarche incrémentale. Pour cela, il nous apparaît important de pouvoir utiliser un modèle qui sera extensible en abordant les raisonnements de manière à faciliter la prise en compte d'effets supplémentaires.

Finalement, le code de calcul devra être *multi-phasique compressible*. Il sera possible de se restreindre au diphasique pour réaliser des validations intermédiaires dans un premier temps. Toutefois, l'extension triphasique devra être possible. Lors de l'ajout d'effets supplémentaires, il faudra s'assurer de vérifier et valider indépendamment puis de manière couplée les effets physiques intégrés.

Il faut dorénavant choisir dans quel ordre intégrer les effets présentés. Pour cela, on va se baser sur un observable expérimental de l'interaction combustible réfrigérant. Cet observable permettra de fixer un objectif de validation intermédiaire dans une situation d'intérêt, les effets qui interviennent seront donc les effets prioritaires à prendre en compte.

2.3.2 Validation vis-à-vis d'un observable expérimental, la zone d'interaction thermique

Pour assurer la fiabilité de l'outil développé, il est nécessaire de disposer d'un observable expérimental vis-à-vis duquel micro-SCONE sera validé. Les observables généralement utilisés sont les fragments refroidis obtenus à la fin de l'interaction. Ce sont des données post mortem qui ne nécessitent pas de moyen de mesure sophistiqué, elles sont donc disponibles en grande quantité dans la littérature. La phase de validation consiste alors à reproduire les caractéristiques (taille, aspect, distribution) de ces fragments, ce qui donne des indications sur les phénomènes qui entrent en jeu. Plus récemment, Zhou et al. [36] et Lin et al. [37] ont présenté des résultats de simulation prometteurs sur la dynamique de l'interaction. Ces résultats permettent des premières comparaisons avec les visualisations directes dans le cas de déstabilisation forcée par le passage d'un choc. Cependant, pour ces deux types d'observables, il est nécessaire de prendre en compte tous les phénomènes présentés précédemment ainsi que la solidification dans le cas des fragments post mortem. Bien qu'étant l'objectif à terme, ces comparaisons sont difficilement envisageables sur des échelles de temps plus faibles. Nous proposons d'utiliser un observable qui permet d'obtenir des éléments de validation plus tôt dans l'interaction, la Thermal Interaction Zone (TIZ).

Depuis les travaux de Dullforce et al. [15] qui ont introduit la TIZ, plusieurs résultats expérimentaux montrent qu'il est possible de définir un domaine d'explosivité en fonction des températures initiales du combustible et du réfrigérant [18, 38, 39], à la fois dans le cas du problème d'intérêt et dans le problème opposé [13]. De plus, fixer l'une des deux températures et introduire une troisième variable permet d'obtenir l'influence de cette dernière sur l'explosivité. C'est ce que font [40] dans des expériences qui mettent en jeu un couple huile-eau en introduisant l'effet du nombre de Weber de la goutte. Une TIZ donne accès à des transitions de comportement qualitatives (et quantitatives) dans un espace de paramètres restreint que sont les températures initiales du réfrigérant et du combustible. Sous l'hypothèse que tout couple combustible réfrigérant vérifie une TIZ, cela permet de limiter considérablement les variables du problème.

Pour retrouver parfaitement les limites d'explosivité de la TIZ d'un couple, il faudra nécessairement prendre en compte l'ensemble des effets décrits précédemment mais également les spécificités du combustible et du réfrigérant. Cependant, l'existence de transitions de comportement est l'information qui nous intéresse, c'est ce que nous nous proposons d'essayer de reproduire dans un premier temps. Cela nous permettra de définir un ensemble de "mécanismes minimum" comme étant le plus petit ensemble d'effets physiques qui permette de retrouver des différences de comportement qualitatives en fonction de la température du combustible et du réfrigérant. Ainsi, à chaque étape de la construction incrémentale de l'outil de calcul, des cas tests devront être définis pour tester si l'ensemble de 'mécanismes minimum' est atteint.

Finalement, l'objectif sera d'essayer de reproduire des différences de comportement qualitatives en fonction des températures de combustible et de réfrigérant uniquement. Les transitions recherchées concernant les limites d'explosivité, on s'attend à des différences de comportement sur le film de vapeur. Le modèle développé devra être diphasique et compressible, avec une possibilité d'extension triphasique peu contraignante. Les effets de diffusion de la chaleur et de changement de phase seront les effets prioritaires à prendre en compte. Pour des raisons de complexité technique, les effets de tension de surface seront certainement pris en considération avant les effets radiatifs. Exception faite dans le cas où une méthode permettant d'émuler l'influence du rayonnement sur la vaporisation du réfrigérant peut être mise en place aisément. L'extension en triphasique devra être réalisée avant de prendre en compte les effets de viscosité. Ces derniers présentant un intérêt principalement dans la phase de fragmentation.

Ainsi, à chaque étape de la construction incrémentale de l'outil de calcul, des cas tests devront être définis pour tester si l'ensemble de 'mécanismes minimum' est atteint.

2.4 Conclusion

Les résultats expérimentaux principaux qui permettent d'aborder la phénoménologie de l'interaction combustible-réfrigérant à l'échelle locale ont été passés en revue. On retiendra que l'interaction énergétique est très rapide (quelques ms) et elle s'accompagne d'une fragmentation importante du combustible appelée fragmentation fine. Les différentes remarques sur le paysage expérimental ont ensuite permis d'expliquer pourquoi l'influence des phénomènes qui interviennent n'est pas tout à fait maitrisée et de repréciser les enjeux du développement de l'outil de calcul micro-SCONE. La construction de cet outil de calcul s'inscrit dans une démarche globale dans laquelle la définition de nouvelles experiences et leur interprétation sont mêlées aux besoins de validation. Cependant, le développement doit être abordé dans un premier temps en ne prenant en compte que l'état des connaissances actuel.

Pour cela, nous avons proposé un problème réduit qui nous apparaît être le sous ensemble fondamental commun aux différents combustibles, réfrigérants et dispositifs expérimentaux. L'hypothèse que l'on propose se résume de la manière suivante : toute interaction combustible-réfrigérant se présente comme une situation d'ébullition en film qui peut dégénérer en fragmentation fine et énergétique du combustible. De plus, d'après les différentes Thermal Interaction Zone disponibles, il apparait que cette transition dépend uniquement de la température initiale des deux constituants. L'application micro-SCONE devra donc être construite avec pour objectif intermédiaire de pouvoir simuler des transitions de comportement qui traduisent une déstabilisation du système. L'obtention de ces transitions correspondra avec la prise en compte des mécanismes minimums de déclenchement de l'explosion de vapeur locale. Dans ce but, nous avons proposé de prendre en compte en priorité les effets compressibles, thermiques et de changement de phase.

Il nous faudra donc dans un premier temps faire le choix d'une famille de modèles multiphasiques qui permet de prendre en compte ces effets à minima et qui présente des capacités d'extension, c'est ce qui sera fait dans la partie suivante. Le modèle choisi devra ensuite être implémenté, vérifié, validé et testé dans des configurations qui permettent de s'assurer de sa capacité à traiter des phénomènes de dynamique rapide compressibles avec effets thermiques importants. Les conditions d'intérêt qui

seront considérées dans ce travail seront celles liées à la configuration d'une goutte de corium en tant que combustible et l'eau en tant que réfrigérant car c'est le réfrigérant pour lequel nous disposons du plus grand nombre de TIZ.

Dans ce travail de thèse, nous avons mis en œuvre cette démarche en étudiant tout d'abord la modélisation des écoulements multiphasiques compressibles avec transferts de chaleur et changement de phase. Ainsi, ce manuscrit présente les efforts réalisés en vue de constuire un outil de calcul de complexité croissante en étudiant la capacité des modèles choisis à être employés pour la simulation de l'explosion de vapeur locale.

Troisième partie

Une modélisation d'écoulement multiphasique

3.1 Introduction

Les écoulements multiphasiques compressibles sont présents dans de nombreux domaines naturels et industriels. Pour décrire ces écoulements, les deux grandes familles de modèles utilisés sont les modèles lagrangiens et les modèles eulériens. Dans l'approche lagrangienne, l'objectif est de décrire les phénomènes qui affectent le parcours d'un élément de fluide dans l'espace. Dans l'approche eulérienne, l'objectif est de décrire les phénomènes qui influent sur l'état du fluide dans un élément de volume fixe de l'espace. Concernant la simulation de ces écoulements, les principales préocupations reposent sur la gestion des interfaces et des phénomènes associés.

Dans le cas où on adopte une approche lagrangienne, le suivi des interfaces est réalisé par déplacement et déformation du maillage. Concernant l'approche eulérienne, il est possible de capturer ou reconstruire l'interface en ajoutant une équation dédiée, c'est le cas des méthodes Volumes Of Fluid (VOF) et Level Set. Des méthodes de suivi d'interface (Front tracking) existent également, couplant certains avantages des représentations lagrangienne et eulérienne. Cet ensemble de méthodes considèrent l'interface comme une discontinuité locale. Cependant, les algorithmes qui interviennent pour le traitement des transferts et la détermination de la position de l'interface sont souvent coûteux. De plus, les forts changements de topologie et la formation/disparition d'interfaces sont particulièrement complexes, d'autant plus avec l'augmentation du nombre de phases en présence.

Il existe une autre classe de méthodes eulériennes. Dans celle-ci, la diffusion de l'interface est autorisée. Les interfaces ne font pas l'objet d'un traitement numérique particulier, ce qui rend l'implémentation de ces modèles plus aisée. De plus, ces méthodes permettent de gérer la formation et disparition dynamique d'interfaces, des déformations importantes et des écoulements avec de nombreuses phases. La transmission des ondes acoustiques est également naturellement prise en compte et donc bien traitée. Le caractère diffus de l'interface est toutefois responsable de difficultés pour localiser précisément sa position.

Notre choix se porte sur cette dernière classe de méthodes et modèles. D'une part pour les avantages décrits précédemment mais également pour les possibilités d'extensions disponibles dans la littérature. En particulier, il existe des travaux dans les domaines du changement de phase [41, 42, 43], des transferts thermiques [44, 45] et des effets capillaires [46].

Dans cette partie, nous présenterons donc le procédé d'homogénéisation [47, 48] usuel qui permet de décrire ce type de modèles.

3.2 Equations monophasiques

On se place dans l'hypothèse de fluides immiscibles. Cela veut dire que dans un domaine donné, chaque phase k occupe un volume distinct V_k. Sur chacun de ces volumes V_k, la phase k vérifie les équations de Navier-Stokes monophasiques,

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho_k \overrightarrow{u_k}) = 0 \tag{3.2.1a}$$

$$\frac{\partial \rho_k \overrightarrow{u_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\rho_k \overrightarrow{u_k} \otimes \overrightarrow{u_k}) = \overrightarrow{\nabla}.(\underline{\underline{\mathcal{T}_k}}) + \overrightarrow{F}_{vol,k} \tag{3.2.1b}$$

$$\frac{\partial \rho_k E_k}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho_k E_k \overrightarrow{u_k}) = \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u_k}.\underline{\underline{\mathcal{T}_k}}) + \overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{F}_{vol,k} + \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_k}) + \dot{q}_k \tag{3.2.1c}$$

que l'on écrira sous la forme générale,

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\psi_k \overrightarrow{u_k}) = \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{J_k}) + \dot{Q}_k \tag{3.2.2}$$

avec les correspondances résumées dans le tableau 1.

	ψ_k	$\overrightarrow{J_k}$	$\dot{Q}_k$
Masse	ρ_k	0	0
Quantité de mouvement	$\rho_k \overrightarrow{u}$	$\underline{\underline{\mathcal{T}_k}}$	$\overrightarrow{F}_{vol,k}$
Energie totale	$\rho_k E_k$	$\overrightarrow{\phi_k}$	$\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u_k}.\underline{\underline{\mathcal{T}_k}}) + \overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{F}_{vol,k} + \dot{q}_k$

TABLE 1 – Équivalence entre l'équation générique et les équations de conservation

Le premier terme de cette équation traduit la variation temporelle de la quantité ψ_k et le deuxième l'advection de cette quantité. Si la somme de ces contributions est nulle (exemple : 3.2.1a), on parlera d'équation de transport sous forme conservative. Dans le membre de droite, on fait la distinction entre deux types de contributions. La première est relative aux *échanges à la surface du volume*, c'est le terme de divergence de flux. La seconde est relative à la formation/disparition de quantité à l'intérieur du volume, c'est le terme de production.

Plus en détail, dans l'équation de quantité de mouvement, le tenseur des contraintes $\underline{\underline{\mathcal{T}_k}}$ regroupe l'ensemble des efforts à la surface du volume V_k. Cela regroupe les efforts de pression, les frottements à la surface et la tension de surface. Les forces de volume $\overrightarrow{F}_{vol,k}$ peuvent être de toute nature. On peut citer les forces de gravité et les forces électromagnétiques. Dans l'équation d'énergie totale, les transferts d'énergie aux surfaces $\overrightarrow{\phi_k}$ proviennent des transferts thermiques. La production d'énergie $\dot{Q}_k$ provient du travail des forces appliquées au volume, qu'elles soient surfaciques ou volumiques, ainsi que des sources d'énergie telles que les effets radiatifs, la puissance résiduelle ou la puissance électrique dissipée par effet Joule par exemple.

En pratique, dans ce travail certains effets physiques seront négligés tels que l'effet Joule et les effets électromagnétiques. La puissance résiduelle, source d'énergie qui provient des réactions de fission dans le corium ne sera pas non plus prise en compte. Concernant les transferts radiatifs, les différents fluides seront soit transparents soit opaques, ce qui permet de négliger les effets volumiques qui peuvent apparaitre dans les milieux semi-transparents. Cependant, il nous apparaît important de conserver la notation générique dans le but de pouvoir reproduire le raisonnement lors de la prise en considération d'effets supplémentaires.

3.3 Formulation locale instantanée

Le système 3.2.1 décrit le comportement d'une phase au sein de son domaine uniquement. L'idée ici est de prolonger le système d'équations de chaque phase sur l'espace total. Pour cela on utilise les fonctions caractéristiques des domaines $V_k(t)$, $X_k(\overrightarrow{x}, t)$, parfois appelées fonctions de présence et définies sur $\mathbb{R}^3$, telles que :

$$X_k(\overrightarrow{x}, t) = \begin{cases} 1 & si\ \overrightarrow{x} \in V_k(t) \\ 0 & sinon \end{cases}$$

Ces fonctions permettent de repérer les phases et de décrire le mouvement de leurs interfaces. En effet, à tout instant, la variation spatiale des fonctions de présence est la fonction caractéristique des interfaces, *i.e.* une distribution de dirac δ_I nulle partout sauf à l'interface : $\overrightarrow{\nabla}(X_k) = -\delta_I \overrightarrow{n_k}$ avec $\overrightarrow{n_k}$ la normale au volume k. Ainsi, le mouvement des volumes et des interfaces est traduit par l'évolution de cette fonction. Nous considérons que c'est une équation de transport purement géométrique qui lie l'évolution du volume au mouvement de ses interfaces,

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \overrightarrow{u_k^I}.\overrightarrow{\nabla}(X_k) = 0 \tag{3.3.1}$$

avec $\overrightarrow{u_k}^I$ la vitesse des interfaces du volume k. C'est un terme à modéliser. Les équations d'évolution de la phase k sur tout le domaine s'écrivent donc, en multipliant 3.2.2 par X_k,

$$X_k \frac{\partial \psi_k}{\partial t} + X_k \overrightarrow{\nabla}.(\psi_k \overrightarrow{u_k}) = X_k \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{J_k}) + X_k \dot{Q}_k \tag{3.3.2}$$

En considérant la fonction X_k au sens des distributions, on peut utiliser la règle de Leibniz sur les différentes dérivées partielles, d'où,

$$\frac{\partial X_k \psi_k}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(X_k \psi_k \overrightarrow{u_k}) = \overrightarrow{\nabla}.(X_k \overrightarrow{J_k}) - \overrightarrow{J_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k) + X_k \dot{Q}_k + \psi_k \frac{\partial X_k}{\partial t} + \psi_k \overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k) \tag{3.3.3}$$

et avec l'équation de transport de l'interface 3.3.1,

$$\frac{\partial X_k \psi_k}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(X_k \psi_k \overrightarrow{u_k}) = \overrightarrow{\nabla}.(X_k \overrightarrow{J_k}) - \overrightarrow{J_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k) + X_k \dot{Q}_k + \psi_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I) \tag{3.3.4}$$

Cette forme des équations est appelée formulation locale instantanée. On y voit apparaître le terme $\psi_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k^I})$ qui traduit l'évolution de la quantité ψ_k au travers de l'interface en présence de transfert de masse. Dans la suite des développements, on fait le choix de conserver la forme $\overrightarrow{\nabla}(X_k)$ plutôt que l'expression au sens des distributions $\delta_I \overrightarrow{n_k}$.

3.4 Moyennes des équations locales instantanées

Cette étape consiste à réaliser un changement d'échelle d'observation des phénomènes. On cherche à passer des équations qui décrivent l'espace localement aux équations qui décrivent une composition arbitraire de l'espace, appelée échelle d'observation. La taille de cette échelle d'observation doit permettre de fixer les relations de fermeture au sein des volumes. Cette étape est nécessaire car il n'est actuellement pas possible de simuler tous les phénomènes à l'échelle décrite par la formulation locale instantanée.

Lors de la détermination des équations moyennées apparaissent des problématiques liées aux moyennes, leurs définitions et leurs propriétés. L'investigation en détail de ces questions ne sera pas traitée ici, se référer aux travaux de [47, 48]. On notera toutefois de ces travaux l'équivalence des différents opérateurs de moyennes. Nous faisons le choix d'utiliser la moyenne volumique, qui permet une interprétation plus directe. Ainsi, la moyenne d'une quantité $\mathcal{Q}$ sur un volume V_m sera notée,

$$\overline{\mathcal{Q}} = \frac{1}{V_m} \int_{V_m} \mathcal{Q} dV \tag{3.4.1}$$

On définit α_k la fraction volumique comme étant la moyenne de la fonction caractéristique,

$$\alpha_k = \overline{X_k} = \frac{1}{V_m} \int_{V_m} X_k dV = \frac{V_k}{V_m} \tag{3.4.2}$$

Les fractions volumiques vérifient l'expression $\sum_k \alpha_k = 1$, appelée *contrainte de saturation*. Ainsi, α_k représente la proportion en volume de la phase k dans le volume V_m. D'après [49], les moyennes vérifient les propriétés de linéarité, et d'idempotence :

$$\overline{\mathcal{Q}_1 + \mathcal{Q}_2} = \overline{\mathcal{Q}_1} + \overline{\mathcal{Q}_2} \tag{3.4.3}$$

$$\overline{\overline{\mathcal{Q}}} = \overline{\mathcal{Q}} \tag{3.4.4}$$

Concernant la commutativité avec les opérateurs différentiels, ce n'est pas une propriété intrinsèque aux opérateurs de moyenne, cela dépend du comportement de la fonction différenciée. Nous ferons l'hypothèse qu'il est possible de commuter les opérateurs de moyenne et les opérateurs différentiels.

En appliquant l'opérateur de moyenne à l'équation 3.3.4 et à l'aide des propriétés des moyennes ci-dessus, on peut écrire l'équation d'une quantité moyennée,

$$\frac{\partial \overline{X_k \psi_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\overline{X_k \psi_k \overrightarrow{u_k}}) = \overrightarrow{\nabla}.(\overline{X_k \overrightarrow{J_k}}) - \overline{\overrightarrow{J_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} + \overline{X_k \dot{Q}_k} + \overline{\psi_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)} \tag{3.4.5}$$

Sous cette forme,

— les termes $\overrightarrow{\nabla}.(\overline{X_k \overrightarrow{J_k}})$ traduisent les effets de diffusion au sein de la phase k,

— les termes $\overline{\overrightarrow{J_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)}$ sont associés aux échanges au travers des interfaces et doivent être modélisés,

— les termes $\overline{\psi_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)}$ sont associés au changement de phase.

Dans la suite de ce travail, la notion d'échange sera réservée aux effets entre phases différentes au travers d'une interface alors que la notion d'effet de diffusion sera réservée aux effets au sein d'une même phase. La notion de transfert sera, elle, plus générique et permettra de décrire l'ensemble.
On définit deux quantités moyennes particulières, appelées moyenne d'Euler et moyenne de Favre d'une quantité $\mathscr{Q}$ donnée,

$$\overline{\mathscr{Q}}^{X_k} = \frac{\overline{X_k \mathscr{Q}}}{\overline{X_k}} \tag{3.4.6}$$

$$\overline{\mathscr{Q}}^{X_k \rho_k} = \frac{\overline{X_k \rho_k \mathscr{Q}}}{\overline{X_k \rho_k}} = \frac{\overline{\rho_k \mathscr{Q}}^{X_k}}{\overline{\rho_k}^{X_k}} \tag{3.4.7}$$

Pour cela, on a supposé que la fraction volumique de chaque composant était non nulle dans chaque volume moyen. Cela signifie que l'*on ne retrouve le comportement monophasique d'une phase k que dans la limite où toutes les fractions volumiques des autres phases tendent vers 0*. Finalement, cela permet d'exprimer la formulation moyenne des équations locales instantanées,

$$\frac{\partial \alpha_k \overline{\psi_k}^{X_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\psi_k \overrightarrow{u_k}}^{X_k}) = \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\overrightarrow{J_k}}^{X_k}) - \overline{\overrightarrow{J_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} + \alpha_k \overline{\dot{Q}_k}^{X_k} + \overline{\psi_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)} \tag{3.4.8}$$

C'est la forme générale des équations de transport moyennées. Elles sont valables pour chaque phase k dans le domaine total.
On obtient ainsi, avec $\psi_k = \rho_k$, l'équation de masse,

$$\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) = \overline{\rho_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)} \tag{3.4.9}$$

avec $\psi_k = \rho_k \overrightarrow{u_k}$, l'équation de quantité de mouvement,

$$\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k} \otimes \overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) = \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\underline{\underline{\mathcal{T}_k}}}^{X_k}) - \overline{\underline{\underline{\mathcal{T}_k}}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} + \alpha_k \overline{\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \overline{\rho_k \overrightarrow{u_k} \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)} \tag{3.4.10}$$

et avec $\psi_k = \rho_k E_k$, l'équation d'énergie totale,

$$\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{E_k}^{X_k \rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{E_k \overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) = \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\overrightarrow{\phi_k}}^{X_k}) - \overline{\overrightarrow{\phi_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} + \alpha_k \overline{\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u_k}.\underline{\underline{\mathcal{T}_k}})}^{X_k} + \alpha_k \overline{\overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \alpha_k \overline{\dot{q}_k}^{X_k}$$
$$+ \overline{\rho_k E_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)} \tag{3.4.11}$$

Il convient de faire la distinction entre les effets de pression $p\underline{\underline{I}}$ et le déviateur des contraintes $\underline{\underline{\tau_k}}$ dans le tenseur $\underline{\underline{\mathcal{T}_k}} = \tau - p\underline{\underline{I}}$, le système pour la phase k s'écrit alors,

$$\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) = \overline{\rho_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)} \tag{3.4.12a}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k} \otimes \overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) &= -\overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{p_k \underline{\underline{I}}}^{X_k}) + \overline{p_k \underline{\underline{I}}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\underline{\underline{\tau_k}}}^{X_k}) - \overline{\underline{\underline{\tau_k}}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \\ &+ \alpha_k \overline{\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \overline{\rho_k \overrightarrow{u_k} \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)}\end{aligned} \tag{3.4.12b}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{E_k}^{X_k \rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{E_k \overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) &= \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\overrightarrow{\phi_k}}^{X_k}) - \overline{\overrightarrow{\phi_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} - \alpha_k \overline{\overrightarrow{\nabla}.(p_k \overrightarrow{u_k}.\underline{\underline{I}})}^{X_k} + \alpha_k \overline{\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u_k}.\underline{\underline{\tau_k}})}^{X_k} \\ &+ \alpha_k \overline{\overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \alpha_k \overline{\dot{q}_k}^{X_k} + \overline{\rho_k E_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)}\end{aligned} \tag{3.4.12c}$$

ou sous une forme plus classique, en développant le travail des efforts surfaciques,

$$\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) = \overline{\rho_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)} \tag{3.4.13a}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k} \otimes \overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) &= -\overrightarrow{\nabla}(\alpha_k \overline{p_k}^{X_k}) + \overline{p_k \overrightarrow{\nabla}(X_k)} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\underline{\underline{\tau_k}}}^{X_k}) - \overline{\underline{\underline{\tau_k}}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \\ &+ \alpha_k \overline{\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \overline{\rho_k \overrightarrow{u_k} \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)}\end{aligned} \tag{3.4.13b}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{E_k}^{X_k \rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{E_k \overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) &= \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\overrightarrow{\phi_k}}^{X_k}) - \overline{\overrightarrow{\phi_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \\ &- \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{p_k \overrightarrow{u_k}}^{X_k}) + \overline{p_k \overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \\ &+ \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\overrightarrow{u_k}.\underline{\underline{\tau_k}}}^{X_k}) - \overline{\overrightarrow{u_k}.\underline{\underline{\tau_k}}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \\ &+ \alpha_k \overline{\overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \alpha_k \overline{\dot{q}_k}^{X_k} + \overline{\rho_k E_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)}\end{aligned} \tag{3.4.13c}$$

A noter que les quantités suivies ne sont donc pas les moyennes volumiques des quantités phasiques mais des moyennes pondérées par le volume ou la masse de composant. Cette formulation est très générale, nous allons maintenant faire des hypothèses simplificatrices et modéliser les termes non fermés.

3.5 La modélisation des termes moyennés

La formulation ci-dessus fait apparaître un grand nombre de termes moyennés complexes. Dans cette section, nous allons simplifier le système et son écriture, puis fermer les différents termes. La démarche pour obtenir le système final est la suivante :

- simplification des termes de moyennes de produits dans la partie advective,
- notation des termes associés au changement de phase,
- notation des termes $\overline{\overrightarrow{J_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)}$, définition des quantités interfaciales,
- fermeture par conditions d'interface,
- fermeture sur la fraction volumique,

— fermeture des termes d'échanges.

Simplification de la partie advective

D'après les définitions des moyennes, on fait apparaître les fluctuations $\mathscr{Q}''$ d'une quantité $\mathscr{Q}$ par rapport à la moyenne de Favre,

$$\mathscr{Q} = \overline{\mathscr{Q}}^{X_k\rho_k} + \mathscr{Q}'' \tag{3.5.1}$$

Cela permet d'exprimer le système 3.4.12, de la manière suivante,

$$\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}) = \overline{\rho_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)} \tag{3.5.2a}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k} \otimes \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}) &= -\overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}'' \otimes \overrightarrow{u_k}''}^{X_k\rho_k}) - \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{p_k}^{X_k}) + \overline{p_k.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \\ &+ \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\underline{\underline{\tau_k}}}^{X_k}) - \overline{\underline{\underline{\tau_k}}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} + \alpha_k \overline{\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} \\ &+ \overline{\rho_k \overrightarrow{u_k} \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)}\end{aligned} \tag{3.5.2b}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{E_k}^{X_k\rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{E_k}^{X_k\rho_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}) &= -\overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{E_k'' \overrightarrow{u_k}''}^{X_k\rho_k}) + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\overrightarrow{\phi_k}}^{X_k}) - \overline{\overrightarrow{\phi_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \\ &- \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{p_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}) - \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{p_k \overrightarrow{u_k}''}^{X_k}) + \overline{p_k \overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \\ &+ \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\underline{\underline{\tau_k}}}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}) + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\underline{\underline{\tau_k}}.\overrightarrow{u_k}''}^{X_k}) - \overline{\overrightarrow{u_k}.\underline{\underline{\tau_k}}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \\ &+ \alpha_k \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overline{\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \alpha_k \overline{\overrightarrow{u_k}''.\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \alpha_k \overline{\dot{q}_k}^{X_k} \\ &+ \overline{\rho_k E_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)}\end{aligned} \tag{3.5.2c}$$

et ainsi obtenir une forme plus commune des termes d'advection. Les termes faisant intervenir les fluctuations sont parfois associés à la turbulence [50] ou à la présence d'une interface mobile dans le volume moyen [51] et seront négligés dans nos travaux.

Les termes associés au changement de phase

Les termes qui apparaissent en faisant intervenir la différence entre vitesse phasique et vitesse de l'interface sont associés aux transferts de masse entre composants. On notera $\dot{m}_{k,V_m}$ le débit de masse de composant par unité de volume sur V_m,

$$\overline{\rho_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)} = \dot{m}_{k,V_m} \tag{3.5.3}$$

A cela sont associées une vitesse $\overrightarrow{u_{k,\dot{m}}}$, et une énergie interne spécifique $e_{k,\dot{m}}$, définies à l'interface et relatives aux transferts par changement de phase à l'interface, telles que,

$$\overline{\rho_k \overrightarrow{u_k} \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)} = \dot{m}_{k,V_m} \overrightarrow{u_{k,\dot{m}}} \tag{3.5.4}$$

$$\overline{\rho_k E_k \overrightarrow{\nabla}(X_k).(\overrightarrow{u_k} - \overrightarrow{u_k}^I)} = \dot{m}_{k,V_m} e_{k,\dot{m}} \tag{3.5.5}$$

Ce sont des quantités introduites dans le but de simplifier les notations et pour lesquelles il faut toujours une fermeture.

Les termes d'échanges entre phases $\overline{\overrightarrow{J_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)}$

On introduit des quantités interfaciales sous une forme arbitraire. L'ensemble des efforts compris

dans le déviateur des contraintes est associé à un terme d'échange de quantité de mouvement $\overrightarrow{M_k}$, tel que,

$$\overrightarrow{M_k} = \overline{\underline{\underline{\tau_k}}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \tag{3.5.6}$$

ainsi, en introduisant une vitesse moyenne de la phase k à l'interface $\overrightarrow{u_{k,I}}$, le travail de ces efforts s'écrit,

$$\overrightarrow{M_k}.\overrightarrow{u_{k,I}} = \overline{\underline{\underline{\tau_k}}\overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \tag{3.5.7}$$

Les transferts de chaleur au travers de l'interface entre les différents fluides sont associés à une quantité $Q_{k,I}$,

$$Q_{k,I} = -\overline{\overrightarrow{\phi_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \tag{3.5.8}$$

et finalement, les effets de pression à une pression interfaciale $p_{k,I}$,

$$p_{k,I}\overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) = \overline{p_k\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \tag{3.5.9}$$

$$p_{k,I}\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} = -\overline{p_k\overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \tag{3.5.10}$$

Le système s'écrit alors, avec les notations introduites,

$$\frac{\partial \alpha_k\overline{\rho_k}^{X_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overline{\rho_k}^{X_k}\overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}) = \dot{m}_{k,V_m} \tag{3.5.11a}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k\overline{\rho_k}^{X_k}\overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\alpha_k\overline{\rho_k}^{X_k}\overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}\otimes\overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}) &= -\overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overline{p_k}^{X_k}) + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overline{\underline{\underline{\tau_k}}}^{X_k}) \\ &+ p_{k,I}\overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) - \overrightarrow{M_k} + \alpha_k\overline{\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \dot{m}_{k,V_m}\overrightarrow{u_{k,\dot{m}}}\end{aligned} \tag{3.5.11b}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k\overline{\rho_k}^{X_k}\overline{E_k}^{X_k\rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overline{\rho_k}^{X_k}\overline{E_k}^{X_k\rho_k}\overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}) &= \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overline{\overrightarrow{\phi_k}}^{X_k}) - \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overline{p_k}^{X_k}\overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}) + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overline{\underline{\underline{\tau_k}}}^{X_k}\overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}) \\ &+ Q_{k,I} - p_{k,I}\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} - \overrightarrow{M_k}.\overrightarrow{u_{k,I}} + \alpha_k\overline{\dot{q}_k}^{X_k} \\ &+ \alpha_k\overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overline{\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \dot{m}_{k,V_m}e_{k,\dot{m}}\end{aligned} \tag{3.5.11c}$$

On aborde maintenant la fermeture du système, qui consiste à,

— écrire les conditions d'interfaces qui décrivent les conservativités locales,

— écrire une équation d'évolution de la fraction volumique,

— écrire une modélisation pour les termes d'échanges entre phases.

En considérant que le système doit être conservatif en masse, quantité de mouvement et énergie, on écrit usuellement que la somme des différents échanges entre phases sur un volume est nulle, *i.e.*,

$$\sum_k \dot{m}_{k,V_m} = 0 \tag{3.5.12a}$$

$$\sum_k \overrightarrow{M_k} = 0 \tag{3.5.12b}$$

$$\sum_k Q_{k,I} = 0 \tag{3.5.12c}$$

$$\sum_k p_{k,I}\overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) = \overrightarrow{0} \tag{3.5.12d}$$

C'est ce que l'on appelle les relations d'interface. **Ecrire cela c'est faire l'hypothèse sous-jacente que tous les échanges entre phases à l'interface ont lieu au sein d'un volume.** En effet, ces expressions

ne font pas intervenir l'environnement du volume moyen, elles traduisent une conservativité qui est locale. On remettra en cause cette hypothèse dans la partie 6.3, ou nous mettrons à défaut les conséquences pratiques de cette description.
Ensuite, regardons l'équation moyennée du déplacement de l'interface,

$$\frac{\partial \overline{X_k}}{\partial t} = -\overline{\overrightarrow{u_k}^I . \overrightarrow{\nabla}(X_k)} \tag{3.5.13}$$

la décomposition du terme $\overline{\overrightarrow{u_k}^I . \overrightarrow{\nabla}(X_k)}$ est arbitraire et peut varier dans les différents travaux sur le sujet. La détermination d'une forme consensuelle de cette équation est un point essentiel qui doit être traité dans de futurs travaux sur les modèles à interfaces diffuses. Ici, nous adopterons la formulation suivante,

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} = -\overrightarrow{u_{\alpha_k}} . \overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) + \dot{\alpha}_k \tag{3.5.14}$$

avec $\overrightarrow{u}_{\alpha_k}$ la vitesse d'advection de α_k et $\dot{\alpha}_k$ la variation de la fraction volumique.

3.6 Fermeture des termes d'échanges

Les termes d'échanges ont pour effet de ramener les différents fluides vers une situation d'équilibre. Plus particulièrement, chaque échange a pour but d'équilibrer une quantité intensive du système, dont les correspondances sont les suivantes,

$$\begin{aligned} Gonflement\ mcanique &\rightsquigarrow pression \\ Efforts &\rightsquigarrow vitesse \\ Echanges\ de\ chaleur &\rightsquigarrow temperature \\ Transferts\ de\ masse &\rightsquigarrow potentiels\ chimiques \end{aligned}$$

La modélisation de ces échanges dépend alors des hypothèses sur les caractéristiques de l'écoulement, ils peuvent être :

— négligés : il n'y a pas d'échange entre les phases au sein d'un volume,
— finis : les interactions sont prises en compte via un modèle explicite, généralement adapté à une situation spécifique,
— intenses : localement, les fluides atteignent instantanément un équilibre.

Ainsi, on fait le choix de conserver l'écriture du système d'équations bilans multiphasiques sous la forme,

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} = -\overrightarrow{u_{\alpha_k}} . \overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) + \dot{\alpha}_k \tag{3.6.1a}$$

$$\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} . (\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) = \dot{m}_{k,V_m} \tag{3.6.1b}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k} \otimes \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) &= -\overrightarrow{\nabla} . (\alpha_k \overline{p_k}^{X_k}) + \overrightarrow{\nabla} . (\alpha_k \overline{\underline{\underline{\tau_k}}}^{X_k}) \\ &+ p_{k,I} \overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) - \overrightarrow{M_k} + \alpha_k \overline{\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \dot{m}_{k,V_m} \overrightarrow{u_{k,\dot{m}}} \end{aligned} \tag{3.6.1c}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{E_k}^{X_k \rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} . (\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{E_k}^{X_k \rho_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) &= \overrightarrow{\nabla} . (\alpha_k \overline{\overrightarrow{\phi_k}}^{X_k}) - \overrightarrow{\nabla} . (\alpha_k \overline{p_k}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) + \overrightarrow{\nabla} . (\alpha_k \overline{\underline{\underline{\tau_k}}}^{X_k} \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) \\ &+ Q_{k,I} - p_{k,I} \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} - \overrightarrow{M_k} . \overrightarrow{u_{k,I}} + \alpha_k \overline{\dot{q}_k}^{X_k} \\ &+ \alpha_k \overline{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k} . \overline{\overrightarrow{F}_{vol,k}}^{X_k} + \dot{m}_{k,V_m} e_{k,\dot{m}} \end{aligned} \tag{3.6.1d}$$

C'est une forme pour laquelle il convient de remplacer les termes d'échanges par des expressions déterminées en fonction de l'application désirée. La contrainte de saturation qui assure la conservation du volume permet de remplacer l'une des équations d'évolution de fraction volumique. C'est un système composé de $4n-1$ équations bilan aux dérivées partielles avec n le nombre de phases. Il est complété par des équations d'état pour chaque phase qui permettent de lier les différentes quantités thermodynamiques.

Dans le cas particulier d'échanges intenses, il existe une méthode permettant de simplifier le modèle, c'est ce que l'on appelle une méthode de relaxation.

3.7 Relaxations et hiérarchie de modèles multiphasiques

Dans le cas où il est avéré que certains phénomènes d'échanges sont intenses alors il est possible de fermer les termes d'échanges correspondants à l'aide d'une relaxation. C'est à dire déterminer une approximation de l'évolution du système à l'équilibre. La méthode employée est décrite succintement ici. Le principe est de déterminer quel est l'état d'équilibre qui sera atteint grâce aux échanges entre les phases et d'écrire l'évolution du système autour de cet équilibre.

Dans ce cadre il convient généralement d'exprimer les échanges intenses comme des termes de rappel vers une valeur commune sous la forme suivante,

$$\overline{\overrightarrow{J}_k.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} = \mathcal{H}_{k,I}(\mathcal{Q})(\mathcal{Q}_I - \mathcal{Q}_k) \tag{3.7.1}$$

qui traduit le phénomène de mise à l'équilibre de $\mathcal{Q}_k$ vers $\mathcal{Q}_I$ sur un temps $1/\mathcal{H}_{k,I}(\mathcal{Q})$ associé à la quantité $\mathcal{Q}$. Le coefficient $\mathcal{H}_{k,I}(\mathcal{Q})$ est appelé coefficient de relaxation et $\mathcal{Q}_I$ la quantité d'équilibre.

La première étape est de déterminer quelle est la valeur commune $\mathcal{Q}_I$ vers laquelle les différentes phases vont s'équilibrer. Pour cela, Baer et Nunziato [52] proposent de se baser sur des valeurs qui assurent la positivité de l'entropie du mélange, définie comme étant la somme de la production d'entropie de chaque phase.

$$\sum_k \left(\frac{\partial \alpha_k \rho_k s_k}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \rho_k s_k \overrightarrow{u_k}) \right) = \sum_k \left(\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{s_k}^{X_k \rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overline{s_k}^{X_k \rho_k} \overrightarrow{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) \right) \geq 0 \tag{3.7.2}$$

que l'on peut écrire sous la forme suivante,

$$\begin{aligned}
&\sum_k \left(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \left(\frac{\partial \overline{s_k}^{X_k \rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}.\overrightarrow{\nabla}(\overline{s_k}^{X_k \rho_k}) \right) + \overline{s_k}^{X_k \rho_k} \left(\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \overrightarrow{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}) \right) \right) \geq 0 \\
&\sum_k \left(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \left(\frac{\partial \overline{s_k}^{X_k \rho_k}}{\partial t} + \overrightarrow{\overrightarrow{u_k}}^{X_k \rho_k}.\overrightarrow{\nabla}(\overline{s_k}^{X_k \rho_k}) \right) + \overline{s_k}^{X_k \rho_k} \dot{m}_{k,V_m} \right) \geq 0
\end{aligned} \tag{3.7.3}$$

et en notant $\frac{D_k \mathcal{Q}}{Dt}$ la dérivée particulaire d'une quantité $\mathcal{Q}$ relative à la phase k,

$$\sum_k \left(\alpha_k \overline{\rho_k}^{X_k} \frac{D_k \overline{s_k}^{X_k \rho_k}}{Dt} + \overline{s_k}^{X_k \rho_k} \dot{m}_{k,V_m} \right) \geq 0 \tag{3.7.4}$$

La relation de Gibbs pour chaque phase permet de lier leur entropie, leur énergie interne spécifique et leur densité. Elle sera approchée sous la forme suivante sur un volume moyen,

$$d\overline{e_k}^{X_k \rho_k} = T_k d\overline{s_k}^{X_k \rho_k} + \frac{\overline{p_k}^{X_k}}{(\overline{\rho_k}^{X_k})^2} d\overline{\rho_k}^{X_k} \tag{3.7.5}$$

avec T_k la température de la phase k dans le volume moyen. Ainsi, exprimer les dérivées particulaires de $\overline{\rho_k}^{X_k}$ et $\overline{e_k}^{X_k\rho_k}$ permettra d'obtenir celle de l'entropie. La combinaison des équations 3.5.11a et 3.5.14 nous donne la première expression,

$$\alpha_k \frac{D_k \overline{\rho_k}^{X_k}}{Dt} = \overline{\rho_k}^{X_k}(\overrightarrow{u_{\alpha_k}} - \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}).\overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) - \overline{\rho_k}^{X_k}\alpha_k\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}) - \overline{\rho_k}^{X_k}\dot{\alpha}_k + \dot{m}_{k,V_m} \tag{3.7.6}$$

La seconde expression est déterminée par les manipulations classiques qui permettent d'écrire l'équation 3.5.11c en énergie interne spécifique. On decompose l'expression de l'évolution d'énergie totale spécifique pour faire apparaître la contribution de l'énergie cinétique et les substitutions qui en découlent. D'où,

$$\begin{aligned}
\alpha_k\overline{\rho_k}^{X_k}\frac{D_k\overline{e_k}^{X_k\rho_k}}{Dt} = &(\frac{\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}}{2} - \overline{e_k}^{X_k\rho_k})\dot{m}_{k,V_m} + \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overline{p_k}^{X_k}) - \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overline{\overline{\tau_k}}^{X_k}) \\
&- \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.p_{k,I}\overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) + \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overrightarrow{M_k} - \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\alpha_k\overline{\overrightarrow{F_{vol,k}}}^{X_k} - \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\dot{m}_{k,V_m}\overrightarrow{u_{k,\dot{m}}} \\
&+ \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overrightarrow{\overline{\phi_k}}^{X_k}) - \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overline{p_k}^{X_k}\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}) + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overline{\overline{\tau_k}}^{X_k}\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}) + Q_{k,I} - p_{k,I}\frac{\partial\alpha_k}{\partial t} - \overrightarrow{M_k}.\overrightarrow{u_{k,I}} + \alpha_k\overline{\dot{q}_k}^{X_k} \\
&+ \alpha_k\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overline{\overrightarrow{F_{vol,k}}}^{X_k} + \dot{m}_{k,V_m}e_{k,\dot{m}}
\end{aligned} \tag{3.7.7}$$

En introduisant l'équation d'évolution de la fraction volumique et avec les simplifications adéquates, on obtient,

$$\begin{aligned}
\alpha_k\overline{\rho_k}^{X_k}\frac{D_k\overline{e_k}^{X_k\rho_k}}{Dt} = &(\frac{\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}}{2} - \overline{e_k}^{X_k\rho_k} + e_{k,\dot{m}} - \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overrightarrow{u_{k,\dot{m}}})\dot{m}_{k,V_m} \\
&- \alpha_k\overline{p_k}^{X_k}.\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}) + \alpha_k\overline{\overline{\tau_k}}^{X_k}.\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}) \\
&- p_{k,I}(\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k} - \overrightarrow{u_{\alpha_k}}).\overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) + (\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k} - \overrightarrow{u_{k,I}}).\overrightarrow{M_k} \\
&+ \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overrightarrow{\overline{\phi_k}}^{X_k}) + Q_{k,I} - p_{k,I}\dot{\alpha}_k + \alpha_k\overline{\dot{q}_k}^{X_k}
\end{aligned} \tag{3.7.8}$$

Ainsi, l'expression de la dérivée particulaire de l'entropie phasique s'écrit,

$$\begin{aligned}
\alpha_k\overline{\rho_k}^{X_k}T_k\frac{D_ks_k}{Dt} = &\left(\frac{\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}}{2} - \overline{e_k}^{X_k\rho_k} + e_{k,\dot{m}} - \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overrightarrow{u_{k,\dot{m}}} - \frac{\overline{p_k}^{X_k}}{\overline{\rho_k}^{X_k}}\right)\dot{m}_{k,V_m} \\
&+ \alpha_k\overline{\overline{\tau_k}}^{X_k}.\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}) \\
&+ (p_{k,I} - \overline{p_k}^{X_k})(\overrightarrow{u_{\alpha_k}} - \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}).\overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) + (\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k} - \overrightarrow{u_{k,I}}).\overrightarrow{M_k} \\
&+ \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k\overrightarrow{\overline{\phi_k}}^{X_k}) + Q_{k,I} + (\overline{p_k}^{X_k} - p_{k,I})\dot{\alpha}_k + \alpha_k\overline{\dot{q}_k}^{X_k}
\end{aligned} \tag{3.7.9}$$

et donc l'équation de production d'entropie devient,

$$\sum_k \left(\alpha_k \rho_k \frac{D_k s_k}{Dt} + s_k \dot{m}_{k,V_m}\right) = \sum_k \frac{1}{T_k}\left(\frac{\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}}{2} - \overline{e_k}^{X_k\rho_k} + e_{k,\dot{m}} - \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}.\overrightarrow{u_{k,\dot{m}}} - \frac{\overline{p_k}^{X_k}}{\overline{\rho_k}^{X_k}} + T_k s_k\right)\dot{m}_{k,V_m} \tag{3.7.10a}$$

$$+ \sum_k \frac{1}{T_k}\left(\alpha_k \overline{\overline{\tau_k}}^{X_k}.\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k})\right) \tag{3.7.10b}$$

$$+ \sum_k \frac{1}{T_k}\left((p_{k,I} - \overline{p_k}^{X_k})(\overrightarrow{u_{\alpha_k}} - \overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k}).\overrightarrow{\nabla}(\alpha_k)\right) \tag{3.7.10c}$$

$$+ \sum_k \frac{1}{T_k}\left((\overrightarrow{\overline{u_k}}^{X_k\rho_k} - \overrightarrow{u_{k,I}}).\overrightarrow{M_k}\right) \tag{3.7.10d}$$

$$+ \sum_k \frac{1}{T_k}\left(\overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overrightarrow{\overline{\phi_k}}^{X_k})\right) \tag{3.7.10e}$$

$$+ \sum_k \frac{1}{T_k}\left(Q_{k,I}\right) \tag{3.7.10f}$$

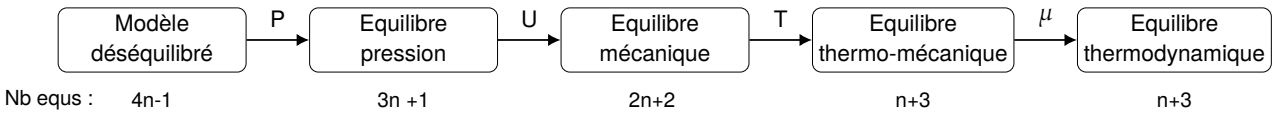
$$+ \sum_k \frac{1}{T_k}\left((\overline{p_k}^{X_k} - p_{k,I})\dot{\alpha}_k\right) \tag{3.7.10g}$$

$$+ \sum_k \frac{1}{T_k}\left(\alpha_k \overline{\dot{q}_k}^{X_k}\right) \geq 0 \tag{3.7.10h}$$

La méthode proposée dans les travaux de Baer et Nunziato [52] est de s'assurer que chaque ligne de cette équation est positive ou nulle. Cela correspond à déterminer un sous-ensemble de solutions du système général 3.6.1 dans lequel tous les termes du système 3.7.10 sont non négatifs et à négliger l'ensemble de solution complémentaire. Dans le cas du diphasique, les travaux de Labois [50] compilent les différentes modélisations proposées pour les termes d'interface Q_I. Les éléments qui justifient le choix d'une expression particulière de Q_I parmi les modélisations existantes ne font pas consensus.

Une fois que l'expression d'une quantité à l'équilibre a été choisie, une approximation de l'évolution du système autour de cet équilibre peut être obtenue. Pour cela, il faut réaliser un développement asymptotique autour de la valeur Q_I déterminée. L'objectif étant d'écrire un système d'évolution dans lequel les différentes phases évoluent à l'équilibre Q_I tout en prenant en compte les effets qui assurent cet équilibre. C'est à dire que les quantités phasiques atteignent une valeur commune et que la transformation qui a mené à cet équilibre a bien eu lieu. Cela se traduit parfois par l'apparition de termes, mais surtout par une réduction du nombre d'équations bilans du système et une fermeture thermodynamique adaptée.

Concernant l'ordre de mise à l'équilibre des quantités, il est possible de réaliser des analyses sur les temps caractéristiques de mise à l'équilibre dans des configurations d'écoulement données, par exemple : écoulements à bulles [50], milieux granulaires [53], milieux hétérogènes [54]. Dans un cas assez général, on retrouve que l'équilibre de pression se fait rapidement devant l'équilibre en vitesse devant l'équilibre en température devant l'équilibre des potentiels de gibbs. Ce qui permet de décrire les modèles relaxés en fonction des différents équilibres successifs réalisés.



Concernant le choix de modèle pour traiter un problème particulier, il est parfois possible de réaliser des études d'échelles et de temps caractéristiques sous des hypothèses de topologie ou de gamme d'écoulements donnés [50, 51, 53], pour choisir un modèle adapté aux phénomènes d'intérêt. Cependant dans le cadre de la simulation de l'explosion de vapeur locale, on rappelle que l'objectif à terme est de pouvoir étudier le phénomène depuis la destabilisation spontanée du film de vapeur jusqu'au comportement des fragments. Cela comporte un ensemble de phénomènes de tailles et de temps caractéristiques méconnus. Ainsi, nous n'avons pas voulu faire d'hypothèse a priori et se restreindre à une catégorie de modèle donné. L'un des travaux à réaliser pour construire micro-SCONE est de déterminer une catégorie de modèle qui permet d'étudier l'interaction combustible-réfrigérant à l'échelle locale. C'est une approche exploratoire dans laquelle nous commencerons par le modèle à l'équilibre thermomécanique (appelé modèle UPT), qui présente des avantages sur les aspects thermiques et numériques puis nous reviendrons sur un modèle en déséquilibre de température (appelé modèle UP) lorsque nous le jugerons nécessaire.

Dans les parties suivantes, nous ommettrons la notation sous forme de moyenne pour plus de lisibilité. Les termes non indicés sont des quantités de mélange et ceux indicés sont des quantités phasiques.

Quatrième partie

Architecture SCONE, application micro-SCONE

4.1 Introduction

Le logiciel SCONE (Software for COrium-Na interaction Evaluation) est en développement depuis 2016 au CEA dans le Laboratoire de Modélisation des Accidents Graves. C'est un logiciel dont le but est, à terme, de réaliser des simulations maillées multiphasiques complexes dans le cadre de l'interaction corium-sodium à l'échelle mésoscopique.

Les premières phases de développement ont permis de construire une architecture logicielle adaptée aux besoins d'un tel code de calcul. Développée en C++ et orientée objet, cette architecture est :

— flexible, de manière à assurer une indépendance entre le développement d'outils informatiques et les développements de modules physiques et numériques. En effet, l'évolution des standards informatiques impose de devoir mettre à jour les outils informatiques pour assurer un niveau de qualité logicielle important au cours du temps. De plus, la compréhension des phénomènes physiques étant en constante progression, il faut pouvoir développer de nouveaux modules physiques avec le minimum d'impact sur les aspects informatiques. Cette indépendance permet entre autres l'évolution du code de calcul en assurant sa rétro-compatibilité. Tout ceci est permis par un haut niveau d'abstraction des outils informatiques,

— modulaire, de manière à décomposer la construction du logiciel et des applications. Cela permet en particulier de capitaliser les différents travaux réalisés au cours du temps et de constituer un outil de complexité croissante. Les différents modules développés sont stockés dans une bibliothèque et mis à disposition pour assembler des applications variées,

— dédiée au multiphasique, de manière à mettre à disposition des outils spécifiques pour le traitement de composants ou de phases différentes. Cela permet de faciliter le développement en rendant la manipulation des phases plus instinctive.

Les propriétés de flexibilité et de modularité ont également permis une décomposition dite orientée 'métiers', c'est-à-dire prenant en compte les différents acteurs du projet. L'architecte est responsable du développement de l'architecture sans avoir besoin de connaître les aspects de modélisation physique ou numérique. Les développeurs utilisent cette architecture pour concevoir des modules physiques et numériques à l'aide des outils mis à disposition, sans avoir besoin de connaître spécifiquement les aspects informatiques. Les différents modules développés permettent de construire des applications. Finalement, les utilisateurs manipulent une application spécifique pour réaliser des études sans avoir besoin de connaître les aspects logiciels. Ce découpage est présenté sur le schéma 12.

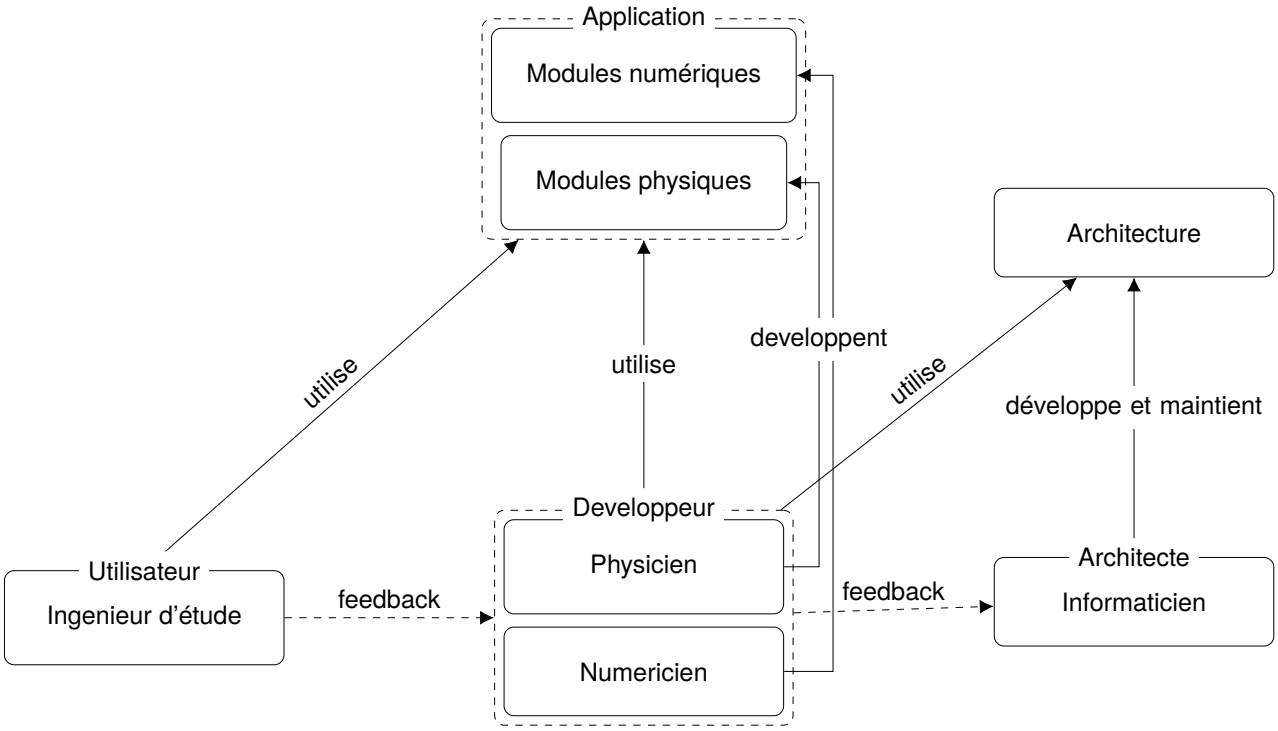


FIGURE 12 – Schéma de l'organisation des acteurs du développement du logiciel SCONE

Dans ce travail de thèse, nous adopterons la position de développeur dans le but de construire l'application micro-SCONE. Cette application sera dédiée à la simulation des phénomènes locaux de l'explosion de vapeur. Nous aurons donc à notre disposition l'architecture existante, dans laquelle la gestion du parallélisme (via la librairie DUNE [4]) ainsi qu'un moteur numérique pour les équations d'Euler compressibles sont déjà en place. Après avoir introduit les équations d'état que nous utiliserons, les aspects numériques seront présentés dans la section 4.3 ainsi que quelques cas tests numériques dans la section 4.3.3.

4.2 Equations d'état

Les équations d'état utilisées dans micro-SCONE seront des équations de type stiffened gas. Elles s'écrivent pour chaque phase k,

$$p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k C_{v,k} T_k - P_{\infty,k} \tag{4.2.1}$$

$$e_k = C_{v,k} T_k + \frac{P_{\infty,k}}{\rho_k} + q_k \tag{4.2.2}$$

et permettent de lier p_k la pression, T_k la température, e_k l'énergie interne spécifique et ρ_k la densité de chaque composant. Les coefficients γ_k, $C_{v,k}$, $P_{\infty,k}$ et q_k employés seront généralement rappelés, ils sont souvent choisis de manière à réaliser des cas de calculs identifiés de la littérature. Dans le cas des fluides d'intérêt, ces coefficients doivent être déterminés de manière à restituer l'état thermodynamique de ces fluides sur une gamme de pressions et températures voulue. La détermination des coefficients pour le corium sera réalisée dans la section 5.3.5.

Concernant le réfrigérant d'intérêt, ici l'eau, nous sommes intéressés par les phénomènes de changement de phase. Il faut alors que les coefficients des phases vapeur et liquide soient liés. Pour cela, [55] proposent une démarche dont le but est d'exprimer les coefficients des phases vapeur et liquide d'un fluide en se basant sur sa courbe de saturation. On retiendra qu'il faut dans un premier temps déterminer une expression analytique de la fonction de saturation, qui définit la courbe dans

4. https ://www.dune-project.org/

l'espace (p,T) à laquelle la vapeur et le liquide d'un composant sont à l'équilibre thermodynamique, en fonction des coefficients des deux phases. Il faut ensuite déterminer les coefficients qui permettent de faire correspondre la fonction de saturation et la courbe de saturation expérimentale.
Dans notre cadre, nous faisons le choix d'utiliser la formulation proposée par Saurel et al. [41] qui a démontré des capacités intéressantes pour différents problèmes de changement de phase [56]. La fonction de saturation f_{sat} liant p et T sur la courbe de saturation telle que $f_{sat}(p,T) = 0$ s'exprime de la manière suivante,

$$f_{sat}(p,T) = \ln\left(\frac{p + P_{\infty,v}}{(p + P_{\infty,l})^D}\right) - \left(A + \frac{B}{T} + C\ln(T)\right) \tag{4.2.3}$$

avec A, B, C et D des paramètres qui dépendent des coefficients des équations d'état. En indiquant par l les coefficients de la phase liquide et v de la phase vapeur, on a :

$$A = \frac{\gamma_l C_{v,l} - \gamma_v C_{v,v} + q'_v - q'_l}{(\gamma_v - 1)C_{v,v}}, B = \frac{q_l - q_v}{(\gamma_v - 1)C_{v,v}}, C = \frac{\gamma_v C_{v,v} - \gamma_l C_{v,l}}{(\gamma_v - 1)C_{v,v}}, D = \frac{(\gamma_l - 1)C_{v,l}}{(\gamma_v - 1)C_{v,v}} \tag{4.2.4}$$

Lorsque p et T vérifient $f_{sat}(p,T) = 0$ on écrira alors p_{sat} et T_{sat}. Les coefficients des paramètres des SG EOS (Stiffened Gas Equation Of State) de l'eau vapeur et liquide retenus pour approcher la courbe de saturation sont,

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$q(J.kg^{-1})$	$q'(J.kg^{-1}.K^{-1})$
Liquide	3.423	1231.2	8.99×10^8	-1.15×10^6	0
Vapeur	1.358	1247	0	1.97×10^6	-3.56×10^4

TABLE 2 – Paramètres des SG EOS de l'eau liquide et sa vapeur

Ainsi, la courbe de saturation obtenue avec la formulation analytique 4.2.3 est présentée sur la figure 13, avec un zoom sur la zone autour de 373 K qui est la température de saturation pour de l'eau à pression ambiante,

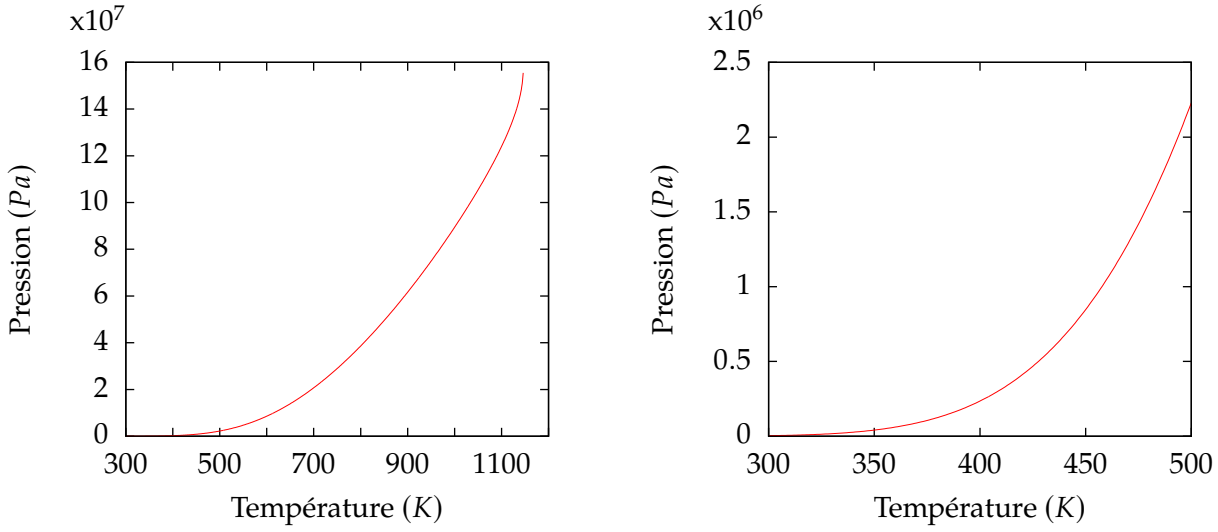


FIGURE 13 – Profils de p_{sat} en fonction de T_{sat}, à gauche sur une large gamme de températures, à droite un zoom autour de 373 K.

Dans les faits, l'interaction corium-réfrigérant peut faire intervenir des fluides plus complexes, dont la connaissance imprécise des différentes propriétés dans la gamme de pression et température rencontrée est une limitation. Ainsi, dans le but de retrouver des comportements quantitatifs, l'utilisation de valeurs tabulées dans micro-SCONE pourra être nécessaire à terme.

4.3 Schéma numérique et résolution

Les modèles à interfaces diffuses sont usuellement résolus avec des schémas de type Godunov [57], basés sur la résolution de problèmes de Riemann. La résolution sous cette forme se justifie par les propriétés mathématiques de certains de ces modèles (hyperbolicité) et les domaines d'applications pour lesquels les ondes de choc font partie des préoccupations principales. Dans ce travail cependant, pour limiter les efforts consacrés au développement d'un schéma numérique spécifique et se focaliser sur la construction de modèles physiques, le choix a été fait d'utiliser le schéma déjà existant dans SCONE. C'est une variante des schémas ICE (Implicit Continuous Eulerian) [58] sous une formulation explicite. Cette formulation est possible grâce aux équilibres en pression et en vitesse des modèles qui nous intéressent.

Les propriétés mathématiques de ce schéma numérique ne feront pas partie de nos préocupations, la possibilité d'en changer étant toujours envisageable pour de futurs travaux. Cependant, nous prendrons le soin d'identifier les conséquences liées à l'utilisation de ce schéma dans le but de pouvoir distinguer les aspects numériques des aspects physiques lors de l'interprétation de résultats de calcul.

4.3.1 Description temporelle

Dans le formalisme volumes finis, on écrira, après intégration sur un volume de maille, les équations bilans discrètes sous la forme générale suivante,

$$Q^{n+1} = Q^n + \Delta t \left(\mathcal{A}_{equ}(\Pi^*, \overrightarrow{u}^*) + \mathcal{P}_{equ}(\Pi^*, \overrightarrow{u}^*) + \dot{\mathcal{Q}}_{equ}(\Pi^*) \right) \tag{4.3.1}$$

avec Q la quantité évoluée, equ le nom de l'équation bilan utilisée QDM, m ou e avec les indices k si ce sont des équations bilans phasiques. $\mathcal{A}$ et $\mathcal{P}$ sont les opérateurs correspondant à l'advection et aux effets compressibles. $\dot{\mathcal{Q}}$ est l'ensemble des termes sources, Π l'ensemble des quantités thermodynamiques (de mélange et phasiques) et $\overrightarrow{u}$ le vecteur vitesse. L'exposant $*$ représente l'itération à laquelle est évaluée la quantité correspondante : n ou $n+1$. Par exemple, si Q est la quantité évoluée de l'itération n à l'itération $n+1$ avec l'équation bilan de masse de mélange,

$$m^{n+1} = m^n + \Delta t \left(\mathcal{A}_m(\Pi^*, \overrightarrow{u}^*) + \mathcal{P}_m(\Pi^*, \overrightarrow{u}^*) + \dot{\mathcal{Q}}_m(\Pi^*) \right) \tag{4.3.2}$$

La description temporelle du schéma numérique employé consiste alors à obtenir $\overrightarrow{u}^{n+1}$ via une formulation complètement explicite en temps de l'équation bilan de quantité de mouvement,

$$\overrightarrow{u}^{n+1} = \overrightarrow{u}^n + \Delta t \left(\mathcal{A}_{QDM}(\Pi^n, \overrightarrow{u}^n) + \mathcal{P}_{QDM}(\Pi^n, \overrightarrow{u}^n) + \dot{\mathcal{Q}}_{QDM}(\Pi^n) \right) \tag{4.3.3}$$

L'évolution de l'ensemble des autres quantités Q via une équation bilan sera ensuite de la forme,

$$Q^{n+1} = Q^n + \Delta t \left(\mathcal{A}_{equ \neq QDM}(\Pi^n, \overrightarrow{u}^{n+1}) + \mathcal{P}_{equ \neq QDM}(\Pi^n, \overrightarrow{u}^{n+1}) + \dot{\mathcal{Q}}_{equ \neq QDM}(\Pi^n) \right) \tag{4.3.4}$$

Les quantités qui décrivent le mélange seront obtenues en priorité, suivies par les quantités phasiques. La correspondance entre les équations utilisées et les quantités évoluées par notre schéma est décrite dans le tableau 3.

Equation :	QDM	m	e	m_k	e_k	α_k
Inconnue Q :	$\overrightarrow{u}$	m	i	m_k	i_k	V_k

Table 3 – Correspondances entre le nom des équations bilan et la quantité évoluée dans notre schéma

Il faut remarquer que les équations bilans d'énergie sont résolues en énergie interne i, c'est-à-dire sous une forme qui n'assure pas la conservativité locale de l'énergie totale. Bien que nécessaire pour la résolution explicite proposée, cette spécificité a des conséquences que nous présenterons dans la section 4.3.3.

L'étape de résolution des équations bilans nous permet d'obtenir $\overrightarrow{u}^{n+1}$ et une partie de Π^{n+1}, mais il reste des quantités à déterminer. Elles sont obtenues par la résolution d'un système d'équations algébrique non linéaire qui doit assurer que toutes les équations qui décrivent la thermodynamique sont respectées au temps $n+1$,

$$\Pi^{n+1} = f_{thermo}(\Pi^{n+1}) \tag{4.3.5}$$

Ce système est composé des EOS, des relations liant les quantités phasiques et quantités de mélange le cas échéant ainsi que les expressions obtenues à partir des équilibres thermodynamiques considérés. C'est à dire que l'on cherche à déterminer l'état thermodynamique au sein d'un volume fermé contraint par les quantités évoluées (qui ne doivent pas être altérées par cette étape). A l'aide des substitutions adaptées, ce système d'équations est généralement solvable directement. Dans le cas contraire, la résolution d'un système multivariable sera envisagée.

Finalement, le schéma 4.3.1 présente l'algorithme de résolution dans le cas d'un mélange seul, c'est le cas monophasique usuel.

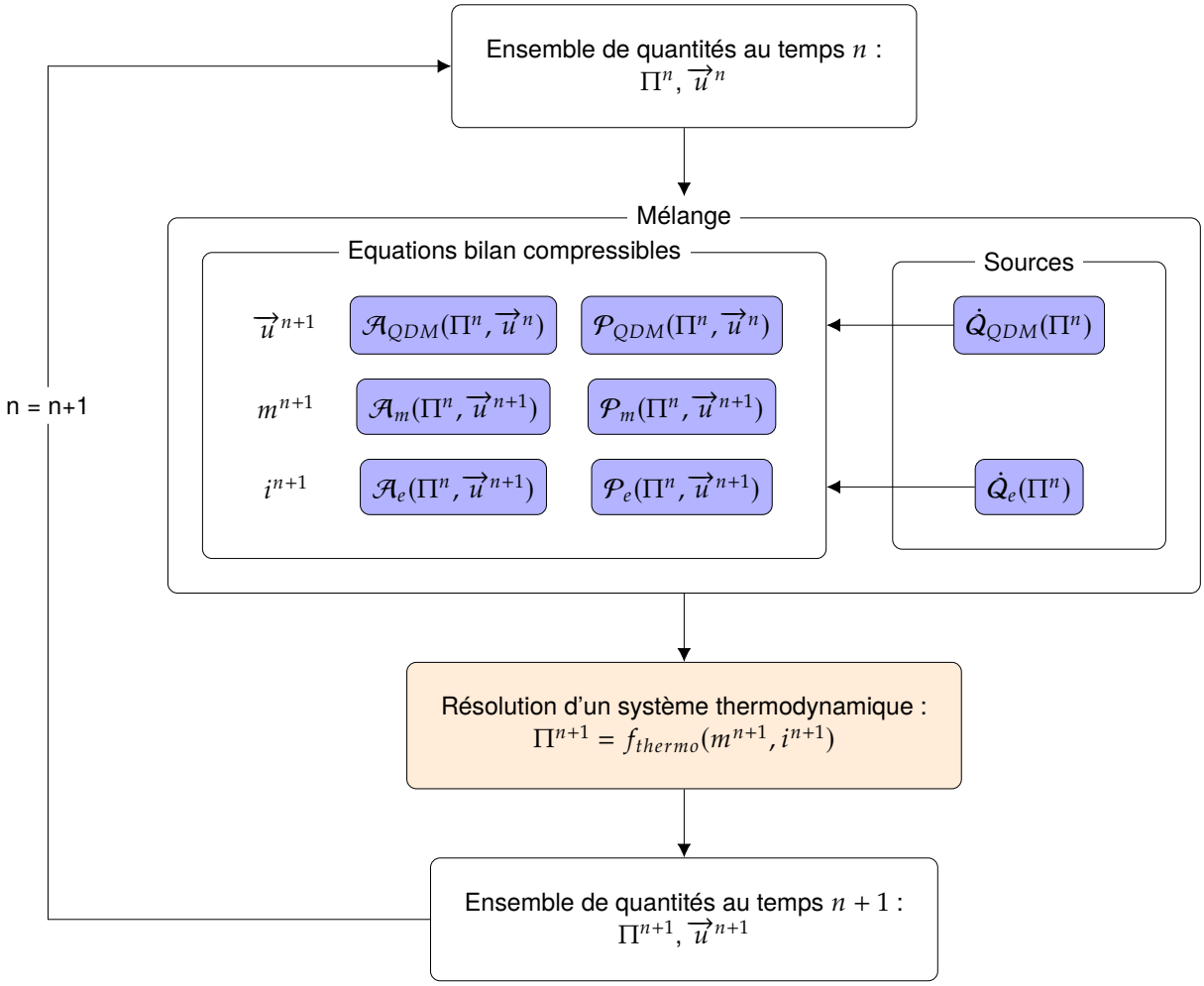


FIGURE 14 – Description de l'algorithme de résolution d'un modèle monophasique usuel

Les boites bleues sont chacunes des modules indépendants, c'est à l'utilisateur de les disposer d'une manière adéquate avec la résolution de son problème. Le *moteur numérique* est la prise en compte des effets d'advection et des effets compressibles, sans termes sources. Le moteur numérique pour résoudre les équations d'Euler monophasiques était déjà existant dans la version de SCONE sur

laquelle se base le développement de micro-SCONE. La prise en compte de tout élément supplémentaire relève de la production réalisée pendant ces travaux de thèse. En particulier les équations phasiques et la prise en compte de termes sources.

Dans le cas d'un mélange et d'un ensemble d'équations bilans phasiques, l'algorithme de résolution est présenté sur le schéma 4.3.1,

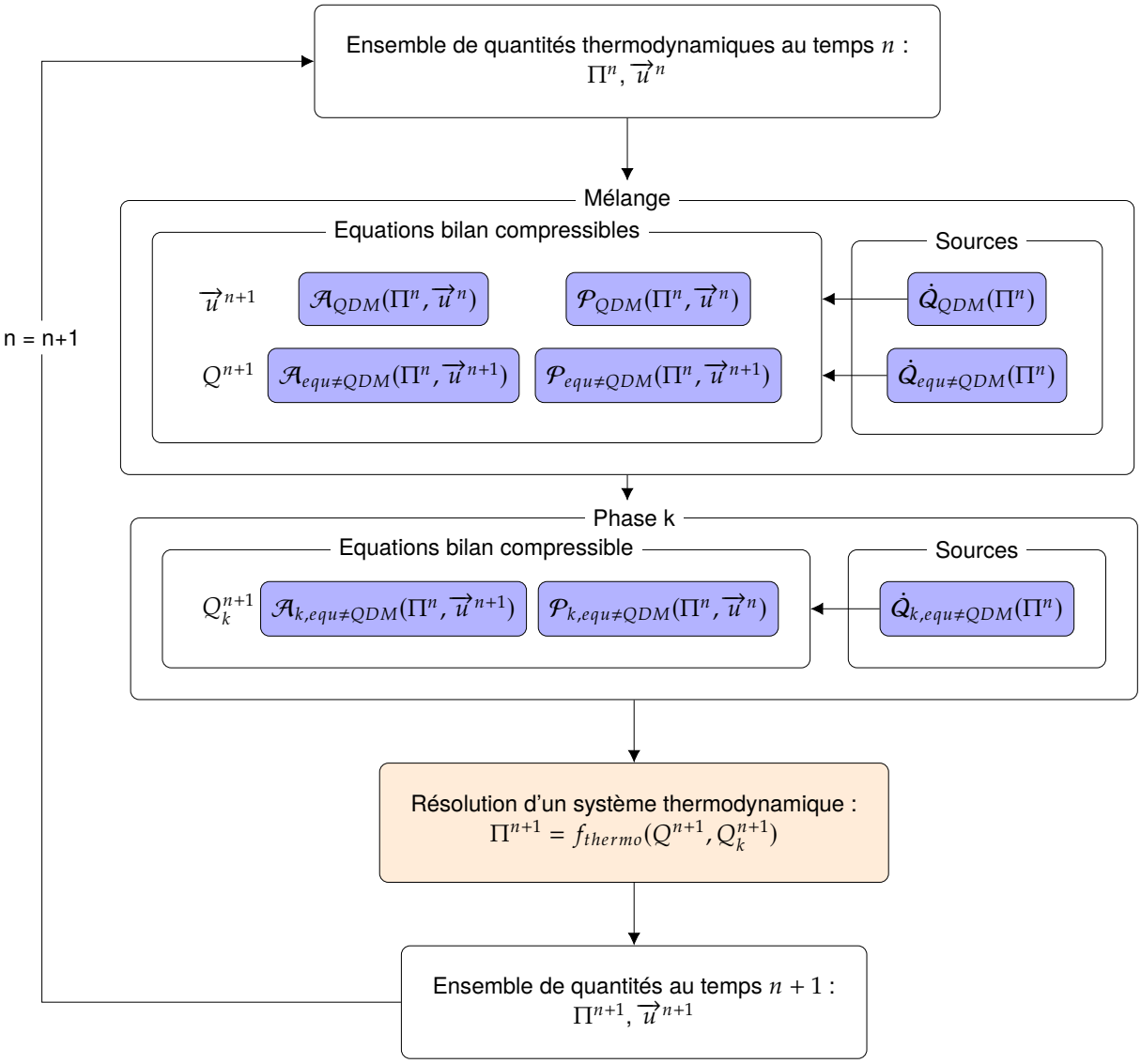


FIGURE 15 – Description de l'algorithme de résolution d'un modèle multiphasique à interface diffuse général

4.3.2 Discrétisation spatiale

Le schéma ICE est un schéma à grilles décalées, c'est-à-dire que les quantités thermodynamiques sont représentées au centre d'une maille et les vitesses normales aux faces. Le schéma 16 illustre la position de ces degrés de liberté. Cette famille de schémas a été proposée pour simuler des écoulements compressibles pour tous régimes de Mach [58]. En particulier, ils tendent dans la limite faible Mach vers la discrétisation MAC bien connue pour les écoulements incompressibles. Ils sont appréciés dans l'industrie pour la compatibilité naturelle des opérateurs gradient et divergence dans le formalisme volumes finis. Ils présentent l'avantage de pouvoir être étendus facilement à des physiques variées [59, 60, 61].

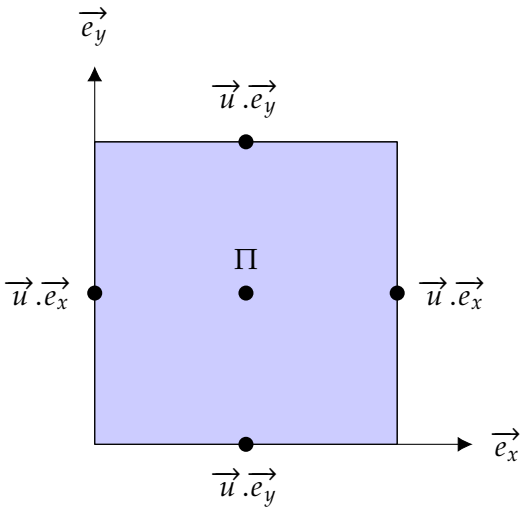


FIGURE 16 – Description discrète, les quantités thermodynamiques sont au centre d'une maille, les vitesse normales sur les faces.

Dans nos travaux, le maillage sera toujours cartésien et régulier. Les notations que nous utiliserons pour décrire la discrétisation spatiale seront génériques dans ce formalisme, ce qui permet une implémentation naturellement multi-D. Dans cette section, nous ne présenterons que la forme discrète des effets d'advection et des effets compressibles. Les termes sources, spécifiques aux modèles et phénomènes physiques pris en compte, seront présentés dans les parties concernées.

Nous allons donc présenter la discrétisation des équations de conservation suivantes,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho \overrightarrow{u}) = 0 \tag{4.3.6a}$$

$$\frac{\partial \rho \overrightarrow{u}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\rho \overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{u} + p\underline{\underline{I}}) = 0 \tag{4.3.6b}$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\rho e \overrightarrow{u}) - p\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u}) = 0 \tag{4.3.6c}$$

qui sont les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie interne monophasiques compressibles classiques. Elles correspondront aux équations bilans pour le mélange en multiphasique. Ce sont les équations bilans déjà existantes dans SCONE qui sont reprises pour le développement de micro-SCONE.

Pour écrire les formulations discrètes des équations bilans sous une forme générale, on introduit les notions suivantes,

- $\mathcal{D}^{cells}$ est le domaine discret qui représente l'ensemble des mailles,
- $\overrightarrow{x_c}$ et $\overrightarrow{x_f}$ sont les positions dans le repère $(\overrightarrow{e_x}, \overrightarrow{e_y}, \overrightarrow{e_z})$ respectivement du milieu d'une maille c et du milieu d'une face f,
- $\mathcal{F}(c)$ est l'ensemble des faces de la maille c,
- $\mathcal{N}^{cells}(c)$ est l'ensemble des mailles qui partagent une unique face avec la maille c, on parlera du voisinage de c,
- $\mathcal{N}^{faces}(f)$ est l'ensemble des faces qui partagent une unique arête avec la face f, on parlera du voisinage de f.

Soit c une maille du domaine discret, soit $d \in \mathcal{N}^{cells}(c)$, alors on définit $cd = \mathcal{F}(c) \bigcap \mathcal{F}(d)$ la face séparant c et d. Une quantité thermodynamique $\pi^n \in \Pi^n$ est alors interpolée sur une face de la manière suivante,

$$\widehat{\pi}^n_{cd} = \frac{\pi^n_c + \pi^n_d}{2} \tag{4.3.7}$$

on parlera alors de la valeur duale de π^n sur cd. Les normales à une face dans différents repères sont,

— $\overrightarrow{n}^G_f$ la normale à la face f dans le repère global, $\overrightarrow{n}^G_f \in (\overrightarrow{e_x}, \overrightarrow{e_y}, \overrightarrow{e_z})$ on définit $\overrightarrow{\tau}^G_{i,f}$ comme étant l'un des vecteurs orthogonaux à $\overrightarrow{n}^G_f$ dans le repère global, $\overrightarrow{\tau}^G_{i,f} \in (\overrightarrow{e_x}, \overrightarrow{e_y}, \overrightarrow{e_z})$ tel que $\overrightarrow{\tau}^G_{i,f}.\overrightarrow{n}^G_f = 0$,

— $\overrightarrow{n}_{cd}$ la normale à la face cd dirigée de c vers d, ainsi $\overrightarrow{n}_{cd} = -\overrightarrow{n}_{dc}$.

L'équation de quantité de mouvement :
L'équation de quantité de mouvement est une équation vectorielle. En faisant le choix d'un degré de liberté scalaire aux faces pour la vitesse, on cherche à déterminer la quantité $(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cd}$ à la face cd. L'évolution de ce degré de liberté est obtenue par projection de l'équation 4.3.6b sur $\overrightarrow{n}^G_{cd}$. Dans le cas d'un maillage cartésien, $(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cd}$ correspond en fait à l'une des composantes du vecteur vitesse dans le repère cartésien $(\overrightarrow{e_x}, \overrightarrow{e_y}, \overrightarrow{e_z})$. C'est une écriture générale qui correspond à u_x, u_y ou u_z en fonction de la face considérée. La discrétisation correspond alors simplement à une application de la méthode des différences finies en choisisant d'évaluer les dérivées de facon décentrée amont (upwind) pour les termes d'advection et centrée pour les forces de pression.

On définit la notion d'upwind pour une quantité thermodynamique $\pi \in \Pi$ au centre évaluée à la face, comme étant,

$$(\pi)^{upw}_{cd} = \pi_c \mathcal{I}^{upw}_{cd,n_{cd}} + (1 - \mathcal{I}^{upw}_{cd,n_{cd}})\pi_d \tag{4.3.8}$$

avec $\mathcal{I}^{upw}_{cd,n_{cd}}$ l'indicatrice d'upwinding sur cd dans la direction $\overrightarrow{n}_{cd}$, définie comme,

$$\mathcal{I}^{upw}_{cd,n_{cd}} = 0.5\left(1 + \frac{(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})_{cd}}{\| (\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})_{cd} \|}\right) \tag{4.3.9}$$

avec $(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})_{cd}$ la vitesse normale à la face cd dirigée vers l'extérieur de c. Cette expression est valable dans le cas ou $(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})_{cd} \neq 0$, dans le cas contraire on aura $\mathcal{I}^{upw}_{cd,n_{cd}} = 1$ si $\| \overrightarrow{x_c} \| < \| \overrightarrow{x_d} \|$ ou $\mathcal{I}^{upw}_{cd,n_{cd}} = 0$ si $\| \overrightarrow{x_c} \| > \| \overrightarrow{x_d} \|$.

Ainsi, la vitesse normale sur une face cd est obtenue par l'expression,

$$\begin{aligned}(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^{n+1}_{cd} =& (\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^n_{cd} - \frac{\Delta t}{\widetilde{\rho}^n_{cd}}\left(\frac{p^n_d - p^n_c}{(\overrightarrow{x_d} - \overrightarrow{x_c}).\overrightarrow{n}^G_{cd}} + \frac{v^n_d - v^n_c}{(\overrightarrow{x_d} - \overrightarrow{x_c}).\overrightarrow{n}^G_{cd}}\right) \\ &- \frac{\Delta t}{\widetilde{\rho}^n_{cd}}\left((\rho^n)^{upw}_{cd}\,(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^n_{cd}\left(\frac{(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^n_{cd} - (\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^{n,upw}_{cd,\|}}{(\overrightarrow{x_{cd}} - \overrightarrow{x_{cd,\|}}).\overrightarrow{n}^G_{cd}}\right)\right) \\ &- \frac{\Delta t}{\widetilde{\rho}^n_{cd}}\left(\sum_i (\rho^n)^{upw}_{cd}\,(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{\tau}^G_i)^n_{cd}\left(\frac{(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^n_{cd} - (\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^{n,upw}_{cd,\tau_i}}{(\overrightarrow{x_{cd}} - \overrightarrow{x_{cd,\tau_i}}).\overrightarrow{n}^G_{cd}}\right)\right)\end{aligned} \tag{4.3.10}$$

avec :

- ν la viscosité artificielle, qui intervient pour des raisons de stabilité et s'exprime,

$$\begin{aligned}\nu^n_c =& 0.5 * C_q(\gamma+1)\rho^n_c * min\left(\mathcal{L} * \sum_{d \in \mathcal{N}^{cells}(c)} \frac{\overrightarrow{u}^{n-1}_{cd} + \overrightarrow{u}^n_{cd}}{2V_c}.\overrightarrow{n}_{cd}, 0\right)^2 \\ &- C_l \rho^n_c c^n_{s,c} * \mathcal{L} * \sum_{d \in \mathcal{N}^{cells}(c)} \frac{\overrightarrow{u}^{n-1}_{cd} + \overrightarrow{u}^n_{cd}}{2V_c}.\overrightarrow{n}_{cd}\end{aligned} \tag{4.3.11}$$

avec C_q, C_l des coefficient pour le mélange que nous fixerons à $C_l = 0.5$ et $C_q = 0.5$ d'après [62]. Pour un mélange ou γ n'a pas forcément de valeur spécifiée, on choisit la valeur $\gamma = 2$. $\mathcal{L}$ est

une longueur caractéristique que nous évaluerons à $\mathcal{L} = \frac{V_c}{\Delta x}$ avec V_c le volume de la maille c et Δx la distance entre deux centres de mailles dans une direction du repère $(\overrightarrow{e_x}, \overrightarrow{e_y}, \overrightarrow{e_z})$. Cette distance est constante dans chaque direction avec un maillage cartésien régulier. c_s est la plus grande vitesse du son phasique,

$$c_s = max_k\,(c_k) \tag{4.3.12}$$

avec c_k la vitesse du son phasique de la phase k. Dans le cas des équations d'état stiffened gas utilisées, son expression est,

$$c_k = \sqrt{\frac{\gamma_k(p + P_{\infty,k})}{\rho_k}} \tag{4.3.13}$$

- $(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^{n,upw}_{cd,\|}$ et $\overrightarrow{x_{cd,\|}}$ tels que,

$$(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^{n,upw}_{cd,\|} = (\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^{n}_{cd'}\mathcal{I}^{n,upw}_{cd,n_{cd}} + (1 - \mathcal{I}^{n,upw}_{cd,n_{cd}})(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^{n}_{dc'} \tag{4.3.14}$$

$$\overrightarrow{x_{cd,\|}} = \overrightarrow{x_{cd'}}\mathcal{I}^{n,upw}_{cd,n_{cd}} + (1 - \mathcal{I}^{n,upw}_{cd,n_{cd}})\overrightarrow{x_{dc'}} \tag{4.3.15}$$

où $d' \in \mathcal{N}^{cells}(c)$ tel que $\overrightarrow{n}_{cd'}.\overrightarrow{n}_{cd} \neq 0$ et $c' \in \mathcal{N}^{cells}(d)$ tel que $\overrightarrow{n}_{dc'}.\overrightarrow{n}_{cd} \neq 0$. Autrement dit, $(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^{n,upw}_{cd,\|}$ est la vitesse dans la direction $\overrightarrow{n}_{cd}$ prise sur la face parallèle à cd selon l'upwind normal, et $\overrightarrow{x_{cd,\|}}$ la position de cette face.

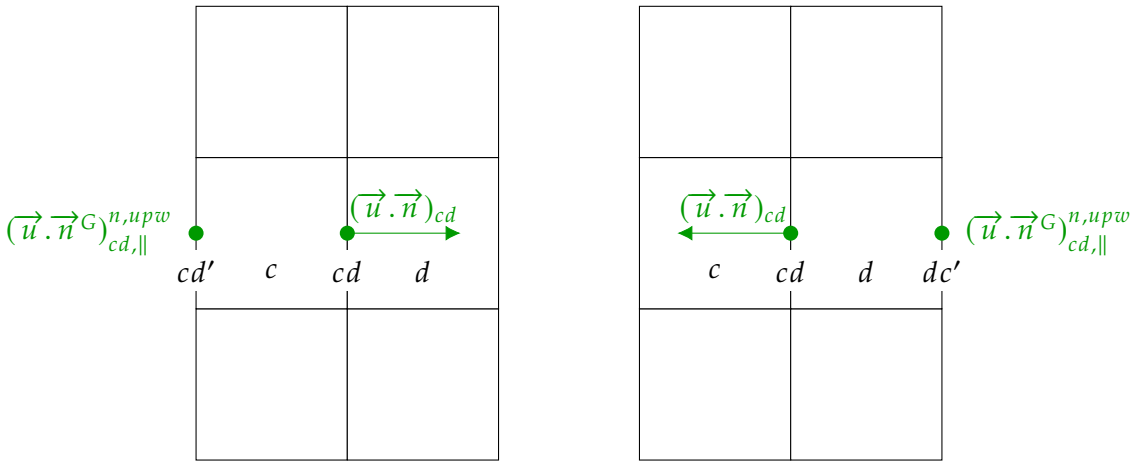


FIGURE 18 – **Représentation schématique d'un stencil discret 2D pour décrire la position de la vitesse upwind parallèle. C'est la vitesse normale dans le repère global sur la face de c parallèle à cd si la vitesse normale sur cd est sortante, et sur la face de d parallèle à cd si la vitesse normale sur cd est entrante.**

- $(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{\tau}^G_i)^n_{cd}$ tel que,

$$(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{\tau}^G_i)^n_{cd} = \frac{\sum_{c'\in\mathcal{N}^{cells}(c)}(\rho^n)^{upw}_{cc'}\,(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^n_{cc'}\,\|\,\overrightarrow{n}^G_{cc'}.\overrightarrow{\tau}^G_i\,\| + \sum_{d'\in\mathcal{N}^{cells}(d)}(\rho^n)^{upw}_{dd'}\,(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^n_{dd'}\,\|\,\overrightarrow{n}^G_{dd'}.\overrightarrow{\tau}^G_i\,\|}{\sum_{c'\in\mathcal{N}^{cells}(c)}(\rho^n)^{upw}_{cc'} + \sum_{d'\in\mathcal{N}^{cells}(d)}(\rho^n)^{upw}_{dd'}} \tag{4.3.16}$$

c'est une moyenne pondérée de la vitesse aux différentes faces du voisinage de cd qui lui sont orthogonales. Cela représente une évaluation de la vitesse du fluide dans la direction $\overrightarrow{\tau}_i$ en cd.

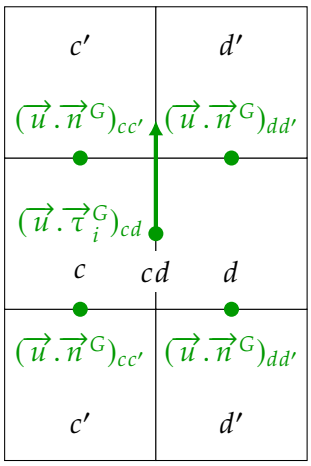


FIGURE 19 – **Représentation schématique d'un stencil discret 2D pour décrire la vitesse transverse sur cd. C'est une pondération des vitesses normales sur les faces orthogonales à cd dans son voisinage.**

- $(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^{n,upw}_{cd,\tau_i}$ et $\overrightarrow{x_{cd,\tau_i}}$ tels que,

$$(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^{n,upw}_{cd,\tau_i} = (\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^n_{f^-}\mathcal{I}^{n,upw}_{cd,\tau_i^G} + (1-\mathcal{I}^{n,upw}_{cd,\tau_i^G})(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^n_{f^+} \tag{4.3.17}$$

$$\overrightarrow{x_{cd,\tau_i}} = \overrightarrow{x_{f^-}}\mathcal{I}^{n,upw}_{cd,\tau_i^G} + (1-\mathcal{I}^{n,upw}_{cd,\tau_i^G})\overrightarrow{x_{f^+}} \tag{4.3.18}$$

avec $\mathcal{I}^{upw}_{cd,\tau_i}$ l'indicatrice d'upwind transverse définie comme étant,

$$\mathcal{I}^{upw}_{cd,\tau_i^G} = 0.5\left(1+\frac{(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{\tau}_i^G)_{cd}}{\parallel(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{\tau}_i^G)_{cd}\parallel}\right) \tag{4.3.19}$$

si $(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{\tau}_i^G)_{cd} \neq 0$ et $\mathcal{I}^{upw}_{cd,\tau_i^G} = 1$ si $\parallel\overrightarrow{x_{f^-}}\parallel<\parallel\overrightarrow{x_{f^+}}\parallel$ ou $\mathcal{I}^{upw}_{cd,\tau_i^G} = 0$ si $\parallel\overrightarrow{x_{f^+}}\parallel>\parallel\overrightarrow{x_{f^+}}\parallel$. Les faces f^+ et f^- sont les faces qui vérifient,

$$f^+ \in \mathcal{N}^{faces}(cd) \,/\, \overrightarrow{n}^G_{f^+}.\overrightarrow{n}^G_{cd} \neq 0 \; et \; (\overrightarrow{x_{f^+}}-\overrightarrow{x_{cd}}).\overrightarrow{\tau}^G_i > 0$$

$$f^- \in \mathcal{N}^{faces}(cd) \,/\, \overrightarrow{n}^G_{f^-}.\overrightarrow{n}^G_{cd} \neq 0 \; et \; (\overrightarrow{x_{f^-}}-\overrightarrow{x_{cd}}).\overrightarrow{\tau}^G_i < 0$$

Autrement dit, $(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^{n,upw}_{cd,\tau_i}$ est la vitesse dans la direction $\overrightarrow{n}^G_{cd}$ prise à la face du même plan selon l'upwind donné par la vitesse transverse.

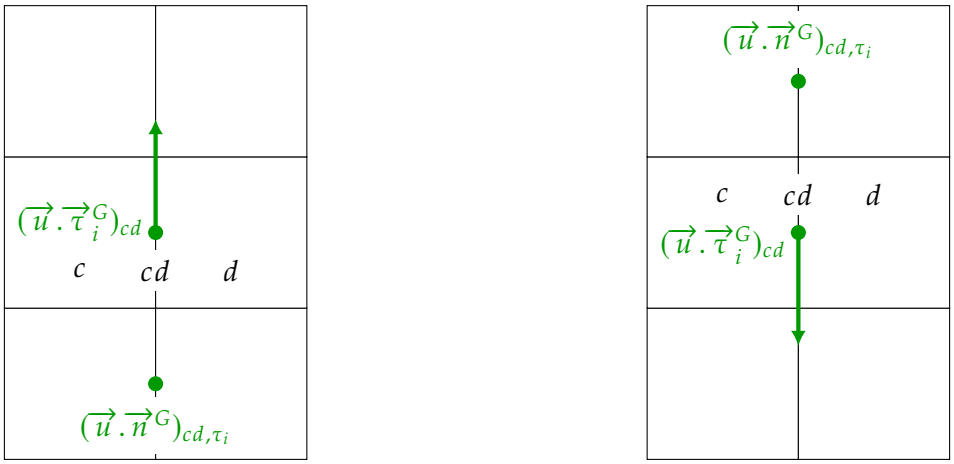


FIGURE 21 – **Représentation schématique d'un stencil discret 2D pour décrire la position de la vitesse upwind transverse. C'est la vitesse normale dans le repère global à la face dans l'entourage de cd de même normale prise en upwind selon la vitesse transverse en cd.**

Les autres équations bilans :
Les formulations discrètes des équations bilans qui concernent des quantités au centre d'une maille s'obtiennent de manière beaucoup plus directe. Elles sont ici présentées sous une écriture proche de l'implémentation qui provient directement de l'application des volumes finis upwind.

— **Masse de mélange :**

$$m_c^{n+1} = \rho_c^n V_c^n - \Delta t \sum_{cd} \left(\rho^n\right)_{cd}^{upw} \left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}\right)_{cd}^{n+1} S_{cd} \tag{4.3.20}$$

avec S_{cd} la surface de la face cd et où S_{cd} est la surface de la face cd.

— **Energie interne de mélange :**

$$i_c^{n+1} = \rho_c^n e_c^n V_c^n - \Delta t \sum_{cd} \left(\rho^n e^n\right)_{cd}^{upw} \left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}\right)_{cd}^{n+1} S_{cd} - \Delta t \left(p_c^n + v_c^n\right) \sum_{cd} \frac{\left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}\right)_{cd}^{n} + \left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}\right)_{cd}^{n+1}}{2} S_{cd} \tag{4.3.21}$$

En reprenant la notation sous forme d'opérateurs $\mathcal{A}$ et $\mathcal{P}$, les correspondances sont résumées dans les tableaux 4 et 5,

Equation	Degré de liberté	$\mathcal{A}$
QDM	$\left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}^G\right)_{cd}^{n+1}$	$-\frac{\Delta t}{\widetilde{\rho}_{cd}^n}\left(\left(\rho^n\right)_{cd}^{upw}\left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}^G\right)_{cd}^n\left(\frac{\left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}^G\right)_{cd}^n - \left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}^G\right)_{cd,\|}^{n,upw}}{\left(\overrightarrow{x_{cd}} - \overrightarrow{x_{cd,\|}}\right) . \overrightarrow{n}_{cd}^G}\right)\right)$ $-\frac{\Delta t}{\widetilde{\rho}_{cd}^n}\left(\sum_i \left(\rho^n\right)_{cd}^{upw}\left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{\tau}_i^G\right)_{cd}^n\left(\frac{\left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}^G\right)_{cd}^n - \left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}^G\right)_{cd,\tau_i}^{n,upw}}{\left(\overrightarrow{x_{cd}} - \overrightarrow{x_{cd,\tau_i}}\right) . \overrightarrow{n}_{cd}^G}\right)\right)$
m	m_c^{n+1}	$-\sum_{cd}\left(\rho^n\right)_{cd}^{upw}\left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}\right)_{cd}^{n+1} S_{cd}$
e	i_c^{n+1}	$-\sum_{cd}\left(\rho^n e^n\right)_{cd}^{upw}\left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}\right)_{cd}^{n+1} S_{cd}$

TABLE 4 – Correspondances des opérateurs d'advection $\mathcal{A}$

Equation	Degré de liberté	$\mathcal{P}$
QDM	$\left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}^G\right)_{cd}^{n+1}$	$-\frac{1}{\widetilde{\rho}_{cd}^n}\left(\frac{p_d^n - p_c^n}{\left(\overrightarrow{x_d} - \overrightarrow{x_c}\right) . \overrightarrow{n}_{cd}^G} + \frac{v_d^n - v_c^n}{\left(\overrightarrow{x_d} - \overrightarrow{x_c}\right) . \overrightarrow{n}_{cd}^G}\right)$
m	m_c^{n+1}	0
e	i_c^{n+1}	$-\left(p_c^n + v_c^n\right)\sum_{cd}\frac{\left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}\right)_{cd}^n + \left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}\right)_{cd}^{n+1}}{2} S_{cd}$

TABLE 5 – Correspondances des opérateurs d'effets compressibles $\mathcal{P}$

L'implémentation dans l'outil micro-SCONE présente le même aspect générique que les formulations présentées. Les cas 1D présentés seront en fait toujours des cas 2D, dont la dimension orthogonale est 1 maille de $0.01m$ de hauteur.
La stabilité du schéma numérique est gérée en déterminant le pas de temps Δt de manière à vérifier l'expression suivante,

$$max_{c \in \mathcal{D}^{cells},\, d \in \mathcal{N}^{cells}(c)} \left(\| \left(\overrightarrow{u} . \overrightarrow{n}^G\right)_{cd}^n \| + c_{s,c}^n \right) \Delta t = CFL \Delta x \tag{4.3.22}$$

On dira alors que l'on vérifie le critère CFL si $CFL < 0.5$. Une sécurité sur la valeur de la CFL sera généralement employée mais ne sera pas nécessairement spécifiée.

Le schéma numérique présenté est d'ordre 1 en espace à cause de la représentation constante par maille des grandeurs utilisées devant les dérivées des termes d'advection dans le schéma upwind. La diffusion numérique pourra être élevée, ce qui ne présente pas de problématique majeure dans un premier temps. A terme, une reconstruction d'ordre 2 devra être implémentée et permettra de réduire la diffusion numérique.

4.3.3 Tests numériques

Le but de cette section est de présenter le comportement du schéma sur deux tests numériques. Ces tests sont réalisés à l'aide du modèle d'euler compressible monophasique sans terme sources, dont le système d'équation bilan s'écrit 4.3.23,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho \overrightarrow{u}) = 0 \tag{4.3.23a}$$

$$\frac{\partial \rho \overrightarrow{u}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\rho \overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{u}) + \overrightarrow{\nabla}(p) = 0 \tag{4.3.23b}$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho e \overrightarrow{u}) + p\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u}) = 0 \tag{4.3.23c}$$

Les équations d'état sont les équations d'état stiffened gas avec les paramètres suivants, correspondant à un gaz parfait,

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$q(J.kg^{-1})$
Fluide monophasique	1.4	100	0	0

TABLE 6 – Coefficients des équations d'état pour les tests numériques monophasiques

Le premier cas test est un problème de transport de discontinuités de contact, dont la configuration initiale est décrite sur le schéma 22. L'objectif est de s'assurer que le schéma préserve vitesse et pression constantes.

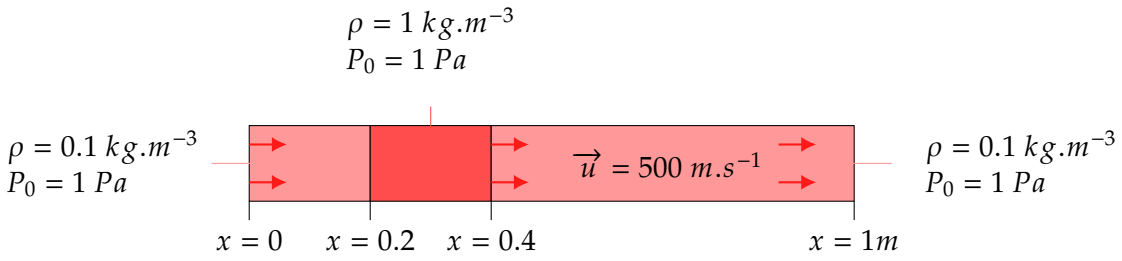


FIGURE 22 – **Configuration du cas test de transport monophasique**

Les résultats sont présentés sur les graphes de la figure 23, Le graphe du bas permet d'illustrer la convergence en maillage avec $\Delta x = 10^{-2}$, $\Delta x = 10^{-3}$ et $\Delta x = 5.10^{-4}$. Les graphes du haut sont présentés pour le maillage le plus fin testé et le pas de temps Δt est déterminé de manière à vérifier le critère CFL.

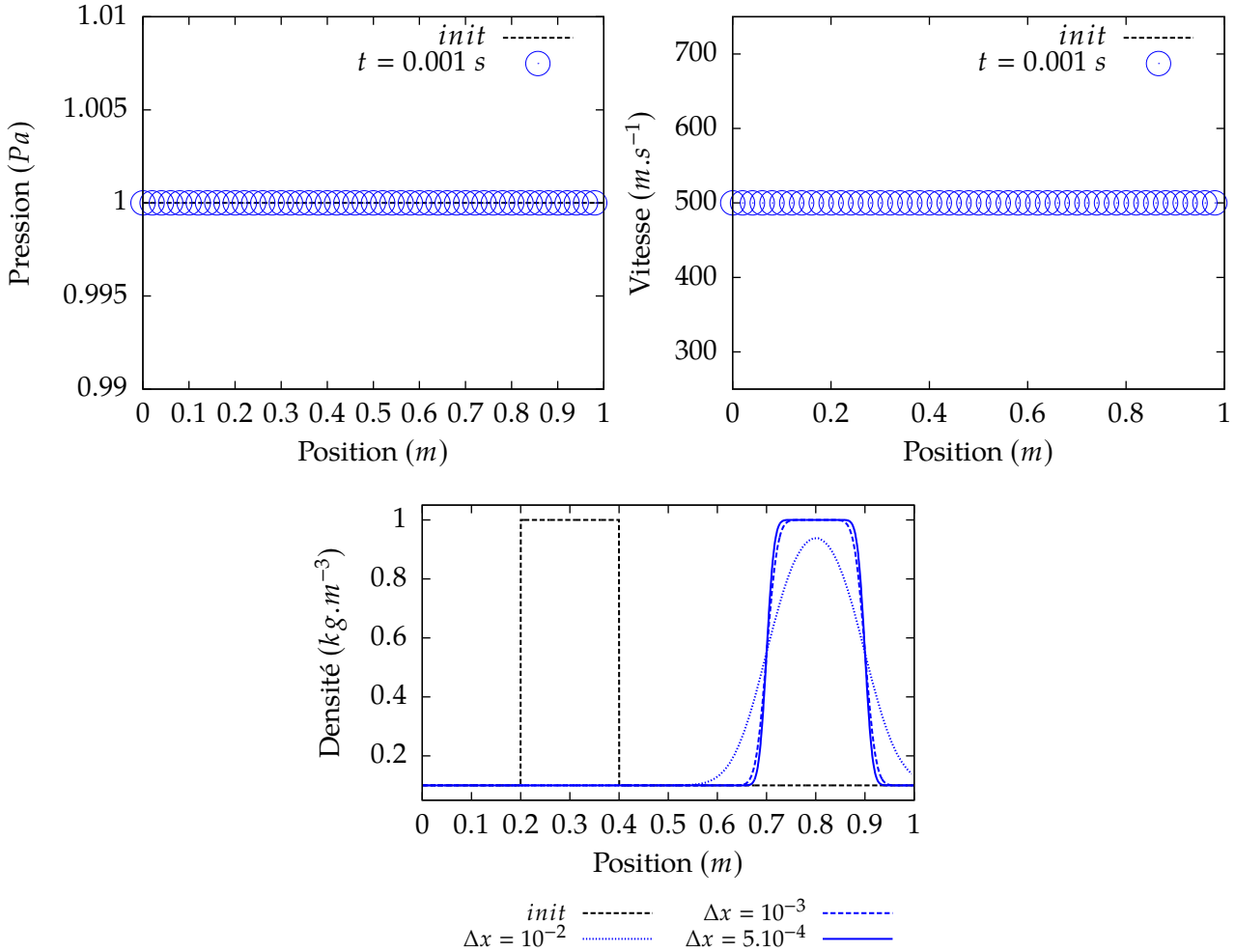


FIGURE 23 – Transport à vitesse constante de discontinuités de contact séparant un fluide avec des densités différentes

Les champs de pression et de vitesse, initialement uniformes, sont conservés. Les discontinuités de contact sont advectées à la vitesse du mélange, sans que les interfaces ne soient altérées par autre chose que la diffusion numérique. La convergence en maillage vers la solution dans laquelle les interfaces sont raides est bien retrouvée. Ces résultats sont conformes aux résultats attendus. La méthode se comporte de manière satisfaisante pour le transport d'interfaces matérielles.

Le second cas test est le cas de tube à choc de Sod [63] dont la configuration initiale est décrite sur le schéma 24,

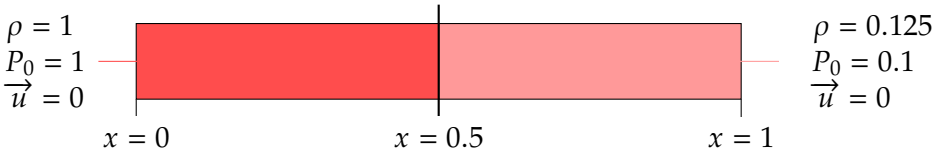


FIGURE 24 – **Configuration du cas test de Sod monophasique**

Les graphes de la figure 25 présentent les profils de densité obtenus. Sur le premier graphe les profils sont tracés pour trois tailles de mailles différentes $\Delta x = 10^{-2}m$, $\Delta x = 10^{-3}m$ et $\Delta x = 10^{-4}m$ de manière à illustrer la convergence en maillage. Sur le second graphe, la solution obtenue avec le maillage le plus fin testé est comparée avec la solution exacte du problème de tube à choc. Le pas de temps est déterminé de manière à assurer une contrainte CFL identique pour chaque maillage.

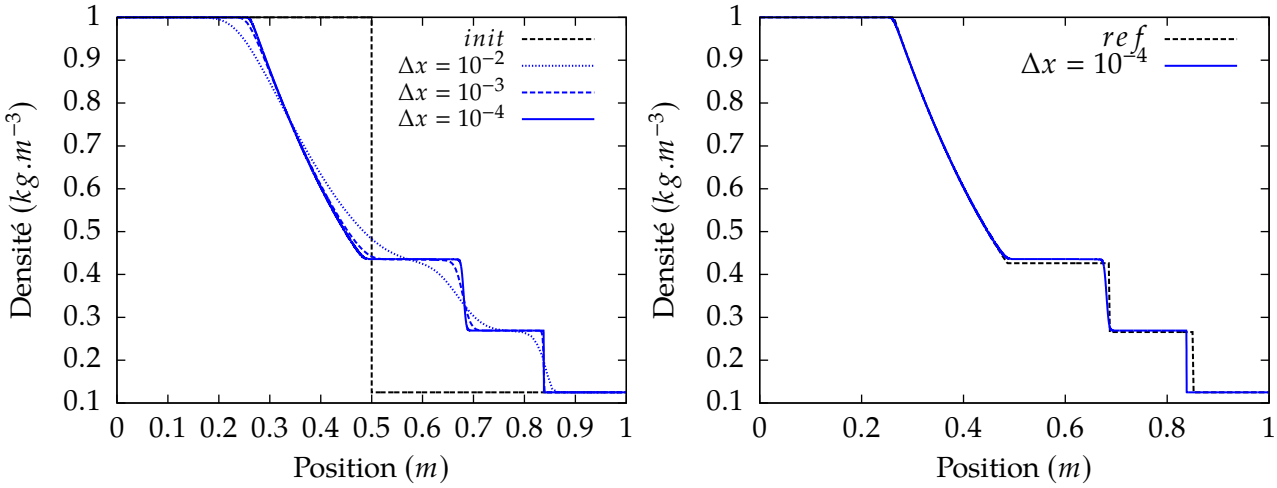


FIGURE 25 – Profils de densité pour le cas test de tube à choc de Sod pour différents maillages en comparaison avec la solution exacte.

Le premier graphe montre que la structure générale d'une solution de tube à choc est retrouvée quelque soit le maillage, à la diffusion des discontinuités près. A gauche de la discontinuité initiale, l'onde de détente se propage dans le milieu. De l'autre côté, la discontinuité de contact est advectée à la vitesse générée par le passage de l'onde de choc en amont. Réduire le pas d'espace permet bien de converger vers une solution. Le second graphe montre que la méthode ne permet pas d'obtenir la solution exacte. En effet, la position du choc et l'état thermodynamique en aval de ce dernier ne sont pas retrouvés, ce qui affecte la position de la discontinuité de contact.

Il faut retenir que cette méthode numérique converge vers une solution, mais cette solution n'est pas la solution exacte du problème de tube à choc. Ce sont les conséquences de la non-conservation de l'énergie totale au niveau discret. Ce comportement est connu dans la littérature [64] et il est possible de le corriger en gardant le même type de résolution en énergie interne et l'équation de quantité de mouvement sous forme non conservative [65, 66, 67]. En appliquant cette technique qui consiste à reporter les résidus numériques liés à la définition de l'énergie cinétique dans l'énergie interne, le schéma peut être rendu conservatif [68]. Cependant, en multiphasique, cette variante implique la perte de la propriété vérifiée dans le cas test précédent, à savoir la préservation d'une pression uniforme dans un champ de vitesse constant.

Nous adoptons l'idée que chaque schéma dispose d'avantages et d'inconvénients plus ou moins significatifs en fonction de l'application visée. Dans notre situation, la précision sur les ondes de choc n'est pas une priorité. Le fait d'être capable de reproduire des comportements raides avec de fortes discontinuités nous apparaît suffisant. Le choix est fait de conserver ce schéma numérique, sachant qu'il sera possible d'en changer si ce défaut apparaît comme un phénomène limitant pour l'étude de l'interaction combustible réfrigérant. En effet, les aspects multiphasiques se retrouvent principalement dans la partie thermodynamique de ces modèles qui, une fois implémentée, sera facilement transposable quelque soit le schéma numérique.

4.4 Multiphasique : introduction à l'approximation d'interface diffuse

Concernant les aspects multiphasiques, il est nécessaire d'aborder quelques spécificités dues à l'approximation d'interface diffuse avant de présenter les cas de calcul et les résultats dans les parties suivantes. Cela permettra entre autres d'introduire le vocabulaire utilisé plus tard.

Par définition, l'interface est la zone de transition entre deux phases pures. Cependant, dans les modèles à interface diffuse, chaque volume contient l'ensemble des phases et il n'existe plus de phase pure. Il est alors nécessaire de préciser la notion d'*interface* qui sera employée dans la suite de ce

travail. De plus, lors du calcul, cette zone de transition n'est pas spécifiquement suivie et n'est pas traitée différemment du reste du modèle. Elle subit donc les effets de diffusion numérique qui vont pouvoir en altérer la taille. Tout ceci peut mener à des difficultés d'interprétation sur la position de l'interface et le comportement qu'on attend des limites phases pures.

En conservant la notion de 'zone de transition', on dira que l'interface est la zone séparant des états particuliers appelés **limites phases pures**. Ce sont des états de l'écoulement qui se rapprochent au mieux de l'état des phases pures correspondantes. Dans les zones en limite phase pure, on souhaite retrouver un comportement monophasique. Cependant, au cours de phénomènes de dynamique rapide, il n'existe pas d'éléments de comparaison qui permettent d'estimer si le comportement obtenu est similaire au comportement monophasique. Ainsi, en pratique, il est communément admis qu'une phase est en limite phase pure lorsque toutes les autres phases sont présentes en quantité très faible dans le volume. Dans ce cas, on dira que les autres phases sont des **phases résiduelles**, présentes en quantités résiduelles.

Néanmoins, la notion de 'présence en quantité très faible' est arbitraire, et il n'y a pas uniformité dans la littérature sur les valeurs utilisées sur la fraction volumique d'une phase résiduelle. De plus, dès lors que l'on traite d'écoulements avec des ratios de densités importants, repérer un fluide en regardant sa proportion massique ou volumique peut mener à des interprétations contradictoires. Pour illustrer ce problème, prenons un écoulement diphasique dans lequel deux phases, k et j, ont un ratio de densités $\mathcal{R} = \rho_k/\rho_j$. Alors, si l'on décide d'initialiser un calcul avec une fraction volumique résiduelle de j à α_j on obtient la fraction massique Y_j de la manière suivante,

$$Y_j = \frac{\alpha_j \rho_j}{\alpha_j \rho_j + \alpha_k \rho_k} \tag{4.4.1}$$

d'où, avec la contrainte de saturation,

$$Y_j = \frac{\alpha_j}{\alpha_j + (1-\alpha_j)\mathcal{R}} \tag{4.4.2}$$

Si on considère la situation où j est la phase résiduelle et k est en limite phase pure, alors α_j est petit devant 1 et si on fait le choix que la phase k est beaucoup plus dense que j alors,

$$Y_j \sim \frac{\alpha_j}{\mathcal{R}} \tag{4.4.3}$$

Ainsi, dans le cas où on traite de forts ratios de densités, le choix de la valeur résiduelle en fraction volumique varie de plusieurs ordres de grandeurs par rapport à la fraction massique. La configuration usuelle dans laquelle on traite d'une phase liquide et d'une phase vapeur avec un ratio de densités, $\rho_l/\rho_v \sim 1000$ mène à la situation suivante,

Initialisation	$Y_r = 10^{-8}$	$\alpha_r = 10^{-8}$
Vapeur résiduelle dans le liquide	$\alpha_r \sim 10^{-5}$	$Y_r \sim 10^{-11}$
Liquide résiduel dans la vapeur	$\alpha_r \sim 10^{-11}$	$Y_r \sim 10^{-5}$

Table 7 – Fractions massiques et volumiques des phases résiduelles, pour les valeurs d'initialisation correspondantes.

La première ligne indique si l'initialisation sur la phase résiduelle est réalisée en fraction massique ou volumique. Les valeurs dans le tableau sont les valeurs respectivement en fraction volumique ou massique que l'on obtient à partir de cette initialisation.

De plus, cette différence entre proportions en volume et en masse repose la question de la localisation de l'interface. Les limites phases pures n'étant pas exactement localisées au même endroit en fonction du fait qu'elles soient caractérisées par une fraction massique ou volumique résiduelle, l'interface ne l'est pas non plus, sa localisation est diffuse. Cela peut poser des difficultés d'interprétations et de jugement sur le comportement attendu et observé du modèle.

Dans ce travail de thèse, nous dirons qu'une phase est présente en quantité résiduelle si sa fraction massique ou volumique est inférieure à 10^{-8}. C'est la valeur que nous utiliserons pour l'initialisation des cas de calcul, avec la conséquence présentée sur le tableau 7. Les différents cas de calcul présentés auront tous été réalisés dans les deux situations, mais une seule d'entre elles sera présentée si il n'y a pas de conséquences particulières. Dans le cas contraire, les résultats présenteront les spécificités. Une remarque est également importante à souligner sur l'état thermodynamique des phases résiduelles. Toujours déterminées de manière à vérifier les équations d'état, les propriétés obtenues pour une phase en tant que phase résiduelle n'ont aucune réalité physique et peuvent mener à des complexités d'interpretation supplémentaires. En effet, la multiplicité des propriétés de l'écoulement que l'on peut présenter en multiphasique peut mener à une information confuse du fait de ces quantités qui n'ont pas de réalité physique dans certaines zones de l'écoulement. Dans la suite de ce manuscrit, nous avons donc fait le choix de ne présenter que les informations qui permettent d'interpréter correctement les différents cas de calculs. Nous porterons toutefois une attention particulière à illustrer les comportements qui pourraient être discutables le cas échéant.

Concernant la résolution numérique dans miro-SCONE, les phases sont libres d'évoluer avec des fractions volumiques et massiques très faibles. Une sécurité nous permet de savoir si les fractions volumiques ou massiques sont négatives ou supérieure à 1, auquel cas le calcul est arrêté. Dans le modèle UPT, l'utilisation de phases pures sera parfois autorisée $\alpha = 1$ ou $Y = 1$ pour illustrer les capacités de résolution.

Pour résumer, nous avons introduit les notions suivantes,

— phase résiduelle : une phase est résiduelle si elle est présente en quantité très faible devant les autres phases. On dira aussi qu'elle est en quantité résiduelle,

— limite phase pure : c'est un endroit dans lequel un composant est présent en très grande majorité, où l'écoulement peut être assimilé à un écoulement monophasique. On parlera de limite phase pure liquide ou vapeur par exemple. Dans ces zones, les autres phases sont présentes en quantités résiduelles,

— interface : c'est la zone de transition entre deux limites phases pures différentes.

Les problématiques d'interprétations ont également été abordées, en particulier sur la localisation de l'interface et l'état thermodynamique des phases résiduelles.

4.5 Conclusion

SCONE est un logiciel de simulation numérique en développement au CEA dont le but est de pouvoir étudier l'interaction corium-sodium à l'échelle réacteur. Ce logiciel dispose d'une architecture orientée objet flexible, modulaire et dédiée au multiphasique. Concernant les aspects numériques, une version explicite du schéma ICE est disponible pour résoudre les équations bilan de quantité de mouvement, masse et énergie interne monophasiques.

L'application micro-SCONE, que nous devons développer, est dédiée à la compréhension des mécanismes locaux de l'explosion de vapeur. Basée sur la même architecture logicielle que SCONE, micro-SCONE profite des outils numériques déjà existants, en particulier le schéma numérique ainsi que la gestion du maillage et du parallélisme.

Le comportement du schéma numérique a été présenté sur deux cas tests. Le premier nous a permis de vérifier que le schéma préserve les constantes $(p, \overrightarrow{u})$ lors du transport de discontinuités de contact. Le second cas test nous a permis d'illustrer les conséquences de la non conservation de l'énergie totale lors de la propagation des ondes de choc. Conscients de ce comportement, nous conserverons ce schéma numérique dans cette étape de développement de micro-SCONE dans laquelle la

détermination d'un modèle physique permettant de traiter notre problème sera notre préocupation principale. L'architecture modulaire de micro-SCONE devrait permettre de changer de schéma sans altérer les développements réalisés. Cependant, nous aurons un regard particulièrement attentif et critique vis-à-vis de l'interprétation des phénomènes liés aux ondes de chocs si nécessaire.

Toutes les fonctionnalités différentes du seul moteur numérique monophasique qui seront abordées dans la suite de ce manuscrit ont été développées dans le cadre spécifique de ce travail. Ainsi, l'ensemble des modules qui auront été créés alimenteront la base de connaissance de SCONE/micro-SCONE et seront mis à disposition pour de futures utilisations.

Finalement, nous avons introduit quelques notions de vocabulaire et quelques spécificités liées à l'utilisation des modèles à interface diffuse multiphasiques dans la suite de ce travail. L'application micro-SCONE est une application de type code de recherche, qui n'a pas de contraintes spécifiques de robustesse. Si ces aspects interviennent, nous chercherons à en comprendre les raisons plutôt que d'employer des correctifs numériques qui peuvent être contraignants à terme.

Cinquième partie

Modèle à l'équilibre thermomécanique

5.1 Description

Le modèle à l'équilibre de vitesse, pression et température, appelé modèle à l'équilibre thermomécanique ou UPT, est un modèle capable de traiter de problèmes avec transferts de chaleur, tension de surface et changement de phase. Il en existe plusieurs variantes dans la littérature [45, 69, 70], qui se différencient par les équations d'état utilisées ou les fermetures des termes d'échanges par exemple. Ce modèle a été appliqué dans des situations qui présentent des aspects communs avec l'explosion de vapeur tels que des problèmes d'ébullition [45], de cavitation [71] et d'écoulements Gas-Magma [72]. Le compromis entre le spectre de ses capacités et sa complexité est très intéressant pour aborder la simulation d'écoulements multiphasiques complexes. Cela en fait un modèle privilégié dans des applications de plus en plus nombreuses [51, 56].

Le modèle diphasique que nous avons implémenté est le système d'équations bilans 5.1.1 complété de l'ensemble d'équations d'état décrites ci-après. C'est une version qui ne prend en compte que les effets de diffusion de la chaleur.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho \overrightarrow{u}) = 0 \tag{5.1.1a}$$

$$\frac{\partial \rho \overrightarrow{u}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\rho \overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{u} + p\underline{\underline{I}}) = 0 \tag{5.1.1b}$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.((\rho E + p)\overrightarrow{u}) = \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi}) \tag{5.1.1c}$$

$$\frac{\partial \rho Y_1}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho Y_1 \overrightarrow{u}) = 0 \tag{5.1.1d}$$

On y retrouve les équations de conservation de la masse, quantité de mouvement et énergie totale de mélange dans lesquelles ρ, $\overrightarrow{u}$ et E sont respectivement les masse volumique, vitesse et énergie totale spécifique du mélange. Les effets compressibles font intervenir une pression unique, c'est la pression de mélange qui provient de l'hypothèses d'équilibre $p = p_1 = p_2$. Les effets de diffusion de la chaleur font intervenir $\overrightarrow{\phi}$ le flux de chaleur. La dernière équation est l'équation de transport de masse d'un composant, en l'occurence le fluide 1, et fait intervenir sa fraction massique Y_1. Ce système continu est complété par la contrainte de saturation, les équations d'état phasiques, les relations définissant les quantités de mélange et les relations d'équilibre.
La contrainte de saturation $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ s'écrit également $Y_1 + Y_2 = 1$ car $Y_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho}$.
Les fermetures thermodynamiques sont les équations d'état par phase, ici des équations de type stiffened gas,

$$p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k C_{v,k} T_k - P_{\infty,k} \tag{5.1.2}$$

$$e_k = C_{v,k} T_k + \frac{P_{\infty,k}}{\rho_k} + q_k \tag{5.1.3}$$

Les relations définissant les quantités de mélange permettent de lier les quantités phasiques aux quantités de mélange,

$$q = Y_1 q_1 + Y_2 q_2 \tag{5.1.4}$$

$$e = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 \tag{5.1.5}$$

$$E = Y_1 E_1 + Y_2 E_2 \tag{5.1.6}$$

$$v = \frac{1}{\rho} = Y_1 v_1 + Y_2 v_2 \tag{5.1.7}$$

où $E_k = e_k + \frac{1}{2}\overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{u_k}$ et l'équation 5.1.7 peut s'écrire sous la forme $\rho = \alpha_1\rho_1 + \alpha_2\rho_2$.
Les relations d'équilibre, ici $p = p_1 = p_2$, $T = T_1 = T_2$ et $\overrightarrow{u} = \overrightarrow{u_1} = \overrightarrow{u_2}$, permettent, avec nos choix d'equations d'état, d'écrire une expression analytique de la pression de mélange [45],

$$p = \frac{1}{2}\left(A_1 + A_2 - (P_{\infty,1} + P_{\infty,2})\right) + \sqrt{\frac{1}{4}\left(A_1 - A_2 - (P_{\infty,1} + P_{\infty,2})\right)^2 + A_1A_2} \tag{5.1.8}$$

avec

$$A_k = \frac{Y_k(\gamma_k - 1)C_{v,k}}{Y_1C_{v,1} + Y_2C_{v,2}}(\rho(e - q) - P_{\infty,k}) \tag{5.1.9}$$

et une température de mélange,

$$T = \frac{(p + P_{\infty,1})(p + P_{\infty,2})}{\rho\left(Y_1C_{v,1}(\gamma_1 - 1)(p + P_{\infty,2}) + Y_2C_{v,2}(\gamma_2 - 1)(p + P_{\infty,1})\right)} \tag{5.1.10}$$

5.2 Vérification-validation du modèle UPT

Dans cette section, différents tests classiques et empruntés à la littérature sont présentés afin de vérifier le comportement du modèle 5.1.1 qui a été implémenté dans micro-SCONE.

5.2.1 Transport diphasique, advection d'interfaces

Le but de ce cas test est de s'assurer du comportement du code lors du transport d'interfaces. Dans cette situation, de l'eau liquide est transportée dans de la vapeur d'eau. Les coefficients des équations d'état sont rappelés dans le tableau 8 et la configuration initiale est décrite dans le schéma 26. C'est un cas test diphasique 1D dans lequel les interfaces sont caractérisées par une variation de fraction volumique.

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$q(J.kg^{-1})$
Eau Liquide	3.423	1231.2	8.99×10^8	-1.15×10^6
Eau Vapeur	1.358	1247	0	1.97×10^6

TABLE 8 – Coefficients des équations d'état pour l'eau liquide et sa vapeur

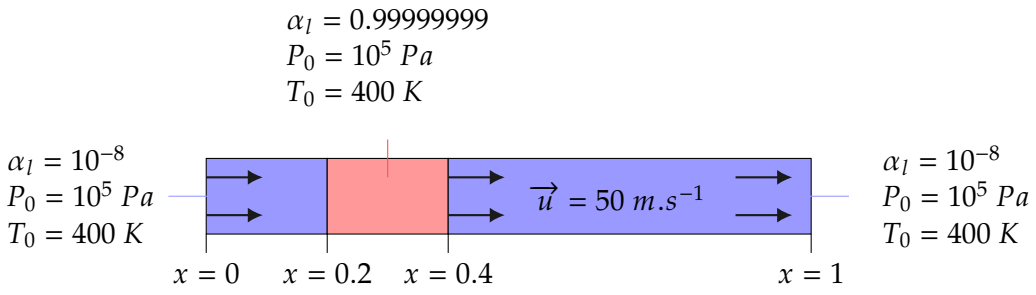


FIGURE 26 – **Configuration du cas test de transport diphasique**

L'état initial est déterminé à l'aide des pression et température initiales, respectivement $P_0 = 10^5\ Pa$ et $T_0 = 400\ K$, ce qui permet d'obtenir un ratio de masses volumiques initial de l'ordre de $\sim 10^3$. Les résultats obtenus sont présentés dans la figure 27, à l'instant initial (noté 'init') et à $t = 0.01\ s$ pour $\Delta x = 10^{-3}$. Le pas de temps Δt est déterminé de manière à vérifier le critère CFL.

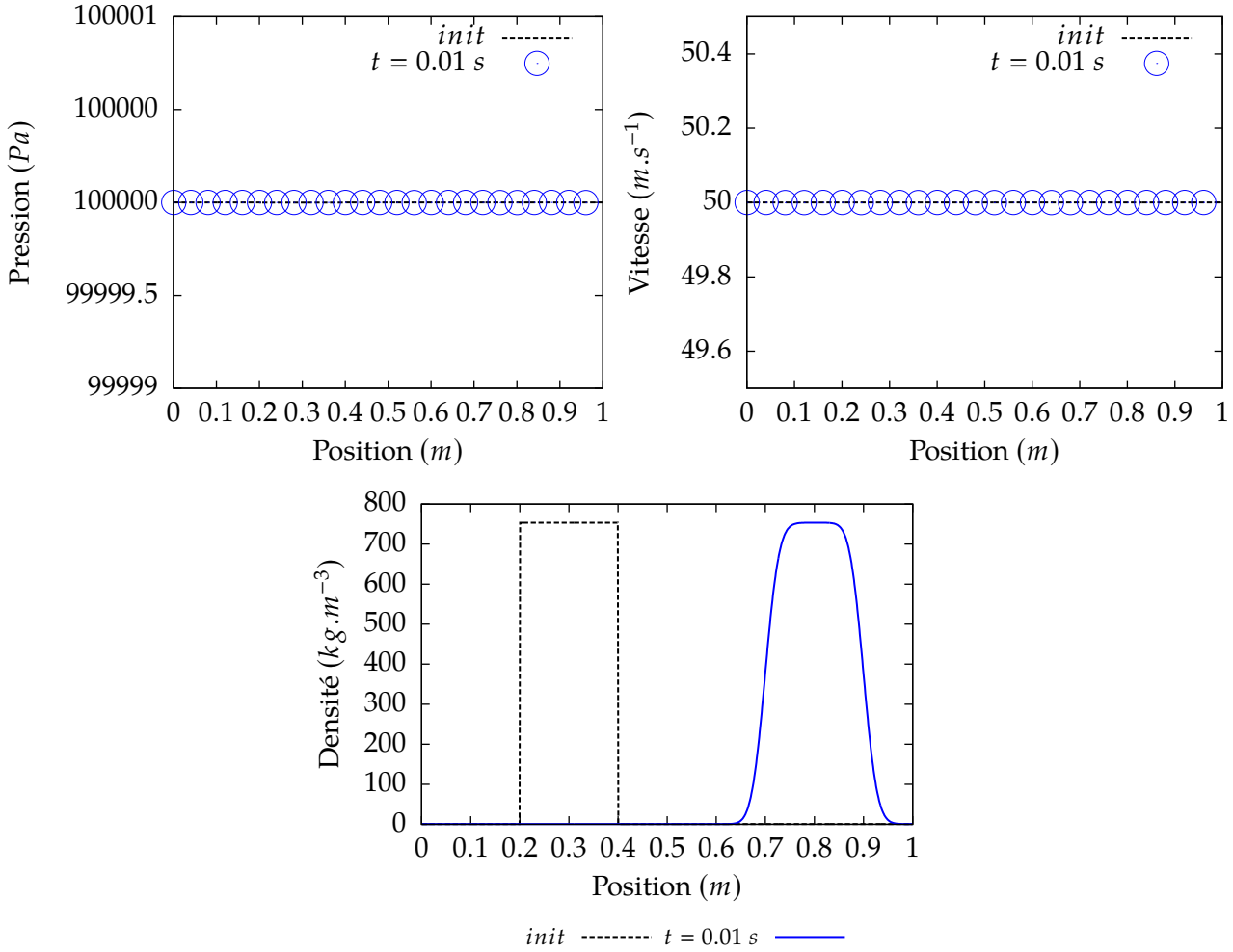


FIGURE 27 – Transport d'un volume de fluide dans un milieu de densité différente

Les profils de pression et de vitesse restent constants et la densité est advectée à la bonne vitesse, ce qui est conforme aux résultats attendus. La forme des interfaces est altérée par la diffusion numérique du schéma. On rappelle que la méthode actuelle est d'ordre 1, l'implémentation d'une méthode d'ordre plus élevé permettra de diminuer cette diffusion et d'obtenir des interfaces plus raides. Ces résultats permettent de vérifier l'implémentation de l'équation de transport de masse phasique 5.1.1d dans micro-SCONE.

5.2.2 Diffusion de la chaleur

Le but de ce cas test, dépourvu d'effets hydrodynamiques, est de s'assurer de l'implémentation des effets de diffusion de la chaleur (conduction thermique) dans micro-SCONE.

On considère une situation monophasique dans laquelle un fluide au repos est instantanément soumis à une condition à la limite de température ou de densité de flux de chaleur imposée. Les effets hydrodynamiques ne sont pas pris en compte de manière à pouvoir comparer les résultats aux solutions analytiques. Le problème continu se restreint alors à l'équation d'énergie seule, qui s'écrit,

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} = \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi}) \tag{5.2.1}$$

et que l'on résout en volumes finis,

$$\int_{V_c} \frac{\partial \rho e}{\partial t} = \int_{S_c} \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi}) dS \tag{5.2.2}$$

soit, avec les notations introduites dans la partie précédente,

$$\rho_c^{n+1} e_c^{n+1} = \rho_c^n e_c^n + \frac{\Delta t}{V_c} \sum_{cd} S_{cd} \overrightarrow{\phi}_{cd}^n . \overrightarrow{n}_{cd} \tag{5.2.3}$$

Le flux de chaleur, exprimé par la loi de Fourier s'écrit $\overrightarrow{\phi} = -\lambda \overrightarrow{\nabla}(T)$, avec

$$\lambda = \alpha_1 \lambda_1 + \alpha_2 \lambda_2 \tag{5.2.4}$$

ce qui donne pour assurer la continuité du flux de chaleur entre les mailles au niveau discret,

$$\overrightarrow{\phi}_{cd}^n . \overrightarrow{n}_{cd} = -2 \frac{\lambda_d \lambda_c}{\lambda_d + \lambda_c} \left(\frac{T_d^n - T_c^n}{\| \overrightarrow{x_d} - \overrightarrow{x_c} \|} \right) \tag{5.2.5}$$

ainsi,

$$\rho e_c^{n+1} e_c^{n+1} = \rho_c^n e_c^n - \frac{\Delta t}{V_c} \sum_{cd} 2 S_{cd} \frac{\lambda_d \lambda_c}{\lambda_d + \lambda_c} \left(\frac{T_d^n - T_c^n}{\| \overrightarrow{x_d} - \overrightarrow{x_c} \|} \right) \tag{5.2.6}$$

Le cas de calcul étant monophasique, on obtient la solution analytique de la diffusion de la chaleur dans un fluide pur à l'aide de l'équation d'énergie dans cette phase, ici k,

$$\frac{\partial \rho_k e_k}{\partial t} = \overrightarrow{\nabla} . (-\lambda_k \overrightarrow{\nabla}(T_k)) \tag{5.2.7}$$

qui s'écrit, avec nos équations d'état et à densité constante,

$$\rho_k C_{v,k} \frac{\partial T_k}{\partial t} = -\Delta(T_k) \tag{5.2.8}$$

où Δ est l'opérateur Laplacien. Les solutions exactes de l'équation 5.2.8 dans le cas d'un mur semi-infini initialement à la température T_0 pour lequel on impose à $t = 0$ une condition de température fixe T_{cl} ou une densité de flux Q_{cl} sont, d'après [73],

$$T_k(x,t) = T_0 + (T_{cl} - T_0) \times erfc \left(\frac{x}{2\sqrt{\frac{\lambda_k}{\rho_k C_{v,k}} t}} \right) \tag{5.2.9}$$

$$T_k(x,t) = T_0 + \frac{2 Q_{cl}}{\lambda_k} \sqrt{\frac{\lambda_k}{\rho_k C_{v,k}} t} \times erfc \left(\frac{x}{2\sqrt{\frac{\lambda_k}{\rho_k C_{v,k}} t}} \right) \tag{5.2.10}$$

avec $erfc$ qui est la fonction erreur complémentaire définie par,

$$erfc(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-x^2} dx \tag{5.2.11}$$

La configuration initiale est décrite sur le schéma 28, les coefficients des équations d'état pour la phase liquide k ainsi que sa conductivité thermique sont présentés dans le tableau 9.

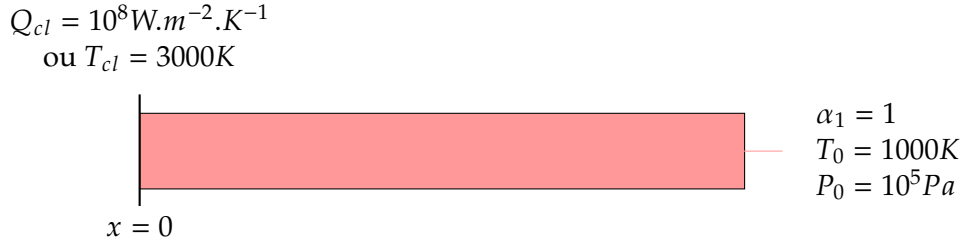


FIGURE 28 – **Configuration du test de validation de conduction de la chaleur dans un mur semi infini soumis à une condition initiale de température ou de densité de flux surfacique imposée sur sa face gauche**

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$\lambda(W.m^{-1}.K^{-1})$
Liquide k	4.4	1000	6×10^8	10 000

TABLE 9 – Paramètres des SG EOS du liquide pour les tests de conduction de la chaleur monophasique

Le domaine de calcul mesure $5mm$ et les résultats sont présentés à $10\mu s$, les paramètres numériques sont $\Delta x = 5 \times 10^{-5}$ et $\Delta t = 10^{-10}$, ce qui permet d'assurer le critère de stabilité $CFL_{th} \leq 0.5$ avec,

$$\frac{D_{th}\Delta t}{\Delta x^2} = CFL_{th} \tag{5.2.12}$$

avec $D_{th} = \frac{\lambda}{\rho C_v}$ la diffusivité thermique de notre fluide. La comparaison entre les solutions analytiques et le résultat du calcul réalisé avec micro-SCONE est présenté sur la figure 29,

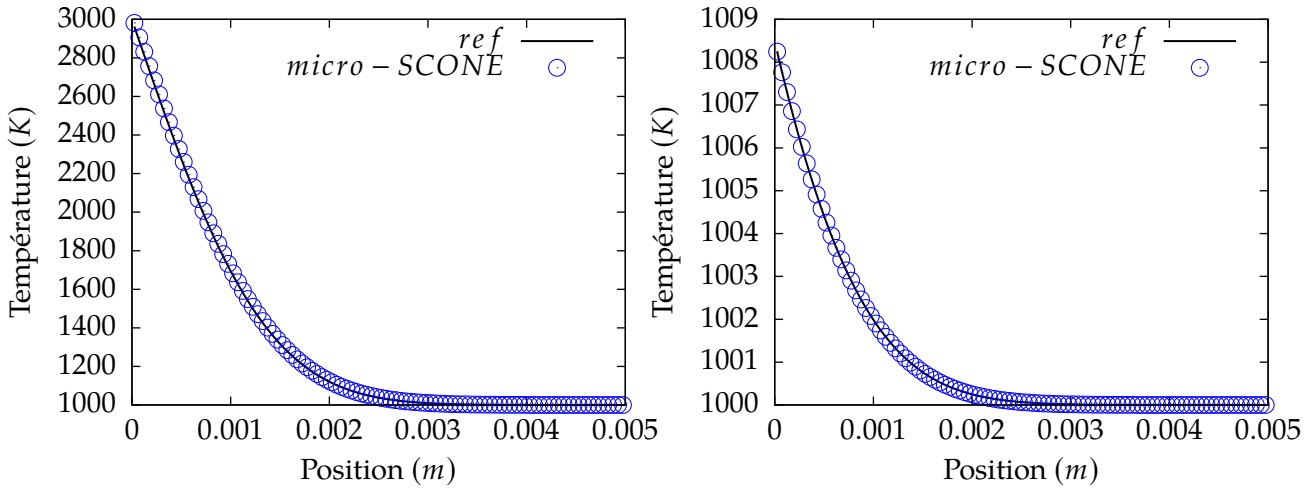


FIGURE 29 – Conduction dans un fluide au repos à la température initiale $T_{init} = 1000K$, sans effets hydrodynamiques. Sur la courbe de gauche, la température de la paroi gauche est imposée à $T_{cl} = 3000K$. Sur la courbe de droite, un flux de chaleur constant $Q_{cl} = 10^8 W.m^{-2}.K^{-1}$ est imposé à la face gauche du domaine.

L'accord entre la solution analytique et le résultat de calcul est très bon. On présente également sur la figure 30 l'écart relatif ϵ_r,

$$\epsilon_r(x,t) = \frac{|solAnalytique - solCalcul|}{solAnalytique}(x,t) \tag{5.2.13}$$

entre les deux solutions pour différents maillages, toute condition équivalente par ailleurs, pour le cas de température imposée. Cela permet de vérifier la convergence en maillage de la résolution discrète employée.

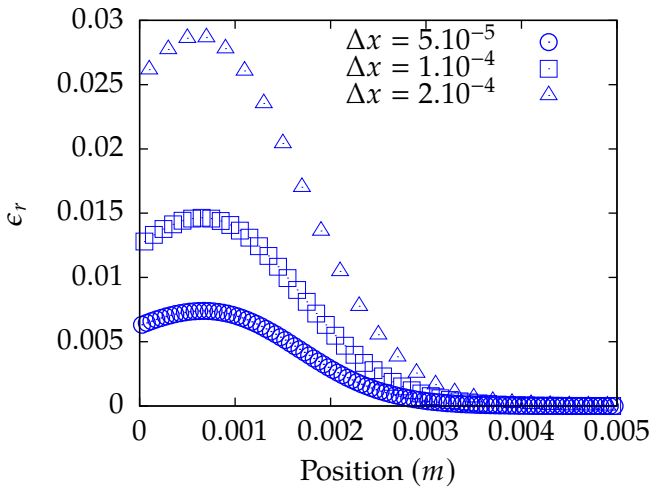


FIGURE 30 – Erreur relative en chaque point du domaine, pour trois maillages différents

Finalement, les résultats donnent satisfaction et permettent de vérifier l'implémentation du terme de diffusion de la chaleur dans micro-SCONE ainsi que la prise en compte de deux types de conditions aux limites, en température et en densité de flux imposée.

5.2.3 Diffusion de la chaleur en milieu compressible

Le but de ces cas tests est de vérifier et valider le couplage des effets thermiques et hydrodynamiques avec le modèle thermomécanique. Ces cas tests proviennent des travaux de Petitpas et al. [44] et consistent à étudier une situation monophasique puis diphasique dans laquelle les échanges de chaleur génèrent un écoulement. Dans ces situations, initialement hydrodynamiquement stables, si les transferts thermiques sont responsables de la mise en mouvement du ou des fluides on dira alors que les échanges de chaleur sont le moteur de l'écoulement. Le mécanisme de mise en mouvement est la conséquence du couplage des effets compressibles et de la discontinuité de température initiale. En effet, dans un premier temps, les échanges de chaleur génèrent une variation d'énergie dans les fluides initialement au repos, qui se traduit par une variation de pression. Dans un second temps, la pression non uniforme engendre alors la mise en mouvement du système. Ce comportement est particulièrement intéressant pour notre application, c'est un pré-requis à l'étude d'instabilités qui peuvent avoir une origine thermique lors de la déstabilisation du film de vapeur.

Les conditions initiales du premier cas de calcul, monophasique, sont présentées sur le schéma 31.

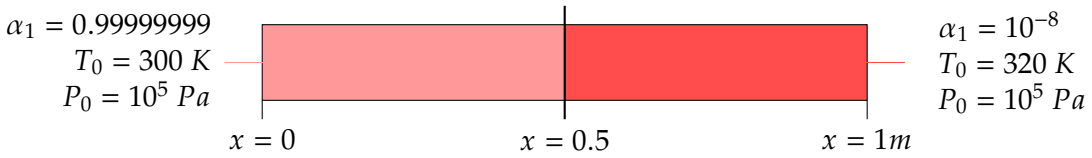


FIGURE 31 – **Configuration du test de validation de conduction de chaleur en milieu monophasique compressible**

Les conditions aux limites sont des conditions de réflexion, ainsi le domaine total peut être considéré comme un système isolé dans lequel les quantités vont évoluer vers un état d'équilibre constant. Avec les paramètres décrivant le fluide I,

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$q(J.kg^{-1})$	$\lambda(W.m^{-1}.K^{-1})$
Fluide I	3.42	1231	8.99×10^8	0	1×10^6

TABLE 10 – Coefficients pour le fluide I

L'état final, déterminé dans Petitpas et al. [44], est $\overrightarrow{u_f} = \overrightarrow{0}$, $P_f = P_0$, $\rho_f \sim 973.72\ kg.m^{-3}$ et $T_f \sim 309.68\ K$. Les phénomènes transitoires étant au cœur de notre application, on présentera les résultats de manière à illustrer ce comportement, en s'assurant de vérifier l'état final décrit précédemment.

Les résultats sont présentés dans les figures 32. Pour plus de clarté, les temps longs sont présentés sur les courbes de densité et de température qui ont une évolution régulière au cours du calcul. Alors que les temps courts, qui permettent d'illuster le comportement instationnaire, sont présentés sur les courbes de vitesse et de pression. Les paramètres numériques sont $\Delta x = 10^{-3}$ et Δt qui vérifie le critère CFL.

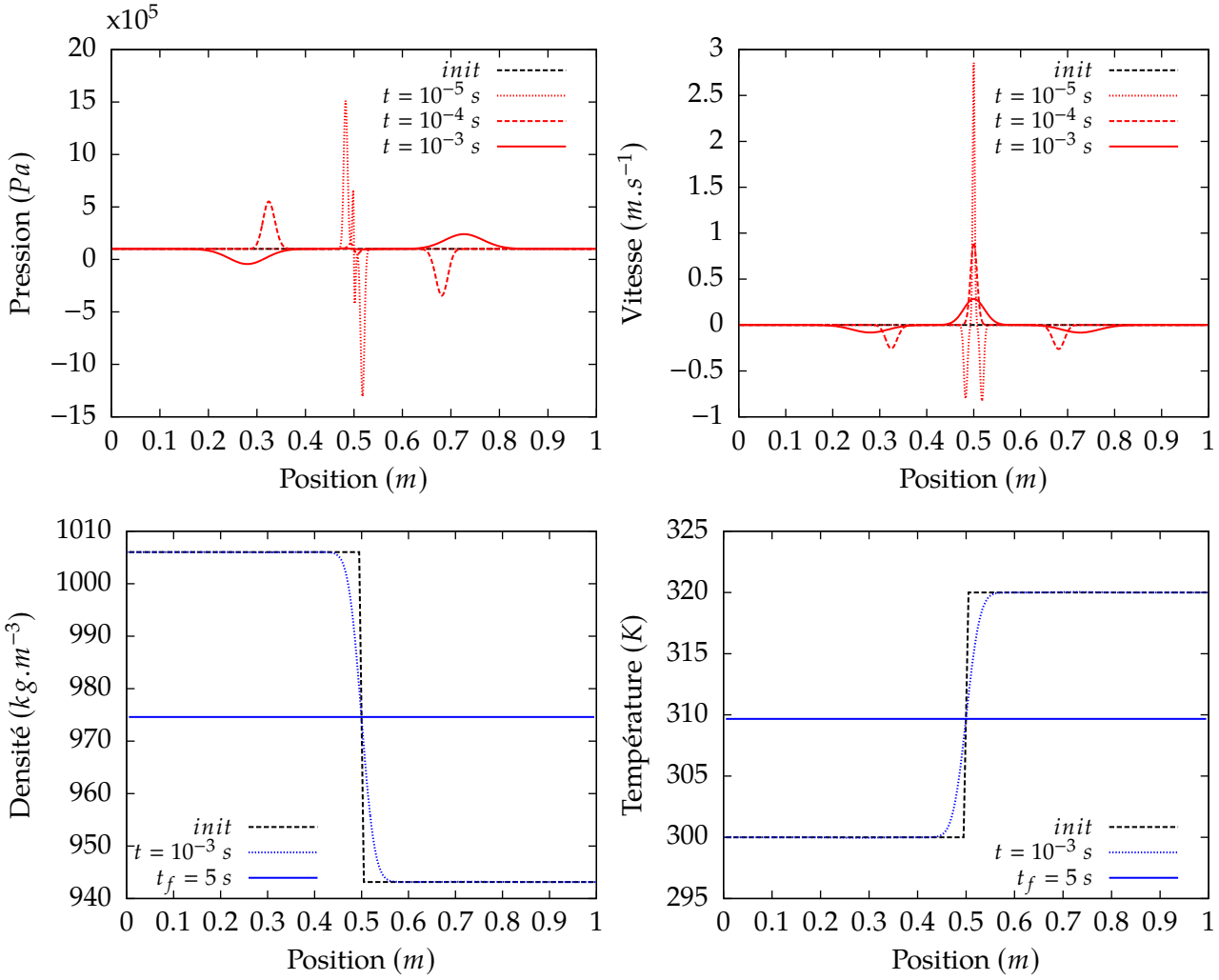


FIGURE 32 – Cas test de conduction en milieu monophasique compressible.

Le comportement global est très satisfaisant. On observe la variation de pression importante générée dans les premiers instants [5], la partie du fluide qui cède de l'énergie voit sa pression diminuer, l'autre augmente. Cela forme un fort gradient de pression initial, ce qui explique la variation de vitesse importante aux temps courts. On rappelle toutefois que l'amplitude de ce comportement n'est pas quantitativement comparable à celui d'un fluide réel, dont le coefficient de conductivité serait bien plus faible. Par la suite, les ondes et leurs réflexions parcourent le domaine de multiples fois, ce qui

5. la pression négative n'est pas un problème tant que $p + P_{\infty,k} > 0$

tend à équilibrer le système. Le profil de vitesse symétrique généré s'atténue au fil du temps, jusqu'à atteindre un état stationnaire stable dans lequel le fluide est au repos. La diffusion de la chaleur dans le fluide permet d'obtenir un profil de température et de densité uniforme. En particulier, on retrouve sur les temps longs l'état final attendu du système.

Le second cas de calcul, diphasique, est présenté sur le schéma 33. Le fluide I, présenté plus tôt, est accompagné d'un fluide II, dont les paramètres de l'équation d'état sont décrits dans le tableau 11,

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$q(J.kg^{-1})$	$\lambda(W.m^{-1}.K^{-1})$
Fluide II	1.4	1000	1×10^8	0	1×10^5

TABLE 11 – Coefficients des SG EOS pour le second fluide de test

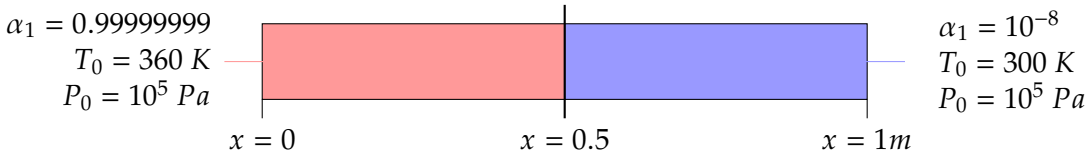


FIGURE 33 – **Configuration du test de validation de conduction de chaleur en milieu diphasique compressible**

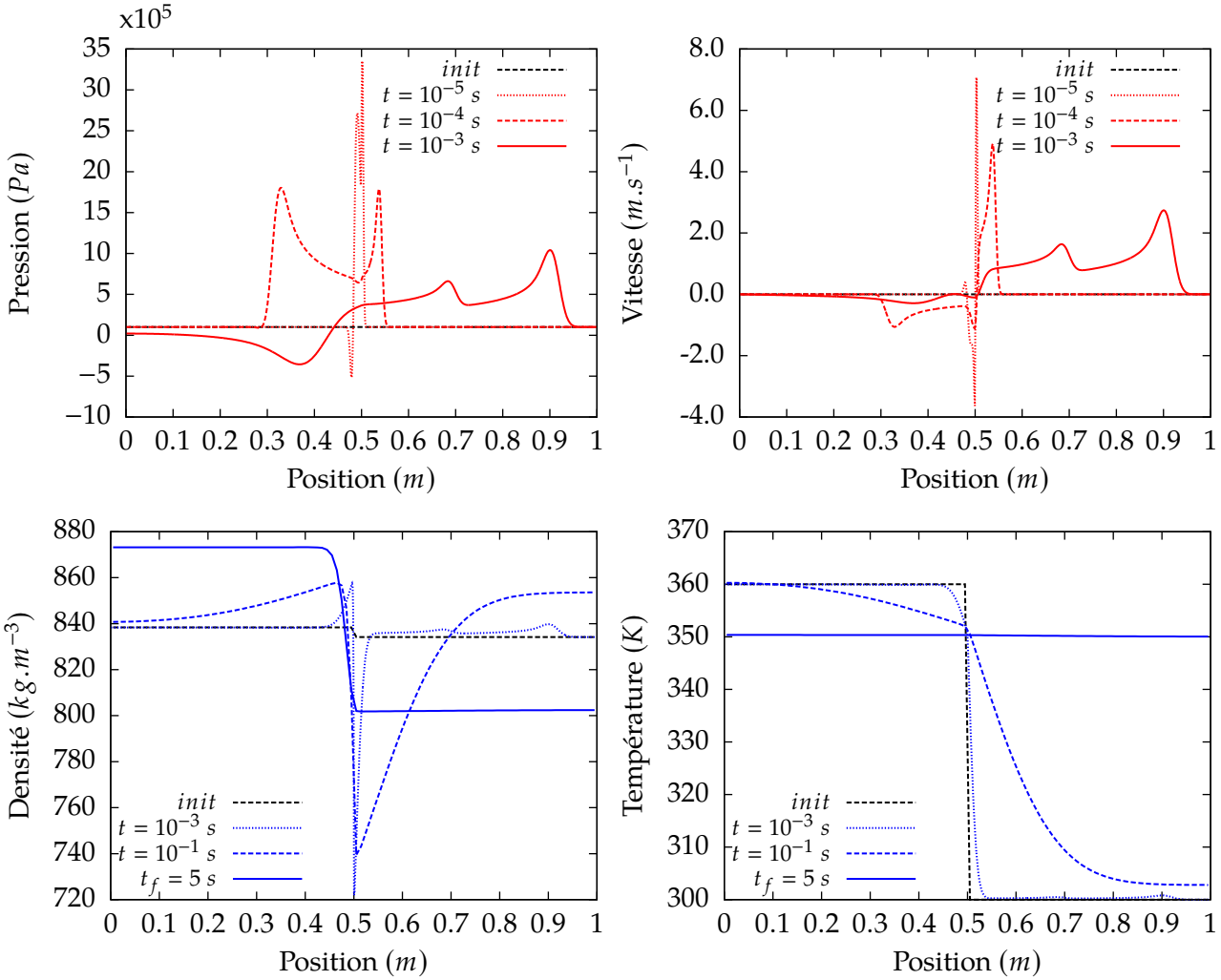


FIGURE 34 – Cas test de deux fluides compressibles intialement à des températures différentes.

Dans cette situation, l'état final est, $\overrightarrow{u_f} = \overrightarrow{0}$, $P_f \sim 12.39 \times 10^6\ Pa$, $\rho_1 \sim 872.24\ kg.m^{-3}$, $\rho_2 \sim 802.06\ kg.m^{-3}$ et $T_f \sim 350.3\ K$. On retrouve le comportement attendu sur les temps longs, présentés sur les figures de température et de densité de mélange. Concernant le transitoire, l'amplitude des ondes de pression générées sont encore une fois extrêmement importantes. En particulier, on observe un comportement semblable à celui d'une détonation dont l'origine est l'interface entre les fluides. Le champ de vitesse généré, différent dans les deux phases à cause de leur différence de compressibilité, a pour conséquence d'altérer le profil de densité de manière significative. Enfin, de manière similaire au cas précédent, les différentes réflexions d'ondes et les effets diffusifs tendent à équilibrer le système.

Ces résultats démontrent la capacité de micro-SCONE à traiter de problèmes diphasiques avec transferts de chaleur et effets compressibles.

5.2.4 Extension triphasique et déformation d'interface en 2D

L'extension d'un modèle à l'équilibre thermomécanique à un plus grand nombre de phases est relativement aisée. Cela en fait un modèle de choix pour la simulation d'écoulements multiphasiques à un plus grand nombre de phases. En effet, sous une forme sans transferts de chaleur, la prise en compte d'une phase supplémentaire se traduit simplement par l'ajout d'une équation de transport

de masse. En triphasique on obtient le système,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho \overrightarrow{u}) = 0 \tag{5.2.14a}$$

$$\frac{\partial \rho \overrightarrow{u}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\rho \overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{u} + p\underline{\underline{I}}) = 0 \tag{5.2.14b}$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.((\rho E + p)\overrightarrow{u}) = 0 \tag{5.2.14c}$$

$$\frac{\partial \rho Y_2}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho Y_2 \overrightarrow{u}) = 0 \tag{5.2.14d}$$

$$\frac{\partial \rho Y_3}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho Y_3 \overrightarrow{u}) = 0 \tag{5.2.14e}$$

Les fermetures d'équilibre et de combinaison sont identiques à celles présentées précédemment, sous leur forme générale,

$$e = \sum_k Y_k e_k \tag{5.2.15}$$

$$v = \sum_k Y_k v_k \tag{5.2.16}$$

Cependant, l'expression analytique de la pression ne s'obtient pas de manière aussi directe. Nous utiliserons un algorithme de résolution de système non linéaire multivariable disponible dans la librairie GSL [6] pour calculer l'état thermodynamique du mélange triphasique. Pour le cas test que nous présentons, emprunté aux travaux de Vazquez-Gonzalez [62] et décrit dans le schéma 35, on utilise des équations d'état de type gaz parfait $p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k e_k$ dont le paramètre γ_k est rappelé sur ce même schéma. Ce cas test est un tube à choc triphasique avec différentes densités et pressions.

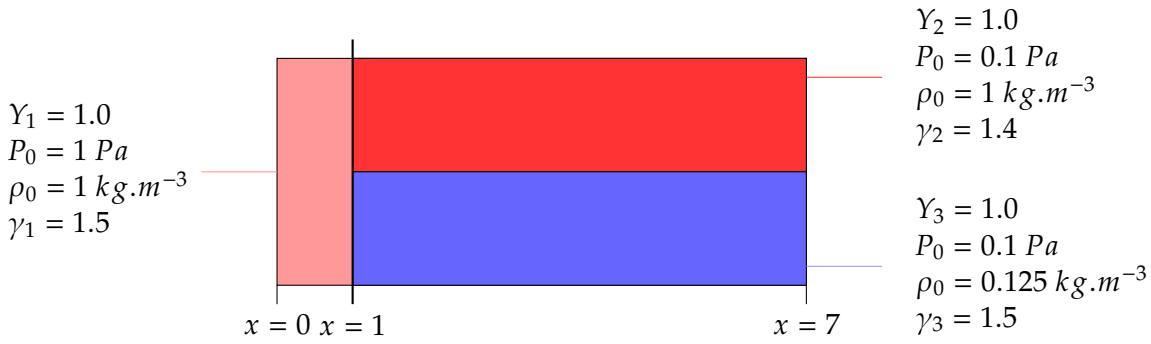


FIGURE 35 – **Configuration du cas test de validation de choc triphasique**

6. http ://www.gnu.org/software/gsl/

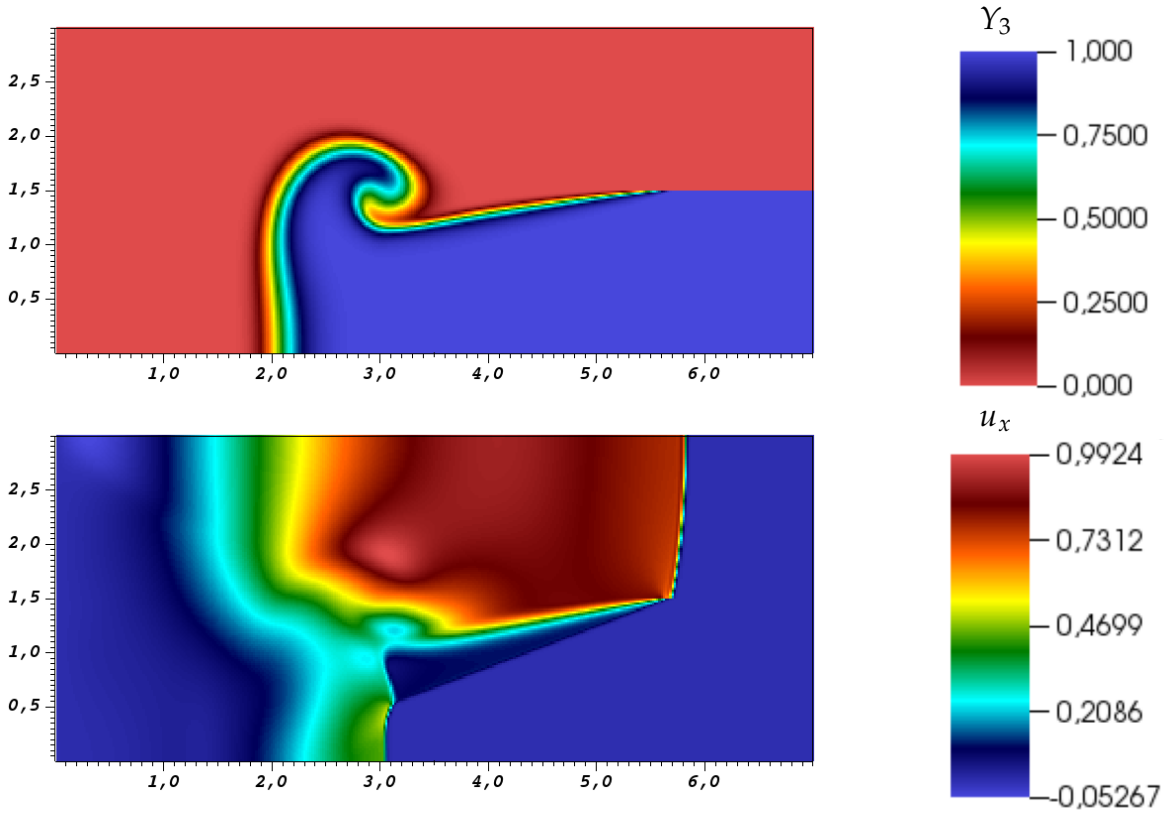


FIGURE 36 – En haut, fraction massique de composant, en bas vitesse de mélange selon l'axe x pour le cas de validation de choc triphasique.

Deux chocs apparaissent et se propagent à des vitesses différentes dans les phases 2 et 3. Ces deux chocs créent du cisaillement le long de la discontinuité horizontale initiale et un vortex.

Les résultats présentés sur la figure 36 sont en accord avec ceux de la littérature. Cela permet d'illustrer la capacité du modèle et de l'application micro-SCONE à traiter de la déformation importante des interfaces. Sur la seconde figure, qui présente la norme de la vitesse selon l'axe $\overrightarrow{x}$, on retrouve très bien la raideur qui traduit la position du choc, illustrant la capacité de micro-SCONE à gérer le comportement compressible et le multi D.

5.3 Conséquences de l'équilibre en température

5.3.1 Introduction

Comme décrit dans la partie 3, ce modèle en équilibre de température est un modèle limite dans lequel les échanges de chaleur entre phases à l'interface sont instantanés. Dans cette section, nous allons nous intéresser aux conséquences de cette hypothèse, en examinant la réponse du modèle dans le cas du transport d'une interface séparant deux fluides à des températures différentes, sans effet de diffusion de la chaleur. Cette situation est caractéristique de la situation initiale de notre configuration d'intérêt, dans laquelle une goutte de liquide chaud se déplace dans de la vapeur de réfrigérant, à température plus faible. Le cas d'étude est donc identique au cas 5.2.1, à l'exception de la température qui n'est pas initialement constante sur le domaine, on prendra $500K$ pour la phase liquide contre $400K$ précédemment et le reste de la configuration est rappelé dans le schéma 37. Dans ce cas, les échanges de chaleur implicitement pris en compte par l'équilibre instantané de températures perturbent l'écoulement. La vitesse et la pression, initialement uniformes, ne conservent pas leur valeur initiale. Ce comportement est illustré sur les graphes de la figure 38. On rappelle que les tests effectués ici, et dans la suite, sont réalisés avec une méthode numérique qui vérifie la préservation des constantes lors de cas de transport. Cela a été démontré lors de la présentation des différents cas monophasiques et diphasiques précédents. On insiste sur le fait que le schéma n'est pas responsable du comportement présenté.

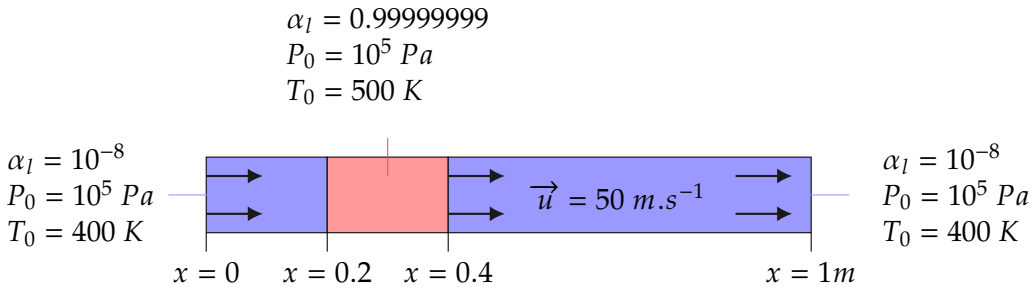


FIGURE 37 – **Configuration du cas test de transport diphasique avec température non homogène sur le domaine**

Sur ces figures, on observe que le profil de densité ne présente pas de comportement inhabituel. Cependant, les profils de pression et de vitesse ont été perturbés par les variations de pression générées lors du passage de l'interface. Ici, les conditions aux limites réflectives employées ne permettent pas d'isoler le comportement au passage de l'interface des répercussions des différentes reflexions d'ondes. L'état obtenu à $t = 0.01\ s$, qui tend vers un état stationnaire, presente un écart à l'état initial qui peut ne pas être considéré comme significatif dans certaines applications. Cependant, sur la figure 39 qui montre la pression obtenue au premier pas de temps, on observe un écart à la pression initiale de près de 25%. Les deux pics de pression observés correspondent aux deux volumes qui, initialement en limite phase pure, forment un mélange à la fin du pas de temps. Cette dernière figure illustre également le caractère local à l'interface de ce comportement. On rappelle que ce comportement provient uniquement des fermetures thermodynamiques du modèle. Le moteur d'écoulement de celui-ci, rappelé ci-après, ne porte pas l'expression d'échanges d'énergie.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}.(\rho \vec{u}) = 0 \tag{5.3.1a}$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p\underline{\underline{I}}) = \vec{0} \tag{5.3.1b}$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \vec{\nabla}.(\rho e \vec{u}) + p\vec{\nabla}.(\vec{u}) = 0 \tag{5.3.1c}$$

$$\frac{\partial \rho Y_1}{\partial t} + \vec{\nabla}.(\rho Y_1 \vec{u}) = 0 \tag{5.3.1d}$$

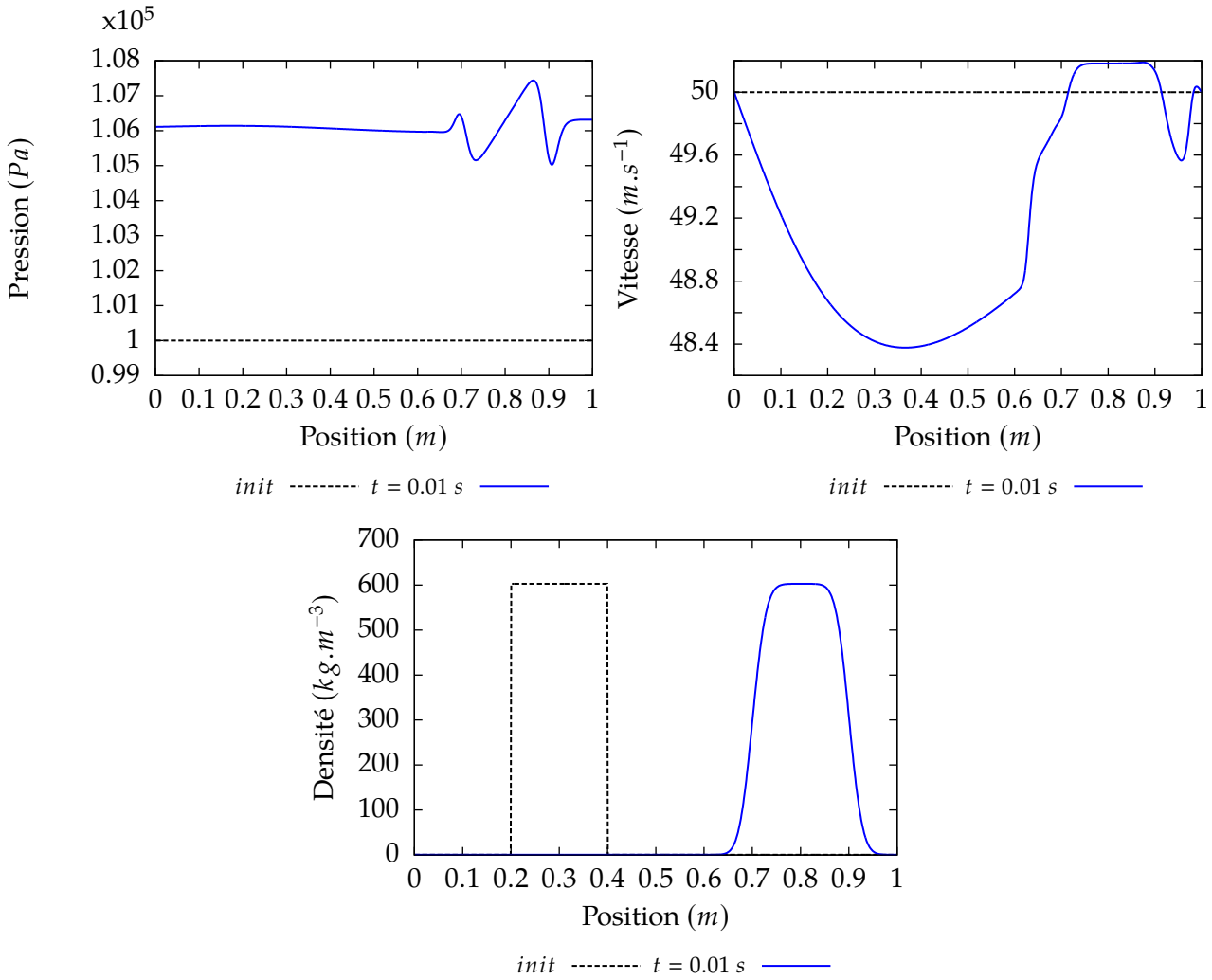


FIGURE 38 – Transport d'un volume de fluide dans un milieu de densité différente avec discontinuité de température initiale sur le domaine

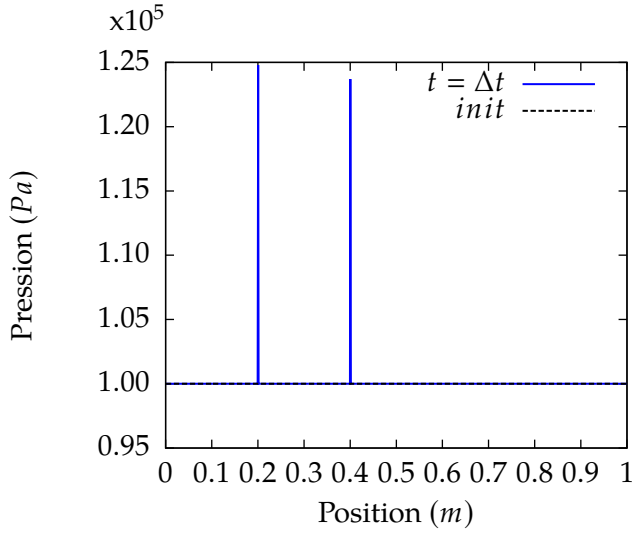


FIGURE 39 – Conséquences du transport d'un volume de fluide avec discontinuités de température et de fractions massiques sur le profil de pression au premier pas de temps.

C'est un système d'équations bilans continu sans termes sources ni d'échanges, pour lequel on s'attend à une solution du type,

$$Y_k(x,t) = Y_{k,0}(x-ut) \tag{5.3.2a}$$
$$\rho(x,t) = \rho_0(x-ut) \tag{5.3.2b}$$
$$e(x,t) = e_0(x-ut) \tag{5.3.2c}$$
$$p(x,t) = P_0 \tag{5.3.2d}$$
$$\overrightarrow{u}(x,t) = \overrightarrow{u_0} \tag{5.3.2e}$$

qui n'est pas retrouvée ici. Dans les paragraphes suivants, on s'intéresse à préciser les rôles respectifs du modèle continu, de la représentation discrète et du schéma numérique. On réalisera par la suite un cas test au plus proche de notre configuration d'intérêt pour évaluer si les conséquences de ce comportement sont convenables ou pas.

5.3.2 Condition d'uniformité des températures dans le cas de transport de discontinuité de contact

On considère un cas particulier de situation initiale, décrit sur le schéma 40. On fait l'hypothèse que $\overrightarrow{u}$ est et reste constant et on va exprimer dans quelles conditions p reste constant au cours du temps.

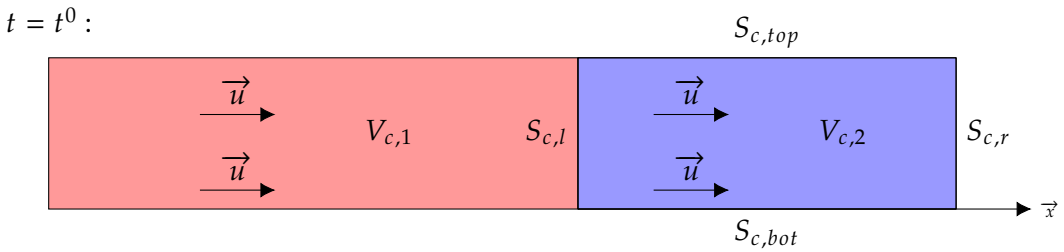


FIGURE 40 – **Schéma représentant la configuration initiale pour décrire la condition d'uniformité des températures dans le cas de transport de discontinuité de contact.**

Le cadre est le suivant :

- les volumes $V_{c,1}$ et $V_{c,2}$ sont fixes dans le temps et l'espace,
- la vitesse reste constante au cours du temps, $\overrightarrow{u}(t) = u_0\overrightarrow{x}$,
- la pression est uniforme sur le domaine à $t = t^0$,
- les surfaces $S_{c,l}$ et $S_{c,r}$ sont normales à l'axe $\overrightarrow{x}$ et les surfaces $S_{c,top}$ et $S_{c,bot}$ sont tangentielles. C'est le cas particulier d'un volume rectangulaire dans l'axe de la vitesse de l'écoulement.

Le bilan d'énergie interne entre un temps t^0 et un temps t^1 sur le volume $V_{c,2}$ s'écrit,

$$\int_{V_{c,2}}\int_{t^0}^{t^1}\frac{\partial\rho(t)e(t)}{\partial t}dtdV_{c,2} = -\int_{V_{c,2}}\int_{t^0}^{t^1}\overrightarrow{\nabla}.(\rho(t)e(t)\overrightarrow{u}(t))dtdV_{c,2} - \int_{V_{c,2}}\int_{t^0}^{t^1}p(t)\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u}(t))dtdV_{c,2} \tag{5.3.3}$$

Les volumes sont indépendants du temps et la vitesse reste constante au cours du temps, ainsi

$$\int_{V_{c,2}}\int_{t^0}^{t^1}\frac{\partial\rho(t)e(t)}{\partial t}dtdV_{c,2} = -\int_{t^0}^{t^1}\int_{S_{c,2}}\rho(t)e(t)u_0\overrightarrow{x}.\overrightarrow{n}_{S_{c,2}}dtdS_{c,2} \tag{5.3.4}$$

$$\int_{V_{c,2}}\rho(t^1)e(t^1)dV_{c,2} = \int_{V_{c,2}}\rho(t^0)e(t^0)dV_{c,2} - \int_{t^0}^{t^1}\int_{S_{c,2}}\rho(t)e(t)u_0\overrightarrow{x}.\overrightarrow{n}_{S_{c,2}}dtdS_{c,2} \tag{5.3.5}$$

Les quantités sont constantes sur chaque volume de contrôle, d'où,

$$\rho_{V_{c,2}}(t^1)e_{V_{c,2}}(t^1) = \rho_{V_{c,2}}(t^0)e_{V_{c,2}}(t^0) - \frac{1}{V_{c,2}}\int_{t^0}^{t^1}\int_{S_{c,2}} \rho(t)e(t)u_0\overrightarrow{x}.\overrightarrow{n}_{S_{c,2}}dtdS_{c,2} \tag{5.3.6}$$

Ainsi, quelque soit t^0, quelque soit u_0, quelque soit $t^1 > t^0$ tel que $(t^1 - t^0)u_0 < \delta x_{V_{c,2}}$ avec $\delta x_{V_{c,2}}$ la dimension de $V_{c,2}$ selon l'axe $\overrightarrow{x}$, alors les flux d'énergie interne sont constants de t^0 à t^1. Les surfaces d'échanges sont $S_{c,l} = S_{c,r}$, on notera S dans la suite du calcul. Cela nous permet d'écrire sur $V_{c,2}$,

$$\rho_{V_{c,2}}(t^1)e_{V_{c,2}}(t^1) = \rho_{V_{c,2}}(t^0)e_{V_{c,2}}(t^0) + \frac{S(t^1 - t^0)u_0}{V_{c,2}}(\rho_{V_{c,1}}(t^0)e_{V_{c,1}}(t^0) - \rho_{V_{c,2}}(t^0)e_{V_{c,2}}(t^0)) \tag{5.3.7}$$

or, avec les EOS gaz parfait (pour le bien de la démonstration),

$$e_k(t) = \mathbb{E}_k T(t) \tag{5.3.8}$$

$$v_k(t) = \frac{\mathbb{V}_k T(t)}{p(t)} \tag{5.3.9}$$

avec $\mathbb{E}_k = C_{v,k}$ et $\mathbb{V}_k = (\gamma_k - 1)C_{v,k}$ on peut écrire, quelque soit t,

$$p_{V_{c,2}}(t) = \rho_{V_{c,2}}(t)e_{V_{c,2}}(t)\frac{Y_{1,V_{c,2}}(t)(\mathbb{V}_1 - \mathbb{V}_2) + \mathbb{V}_2}{Y_{1,V_{c,2}}(t)(\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2) + \mathbb{E}_2} \tag{5.3.10}$$

On cherche maintenant à identifier les conditions à vérifier pour assurer que la pression ne varie pas sur le volume $V_{c,2}$ de t^0 à t^1, c'est-à-dire assurer $p_{V_{c,2}}(t^0) = p_{V_{c,2}}(t^1)$. A l'aide de l'équation 5.3.10 on a,

$$\begin{aligned} & p_{V_{c,2}}(t^0) = p_{V_{c,2}}(t^1) \\ & \Leftrightarrow \\ & p_{V_{c,2}}(t^0) = \rho_{V_{c,2}}(t^1)e_{V_{c,2}}(t^1)\frac{Y_{1,V_{c,2}}(t^1)(\mathbb{V}_1 - \mathbb{V}_2) + \mathbb{V}_2}{Y_{1,V_{c,2}}(t^1)(\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2) + \mathbb{E}_2} \end{aligned}$$

et, d'après le bilan 5.3.6,

$$\begin{aligned} & p_{V_{c,2}}(t^0) = p_{V_{c,2}}(t^1) \\ & \Leftrightarrow \\ & p_{V_{c,2}}(t^0) = \left(\rho_{V_{c,2}}(t^0)e_{V_{c,2}}(t^0) + \frac{S(t^1 - t^0)u_0}{V_{c,2}}\left(\rho_{V_{c,1}}(t^0)e_{V_{c,1}}(t^0) - \rho_{V_{c,2}}(t^0)e_{V_{c,2}}(t^0)\right)\right)\frac{Y_{1,V_{c,2}}(t^1)(\mathbb{V}_1 - \mathbb{V}_2) + \mathbb{V}_2}{Y_{1,V_{c,2}}(t^1)(\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2) + \mathbb{E}_2} \end{aligned}$$

en faisant l'hypothèse que le volume $V_{c,1}$ est composé à t^0 uniquement de fluide 1 et $V_{c,2}$ de fluide 2, on a $Y_{1,V_{c,1}}(t^0) = 1$ et $Y_{1,V_{c,2}}(t^0) = 0$. De plus, dans la situation initiale, $p(t^0)$ est uniforme sur le domaine : $p_{V_{c,1}}(t^0) = p_{V_{c,2}}(t^0)$ et ainsi,

$$\rho_{V_{c,1}}(t^0)e_{V_{c,1}}(t^0) = \frac{p_{V_{c,2}}(t^0)\mathbb{E}_1}{\mathbb{V}_1} \tag{5.3.11}$$

$$\rho_{V_{c,2}}(t^0)e_{V_{c,2}}(t^0) = \frac{p_{V_{c,2}}(t^0)\mathbb{E}_2}{\mathbb{V}_2} \tag{5.3.12}$$

La condition pour que la pression reste constante sur $V_{c,2}$ s'écrit alors,

$$\begin{aligned} & p_{V_{c,2}}(t^0) = p_{V_{c,2}}(t^1) \\ & \Leftrightarrow \\ & p_{V_{c,2}}(t^0) = \left(\frac{p_{V_{c,2}}(t^0)\mathbb{E}_2}{\mathbb{V}_2} + \frac{S(t^1 - t^0)u_0}{V_{c,2}}\left(\frac{p_{V_{c,2}}(t^0)\mathbb{E}_1}{\mathbb{V}_1} - \frac{p_{V_{c,2}}(t^0)\mathbb{E}_2}{\mathbb{V}_2}\right)\right)\frac{Y_{1,V_{c,2}}(t^1)(\mathbb{V}_1 - \mathbb{V}_2) + \mathbb{V}_2}{Y_{1,V_{c,2}}(t^1)(\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2) + \mathbb{E}_2} \\ & \Leftrightarrow \\ & 1 = \left(\left(1 - \frac{S(t^1 - t^0)u_0}{V_{c,2}}\right)\frac{\mathbb{E}_2}{\mathbb{V}_2} + \frac{S(t^1 - t^0)u_0}{V_{c,2}}\frac{\mathbb{E}_1}{\mathbb{V}_1}\right)\frac{Y_{1,V_{c,2}}(t^1)(\mathbb{V}_1 - \mathbb{V}_2) + \mathbb{V}_2}{Y_{1,V_{c,2}}(t^1)(\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2) + \mathbb{E}_2} \end{aligned}$$

En développant on obtient finalement la condition,

$$
\begin{aligned}
& p_{V_{c,2}}(t^0) = p_{V_{c,2}}(t^1) \\
& \Leftrightarrow \\
& Y_{1,V_{c,2}}(t^1) = \frac{\mathbb{V}_2(t^1 - t^0)u_0 S}{\mathbb{V}_1(V_c - (t^1 - t^0)u_0 S) + (t^1 - t^0)u_0 S\mathbb{V}_2}
\end{aligned} \tag{5.3.13}
$$

De plus, l'expression des bilans de masse dans notre situation spécifique s'écrit,

$$m_{1,V_{c,2}}(t^1) = (t^1 - t^0)u_0 S\rho_{V_{c,1}}(t) \tag{5.3.14}$$

$$m_{V_{c,2}}(t^1) = V_{c,2}\rho_{V_{c,2}}(t^0) + (t^1 - t^0)u_0 S(\rho_{V_{c,1}}(t^0) - \rho_{V_{c,2}}(t^0)) \tag{5.3.15}$$

et,

$$\rho_{V_{c,1}}(t^0) = \frac{p(t^0)}{\mathbb{V}_1 T_{V_{c,1}}(t^0)} \tag{5.3.16}$$

$$\rho_{V_{c,2}}(t^0) = \frac{p(t^0)}{\mathbb{V}_2 T_{V_{c,2}}(t^0)} \tag{5.3.17}$$

donc

$$Y_{1,V_{c,2}}(t^1) = \frac{m_{1,V_{c,2}}(t^1)}{m_{V_{c,2}}(t^1)} = \frac{\mathbb{V}_2(t^1 - t^0)u_0 S T_{V_{c,2}}(t^0)}{\mathbb{V}_1 T_{V_{c,1}}(t^0)(V_c - (t^1 - t^0)u_0 S) + (t^1 - t^0)u_0 S\mathbb{V}_2 T_{V_{c,2}}(t^0)} \tag{5.3.18}$$

Ainsi on peut voir que la condition 5.3.13 et l'équation 5.3.18 ne sont égales que dans certaines situations. Il en résulte que la condition 5.3.13, qui permet d'assurer que la pression ne varie pas, est vérifiée seulement si les températures initiales sont identiques ou si la vitesse correspond à une advection remplissant tout $V_{c,2}$, donc ne créant pas de situation de mélange dans ce volume.

Ce raisonnement met en évidence qu'indépendamment du schéma numérique utilisé, le modèle *UPT* implique la perte de la préservation d'un champ de pression uniforme lors du transport d'une interface matérielle, excepté dans le cas particulier ou le champ de température est également uniforme.

5.3.3 Description du comportement discret

Dans ce paragraphe, nous allons décrire le comportement au niveau discret. Pour cela, on considère en 1D un stencil de trois mailles dans la situation initiale de notre cas de calcul, avec discontinuité de densité et de température. Le maillage est cartésien uniforme. La première maille g contient un fluide 1, les deux suivantes, appelées c et d sont composées d'un fluide 2. Chaque fluide a une équation d'état stiffened gas de paramètres différents. Pour le bien de la démonstration, les mailles sont purement monophasiques : $Y_k = 0$ ou 1. La considération de phases pures ou de mélange ne remet pas en cause la présentation qui suit, c'est une complexité de manipulation qui ne sera pas prise en compte.
Le comportement discret est illustré sur la figure 41 et décrit ci-après,

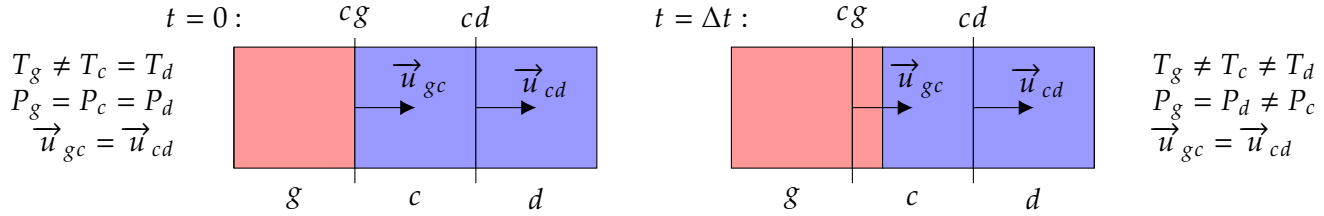
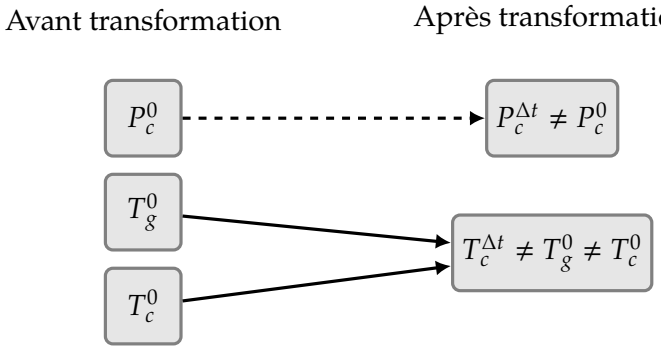


FIGURE 41 – **Configuration discrète du transport de discontinuité, à gauche l'instant initial, à droite après le premier pas de temps.**

— initialement, les phases sont à des températures différentes mais dans un état qui vérifie une pression identique dans chaque volume,
— à la fin de l'étape d'advection, la maille c se retrouve composée d'un mélange de deux phases. Sans l'équilibre de température, les phases vérifieraient alors, au sein de leurs volumes respectifs $V_{1,c}$ et $V_{2,c}$ dans la maille c :

$$\begin{array}{l} P^{\Delta t}_{V_{1,c}} = P^0_g \\ T^{\Delta t}_{1,V_{1,c}} = T^0_{1,g} \end{array} \quad \begin{array}{c} = \\ \neq \end{array} \quad \begin{array}{l} P^{\Delta t}_{V_{2,c}} = P^0_c \\ T^0_{2,V_{2,c}} = T^{\Delta t}_{2,c} \end{array}$$

C'est obtenu par le caractère conservatif du moteur d'écoulement, qui permet justement de conserver l'état initial quelque soit le schéma.
— l'équilibre en température impose la détermination d'une température unique pour le volume. La transformation vers une température commune est effectuée lors de l'utilisation des fermetures thermodynamiques et correspond à des échanges de chaleur instantanés au sein du volume,



Dans le cas général, la température finale n'est ni T^0_g ni T^0_c et cela conduit à l'obtention d'un état thermodynamique dans lequel $P^{\Delta t}_c$ ne peut être égal à P^0_c.

Sauf cas particulier, la pression de mélange ne peut être égale à la pression initiale. A priori, cette transformation est la combinaison d'un échange de chaleur instantané et d'une différence de compressibilité. Dans certaines conditions sur la compressibilité des fluides et la vitesse de l'écoulement, il est envisageable que la transformation qui tend à équilibrer les deux températures ait un effet qui soit compensé par la variation de pression.

5.3.4 Indépendance de la variation de pression initiale au maillage

Le principe étant exposé, on réalise maintenant l'analyse discrète au premier pas de temps avec notre schéma numérique, sur le stencil de 3 mailles présenté sur la figure 41 précédente. D'après la fermeture thermodynamique du modèle, on sait que $p^{n+1}_c = f(\rho^{n+1}_c, e^{n+1}_c, Y^{n+1}_{1,c})$. On cherche donc à exprimer la fraction massique de composant ainsi que la masse volumique et l'énergie interne spécifique de mélange en fonction des quantités initiales sur le premier pas de temps. Pour cela, on utilise les expressions générales du schéma numérique décrit dans la partie 4. Sur la maille c, à l'initialisation et avec un maillage cartésien qui vérifie $S_{cg} = S_{cd} = S$, on obtient,

$$(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^1_{cg} = (\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^0_{cg} \tag{5.3.19}$$

$$(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^1_{cd} = (\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^0_{cd} \tag{5.3.20}$$

$$m^1_c = m^0_c + \Delta t S(\rho^0_g(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^1_{cg} - \rho^0_c(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^1_{cd}) \tag{5.3.21}$$

$$m^1_{1,c} = m^0_{1,c} + \Delta t S(\alpha^0_{1,g}\rho^0_{1,g}(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^1_{cg} - \alpha^0_{1,c}\rho^0_{1,c}(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^1_{cd}) \tag{5.3.22}$$

$$i^1_c = i^0_c + \Delta t S(\rho^0_g e^0_g(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^1_{cg} - \rho^0_c e^0_c(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)^1_{cd}) \tag{5.3.23}$$

or, en utilisant le critère CFL défini par l'équation 4.3.22 que l'on exprimera ici,

$$\mathbb{M}\Delta t = CFL\Delta x \tag{5.3.24}$$

où $\mathbb{M}$ une valeur constante sur le pas de temps pour en simplifier l'écriture. On a, avec $S \times \Delta x = V_c$,

$$S\Delta t = \frac{V_c CFL}{\mathbb{M}} \tag{5.3.25}$$

Finalement, à l'aide des relations thermodynamiques qui permettent de déterminer les quantités au premier temps,

$$\rho_c^1 = \frac{m_c^1}{V_c} = \rho_c^0 + \frac{CFL}{\mathbb{M}}(\rho_g^0(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cg}^1 - \rho_c^0(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cd}^1) \tag{5.3.26}$$

$$e_c^1 = \frac{i_c^1}{m_c^1} = \frac{\mathbb{M}\rho_c^0 e_c^0 + CFL(\rho_g^0 e_g^0(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cg}^1 - \rho_c^0 e_c^0(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cd}^1)}{\mathbb{M}\rho_c^0 + CFL(\rho_g^0(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cg}^1 - \rho_c^0(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cd}^1)} \tag{5.3.27}$$

$$Y_{1,c}^1 = \frac{m_{1,c}^1}{m_c^1} = \frac{\mathbb{M}\rho_{1,c}^0 + CFL(\alpha_{1,g}^0\rho_{1,g}^0(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cg}^1 - \alpha_{1,c}^0\rho_{1,c}^0(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cd}^1)}{\mathbb{M}\rho_c^0 + CFL(\rho_g^0(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cg}^1 - \rho_c^0(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}^G)_{cd}^1)} \tag{5.3.28}$$

la dépendance au volume de maille disparait. Ainsi, pour des conditions initiales identiques et une condition de CFL identique, p_c^1 ne dépend pas du maillage.

5.3.5 Etude dans la configuration d'intérêt

Afin de déterminer si ce comportement doit être considéré comme gênant ou négligeable, on étudie l'advection d'une interface d'UO2 liquide dans de la vapeur d'eau. C'est la situation initiale de notre étude dans laquelle une goutte de corium chute dans un film de vapeur de réfrigérant. Pour la vapeur d'eau on utilise les paramètres d'équation d'état déterminés dans la partie 4. Concernant l'UO2 liquide, on récupère dans la base de données de l'International Atomic Energy Agency [74] des ordres de grandeur pour les propriétés nécessaires, $C_p \sim 800 J.kg^{-1}.K^{-1}$ et $\rho \sim 9000 kg.m^{-3}$ à (3000 K, 0.1 MPa). Ne disposant pas de l'information, on conserve le $\gamma = 3.423$ de l'eau liquide pour l'UO2, ce qui permet d'obtenir $C_v \sim 230\ J.kg^{-1}.K^{-1}$ et une pression de référence $P_\infty(UO2) \sim 1.5x10^{10}\ Pa$. Le calcul est initialisé à pression atmosphérique $P_0 = 10^5\ Pa$ et les températures de l'UO2 liquide et de la vapeur d'eau sont respectivement 3000 K et 1000 K. Les valeurs limites de fraction massique et de température sont reliées continuement à l'aide des régularisations en tangente hyperbolique suivantes,

$$g_1(x) = 0.5 \times (1 + tanh(\frac{x_0 - x}{l})) \tag{5.3.29a}$$

$$g_2(x) = 0.5 \times (1 + tanh(\frac{x - x_0}{l})) \tag{5.3.29b}$$

avec x_0 la position de l'interface et l un paramètre qui permet de définir la raideur autour du point x_0. Ainsi, les profils de température et de fraction massique sont,

$$Y_1(x) = g_1(x)Y_{1,left} + g_2(x)Y_{1,right} \tag{5.3.30}$$

$$T(x) = g_1(x)T_{left} + g_2(x)T_{right} \tag{5.3.31}$$

La vitesse initiale est toujours de $5ms$ et la pression de $10^5 Pa$, les conditions sont résumées dans le schéma 42,

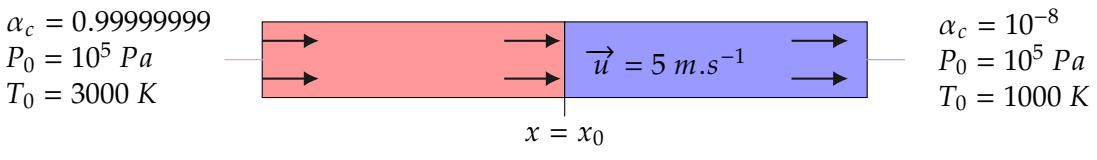


FIGURE 42 – **Configuration du cas de transport d'une interface de corium**

On présente les résultats pour un maillage fixe $\Delta x = 10^{-7}$ et pour trois raideurs d'interface différentes ($l = 2 \times 10^{-6}$, $l = 1 \times 10^{-6}$ et $l = 5 \times 10^{-7}$). Les pas de temps vérifient le critère CFL et on présente les résultats au temps réel $t = 1 \mu s$.

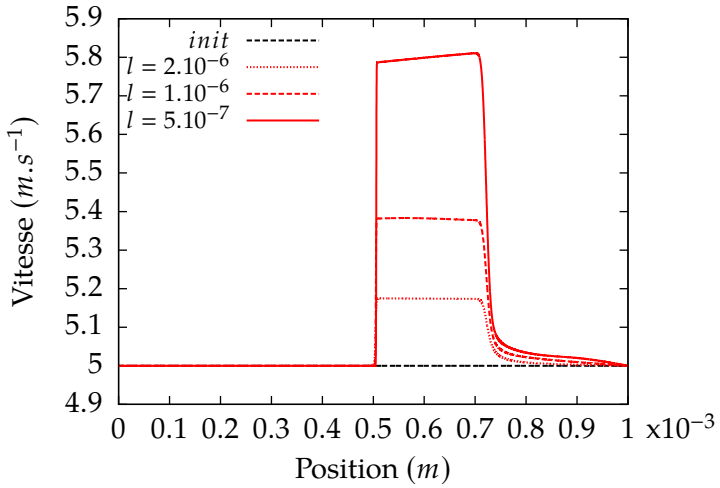


FIGURE 43 – Profils de vitesse à 1 μs de temps réel pour le cas de transport d'une interface de corium pour plusieurs raideurs de l'interface.

Raidir l'interface tend à générer une vitesse plus importante, cela provient d'une variation de pression plus raide à l'interface aux premiers instants.

5.3.6 Bilan

Dans cette section, nous avons vu le comportement du modèle thermomécanique dans une situation de transport diphasique avec non uniformité du profil de température sur l'interface. L'hypothèse d'équilibre en température est responsable d'échanges de chaleur au passage de l'interface, ce qui a pour conséquence de générer une variation de pression, ne permettant pas de retrouver la solution d'un problème de transport sans échanges de chaleur usuel. En effet, le problème de transport sans échanges de chaleur est hors du domaine de validité du modèle qui, lui, est indissociable des échanges de chaleur au travers de l'interface. Plus particulièrement, ce modèle est valide *uniquement* dans le cas limite ou les échanges de chaleur entre les phases sont instantanés.

Or, la frontière du domaine de validité de ce modèle est encore confuse, ce qui rend son utilisation délicate. Dans notre cas, il est aisé de voir que l'on résout une discontinuité de température puisque l'initialisation est réalisée à partir de cette quantité. Cependant, nous pensons qu'en initialisant avec des quantités plus complexes (densité, énergie, pression) il est possible de se retrouver dans une situation dans laquelle on résout une discontinuité de température sans y prêter attention. De plus, le système d'équations bilans du modèle continu ne fait pas apparaître de terme d'échanges d'énergie. Ainsi, il est aisé de penser résoudre un modèle sans échanges alors qu'il les maximise. Ces éléments illustrent une fragilité pour identifier aisément les effets pris en compte dans les modèle à interfaces diffuses et les situations dans lesquels ils sont applicables.

L'étude menée ici permet également de soulever une problématique plus générale qui concerne toutes les hypothèses d'équilibre. En effet, on rappelle que chaque hypothèse d'équilibre correspond à des échanges instantanés entre phases au sein d'un volume de contrôle moyen. Cela signifie que, au même titre que l'équilibre en température est susceptible de rendre le modèle thermomécanique inadéquat pour traiter de problèmes avec échanges de chaleur, l'équilibre en vitesse peut rendre le modèle mécanique inadéquat pour traiter de problèmes avec échanges de quantité de mouvement entre les phases. Il est également possible qu'il en soit de même pour l'équilibre en pression et les effets de gonflement mécanique. Cette remarque est importante à prendre en compte dans la phase de vérification-validation d'un code de calcul pour identifier avec pertinence les cas de validation adaptés

et inadaptés aux différents modèles. En particulier, on remarque qu'un comportement similaire à celui présenté ici a déjà été observé avec le modèle thermomécanique [51] pour des problèmes de transport. Ces comportements ont été attribués aux méthodes de résolution numérique. Cependant, il est tout à fait probable que les modèles employés en soient responsables.

Finalement, on souligne le fait que ces modèles doivent être appréhendés avec précaution, à cause des différents effets couplés répartis entre le système d'équations aux dérivées partielles et la thermodynamique qui découle des équilibres.

5.4 Conclusion

Dans cette partie, l'implémentation du modèle à l'équilibre thermomécanique a été vérifiée et validée. Les effets hydrodynamiques et thermiques ont été validés de manière indépendante dans des situations classiques de transport et de diffusion de la chaleur. Les effets couplés ont ensuite été validés vis-à-vis de cas de validation disponibles dans la littérature. Une extension triphasique du modèle thermomécanique sans transferts de chaleur a été présentée et implémentée, les résultats 2D permettent d'illustrer les capacités de ce type de modèle à traiter de la forte déformation d'interfaces et les capacités de la méthode numérique à gérer la formation d'ondes de chocs.

Dans un second temps, le comportement du modèle lors d'un problème de transport de discontinuité de contact avec non uniformité de température sur l'interface a été présenté. Cela a permis de souligner l'importance de la maîtrise du domaine de validité de l'hypothèse d'équilibre en température et le besoin de cohérence entre la construction du modèle et l'application.

En particulier, dans notre application, on utilisera généralement une discontinuité de quantités, qui est une situation encore plus raide que celles présentées ici. On considère donc que le comportement du modèle se répercute de manière trop intense sur la vitesse de l'écoulement. *L'hypothèse d'échanges de chaleur instantanés nous apparaît trop restrictive dans le cadre de notre application*. De plus, les échanges de chaleur ayant un rôle très important dans l'explosion de vapeur, on pense qu'il faut avoir un contrôle plus fin, plutôt qu'une surestimation des échanges (uniquement au passage de l'interface, qui dépend de la taille de l'interface...).

Finalement, dans le contexte du développement logiciel de micro-SCONE, l'utilisation du modèle thermomécanique complexifie considérablement la phase de validation. En effet, les limites du domaine de définition du modèle sont encore confuses, et les conséquences de l'équilibre en température ne sont pas identifiées dans un grand nombre de situations. Cela crée des ambiguités pour déterminer l'origine des observables et il faut alors discerner les effets du modèle en plus des effets liés aux aspects numériques. De plus, la validation par effets séparés nous impose de pouvoir traiter de problèmes purement hydrodynamiques, pour lesquels le modèle a montré certaines limites. L'ensemble de ces problématiques nous a poussé à vouloir développer un autre modèle. Toutefois, le modèle thermomécanique reste disponible dans SCONE et micro-SCONE si des applications futures se présentent en accord avec les restrictions qu'il impose.

Sixième partie

Modèle à l'équilibre mécanique et transferts de chaleur

Les deux premières sections de cette partie reprennent la structure de la partie précédente. On ajoutera des éléments spécifiques à l'intégration de ce modèle dans micro-SCONE. La troisième section présente la problématique liée aux transferts de chaleur dans le modèle mécanique et la quatrième présente quelques cas d'application dans une configuration plus proche de notre configuration d'intérêt.

6.1 Description du modèle

Le modèle à l'équilibre de vitesse et pression, appelé modèle à l'équilibre mécanique ou UP a originellement été développé pour traiter des effets de compaction dans les milieux granulaires [53] lors de la transition déflagration-détonation dans les explosifs condensés. Depuis, ce modèle a largement été étendu sous une forme sans effets granulaires pour le traitement de problèmes à interfaces [75]. Cela a permis des extensions supplémentaires pour la résolution de nombreux problèmes à physiques variées tels que des problèmes de cavitation, [76], d'interaction solides-fluides en grandes déformations [77] ou plus récemment d'interaction choc-gouttes en présence d'effets capillaires [46]. C'est la catégorie de modèle la plus développée dans la hiérarchie des modèles à interfaces diffuses présentée dans la partie 3.

Le modèle diphasique que nous avons implémenté repose sur le système d'équations bilans 6.1.1, présenté par Saurel et al. [75]. Il est écrit sans transferts thermiques dans un premier temps,

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{u}.\overrightarrow{\nabla}(\alpha_1) = \frac{\alpha_1\alpha_2(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2)}{\alpha_2\rho_1 c_1^2 + \alpha_1\rho_2 c_2^2}\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u}) \tag{6.1.1a}$$

$$\frac{\partial \alpha_1\rho_1}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1\rho_1\overrightarrow{u}) = 0 \tag{6.1.1b}$$

$$\frac{\partial \alpha_2\rho_2}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_2\rho_2\overrightarrow{u}) = 0 \tag{6.1.1c}$$

$$\frac{\partial \rho\overrightarrow{u}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\rho\overrightarrow{u}\otimes\overrightarrow{u}) + \overrightarrow{\nabla}(p) = 0 \tag{6.1.1d}$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho E\overrightarrow{u}) + \overrightarrow{\nabla}.(p\overrightarrow{u}) = 0 \tag{6.1.1e}$$

On y retrouve les équations de conservation du volume et de masse du composant 1, l'équation de conservation de la masse du composant 2 et les équations de conservation de quantité de mouvement et d'énergie totale du mélange. Les quantités ρ, $\overrightarrow{u}$ et E sont respectivement les densité, vitesse et énergie totale spécifique du mélange. Ce système d'équations bilans est complété par la contrainte de saturation, des équations d'état par phase, les relations qui définissent les quantités de mélange et les relations d'équilibre.

La contrainte de saturation s'écrit $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$.

Les fermetures thermodynamiques sont les équations d'état par phase, ici des équations de type stiffened gas,

$$p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k C_{v,k} T_k - P_{\infty,k} \tag{6.1.2}$$

$$e_k = C_{v,k} T_k + \frac{P_{\infty,k}}{\rho_k} + q_k \tag{6.1.3}$$

Les relations définissant les quantités de mélange permettent de lier les quantités phasiques aux

quantités de mélange,

$$\rho = \alpha_1\rho_1 + \alpha_2\rho_2 \tag{6.1.4}$$
$$q = Y_1 q_1 + Y_2 q_2 \tag{6.1.5}$$
$$e = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 \tag{6.1.6}$$
$$E = Y_1 E_1 + Y_2 E_2 \tag{6.1.7}$$
$$\tag{6.1.8}$$

où $E_k = e_k + \frac{1}{2}\overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{u_k}$ et Y_k sont les fractions massiques des composants telles que $Y_k = \frac{\alpha_k\rho_k}{\rho}$.
Les équilibres, ici $p = p_1 = p_2$ et $\overrightarrow{u} = \overrightarrow{u_1} = \overrightarrow{u_2}$, permettent d'exprimer la pression en fonction des quantités de mélange,

$$p = \frac{\rho(e-q) - \left(\frac{\alpha_1\gamma_1 P_{\infty,1}}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2\gamma_2 P_{\infty,2}}{\gamma_2 - 1}\right)}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}} \tag{6.1.9}$$

6.2 Vérification-validation du moteur d'écoulement du modèle à l'équilibre mécanique

Dans cette section, nous allons présenter deux cas tests pour s'assurer de l'implémentation du modèle à l'équilibre mécanique dans micro-SCONE.

Pour s'assurer de l'implémentation et de la possibilité d'utiliser ce modèle pour la suite de la modélisation de l'explosion de vapeur, il est nécessaire de vérifier que le transport d'une discontinuité de contact avec non uniformité du profil de température est réalisé conformément au comportement attendu. Nous appliquerons ensuite le modèle à un cas 2D de la littérature pour en illustrer les capacités.

6.2.1 Transport de discontinuité de contact dans un domaine non isotherme

Le but de ce cas test est de s'assurer du comportement du code de calcul lors du transport d'interfaces dans un domaine non isotherme. La configuration du cas test est identique à la configuration qui a permis d'illustrer le comportement du modèle UPT dans la section 5.3. On rappelle que l'une des raisons qui justifient l'utilisation du modèle UP est de ne pas altérer le transport d'une discontinuité de contact lorsque le système d'équations bilans ne fait pas intervenir explicitement de termes sources. Ainsi, ce cas test permettra d'une part de vérifier l'implémentation du modèle à l'équilibre mécanique et d'autre part de s'assurer qu'aucune variation de pression ou de vitesse n'est générée au passage des interfaces.

La configuration est rappelée sur le schéma 44 et les paramètres des équations d'état utilisées dans le tableau 12. C'est un cas test diphasique 1D dans lequel les interfaces sont caractérisées par une variation de fraction volumique.

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$q(J.kg^{-1})$
Eau Liquide	3.423	1231.2	8.99×10^8	-1.15×10^6
Eau Vapeur	1.358	1247	0	1.97×10^6

Table 12 – Coefficients des équations d'état pour l'eau liquide et sa vapeur

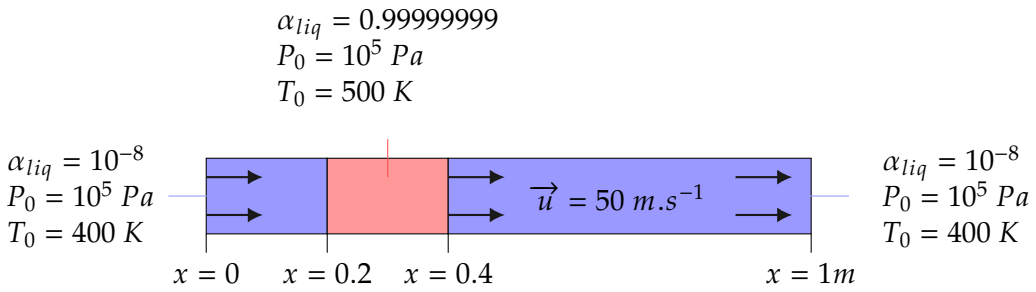


FIGURE 44 – **Configuration du cas test de transport diphasique avec température non homogène sur le domaine**

Remarque concernant la détermination de l'état initial :
L'utilisation d'un modèle en déséquilibre de température pose des questions pratiques supplémentaires, en partie dès l'initialisation d'un cas de calcul. Il faut dorénavant spécifier une température par phase. Les températures des phases en limite phase pure sont naturellement à la température désirée pour le cas test, ici 500 K pour le liquide et 400 K dans la vapeur. Cependant, il est nécessaire de faire un choix concernant les phases résiduelles. Pour cela, on rappelle que la seule chose qui est attendue d'une phase résiduelle est de ne pas altérer significativement les propriétés de la phase en limite phase pure lors du passage aux quantités de mélange. Toutefois, il n'existe pas de moyen prédictif pour évaluer l'influence de cette phase résiduelle au cours d'un calcul. Il est seulement possible d'évaluer l'erreur entre les quantités phasiques et les quantités de mélange à l'initialisation. Pour réduire cette erreur, on peut alors vouloir imposer des contraintes sur le fait de retrouver la densité ou bien l'énergie de mélange identique à celle de la limite phase pure. C'est faisable en ajustant la température de la phase résiduelle de manière à vérifier $\rho_1 = \rho_2 = \rho$ ou bien $e_1 = e_2 = e$. Néanmoins, en fonction des EOS et des équilibres considérés, il n'est pas toujours possible de vérifier ces deux contraintes en même temps, ce qui est le cas dans notre situation (SG EOS et équilibre de pression). Un choix doit alors être fait, en donnant plus d'importance à l'une de ces deux quantités par exemple.

Il est également possible de se baser sur d'autres considérations physiques, telles que la régularité du profil de température que l'on peut attendre, ou bien des raisons pratiques en fonction des entrées et sorties d'un code de calcul par exemple.

Dans ce travail, nous ne proposerons que des cas présentés dans deux types de configurations possibles concernant les températures des phases résiduelles. Dans certains cas, la température de la phase résiduelle sera la même que celle de la limite phase pure, correspondant à une initialisation où les phases sont initialement en équilibre de température. Dans d'autres cas, en particulier lors de l'utilisation d'interfaces initialement diffuses, nous utiliserons plutôt une valeur de température de phase constante sur le domaine. Ainsi, une phase k dans une zone où elle est résiduelle sera à la température de l'endroit où k est en limite phase pure.

Pour illustrer ces deux configurations et leurs conséquences, le cas de calcul a été réalisé dans les deux situations, les profils de température correspondants sont présentés sur la figure 46. L'état initial est déterminé à l'aide de la pression et des températures phasiques en limite phase pure initiales, respectivement $P_0 = 10^5\ Pa$, $T_{liq,0} = 500\ K$ et $T_{vap,0} = 400\ K$. Les températures des phases résiduelles ont été choisies suivant les deux raisonnements décrits précédemment. Les paramètres numériques sont : $\Delta x = 10^{-3}$ et Δt est déterminé de manière à vérifier le critère CFL.

Les résultats obtenus sur les pressions, vitesses et densité de mélange étant équivalents, on ne présente que pour l'un des deux cas sur la figure 45 à l'instant initial et au temps final $t_f = 0.008\ s$. Les résultats obtenus sur les températures phasiques sont présentés sur les figures 46 aux mêmes instants.

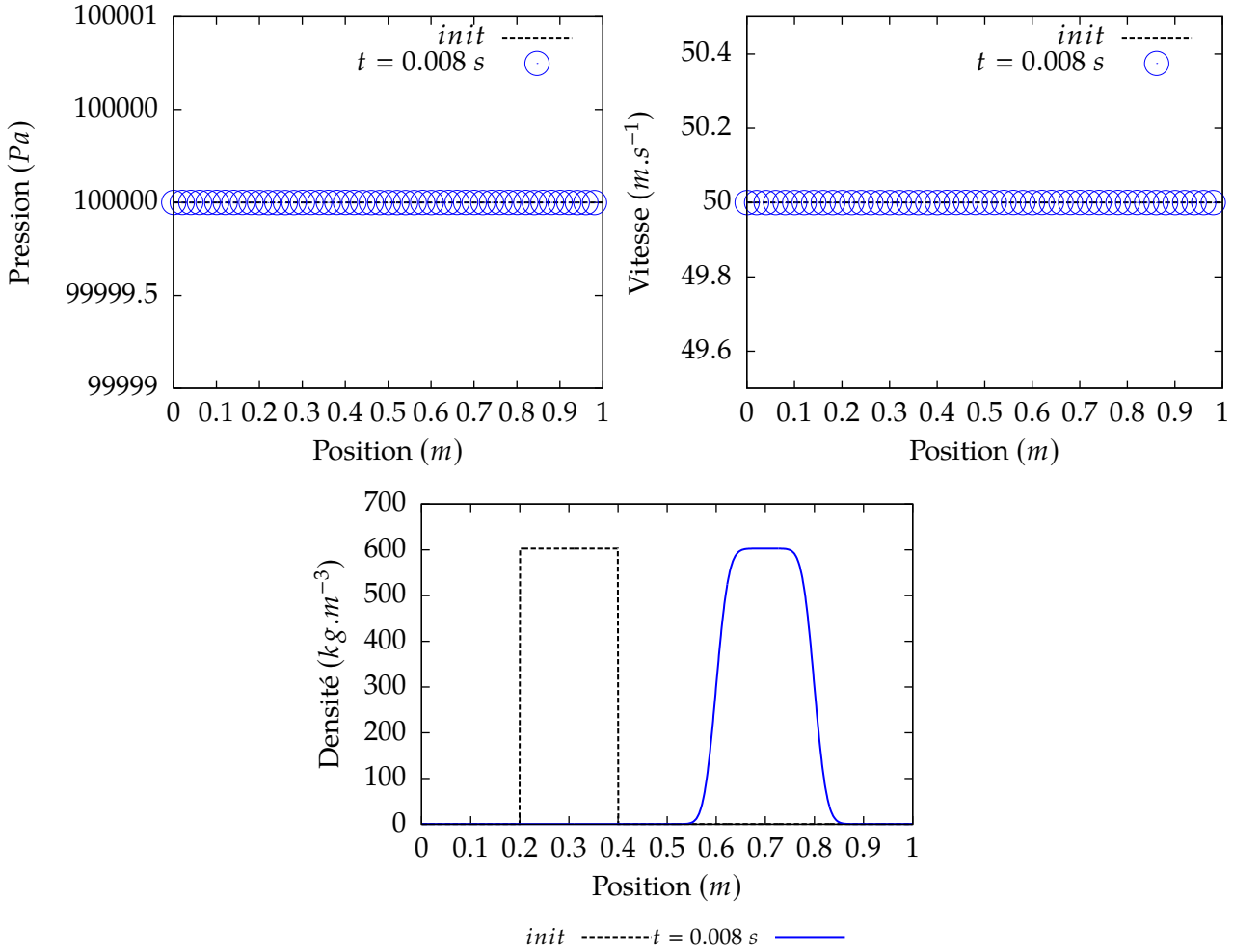


FIGURE 45 – Transport d'un volume de fluide dans un milieu de densité différente avec discontinuité de température initiale sur le domaine avec le modèle à l'équilibre mécanique.

Les profils de pression et de vitesse restent constants et la densité est advectée à la bonne vitesse, ce qui est conforme aux résultats attendus avec ce modèle.

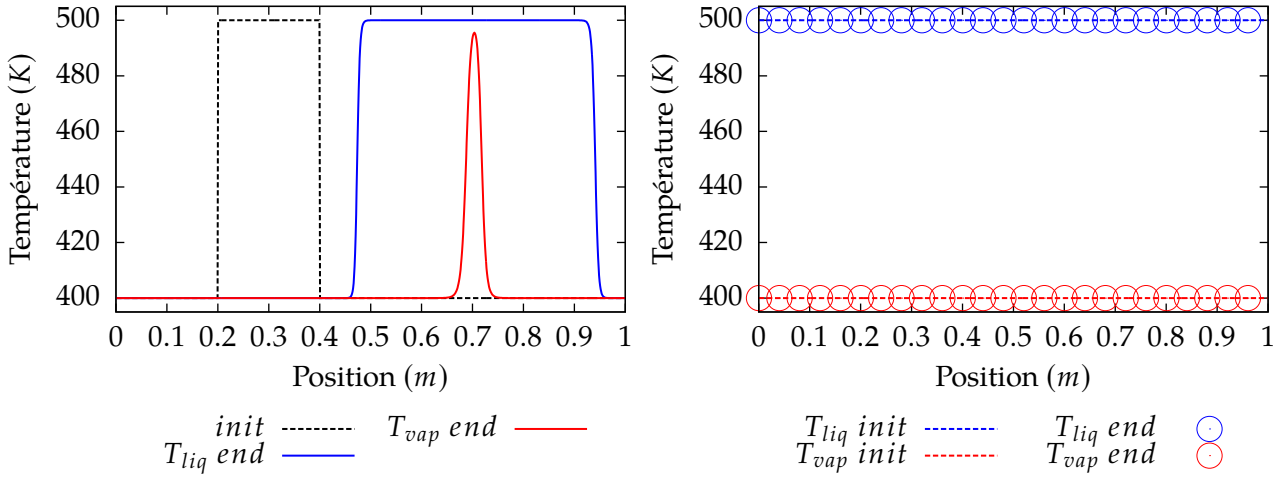


FIGURE 46 – Profils de température pour le cas de transport avec non uniformité de la température sur le domaine. À gauche, la température de la phase résiduelle est initialement à la même température que la phase majoritaire. À droite, la température de chaque phase est initialement constante sur le domaine.

Les profils de température présentent des comportements différents en fonction de l'initialisation du calcul. Dans le premier cas, en équilibre initial des températures, on voit l'influence de la diffusion de l'interface sur les profils de température finaux. Les écarts entre les températures des deux phases sont voués à disparaître avec le raidissement de l'interface. Dans le second cas, on peut voir que les températures sont inchangées au cours du temps.

Les deux comportements sont cohérents et valides puisqu'ils n'ont pas démontré d'influence sur le comportement du mélange. En pratique, on préfèrera utiliser un équilibre des températures initiales dans des cas présentant une interface discontinue à l'initialisation mais des températures constantes sur le domaine lors de cas avec une interface initialement diffuse.

Finalement, ce cas test a permis de s'assurer de pouvoir réaliser un cas de transport avec non uniformité du profil de température sans générer de variation de pression au passage de l'interface. Il a également permis de soulever la question du choix de l'état thermodynamique initial des phases résiduelles.

6.2.2 Implosion hydrodynamique

Le but de ce cas test est de s'assurer de l'implémentation dans l'architecture parallèle de micro-SCONE et d'illustrer les capacités du modèle UP dans un cas multi-dimensionnel.

Ce cas de calcul est emprunté à la série de cas tests de validation du code de calcul HERACLES [7], développé par l'IRFU [8] et traite de la formation d'un jet axial monophasique. La configuration initiale est représentée sur le schéma 47. La région bleue est en surpression par rapport à la région rouge. Les ondes de choc qui vont se former et leurs différentes réflexions dans le domaine vont former un jet selon l'axe $y = x$.

7. http://irfu.cea.fr/Projets/Site_heracles/
8. http://irfu.cea.fr/dap/

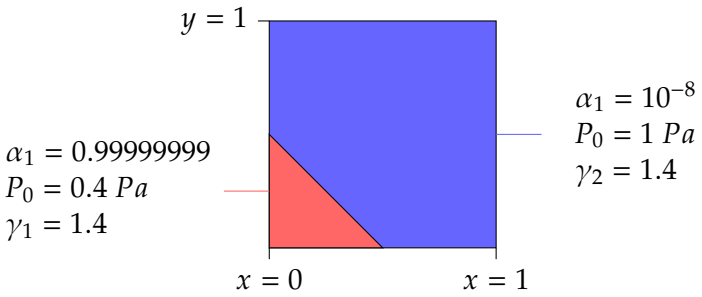


FIGURE 47 – **Configuration du test de validation d'implosion hydrodynamique**

C'est un cas monophasique, pour lequel on utilise tout de même la description diphasique de l'architecture de micro-SCONE i.e. le fluide initialement dans la zone en dépression sera considéré comme étant le fluide 1 et le fluide initialement dans la zone en surpression sera considéré comme étant le fluide 2. Les équations d'état sont des équations d'état gaz parfait dont les paramètres sont identiques $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.4$. Concernant les paramètres numériques, le maillage est cartésien et le domaine est composé de 500 mailles dans chaque direction donc $\Delta x = \Delta y = 2 \times 10^{-3}$ et Δt est calculé de manière à assurer le critère CFL. Le calcul est lancé en parallèle sur 4 processeurs qui traitent chacun un quart du domaine.

La figure 48 présente le contour de fraction volumique du fluide 1, initialement en dépression, aux instants $t = 0.25\ s$, $0.5\ s$, $0.75\ s$ et $1\ s$.

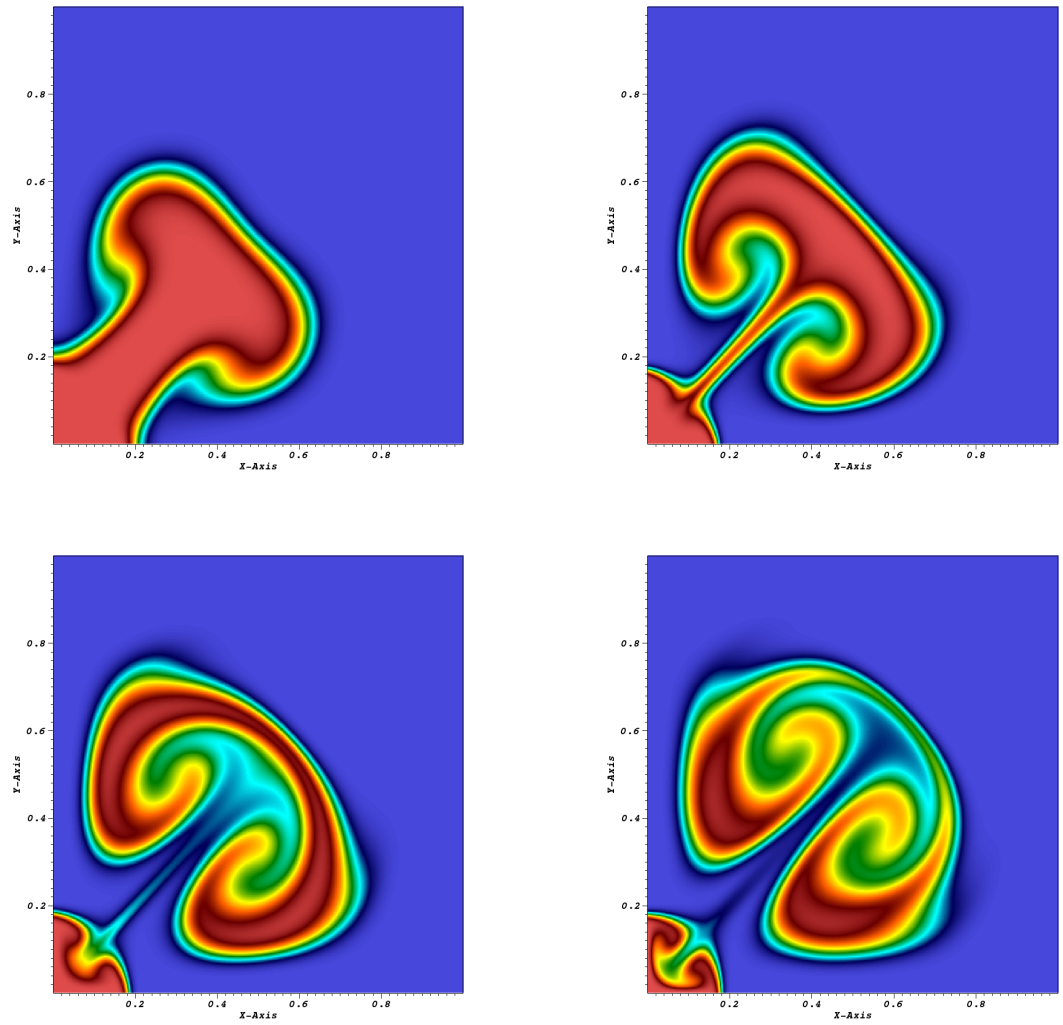


FIGURE 48 – Formation d'un jet lors du cas test d'implosion hydrodynamique monophasique

La formation du jet selon l'axe $y = x$ est bien retrouvée. La symétrie semble être conservée et aucun artefact lié à l'utilisation du calcul parallèle n'est observé. Cela permet de vérifier et valider l'utilisation de ces différents outils avec le modèle à l'équilibre mécanique.

Concernant la structure du jet, elle est fortement dépendante de la diffusion numérique, on ne retrouve ici que les caractéristiques globales, conséquence de l'utilisation d'un schéma d'ordre 1. Encore une fois, le passage à un ordre plus élevé ou le raidissement des interfaces devrait permettre l'obtention des structures plus fines de l'écoulement.

6.3 Transferts de chaleur dans le modèle à l'équilibre mécanique

Dans le cadre de l'étude de l'interaction corium-réfrigérant, les transferts de chaleur sont indissociables des effets hydrodynamiques [7]. Il nous faut donc disposer d'un modèle capable de traiter des transferts de chaleur. Nous allons nous intéresser ici à l'élaboration d'un tel modèle.

Cette section se décompose de la manière suivante,

— le premier paragraphe a pour but de rappeler succinctement la forme générale d'un modèle multiphasique moyenné puis le modèle réduit en équilibre de vitesse et de pression avec transfert de chaleur,

— le deuxième paragraphe décrit les modélisations des termes de transfert de chaleur de la littérature,

— le troisième paragraphe aborde les problématiques de discrétisation des modèles existants. Nous verrons les contraintes liées à l'initialisation d'un cas de calcul et à la 'cohérence' des termes discrets. La nécessité de disposer d'un nouveau modèle continu sera abordée,

— le quatrième paragraphe présente une proposition de modélisation qui permet de prendre en compte une situation plus générale,

— les paragraphes suivants présentent tour à tour la discrétisation puis la vérification de l'implémentation des équations d'énergie et de volume obtenues dans le but de valider la modélisation proposée,

— le dernier paragraphe présente un bilan de la section.

Les développements qui sont faits ici sont spécifiques au diphasique et ne doivent en aucun cas être transposés directement à un écoulement multiphasique général. Cependant, on abordera autant que possible les termes sous l'angle de leur signification ou de leur interprétation pour apporter des informations utiles à l'extension du raisonnement en multiphasique.

6.3.1 Modèles à équilibre de vitesse et pression avec transferts de chaleur

A notre connaissance, les modèles en équilibre de vitesse et pression qui abordent de la manière la plus complète les transferts de chaleur sont ceux proposés par Labois [50] et Petitpas et al. [44]. Le premier introduit une forme très générale des transferts de chaleur tandis que le second décrit de manière plus précise les phénomènes mis en jeu et porte une attention particulière à leurs expressions. Ces deux modèles ont pour point de départ le modèle 6.3.1 qui est ici présenté sous une forme simplifiée (sans changement de phase ni effets du déviateur des contraintes). De plus, le terme de transfert de chaleur est conservé sous sa forme moyennée $\overline{X_k \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_k})}$ obtenu par la démarche décrite dans la partie 3.

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = -\overrightarrow{u_I}.\overrightarrow{\nabla}(\alpha_1) \tag{6.3.1a}$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \rho_1 \overrightarrow{u_1}) = 0 \tag{6.3.1b}$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \overrightarrow{u_1}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\alpha_1 \rho_1 \overrightarrow{u_1} \otimes \overrightarrow{u_1}) + \overrightarrow{\nabla}(\alpha_1 p_1) + p_{1,I}.\overrightarrow{\nabla}(\alpha_1) = 0 \tag{6.3.1c}$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1(\rho_1 E_1 + p_1)\overrightarrow{u_1}) + p_{1,I}.\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overline{X_1 \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_1})} = 0 \tag{6.3.1d}$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_2 \rho_2 \overrightarrow{u_2}) = 0 \tag{6.3.1e}$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 \overrightarrow{u_2}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\alpha_2 \rho_2 \overrightarrow{u_2} \otimes \overrightarrow{u_2}) + \overrightarrow{\nabla}(\alpha_2 p_2) + p_{2,I}.\overrightarrow{\nabla}(\alpha_2) = 0 \tag{6.3.1f}$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_2(\rho_2 E_2 + p_2)\overrightarrow{u_2}) + p_{2,I}.\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \overline{X_2 \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_2})} = 0 \tag{6.3.1g}$$

Les termes indicés I représentent les termes interfaciaux [50, 51, 52, 53, 75, 78]. En suivant la procédure proposée par Labois [50] pour déterminer un sous-système dans lequel les différentes phases évoluent en équilibre de pression et de vitesse, le système diphasique obtenu est le suivant,

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \overrightarrow{u}) = \frac{\alpha_1 \rho_2 c_2^2}{\alpha_1 \rho_2 c_2^2 + \alpha_2 \rho_1 c_1^2} \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u}) - \frac{\left(\alpha_2 \Gamma_1 (\overline{X_1 \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_1})}) - \alpha_1 \Gamma_2 (\overline{X_2 \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_2})})\right)}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} \tag{6.3.2a}$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \rho_1 \overrightarrow{u}) = 0 \tag{6.3.2b}$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_2 \rho_2 \overrightarrow{u}) = 0 \tag{6.3.2c}$$

$$\frac{\partial \rho \overrightarrow{u}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\rho \overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{u}) + \overrightarrow{\nabla}(p) = 0 \tag{6.3.2d}$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho e \overrightarrow{u}) + p \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u}) + (\overline{X_1 \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_1})} + \overline{X_2 \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_2})}) = 0 \tag{6.3.2e}$$

avec $\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$ la densité de mélange, $e = Y_1 e_1 + Y_2 e_2$ l'énergie interne spécifique de mélange et,

$$c_k^2 = \left.\frac{\partial p_k}{\partial \rho_k}\right|_{s_k} = \frac{\frac{p_k}{\rho_k^2} - \left.\frac{\partial e_k}{\partial \rho_k}\right|_{p_k}}{\left.\frac{\partial e_k}{\partial p_k}\right|_{\rho_k}} = \frac{\gamma_k}{\rho_k}(p + P_{\infty,k}) \tag{6.3.3}$$

$$\Gamma_k = v_k \left.\frac{\partial p_k}{\partial e_k}\right|_{\rho_k} = (\gamma_k - 1) \tag{6.3.4}$$

c_k la vitesse du son de la phase k et Γ_k son coefficient de Gruneisen.

6.3.2 Modélisation des termes de transfert de chaleur dans la littérature

Concentrons-nous maintenant sur la modélisation des termes de transferts de chaleur $\overline{X_k \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_k})}$. On rappelle que ce terme traduit l'ensemble des transferts de chaleur avec la phase k présente dans le volume moyen. Il peut également s'écrire sous la forme $\overrightarrow{\nabla}.(\overline{X_k \overrightarrow{\phi_k}}) - \overline{\overrightarrow{\phi_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)}$. Le premier terme traduit les effets de diffusion de la chaleur au sein de la phase, on parlera parfois de transferts intra-phase. Le second terme traduit les échanges de chaleur entre les phases sur l'interface, on parlera parfois de transferts inter-phases. Dans ses travaux, Labois [50], propose de modéliser ces termes de la manière suivante,

$$\overrightarrow{\nabla}.(\overline{X_k \overrightarrow{\phi_k}}) - \overline{\overrightarrow{\phi_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k)} \sim \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overrightarrow{\phi_k}) + Q_{k,I} \tag{6.3.5}$$

La relation d'interface qu'il propose permet d'écrire,

$$\sum_k Q_{k,I} = 0 \tag{6.3.6}$$

Finalement, après avoir introduit la notation $Q_{1,I} = -Q_{2,I} = Q_I$, la fermeture entropique du modèle permet de modéliser Q_I comme un terme de relaxation $Q_I \sim H_{relax}(T_2 - T_1)$. Le système 6.3.2 devient,

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \overrightarrow{u}) = \frac{\alpha_1 \rho_2 c_2^2}{\alpha_1 \rho_2 c_2^2 + \alpha_2 \rho_1 c_1^2} \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u}) - \frac{\left(\alpha_2 \Gamma_1 \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \overrightarrow{\phi_1}) - \alpha_1 \Gamma_2 \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_2 \overrightarrow{\phi_2}) - (\alpha_2 \Gamma_1 + \alpha_1 \Gamma_2) H_{relax}(T_2 - T_1)\right)}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2} \tag{6.3.7a}$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \rho_1 \overrightarrow{u}) = 0 \tag{6.3.7b}$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_2 \rho_2 \overrightarrow{u}) = 0 \tag{6.3.7c}$$

$$\frac{\partial \rho \overrightarrow{u}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\rho \overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{u}) + \overrightarrow{\nabla}(p) = 0 \tag{6.3.7d}$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho e \overrightarrow{u}) + p \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u}) + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \overrightarrow{\phi_1}) + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_2 \overrightarrow{\phi_2}) = 0 \tag{6.3.7e}$$

Dans leurs travaux, Petitpas et al. [44] introduisent la notion de fluctuation du flux de chaleur à l'interface en s'inspirant des travaux de Chinnayya et al. [54] et expriment,

$$\overrightarrow{\nabla}.(X_k \overrightarrow{\phi_k}) - \overrightarrow{\phi_k}.\overrightarrow{\nabla}(X_k) \sim \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overrightarrow{\phi_k}) - \overrightarrow{Q_I}.\overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) - H(T_j - T_k) \tag{6.3.8}$$

Le premier terme représente toujours les effets de diffusion, le second les échanges de chaleur entre les phases sur l'interface et le troisième la contribution des fluctuations du flux de chaleur à l'interface autour de sa valeur moyenne. A l'aide de la relation d'interface suivante,

$$\sum_k \overrightarrow{Q_I}.\overrightarrow{\nabla}(\alpha_k) + H(T_j - T_k) = 0 \tag{6.3.9}$$

le système 6.3.2 devient,

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \overrightarrow{u}) &= \frac{\alpha_1 \rho_2 c_2^2}{\alpha_1 \rho_2 c_2^2 + \alpha_2 \rho_1 c_1^2} \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u}) \\ &- \frac{\left(\alpha_2 \Gamma_1 \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \overrightarrow{\phi_1}) - \alpha_1 \Gamma_2 \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_2 \overrightarrow{\phi_2}) - (\alpha_2 \Gamma_1 + \alpha_1 \Gamma_2) \overrightarrow{Q_I}.\overrightarrow{\nabla}(\alpha_1) - (\alpha_2 \Gamma_1 + \alpha_1 \Gamma_2) H(T_2 - T_1)\right)}{\alpha_2 \rho_1 c_1^2 + \alpha_1 \rho_2 c_2^2}\end{aligned} \tag{6.3.10a}$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \rho_1 \overrightarrow{u}) = 0 \tag{6.3.10b}$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_2 \rho_2 \overrightarrow{u}) = 0 \tag{6.3.10c}$$

$$\frac{\partial \rho \overrightarrow{u}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\rho \overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{u}) + \overrightarrow{\nabla}(p) = 0 \tag{6.3.10d}$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho e \overrightarrow{u}) + p \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u}) + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \overrightarrow{\phi_1}) + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_2 \overrightarrow{\phi_2}) = 0 \tag{6.3.10e}$$

La différence avec le modèle proposé par Labois étant finalement une contribution supplémentaire dans l'équation d'évolution de la fraction volumique. Les autres équations bilans sont identiques, en particulier l'équation d'énergie de mélange.

6.3.3 Conséquence directe de la discrétisation des termes de transfert de chaleur existants

Dans les modèles existants pour traiter des transferts de chaleur, les termes qui interviennent dans l'équation d'énergie sont uniquement des termes de diffusion. Ces termes traduisent, au niveau continu, les transferts de chaleur au sein d'une phase. Ainsi, ces modèles ne sont pas conçus pour prendre en considération les échanges entre les différentes phases. Cela pose un problème dans une

partie des situations qui nous intéressent dans lesquelles la mise en mouvement du fluide dépend uniquement de ces échanges, comme dans la situation représentée sur le schéma 49.

Pour illustrer le problème, nous considérons une situation stable diphasique (vitesse nulle, pression constante) avec discontinuité de température entre les phases. Comme nous l'avons vu dans la section 5.2.3, ce sont les transferts d'énergie qui permettent la variation de pression des différentes phases et la génération d'une dynamique. Ainsi, nous n'allons considérer que l'équation d'énergie et identifier les limitations liées à cette modélisation, dans le cadre ou les échanges d'énergie entre phases sont nécessaires. Cette équation d'énergie interne, identique dans les deux modèles présentés dans la section précédente s'écrit,

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} = -\sum_k \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_k \overrightarrow{\phi_k}) \tag{6.3.11}$$

et devient avec la méthode des volumes finis,

$$\int_{V_c} \frac{\partial \rho e}{\partial t} dV = -\int_{S_c} \sum_k \alpha_k \overrightarrow{\phi_k}.\overrightarrow{n_S} dS \tag{6.3.12}$$

puis, discrétisé selon le schéma usuel en temps et en espace,

$$\rho_c^{n+1} e_c^{n+1} = \rho_c^n e_c^n - \frac{\Delta t}{V_c} * \sum_{cd} \sum_k \alpha_{k,cd}^n * S_{cd} * \overrightarrow{\phi}_{k,cd}^n . \overrightarrow{n}_{cd} \tag{6.3.13}$$

Le flux de chaleur au sein d'une phase k sera modélisé par la loi de Fourier en assurant, au niveau discret, la continuité du flux de chaleur entre les mailles,

$$\overrightarrow{\phi}_{k,cd}^n . \overrightarrow{n}_{cd} \sim -2 * \frac{\lambda_{k,c}\lambda_{k,d}}{\lambda_{k,c} + \lambda_{k,d}} \left(\frac{T_{k,d}^n - T_{k,c}^n}{\| \overrightarrow{x_d} - \overrightarrow{x_c} \|} \right) \tag{6.3.14}$$

Le dernier terme à discrétiser est $\alpha_{k,cd}$ qui doit représenter la fraction volumique de la phase k sur la surface cd. On pourrait vouloir utiliser $\widehat{\alpha}_{k,cd}$ la valeur duale, cependant nous allons voir ici que $\alpha_{k,cd}$ doit vérifier certaines contraintes et que cela a des conséquences problématiques. Le schema 49, présente la configuration initiale dans laquelle les échanges de chaleur entre les deux limites phases pures agissent comme un moteur thermique de l'écoulement. La maille c est la maille d'intérêt et on nomme les mailles g et d respectivement situées à gauche et à droite de c.

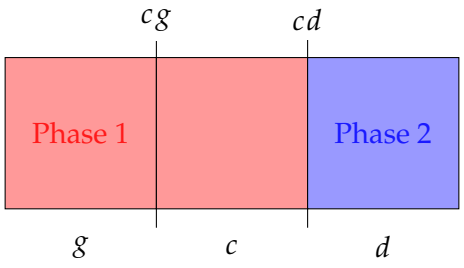


FIGURE 49 – **Configuration initiale dans laquelle les échanges de chaleur doivent agir comme moteur thermique**

La phase 1 est en contact avec la phase 2 selon la surface cd. Ainsi, dans la maille c, l'équation d'énergie s'écrit,

$$\begin{aligned} V_c \rho_c^{n+1} e_c^{n+1} =& V_c \rho_c^n e_c^n \\ & - \Delta t * (\alpha_{1,cg}^n S_{cg} \overrightarrow{\phi}_{1,cg}^n . \overrightarrow{n_{cg}} + \alpha_{1,cd}^n S_{cd} \overrightarrow{\phi}_{1,cd}^n . \overrightarrow{n_{cd}}) \\ & - \Delta t * (\alpha_{2,cg}^n S_{cg} \overrightarrow{\phi}_{2,cg}^n . \overrightarrow{n_{cg}} + \alpha_{2,cd}^n S_{cd} \overrightarrow{\phi}_{2,cd}^n . \overrightarrow{n_{cd}}) \end{aligned} \tag{6.3.15}$$

Or, les expressions de $\overrightarrow{\phi}^n_{1,cd}.\overrightarrow{n}_{cd}$ et $\overrightarrow{\phi}^n_{2,cd}.\overrightarrow{n}_{cd}$ qui s'écrivent selon l'équationn 6.3.14 font alors intervenir respectivement $T^n_{1,d}$ et $T^n_{2,c}$ qui sont les températures des phases résiduelles dans les volumes en question. N'ayant aucun contrôle sur l'état des phases résiduelles, il nous apparait difficile de justifier la prise en compte de ces termes pour faire évoluer l'énergie interne du mélange, ce qui impose la contrainte $\alpha^n_{1,cd} = \alpha^n_{2,cd} = 0$. Cela se traduit par l'absence de transfert d'énergie entre les phases pures. De manière plus générale, cette approche ne permet pas de traiter les transferts d'énergie à partir d'une initialisation de calcul dans lequel les phases pures sont séparées.
On retiendra les points suivants,

— selon la discrétisation adoptée, il existe des contraintes liées aux échanges avec les phases résiduelles,

— cette approche ne permet pas de disposer d'un moteur thermique lorsque deux mailles de phase pure différentes sont en contact.

6.3.4 Proposition de modélisation des transferts de chaleur

Dans le but de faire apparaitre l'ensemble des transferts, on propose de décomposer le terme de transfert moyen $\overline{X_k \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_k})}$ en une somme de trois contributions,

— des effets de diffusion intra-phase inter-volumes,

— des échanges inter-phases inter-volumes,

— des échanges inter-phases au sein du volume.

Cette décomposition se distingue des modélisations précédentes par l'utilisation d'un terme d'échanges inter-phases inter-volumes. Pour l'écrire, on considère l'intégration du terme de transfert de chaleur sur un volume de contrôle. Ainsi, en introduisant les double indices kk ou kj pour indiquer la nature des phases impliquées, on propose la formulation suivante,

$$\int_{V_c} \overline{X_k \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_k})} dV = \int_{S_{c,kk}} \overrightarrow{\phi_{kk}}.\overrightarrow{n_{kk}} dS + \sum_{j \neq k} \left(\int_{S_{c,kj}} \overrightarrow{\phi_{kj}}.\overrightarrow{n_{kj}} dS + \int_{S_{int,kj}} \overrightarrow{\phi_{kj}}.\overrightarrow{n_{kj}} dS \right) \tag{6.3.16}$$

Cette formulation ne s'exprime que sous une forme intégrale car elle fait apparaitre une interdépendance des surfaces de transfert, les différentes surfaces qui interviennent sont représentées sur le schéma 50.

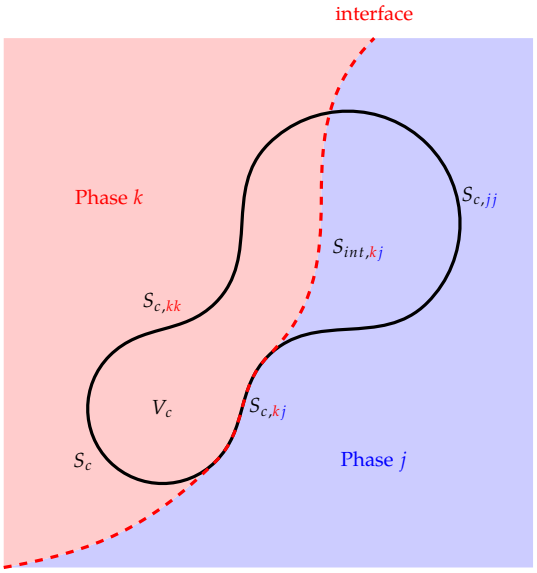


FIGURE 50 – **Représentation des différentes surfaces qui interviennent dans la formulation des échanges de chaleur proposée.**

En effet, la surface d'un volume est une partition des surfaces sur lesquelles on retrouve les effets de diffusion intra-phase $S_{c,kk}$ et les échanges inter-phases $S_{c,kj}$. La surface d'échange intérieure $S_{int,kj}$, elle, est indépendante, inconnue et peut être quelconque a priori. Seule la définition du type de problème que l'on cherche à résoudre (problème à interface, inclusions, milieux homogènes...) permettra de donner des indications sur la topologie interne de l'écoulement dans le volume et proposer une modélisation de cette contribution intérieure. C'est cette contribution qui est exprimée sous la forme d'un terme de relaxation dans les modèles de la littérature. Pour la suite de ce travail, sous l'hypothèse de continuité du flux de chaleur sur les différentes surfaces, on propose d'exprimer deux types de relations d'interfaces,

— une relation d'interface interne,

$$\int_{S_{int,kj}} \overrightarrow{\phi_{kj}}.\overrightarrow{n_{kj}}dS = -\int_{S_{int,jk}} \overrightarrow{\phi_{jk}}.\overrightarrow{n_{jk}}dS \tag{6.3.17}$$

— une relation d'interface à la surface du volume, appelée relation d'interface externe. On l'écrit, en appelant ext l'ensemble des volumes partageant une surface commune avec le volume c,

$$\int_{S_{c,kj}} \overrightarrow{\phi_{kj}}.\overrightarrow{n_{kj}}dS = -\int_{S_{ext,jk}} \overrightarrow{\phi_{jk}}.\overrightarrow{n_{jk}}dS \tag{6.3.18}$$

L'écriture du terme de transfert de chaleur que l'on propose permet de faire intervenir un terme supplémentaire par rapport aux modélisations existantes. Cela permet en particulier de disposer du moteur thermique dans la situation qui nous intéresse, à savoir deux phases en limite phase pure initialement en contact. Nous allons maintenant voir la discrétisation et la vérification de l'implémentation de l'équation d'énergie puis de l'équation de transport de volume qui découlent de cette modélisation.

6.3.5 Formulation discrète des transferts de chaleur dans l'équation d'énergie

Pour décrire la formulation discrète des transferts d'énergie, on se place dans le cadre où seuls les effets thermiques sont pris en compte, l'équation d'énergie de mélange 6.3.2e s'écrit alors,

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} = -\sum_k \overline{X_k \overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_k})} \tag{6.3.19}$$

et devient, avec l'utilisation de la méthode des volumes finis sur un volume de contrôle V_c,

$$\int_{V_c} \frac{\partial \rho e}{\partial t} dV = -\sum_k \left(\int_{S_{c,kk}} \overrightarrow{\phi_{kk}}.\overrightarrow{n_{kk}}dS + \sum_{j\neq k} \int_{S_{c,kj}} \overrightarrow{\phi_{kj}}.\overrightarrow{n_{kj}}dS \right) \tag{6.3.20}$$

et on obtient l'évolution de l'énergie de mélange au niveau discret,

$$\rho_c^{n+1} e_c^{n+1} = \rho_c^n e_c^n - \frac{\Delta t}{V_c} * \sum_{cd} \sum_k \left(S^n_{kk,cd} \overrightarrow{\phi}_{kk,cd}.\overrightarrow{n}_{kk,cd} + \sum_{j\neq k} \left(S^n_{kj,cd} \overrightarrow{\phi}_{kj,cd}.\overrightarrow{n}_{kj,cd} \right) \right) \tag{6.3.21}$$

avec la loi de Fourier pour écrire $\overrightarrow{\phi}_{kk,cd}.\overrightarrow{n}_{kk,cd}$ et $\overrightarrow{\phi}_{kj,cd}.\overrightarrow{n}_{kj,cd}$,

$$\overrightarrow{\phi}^n_{kk,cd}.\overrightarrow{n}_{kk,cd} \sim -2 * \frac{\lambda_{k,c}\lambda_{k,d}}{\lambda_{k,c}+\lambda_{k,d}} \left(\frac{T^n_{k,d} - T^n_{k,c}}{\| \overrightarrow{x_d} - \overrightarrow{x_c} \|} \right) \tag{6.3.22}$$

$$\overrightarrow{\phi}^n_{kj,cd}.\overrightarrow{n}_{kj,cd} \sim -2 * \frac{\lambda_{k,c}\lambda_{j,d}}{\lambda_{k,c}+\lambda_{j,d}} \left(\frac{T^n_{j,d} - T^n_{k,c}}{\| \overrightarrow{x_d} - \overrightarrow{x_c} \|} \right) \tag{6.3.23}$$

soit, en diphasique,

$$\begin{aligned} V_c \rho_c^{n+1} e_c^{n+1} =& V_c \rho_c^n e_c^n \\ &- \Delta t * \sum_{cd} S^n_{11,cd} \overrightarrow{\phi}_{11,cd} . \overrightarrow{n}_{11,cd} + S^n_{12,cd} \overrightarrow{\phi}_{12,cd} . \overrightarrow{n}_{12,cd} \\ &- \Delta t * \sum_{cd} S^n_{22,cd} \overrightarrow{\phi}_{22,cd} . \overrightarrow{n}_{22,cd} + S^n_{21,cd} \overrightarrow{\phi}_{21,cd} . \overrightarrow{n}_{21,cd} \end{aligned} \tag{6.3.24}$$

A noter que l'on fait intervenir les surfaces d'échange $S^n_{11,cd}$ et $S^n_{22,cd}$ devant les flux de chaleur intra-phase et non plus la surface totale comme c'était le cas dans la section précédente. De plus, on rajoute la notion temporelle pour traduire le fait que ces surfaces sont susceptibles de varier au cours du temps. Conformément à la formulation du modèle proposée, l'évaluation discrète des différentes contributions ne peut se faire de manière indépendante. Cependant, au niveau discret, nous n'avons pas accès aux surfaces d'échanges. Il est alors possible de chercher à les reconstruire, ou de faire une hypothèse sur la topologie.

Par exemple, dans le cas d'un problème avec des inclusions de taille plus faible que la taille des volumes moyens, il peut convenir de considérer que les surfaces d'échanges intérieures seront très majoritaires devant les surfaces extérieures, permettant de les négliger. Une fermeture adaptée doit alors être proposée, en stipulant une topologie (bulles sphériques, fragments cylindriques ...) et utiliser la modélisation des transferts en accord (échanges convectifs avec corrélations adaptées à des géométries sphériques...). Lorsque l'on traite de problèmes à interface, on fait l'approximation que l'échelle considérée permet de capter toutes les déformations de l'interface. C'est-à-dire que localement à un volume de contrôle, l'interface est plane. L'interface réelle est donc raide et positionnée au sein d'un volume de contrôle ou bien à sa surface. On rappelle que l'origine de la diffusion de l'interface n'est que numérique, nous ferons donc l'hypothèse suivante,

Hypothèse : L'interface numérique est 'étagée' entre les phases. Dans chaque direction, indépendemment les unes des autres, les phases sont organisées de manière ordonnée.

Par exemple, dans une direction de l'espace cartésien, le schéma 51 illustre la représentation retenue pour décrire numériquement la transition entre les limites phases pures. En introduisant les doubles indices discrets sur les phases de manière à indiquer les phases impliquées, $S^n_{cd,12}$ est la surface entre c et d dans laquelle la phase 1 de c est en regard avec la phase 2 de d à l'itération n.

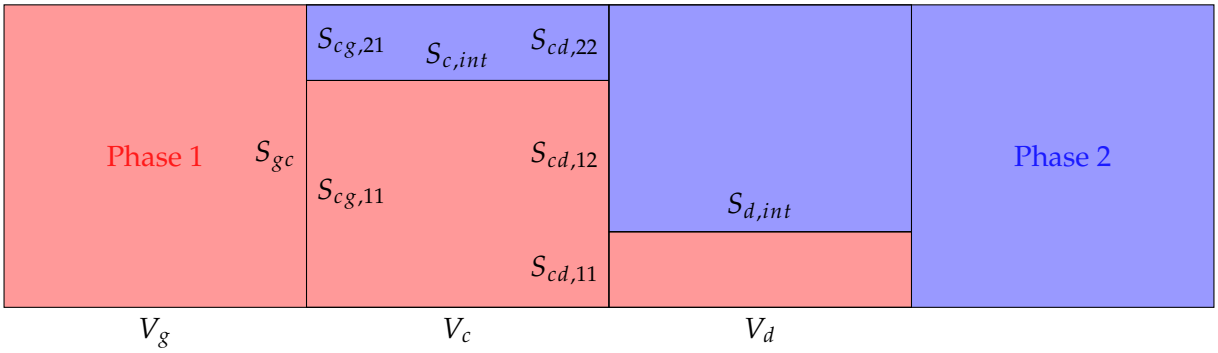


FIGURE 51 – **Schéma illustrant la représentation 'étagée' de l'interface numérique diffuse.**

Ainsi, on peut écrire le partitionnement d'une surface,

$$S^n_{cd} = S^n_{11,cd} + S^n_{22,cd} + S^n_{12,cd} + S^n_{21,cd} \tag{6.3.25}$$

et la condition d'interface externe,

$$S^n_{12,cd} = S^n_{21,dc} \tag{6.3.26}$$

De plus, en faisant cette hypothèse, on impose des contraintes supplémentaires sur les configurations possibles. En particulier le fait que les deux surfaces d'échange inter-phases ne peuvent pas co-exister,

$$S^n_{21,cd} * S^n_{12,cd} = 0 \tag{6.3.27}$$

et que les différentes surfaces d'échange peuvent s'écrire, à l'aide de considérations purement géométriques,

$$S^n_{12,cd} + S^n_{21,cd} = \| \alpha^n_{1,d} - \alpha^n_{1,c} \| * S^n_{cd} \tag{6.3.28}$$

$$S^n_{11,cd} = 0.5 * \left(\alpha^n_{1,d} + \alpha^n_{1,c} - \| \alpha^n_{1,d} - \alpha^n_{1,c} \| \right) * S^n_{cd} \tag{6.3.29}$$

$$S^n_{22,cd} = 0.5 * \left(\alpha^n_{2,d} + \alpha^n_{2,c} - \| \alpha^n_{2,d} - \alpha^n_{2,c} \| \right) * S^n_{cd} \tag{6.3.30}$$

Le signe de $\alpha^n_{k,d} - \alpha^n_{k,c}$ donne alors une indication sur la phase en présence qui échange avec la phase étrangère de l'autre volume. Si $\alpha^n_{k,d} - \alpha^n_{k,c} > 0$ alors la surface d'échange inter-phases est $S^n_{jk,cd}$. L'existence dans le volume c de la surface $S^n_{kj,cd}$ pour l'échange inter-phases inter-mailles peut être conditionnée par l'indicatrice,

$$0.5 * \left(1 - \frac{\alpha^n_{k,d} - \alpha^n_{k,c}}{\| \alpha^n_{k,d} - \alpha^n_{k,c} \|} \right) \tag{6.3.31}$$

qui vaut 0 ou 1, si $\alpha^n_{k,d} - \alpha^n_{k,c} \neq 0$. L'expression se désingularise pour finalement écrire les surfaces d'échange inter-phases,

$$\begin{aligned} S^n_{12,cd} &= \| \alpha^n_{1,d} - \alpha^n_{1,c} \| * 0.5 * \left(1 - \frac{\alpha^n_{1,d} - \alpha^n_{1,c}}{\| \alpha^n_{1,d} - \alpha^n_{1,c} \|} \right) * S^n_{cd} \\ &= 0.5 * \left(\| \alpha^n_{1,d} - \alpha^n_{1,c} \| - (\alpha^n_{1,d} - \alpha^n_{1,c}) \right) * S^n_{cd} \end{aligned} \tag{6.3.32}$$

et,

$$S^n_{21,cd} = 0.5 * \left(\| \alpha^n_{2,d} - \alpha^n_{2,c} \| - (\alpha^n_{2,d} - \alpha^n_{2,c}) \right) * S^n_{cd} \tag{6.3.33}$$

Cette formulation assure de ne pas avoir d'échange avec une phase résiduelle ainsi que la conservativité de l'énergie. Elle est valable au cours du temps et dans chaque direction de l'espace. Le modèle discret obtenu est équivalent au modèle discret proposé par Petitpas et al. [44]. Cependant, il est ici basé sur une modélisation des échanges de chaleur au niveau continu qui prend en compte les contributions inter-phases inter-volumes puis une description discrète dans laquelle la diffusion de l'interface n'est vue que comme la conséquence de la diffusion numérique et ne traduit aucun phénomène physique. Les contraintes que l'on impose au niveau discret sur la partition des surfaces d'échange ont pour but d'assurer une compatibilité avec les phénomènes physiques que l'on traite. Cette représentation permet en particulier de retrouver, en 1D, la même surface d'échange que si l'interface était parfaitement raide. En multi-D, cela correspond toutefois à une approximation et nous n'aurons nécessairement pas la même précision dans des directions différentes du repère cartésien. Ces imprécisions sont inhérentes à l'utilisation d'un maillage fixe indéformable et non à la représentation proposée.

6.3.6 Validation du modèle, vérification de l'implémentation de la forme discrète de l'équation d'énergie

Le but de ce cas test est de valider les échanges thermiques entre phases et de vérifier l'implémentation des effets de diffusion de la chaleur dans le modèle UP. C'est un problème de thermique dépourvu d'effets hydrodynamiques. Les solutions de référence qui existent pour des problèmes de mur semi-infini avec une condition aux limites de température ou de flux imposé ont été présentés dans la partie précédente. Nous verrons ici le problème de contact de deux murs semi infinis. Deux

configurations seront proposées. La première, avec une interface raide permettra de s'assurer que l'on est capable de traiter des échanges inter-phases inter-mailles. La seconde, avec une interface initialement diffuse, permettra de vérifier que notre modèle permet de traiter correctement l'ensemble des transferts de chaleur au travers d'une interface proche de celles rencontrées lors de cas de calculs plus complexes. La configuration initiale, décrite sur le schéma 52 est diphasique pour s'assurer que les échanges entre les phases sur la discontinuité initiale sont bien retrouvés.

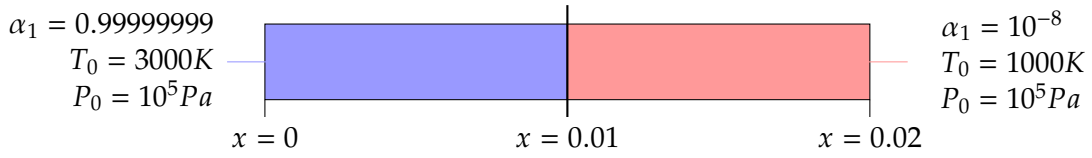


FIGURE 52 – **Configuration du cas test de vérification-validation des effets de conduction de la chaleur entre deux murs semi-infinis avec le modèle UP.**

Les coefficients des équations d'état pour les différents fluides et leur conductivité thermique, considérée constante, sont présentés dans le tableau 13.

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$\lambda(W.m^{-1}.K^{-1})$
Liquide	4.4	1000	6×10^8	10 000
Vapeur	1.4	100	0	100

TABLE 13 – Paramètres des SG EOS du liquide pour les tests de conduction

Le domaine de calcul mesure $20mm$ et les résultats sont présentés à $10\mu s$. Les paramètres numériques sont $\Delta x = 5 \times 10^{-5}$ et $\Delta t = 10^{-10}$, ce qui permet d'assurer le critère de stabilité $CFL_{th} \leq 0.5$ défini tel que,

$$\frac{max_k(D_{th,k})\Delta t}{\Delta x^2} = CFL_{th} \tag{6.3.34}$$

avec $D_{th,k} = \frac{\lambda_k}{\rho_k C_{v,k}}$ la diffusivité thermique du fluide k dans sa limite phase pure. Les conditions aux limites sont des conditions de symétrie. La température des phases résiduelles est prise de manière à ce que la température soit constante sur le domaine par phase. Les comparaisons entre la solution analytique et le résultat du calcul réalisé avec micro-SCONE sont présentées sur la figure 53.

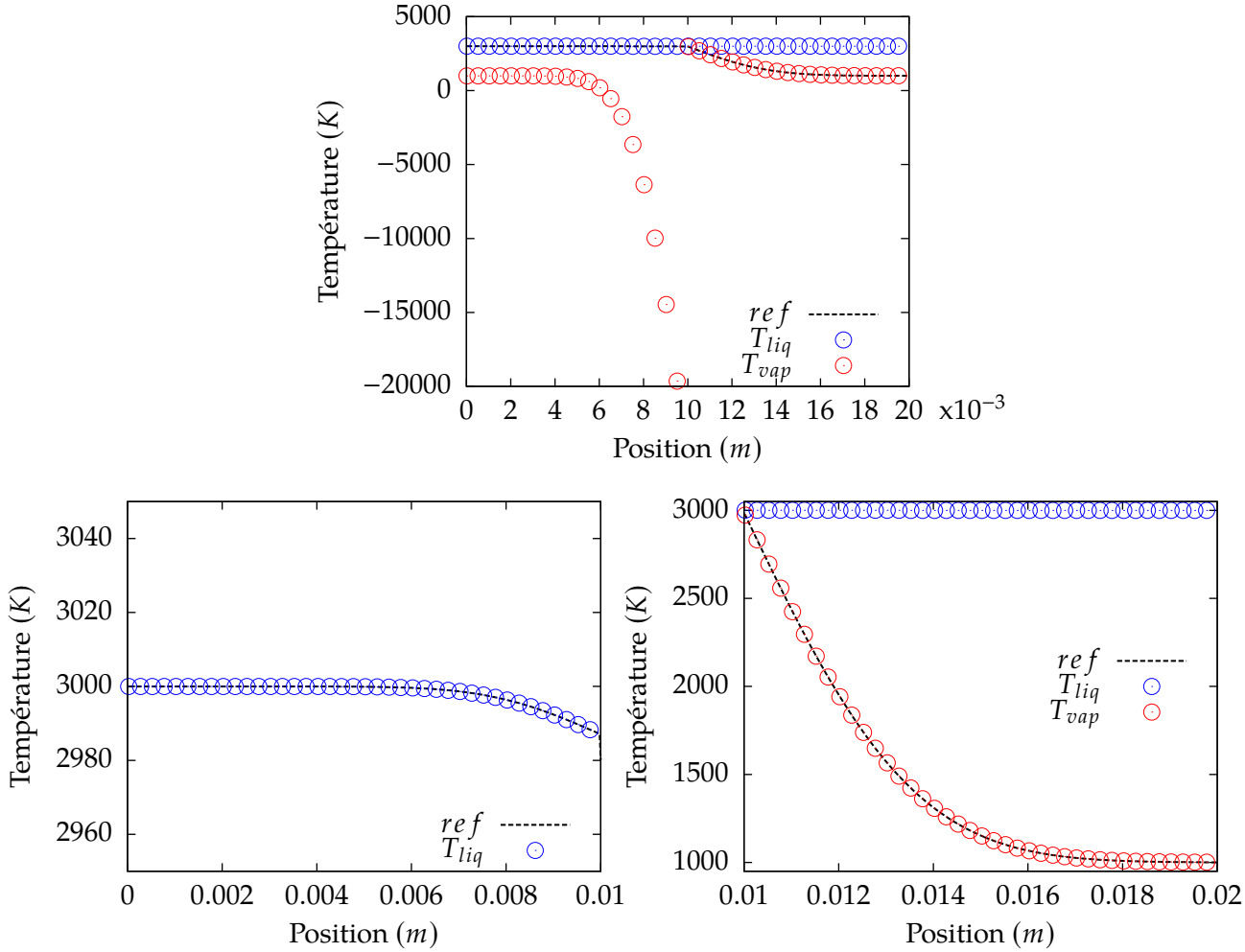


FIGURE 53 – Profils de température pour le cas de conduction de la chaleur entre deux murs semi-infinis avec une interface initialement raide au temps $t = 10\mu s$. Le premier graphe présente les différents profils sur le domaine complet, les graphes suivants présentent les profils de part et d'autre de l'interface. Le nombre de points affichés à été réduit pour plus de clarté.

L'accord entre la solution exacte et les profils en limite phase pure est satisfaisant. Concernant les phases résiduelles, le liquide dans la limite phase pure vapeur est peu affecté. Cependant, la vapeur dans la limite phase pure liquide voit sa température atteindre $\sim -20000\ K$. Bien que surprenant, ce comportement n'a pas de répercussions sur le reste du calcul. Cela n'entre pas en contradiction avec ce que l'on attend de la phase résiduelle, qui est de ne pas avoir d'influence sur le comportement général, donc ce comportement sera considéré comme acceptable.

Les résultats du cas test réalisé avec une interface initialement diffuse sont présentés sur les graphes de la figure 54. La diffusion initiale de l'interface est réalisée sur la fraction volumique et suit une tangente hyperbolique, décrite par le système 5.3.29, avec $l = 10^{-4}$.

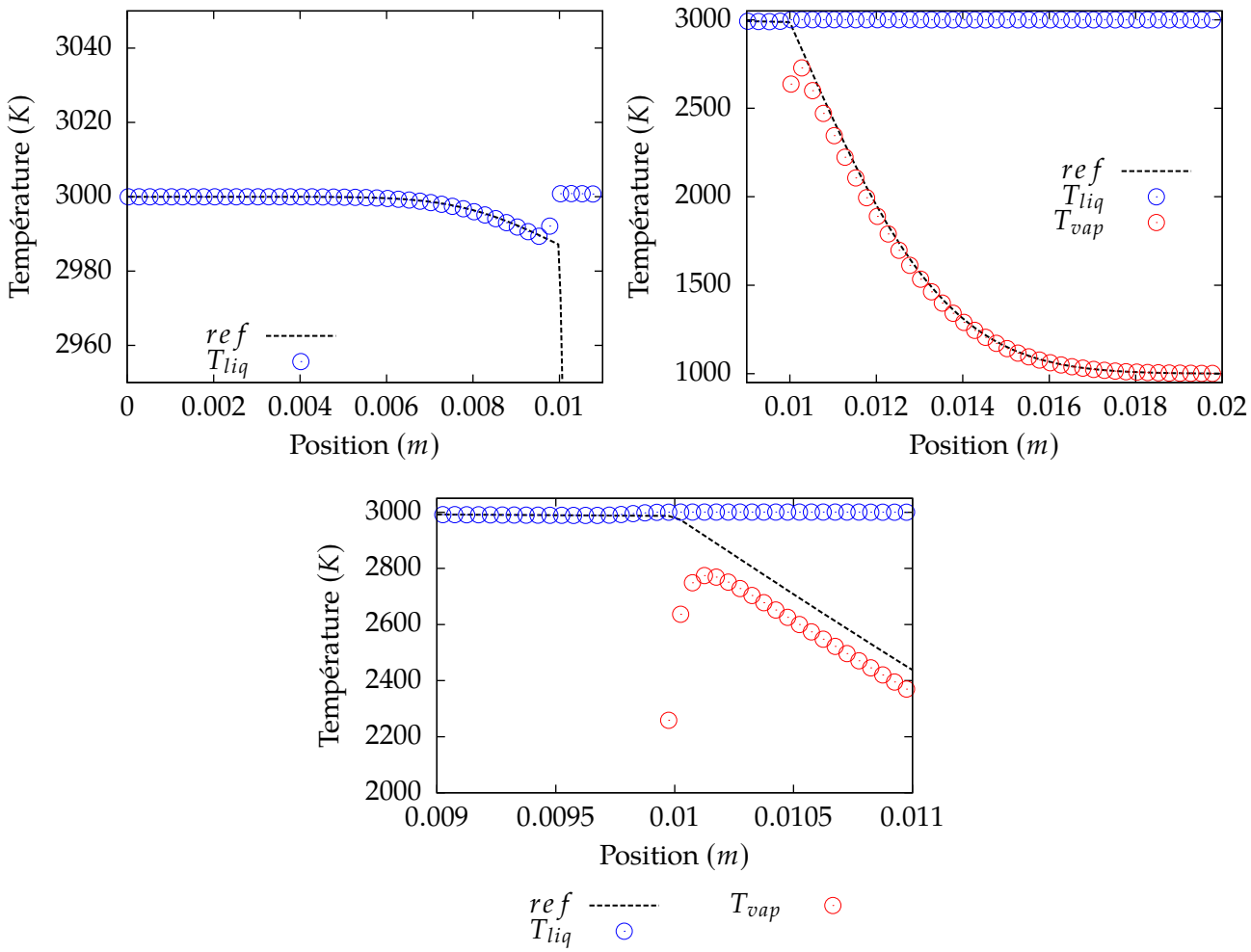


FIGURE 54 – Profils de température pour le cas de conduction de la chaleur entre deux murs semi-infinis avec une interface initialement diffuse au temps $t = 10\mu s$. Les graphes du haut représentent les profils de température de part et d'autre de l'interface avec une légère zone de recouvrement. Le troisième graphe présente le comportement autour de l'interface. Le nombre de points affichés à été réduit pour plus de clarté.

Les résultats obtenus sont en bon accord avec la solution exacte, en particulier en l'éloignant de l'interface, ce qui signifie que les transferts de chaleur globaux sont bien retrouvés. Sur l'interface, les températures phasiques prennent des valeurs qui restent cohérentes et encadrent la solution exacte. Il est difficile de juger plus spécifiquement du comportement sur l'interface. Cependant, aucune observation ne laisse présager un défaut particulier.

Finalement, les résultats obtenus pour le problème de conduction de la chaleur entre deux murs semi-infinis sont satisfaisants et permettent d'avoir une certaine confiance dans le modèle et la discretisation proposés.

6.3.7 Formulation discrète de l'équation de transport de volume

On reprend l'équation d'évolution de la fraction volumique dans le modèle UP avec transfert de chaleur 6.3.2, qui s'écrit en diphasique,

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1 \overrightarrow{u}) = \frac{\alpha_1\rho_2 c_2^2}{\alpha_1\rho_2 c_2^2 + \alpha_2\rho_1 c_1^2}\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u}) - \frac{\left(\alpha_2\Gamma_1(\overline{X_1\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_1})}) - \alpha_1\Gamma_2(\overline{X_2\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{\phi_2})})\right)}{\alpha_2\rho_1 c_1^2 + \alpha_1\rho_2 c_2^2}$$

Avec la méthode des volumes finis et la modélisation proposée, on a,

$$\begin{aligned}\int_{V_c}\frac{\partial \alpha_1}{\partial t}dV =& -\int_{V_c}\overrightarrow{\nabla}.(\alpha_1\overrightarrow{u})dV + \int_{V_c}\frac{\alpha_1\rho_2 c_2^2}{\alpha_1\rho_2 c_2^2 + \alpha_2\rho_1 c_1^2}\overrightarrow{\nabla}.(\overrightarrow{u})dV \\ &- \frac{\alpha_2\Gamma_1}{\alpha_2\rho_1 c_1^2 + \alpha_1\rho_2 c_2^2} * \left(\int_{S_{c,11}}\overrightarrow{\phi_{11}}.\overrightarrow{n_{11}}dS + \int_{S_{c,12}}\overrightarrow{\phi_{12}}.\overrightarrow{n_{12}}dS + \int_{S_{int,12}}\overrightarrow{\phi_{12}}.\overrightarrow{n_{12}}dS\right) \\ &+ \frac{\alpha_1\Gamma_2}{\alpha_2\rho_1 c_1^2 + \alpha_1\rho_2 c_2^2} * \left(\int_{S_{c,22}}\overrightarrow{\phi_{22}}.\overrightarrow{n_{22}}dS + \int_{S_{c,21}}\overrightarrow{\phi_{21}}.\overrightarrow{n_{21}}dS + \int_{S_{int,21}}\overrightarrow{\phi_{21}}.\overrightarrow{n_{21}}dS\right)\end{aligned} \tag{6.3.35}$$

On peut écrire au niveau discret,

$$\begin{aligned}V_{1,c}^{n+1} =& V_c\alpha_{1,c}^n - \Delta t V_c\left(\sum_{cd}\left(\alpha_1^n\right)_{cd}^{upw}(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})_{cd}^{n+1}S_{cd} - \frac{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c_{2,c}^2\right)^n}{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c_{2,c}^2\right)^n + \left(\alpha_{2,c}\rho_{1,c}c_{1,c}^2\right)^n}\sum_{cd}(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})_{cd}^{n+1}S_{cd}\right) \\ &- \frac{\Delta t\,(\alpha_{2,c}\Gamma_{1,c})^n}{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c_{2,c}^2\right)^n + \left(\alpha_{2,c}\rho_{1,c}c_{1,c}^2\right)^n} * \sum_{cd}\left(S_{11,cd}^n\overrightarrow{\phi}_{11,cd}^n.\overrightarrow{n}_{11,cd} + S_{12,cd}^n\overrightarrow{\phi}_{12,cd}^n.\overrightarrow{n}_{12,cd} + S_{12,int}^n\overrightarrow{\phi}_{12,int}^n.\overrightarrow{n}_{12,int}\right) \\ &+ \frac{\Delta t\,(\alpha_{1,c}\Gamma_{2,c})^n}{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c_{2,c}^2\right)^n + \left(\alpha_{2,c}\rho_{1,c}c_{1,c}^2\right)^n} * \sum_{cd}\left(S_{22,cd}^n\overrightarrow{\phi}_{22,cd}^n.\overrightarrow{n}_{22,cd} + S_{21,cd}^n\overrightarrow{\phi}_{21,cd}^n.\overrightarrow{n}_{21,cd} + S_{21,int}^n\overrightarrow{\phi}_{21,int}^n.\overrightarrow{n}_{21,int}\right)\end{aligned} \tag{6.3.36}$$

avec la condition d'interface interne,

$$S_{12,int}^n\overrightarrow{\phi}_{12,int}^n.\overrightarrow{n}_{12,int} = -S_{21,int}^n\overrightarrow{\phi}_{21,int}^n.\overrightarrow{n}_{21,int} \tag{6.3.37}$$

En regroupant les termes d'échanges internes grâce à la relation 6.3.37, l'expression discrète devient,

$$\begin{aligned}V_{1,c}^{n+1} =& V_c\alpha_{1,c}^n - \Delta t V_c\left(\sum_{cd}\left(\alpha_1^n\right)_{cd}^{upw}(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})_{cd}^{n+1}S_{cd} - \frac{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c_{2,c}^2\right)^n}{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c_{2,c}^2\right)^n + \left(\alpha_{2,c}\rho_{1,c}c_{1,c}^2\right)^n}\sum_{cd}(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})_{cd}^{n+1}S_{cd}\right) \\ &- \Delta t * \frac{(\alpha_{1,c}\Gamma_{2,c})^n + (\alpha_{2,c}\Gamma_{1,c})^n}{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c_{2,c}^2\right)^n + \left(\alpha_{2,c}\rho_{1,c}c_{1,c}^2\right)^n}S_{12,int}^n\overrightarrow{\phi}_{12,int}^n.\overrightarrow{n}_{12,int} \\ &- \frac{\Delta t\,(\alpha_{2,c}\Gamma_{1,c})^n}{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c_{2,c}^2\right)^n + \left(\alpha_{2,c}\rho_{1,c}c_{1,c}^2\right)^n} * \sum_{cd}\left(S_{11,cd}^n\overrightarrow{\phi}_{11,cd}^n.\overrightarrow{n}_{11,cd} + S_{12,cd}^n\overrightarrow{\phi}_{12,cd}^n.\overrightarrow{n}_{12,cd}\right) \\ &+ \frac{\Delta t\,(\alpha_{1,c}\Gamma_{2,c})^n}{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c_{2,c}^2\right)^n + \left(\alpha_{2,c}\rho_{1,c}c_{1,c}^2\right)^n} * \sum_{cd}\left(S_{22,cd}^n\overrightarrow{\phi}_{22,cd}^n.\overrightarrow{n}_{22,cd} + S_{21,cd}^n\overrightarrow{\phi}_{21,cd}^n.\overrightarrow{n}_{21,cd}\right)\end{aligned} \tag{6.3.38}$$

Dans cette expression, les contributions des échanges internes ne se compensent pas. En effet, l'énergie échangée en interne va contribuer à l'expansion d'un fluide et la compression de l'autre. Cette

expression fait également apparaitre le terme d'échange intra-maille $S^n_{12,int}\overrightarrow{\phi}^n_{12,int}.\overrightarrow{n}_{12,int}$ qu'il faut déterminer.

En reprenant sans précaution la forme étagée de l'interface proposée alors, en 1D, la surface d'échange interne est constante et égale à Δx sur tout le domaine. En limite phase pure, on retrouve la problématique des échanges avec la phase résiduelle soulevée dans la section 6.3.3, ce qui ne convient pas. Or, on rappelle que cette forme n'est qu'une représentation du comportement réel. En pratique, dans une situation où l'interface réelle est contenue dans un volume de contrôle, alors l'interface étagée fait intervenir des échanges inter-mailles qui n'existent pas. Cependant, si le profil de température est régulier, ces échanges inter-mailles sont une approximation cohérente des échanges intérieurs réels. Il est possible de faire une analyse géométrique pour estimer l'erreur sur la surface d'échange en fonction du maillage et une analyse sur la régularité du profil de température pour l'erreur sur les températures qui interviennent dans les mailles adjacentes. Dans une situation où l'interface est confondue avec la surface d'un volume de contrôle, les termes inter-mailles sont naturellement une bonne approximation de la surface d'échange. Finalement, dans le cas de problèmes à interfaces et avec la représentation étagée de l'interface numérique, les échanges inter-mailles permettent de retrouver une bonne approximation de l'ensemble des échanges internes et externes. Ainsi, on considère que le terme d'échanges internes discret peut être négligé. Finalement, la forme discrète de l'équation d'évolution de la fraction volumique est,

$$\begin{aligned} V^{n+1}_{1,c} =& V_c\alpha^n_{1,c} - \Delta t V_c\left(\sum_{cd}\left(\alpha^n_1\right)^{upw}_{cd}(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})^{n+1}_{cd}S_{cd} - \frac{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c^2_{2,c}\right)^n}{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c^2_{2,c}\right)^n+\left(\alpha_{2,c}\rho_{1,c}c^2_{1,c}\right)^n}\sum_{cd}(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})^{n+1}_{cd}S_{cd}\right) \\ &- \frac{\Delta t\,(\alpha_{2,c}\Gamma_{1,c})^n}{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c^2_{2,c}\right)^n+\left(\alpha_{2,c}\rho_{1,c}c^2_{1,c}\right)^n} * \sum_{cd}\left(S^n_{11,cd}\overrightarrow{\phi}^n_{11,cd}.\overrightarrow{n}_{11,cd} + S^n_{12,cd}\overrightarrow{\phi}^n_{12,cd}.\overrightarrow{n}_{12,cd}\right) \\ &+ \frac{\Delta t\,(\alpha_{1,c}\Gamma_{2,c})^n}{\left(\alpha_{1,c}\rho_{2,c}c^2_{2,c}\right)^n+\left(\alpha_{2,c}\rho_{1,c}c^2_{1,c}\right)^n} * \sum_{cd}\left(S^n_{22,cd}\overrightarrow{\phi}^n_{22,cd}.\overrightarrow{n}_{22,cd} + S^n_{21,cd}\overrightarrow{\phi}^n_{21,cd}.\overrightarrow{n}_{21,cd}\right) \end{aligned} \tag{6.3.39}$$

On voudrait résoudre cette équation pour les deux phases, cependant cela ne permet pas d'assurer que les volumes calculés puissent être contenus dans V_c. Pour s'assurer de vérifier que $\alpha_k \in [0,1]$ et $\sum_k \alpha_k = 1$, on se base sur la signification première de α_k qui est d'être la proportion de phase k dans un mélange. Ainsi, on dira que l'équation 6.3.39 ne permet pas d'obtenir $V^{n+1}_{1,c}$ mais $V^{*,n+1}_{1,c}$ le volume que devrait occuper la phase 1. On calculera cette équation pour les deux phases, ce qui permet d'obtenir $V^{*,n+1}_{1,c}$ et $V^{*,n+1}_{2,c}$ et on détermine $\alpha^{n+1}_{k,c}$ la proportion en volume de la phase k,

$$\alpha^{n+1}_{k,c} = \frac{V^{*,n+1}_{k,c}}{\sum_i V^{*,n+1}_{i,c}} \tag{6.3.40}$$

puis, les volumes phasiques au sein du volume V_c sont déterminés avec l'équation suivante,

$$V^{n+1}_{k,c} = V_c\alpha^{n+1}_{k,c} \tag{6.3.41}$$

ce qui permet de vérifier la contrainte de saturation. Le besoin de revenir à la signification initiale de la fraction volumique peut traduire l'absence de la prise en compte de certains phénomènes dans l'équation 3.5.14 de α_k qui a été postulée dans la section 3.5.

6.3.8 Validation du modèle, vérification de l'implémentation de la forme discrète de l'équation de transport de volume

Le but de ce cas test est de valider l'utilisation du modèle à l'équilibre mécanique avec transferts de chaleur pour traiter de problèmes couplés thermo-hydrodynamiques. La différence avec le cas test précédent est la résolution du système diphasique complet avec, en particulier, l'équation d'évolution

de volume. La configuration de ce cas test diphasique est identique à la configuration décrite dans la section 5.2.3 et est rappelée sur le schéma 55. Les coefficients des équations d'état et les conductivités thermiques des composants sont rappelés dans le tableau 14.

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$q(J.kg^{-1})$	$\lambda(W.m^{-1}.K^{-1})$
Fluide I	3.42	1231	8.99×10^8	0	1×10^6
Fluide II	1.4	1000	1×10^8	0	1×10^5

TABLE 14 – Coefficients des SG EOS pour les fluides du cas test de validation de conduction de chaleur en milieu diphasique compressible.

L'interface initialement raide nous permet d'initialiser avec un équilibre initial des températures par zone du domaine. Les paramètres numériques sont $\Delta x = 10^{-3}$ et Δt qui vérifie le critère CFL.

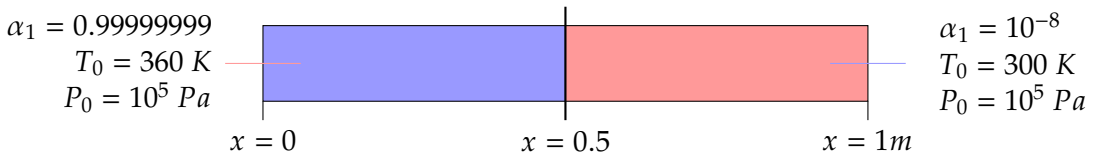


FIGURE 55 – **Configuration du test de validation de conduction de chaleur en milieu diphasique compressible avec le modèle UP.**

Dans cette situation, on s'attend à retrouver le même comportement que celui observé avec le modèle à l'équilibre thermomécanique. En effet, aux temps courts, les transferts de chaleur sont identiques dans les deux modèles dans le cas d'une interface raide. De plus, avec les coefficients de conductivité importants qui sont utilisés, les effets de diffusion de la chaleur sont intenses et de premier ordre vis à vis des échanges implicites qui peuvent apparaitre lors du déplacement de l'interface avec le modèle UPT. Les résultats sont présentés sur les figures 56 pour les quantités de mélange et 57 pour les températures phasiques.

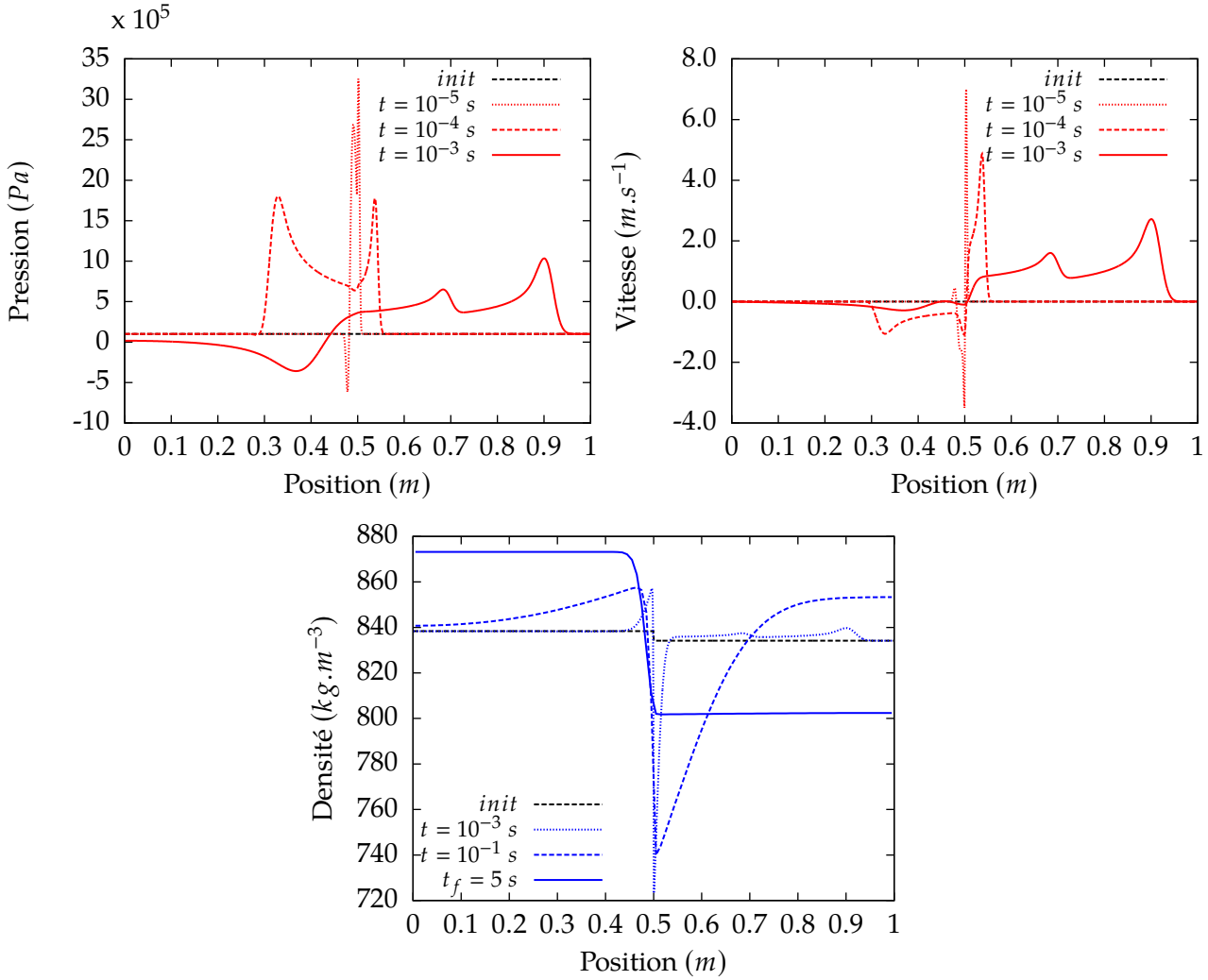


FIGURE 56 – Profils de pression, vitesse et masse volumique de mélange obtenus pour le cas test de conduction entre deux fluides compressibles initialement à des températures différentes avec le modèle UP.

Conformément aux résultats attendus, le comportement observé sur les quantités de mélange est indiscernable du comportement obtenu avec le modèle UPT dans la section 5.2.3, ce qui est satisfaisant.

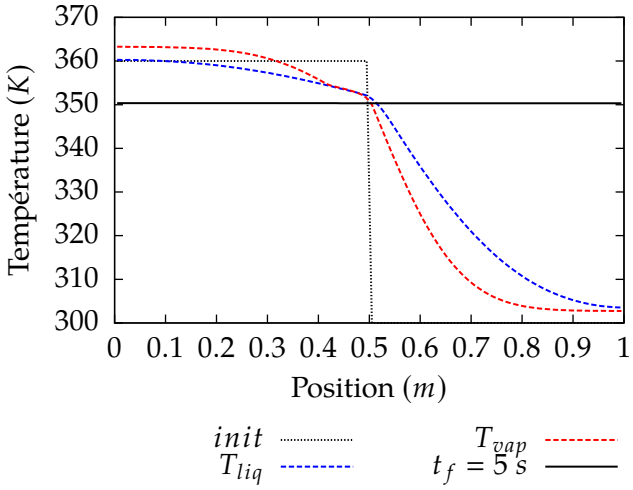


FIGURE 57 – Profils de températures phasiques obtenus pour le cas test de condution entre deux fluides compressibles initialement à des températures différentes avec le modèle UP, aux instants $t = 0$, $t = 10^{-1}\ s$ et $t_f = 5\ s$.

Concernant les températures phasiques, on retrouve des profils cohérents en limite phase pure tout au long du calcul. Ces profils sont reliés continûment comme on peut le voir entre $x = 0.4$ et $x = 0.5$. Ce comportement est obtenu grâce aux conditions d'interfaces qui sont vérifiées au niveau discret. La température finale, qui correspond à un état d'équilibre, est bien retrouvée. Ces résultats sont satisfaisants et encourageants vis-à-vis des capacités du modèle physique et de la formulation discrète proposée pour traiter de problèmes diphasiques avec transferts de chaleur et effets compressibles.

6.3.9 Bilan sur les transferts de chaleur dans le modèle à équilibre mécanique

L'analyse des modèles à l'équilibre mécanique avec transferts de chaleur de la littérature nous a permis de mettre en évidence certaines limites liées à la prise en compte locale des transferts de chaleur. En particulier, les modèles existants ne permettent pas de retrouver les échanges de chaleur entre deux volumes de contrôles constitués de phases pures différentes. Ainsi, il n'était pas possible de disposer d'un moteur thermique au niveau discret dans le cas où deux limites phases pures sont initialement en contact. Nous avons donc proposé une modélisation des transferts de chaleur et une représentation discrète en accord avec cette modélisation. L'implémentation du modèle a ensuite été vérifiée et validée sur deux cas tests. Cette étape de vérification nous a permis de nous assurer que les échanges inter-phases inter-mailles et les effets de diffusion sont bien retrouvés avec la modélisation que nous proposons.

Ces résultats sont encourageants vis-à-vis de l'utilisation de ce modèle avec transferts de chaleur en apportant une confiance quant à la capacité du modèle à gérer les effets compressibles et thermiques couplés. Cependant, le dernier cas test peut soulever la question de l'intérêt d'utiliser le modèle UP puisque les résultats ne présentent pas de différences significatives avec ceux du modèle UPT. Cela vient du fait qu'il est parfois difficile de distinguer a priori si les modèles doivent avoir un comportement différent. Pour pouvoir les comparer convenablement, il faut être capable de définir une situation dans laquelle il est possible d'isoler les effets qui nous intéressent. Une de ces situations est présentée dans la section suivante.

L'application micro-SCONE dispose donc dorénavant d'un modèle à l'équilibre mécanique diphasique capable de traiter les effets de conduction de la chaleur.

6.4 Application en configuration d'intérêt

Cette section a pour but de réaliser des cas de calcul dans des configurations qui se rapprochent de la configuration réelle. Ce sont des calculs préliminaires à des situations plus complexes et réalisables avec le modèle présenté. Les objectifs sont d'une part d'observer des comportements dans des situations simples pour être capable de dissocier certains effets observés dans des situations plus complexes, d'autre part d'identifier les améliorations à porter au modèle dans le but de pouvoir décrire une situation plus représentative de la situation réelle.

6.4.1 Transport d'une interface de corium

La première configuration est similaire au cas présenté dans la section 5.3.5. Elle consiste à observer les conséquences du déplacement d'une interface de corium dans de la vapeur de réfrigérant. Ici, les transferts de chaleur seront pris en compte et l'interface sera initialement raide. La configuration initiale est rappelée sur le schéma 58.

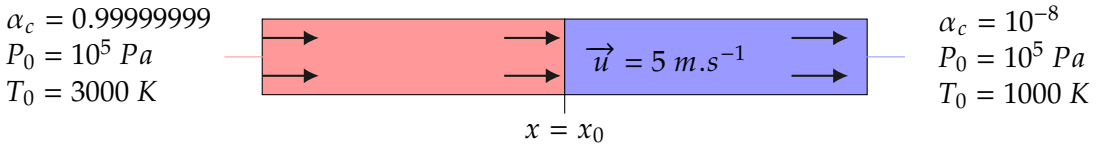


FIGURE 58 – **Configuration du cas de transport d'une interface de corium**

Les paramètres des équations d'état pour le corium et la vapeur sont rappelés dans le tableau 15

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$\lambda(W.m^{-1}.K^{-1})$
Corium	3.423	230	$1.5x10^{10}$	2.5
Vapeur d'eau	1.358	1247	0	$2.7x10^{-2}$

TABLE 15 – Paramètres des SG EOS du corium et de la vapeur d'eau pour le cas test de transport d'une interface de corium.

Les paramètres numériques sont $\Delta x = 10^{-7}$ sur un domaine de $1mm$ et Δt vérifie le critère CFL. Les températures des phases résiduelles sont initialement égales à la température de la phase majoritaire. La figure 59 présente le profil de vitesse à $t = 0.01\mu s$, l'origine du graphe est à la position initiale de l'interface.

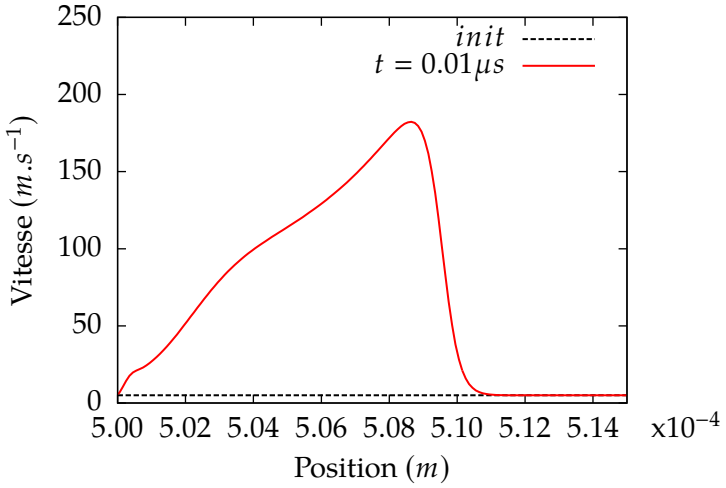


FIGURE 59 – Profil de vitesse généré dans le cas de transport d'une interface de corium avec transferts de chaleur avec le modèle UP.

La vapeur, initialement à une vitesse de 5 $m.s^{-1}$ est mise en mouvement violemment. Ce comportement est caractéristique de l'onde de pression générée par des transferts de chaleur intenses entre le corium et la vapeur de réfrigérant. C'est le comportement que l'on observait avec l'utilisation du modèle UPT dans la partie 5.3.5 à cause des transferts de chaleur intenses qui étaient pris en compte intrinsèquement dans le modèle. La particularité cette fois-ci est que ce comportement dépend correctement des propriétés thermiques des composants. Pour illustrer ceci, la figure 60, présente le profil de vitesse obtenu avec le modèle UP et UPT pour différentes valeurs de conductivités thermiques, λ_k définis dans le tableau 15 puis $10^{-2} * \lambda_k$ et $10^{-4} * \lambda_k$. Les deux modèles sont résolus avec transferts de chaleur et dans les mêmes configurations numériques.

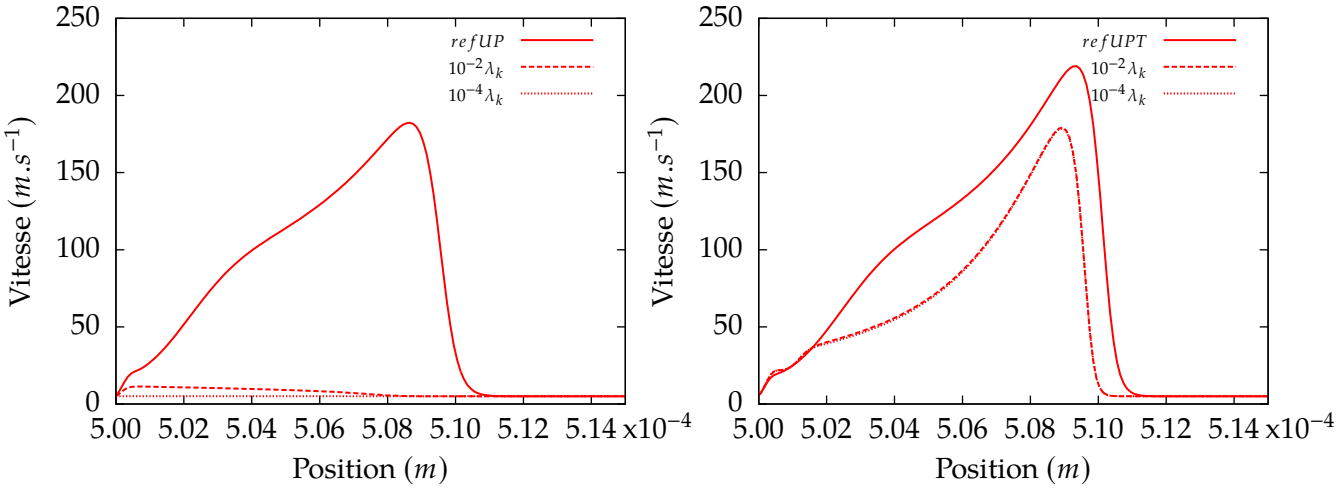


FIGURE 60 – Profils de vitesse obtenus dans le cas de transport d'une interface de corium dans de la vapeur d'eau pour différentes conductivités thermiques. A gauche avec le modèle UP, à droite avec le modèle UPT.

Concernant les résultats obtenus avec le modèle UP, on observe que le fait de réduire la conductivité fait tendre vers une situation de transport sans transferts de chaleur. L'utilisation du modèle UPT, quant à elle, montre que la réduction de la conductivité fait tendre vers une valeur limite différente, qui est la limite observée dans la partie 5.3. C'est la limite d'un problème de transport avec échanges de chaleur instantanés au sein d'un volume mais sans diffusion de la chaleur.

Le modèle UP permet d'avoir un 'contrôle' sur les transferts de chaleur, ce qui est nécessaire

pour étudier l'influence du changement de matériaux par exemple. Cependant, dans un cas où les échanges sont effectivement intenses (forts gradients de températures et/ou conductivités thermiques importantes), on retrouve la remarque concernant le cas test 6.3.8 comme quoi il vaut peut être mieux utiliser le UPT pour sa simplicité. La différence de comportement dans le cas réel observée ici n'étant pas nécessairement significative.

Concernant la situation physique qui nous intéresse, la mise en vitesse violente de la vapeur est un phénomène difficile à lier aux observations expérimentales. En effet, dans une installation expérimentale, la goutte n'entre pas instantanément en contact avec un environnement plus froid. La mise en température de la goutte s'accompagne d'un échauffement de son environnement. De plus, lors de sa chute avant d'entrer en contact avec le bain de réfrigérant, on aurait tendance à supposer que l'écoulement autour de la goutte est un écoulement longitudinal principalement piloté par la vitesse de chute. Cependant, les observations réalisées ici supposent un écoulement radial, piloté par les effets thermiques. Ce comportement n'est peut-être que la conséquence d'une initialisation raide et instantanée, vue comme une discontinuité par le système et donc pas caractéristique d'une situation physiquement cohérente. Cela soulève la problématique qui est de déterminer l'état des différents fluides au moment d'initialiser un cas de calcul dans la situation d'une goutte entourée d'un film de vapeur dans un bain de réfrigérant. De manière plus générale, la question est de savoir si la situation initiale que l'on souhaite utiliser est réalisable sans générer des artefacts que l'on n'observe pas expérimentalement.

6.4.2 Film de vapeur chauffé

La seconde configuration consiste à étudier la dynamique du film de vapeur de réfrigérant qui entoure la goutte de combustible pendant sa chute. Le modèle dont on dispose étant diphasique on émulera l'apport d'énergie du combustible par une surface chauffante. Réalisé en une dimension, c'est un cas préliminaire à des études multi-dimensionnelles. La situation est donc celle dans laquelle un film de vapeur de réfrigérant isole le liquide d'une surface chauffante.

Initialement, la vitesse est nulle, la pression et la température sont constantes sur le domaine et vérifient l'équation de saturation $f_{sat}(p,T) = 0$. Ce choix est fait en anticipation de la prise en compte du changement de phase. En imposant la pression initiale, la température est obtenue aisément à l'aide d'un algorithme de recherche de zéro. Ainsi, pour une pression imposée de $P_0 = 10^5\ Pa$, la température de saturation est $T = 373.456\ K$ que l'on notera $T_{sat}(P_0)$. Dans cette configuration initiale, le fluide est immobile et l'uniformité des champs de pression, vitesse et température assure la stabilité de l'ensemble. Une température de $3000K$, émulant celle du corium, est alors imposée à $t = 0$ sur la limite gauche du domaine de calcul et on s'intéresse à la dynamique générée. Plus particulièrement, on cherche à savoir si l'interface séparant la vapeur et le liquide peut être mise en mouvement, par dilatation du film de vapeur par exemple. Pour les dimensions du domaine, nous reprenons les observations des travaux de Hansson et al. [6] dans lesquels le film de vapeur a été mesuré d'une épaisseur comprise entre 1 mm et 5 mm lors de l'interaction. Nous prendrons une épaisseur de 5 mm, ce qui nous permet d'utiliser une taille de maille de $\Delta x = 10^{-4}$ pour avoir ~ 50 mailles dans le film de vapeur. Le pas de temps est choisi de manière à respecter le critère de stabilité CFL. Ce cas est réalisé avec une interface initialement raide et une interface initialement diffuse dont la forme est déterminée par les équations 5.3.29 appliquées à la fraction volumique avec le paramètre $l = 0.0001$. La configuration initiale est rappelée sur le schéma 58,

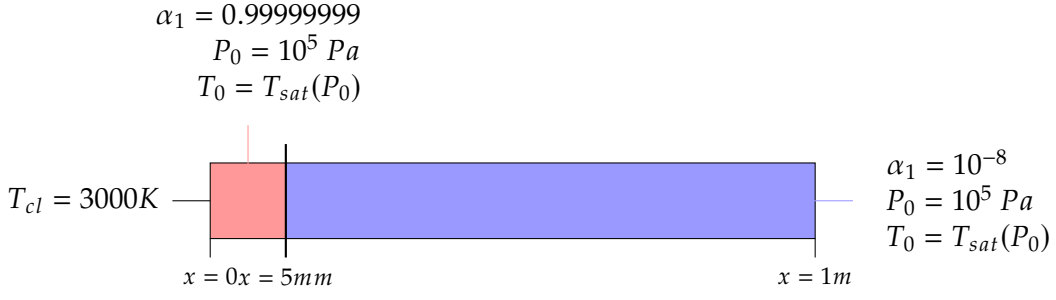


FIGURE 61 – **Configuration du cas test de film de vapeur chauffé par conduction**

Les paramètres des équations d'état sont ceux de l'eau et les conductivités thermiques ont été tirées des travaux de Le Belguet [28]. Ces paramètres sont rappelés dans le tableau 16,

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$q(J.kg^{-1})$	$\lambda(W.m^{-1}.K^{-1})$
Eau Liquide	3.423	1231.2	8.99×10^8	-1.15×10^6	0.6
Eau Vapeur	1.358	1247	0	1.97×10^6	2.7×10^{-2}

TABLE 16 – Paramètres des SG EOS de l'eau liquide et vapeur pour le cas de film de vapeur chauffé.

Les conditions aux limites en pression sont des conditions de symétrie de part et d'autre du domaine. Le transferts de chaleur par conduction sont naturellement pris en compte et le cas sera réalisé avec une interface initialement raide et une interface initialement diffuse. Les résultats sont présentés sur les figures 62, 63 et 64.

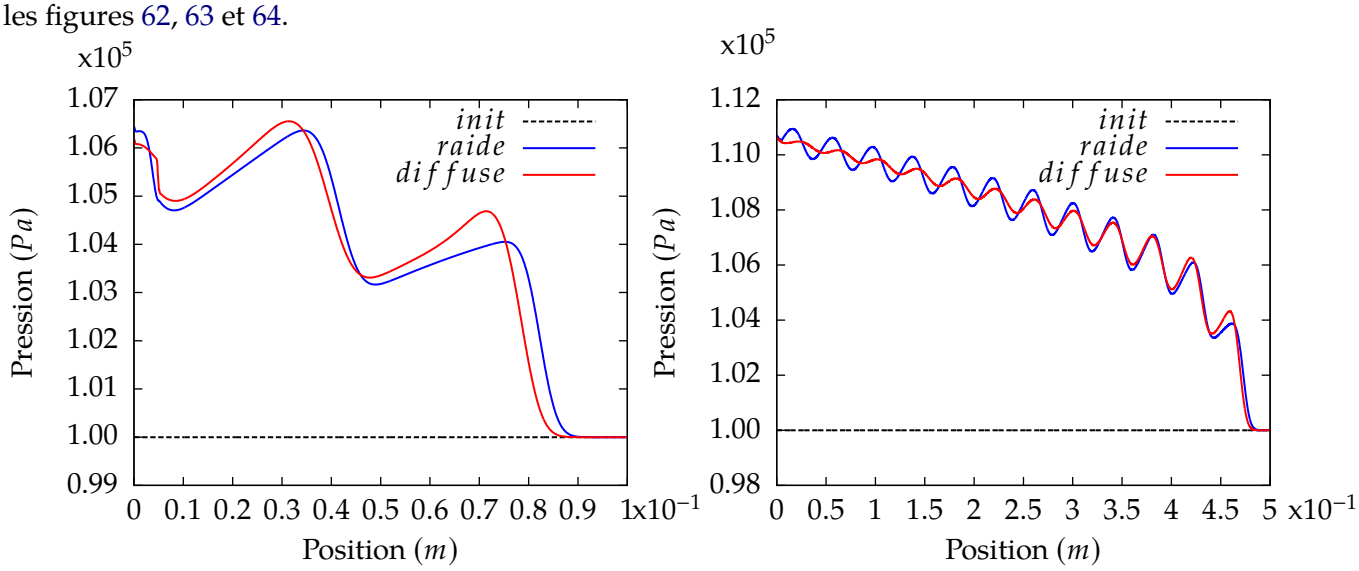


FIGURE 62 – Profils de pression dans le cas de film de vapeur chauffé. Résultats présentés pour $t = 50\mu s$ à gauche et $t = 250\mu s$ à droite.

Ces courbes représentent les profils de pressions obtenus pour les deux profils d'interface initiaux à $t = 50\mu s$ et $t = 250\mu s$. On observe un comportement d'ondes original du fait de l'apport d'énergie continu en bord de domaine. L'augmentation en température proche du mur chauffant crée une pressurisation de la vapeur. L'onde ainsi générée se propage dans le film de vapeur jusqu'à l'interface vapeur-liquide où une partie est réfléchie et l'autre transmise à la phase liquide. La partie réfléchie effectue le parcours inverse jusqu'à la surface chauffante où elle est réfléchie de nouveau mais avec de l'énergie supplémentaire. Le procédé se répète et on observe une série d'ondes qui se propagent dans la phase liquide. La fréquence obtenue correspond au temps nécessaire à une onde de pression pour faire l'aller-retour dans le film de vapeur. On observe que l'utilisation d'une interface raide ou diffuse n'a pas beaucoup d'influence sur le comportement mise à part une dissipation d'énergie légèrement plus importante lors du passage sur l'interface. Sur la figure de droite, qui présente l'avancée des ondes dans le domaine sur un temps plus long, on observe également que les ondes de pression générées oscillent autour d'une valeur moyenne en augmentation. Cette augmentation est la conséquence des multiples réflexions d'ondes dans le film de vapeur. Concernant le mouvement de l'interface, le graphe de la figure 63 représente la position de l'interface initialement diffuse aux temps $t = 0\ s$, $t = 50\mu s$ et $t = 250\mu s$.

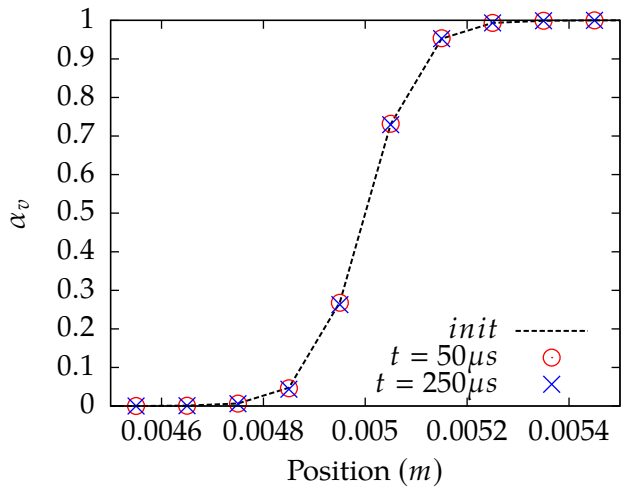


FIGURE 63 – Profils de fraction volumique de la phase vapeur à l'instant initial, à $t = 50\mu s$ et $t = 250\mu s$ pour le cas où l'interface est initialement diffuse.

On observe que malgré le passage des multiples ondes de pression, la position de l'interface n'est pas altérée, ce qui traduit l'absence de mise en mouvement du film de vapeur. Les résultats qui concernent l'interface initialement raide sont identiques, c'est pourquoi ils n'ont pas été présentés. Cette absence de dynamique se retrouve sur les profils de vitesse de la figure 64,

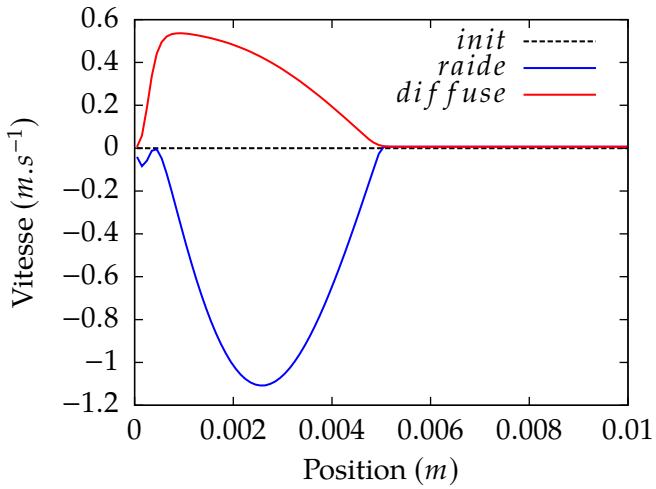


FIGURE 64 – Profil de vitesse dans le film de vapeur pour le cas de calcul de film de vapeur avec condition de température imposée.

Sur ce graphe, on observe que la vapeur est bien mise en mouvement mais la vitesse du fluide est toujours très faible sur l'interface. Il semble que l'inertie du liquide est trop importante en comparaison des forces de pression générées dans le film de vapeur. Divers cas supplémentaires ont été testés, sur des temps plus longs et avec des températures imposées plus importantes, aucun mouvement significatif de l'interface a été observé.

6.5 Conclusion

Dans cette partie, nous avons présenté la vérification et la validation de l'implémentation du modèle à l'équilibre mécanique sans transferts thermiques dans micro-SCONE. Ensuite, nous avons passé en revue les propositions disponibles dans la littérature pour modéliser les transferts de chaleur dans le modèle UP. Ces modélisations présentent une limitation importante lorsque l'on souhaite

prendre en compte les transferts de chaleur entre deux volumes en limite phase pure. Cette limitation provient des hypothèses concernant la localité des échanges lors de l'écriture des relations d'interfaces. Nous avons donc proposé une modélisation sous forme intégrale qui fait intervenir des termes d'échanges internes et externes au volume de contrôle. Cette modélisation est plus générale car elle permet de prendre en compte l'ensemble des échanges entre les phases. Elle présente également l'avantage d'être naturellement compatible avec l'utilisation du formalisme volumes finis pour la discrétisation spatiale. Cependant, la fermeture des surfaces qui interviennent dans la modélisation doit être adaptée au type de problème que l'on cherche à simuler. Dans notre cadre, on s'intéresse uniquement à des problèmes à interface ce qui nous a permis de négliger les échanges internes et de ne considérer que les échanges externes. La décomposition discrète employée a été présentée, elle permet de retrouver dans la limite d'une interface raide les échanges attendus. De plus, l'implémentation s'étend naturellement en multi-D. On notera que la représentation des échanges proposée permet une extension triphasique naturelle mais que l'application au niveau discret est susceptible de soulever des complexités supplémentaires.

La prise en compte des effets thermiques a ensuite été vérifiée et validée sur des problèmes de thermique classique puis sur un problème couplé avec les effets compressibles tiré de la littérature. Les résultats obtenus sont cohérents et encourageants mais ne se distinguent pas particulièrement, a priori, des résultats obtenus avec le modèle à l'équilibre thermomécanique présenté dans la partie 5. Le modèle à l'équilibre mécanique faisant intervenir en plus une difficulté liée aux phases résiduelles lors de l'initialisation des cas de calcul ainsi que pour l'interprétation des résultats. Cependant, lors de l'application du modèle UP dans une situation de transport avec transferts de chaleur entre les phases, nous avons pu illustrer clairement l'avantage du modèle proposé. Cet avantage repose sur la continuité entre un modèle capable de traiter un cas de transport avec et sans échanges de chaleur là où le modèle UPT prend en compte intrinsèquement ces échanges et qu'il n'est pas possible de s'en affranchir.

Enfin, le modèle a été appliqué dans une situation 1D de film de vapeur chauffé. Nous avons observé la propagation des ondes de pression générées par l'apport d'énergie continu du mur et les interactions avec les différentes réflexions d'ondes dans le film de vapeur. Cependant, aucune dynamique d'interface a été observée. Dans la prochaine partie, nous nous intéresserons à la prise en compte du changement de phase et son utilisation dans micro-SCONE. Cela permettra de disposer d'un modèle diphasique compressible avec transferts de chaleur et changement de phase, avec lequel nous espérons qu'il sera possible d'obtenir un mouvement du film de vapeur dans la dernière configuration étudiée.

Septième partie

Changement de phase

7.1 Introduction, le modèle de changement de phase

Lors de l'étude d'écoulements multiphasiques, il arrive fréquemment que les phénomènes de changement de phase liquide-vapeur interviennent tels que la cavitation ou l'ébullition par exemple.

Dans le formalisme que nous avons décrit dans la partie 3 le changement de phase entre deux fluides i et j apparait sous la forme,

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_i \rho_i \overrightarrow{u}) = \dot{m}_{ij} \tag{7.1.1}$$

$$\frac{\partial \alpha_j \rho_j}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\alpha_j \rho_j \overrightarrow{u}) = -\dot{m}_{ij} \tag{7.1.2}$$

La première solution pour prendre en compte ces phénomènes est l'utilisation d'un terme explicite, c'est-à-dire imposer une dynamique de changement de phase que l'on a pu évaluer. Cependant, dans le cadre de notre étude à petite échelle, on ne dispose pas de formulations analytiques convenables.

Le principe, que l'on retrouve dans de nombreux travaux [42, 43, 45, 56, 79] est de considérer que les phénomènes de changement de phase sont intenses sur les temps d'observation de l'écoulement. Il est alors possible de considérer que l'écoulement évolue à l'équilibre des potentiels de Gibbs et donc écrire un modèle adapté. Dans cette partie, nous resterons en diphasique et les deux phases en présence seront donc celles qui changent d'état, que l'on notera 1 et 2 ou l et v quand il faut spécifier les phases liquide et vapeur. Le modèle correspondant à l'équilibre des potentiels de Gibbs est composé du système d'équations bilans d'Euler compressibles pour le mélange, ici sans termes sources,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.(\rho \overrightarrow{u}) = 0 \tag{7.1.3a}$$

$$\frac{\partial \rho \overrightarrow{u}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}(\rho \overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{u} + p\underline{\underline{I}}) = 0 \tag{7.1.3b}$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}.((\rho E + p)\overrightarrow{u}) = 0 \tag{7.1.3c}$$

On y retrouve les équations de conservation de la masse, quantité de mouvement et énergie totale du mélange. Ce système d'équations bilans est complété par la contrainte de saturation, des équations d'état par phase, les relations qui définissent les quantités de mélange et les relations d'équilibre. La contrainte de saturation s'écrit $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$. Les fermetures thermodynamiques sont les équations d'état par phase, ici des équations de type stiffened gas,

$$p_k = (\gamma_k - 1)\rho_k C_{v,k} T_k - P_{\infty,k} \tag{7.1.4}$$

$$e_k = C_{v,k} T_k + \frac{P_{\infty,k}}{\rho_k} + q_k \tag{7.1.5}$$

Les relations définissant les quantités de mélange permettent de lier les quantités phasiques aux quantités de mélange,

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2 \tag{7.1.6}$$

$$q = Y_1 q_1 + Y_2 q_2 \tag{7.1.7}$$

$$e = Y_1 e_1 + Y_2 e_2 \tag{7.1.8}$$

$$E = Y_1 E_1 + Y_2 E_2 \tag{7.1.9}$$

où $E_k = e_k + \frac{1}{2}\overrightarrow{u_k}.\overrightarrow{u_k}$ et Y_k sont les fractions massiques des composants telles que $Y_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho}$.
Les équilibres sont ici $\overrightarrow{u} = \overrightarrow{u_1} = \overrightarrow{u_2}$, $p = p_1 = p_2$, $T = T_1 = T_2$ et $\mu = \mu_1 = \mu_2$ avec μ_k le potentiel

de Gibbs de la phase k. Par différentes substitutions, la dernière relation peut être remplacée par l'équation $f_{sat}(p,T) = 0$ qui traduit l'équilibre des potentiels de Gibbs. La fonction f_{sat} choisie a été décrite dans la partie 4 et s'écrit,

$$f_{sat}(p,T) = \ln(\frac{p + P_{\infty,v}}{(p + P_{\infty,l})^D}) - A - \frac{B}{T} - C\ln(T) \tag{7.1.10}$$

avec A, B, C et D des paramètres dépendants des coefficients des équations d'état,

$$A = \frac{\gamma_l C_{v,l} - \gamma_v C_{v,v} + q'_v - q'_l}{(\gamma_v - 1)C_{v,v}}, B = \frac{q_l - q_v}{(\gamma_v - 1)C_{v,v}}, C = \frac{\gamma_v C_{v,v} - \gamma_l C_{v,l}}{(\gamma_v - 1)C_{v,v}}, D = \frac{(\gamma_l - 1)C_{v,l}}{(\gamma_v - 1)C_{v,v}} \tag{7.1.11}$$

Cela permet de résumer les équilibres sur la pression et la température sous la forme : $p = p_{sat}$ et $T = T_{sat}$.

Ce modèle permet de traiter les problèmes d'évaporation, cavitation et ébullition de la même manière. C'est la contrainte d'équilibre des potentiels de Gibbs qui impose la répartition des masses de composants en fonction de l'énergie et de la masse de mélange disponibles dans le volume. Cependant, la détermination de cet état d'équilibre est une étape non triviale, ce sera l'objet des premières sections de cette partie. Ensuite, nous aborderons l'utilisation de ce modèle avec les autres modèles à interface diffuse présentés précédemment. Enfin, nous réaliserons un ensemble de cas tests permettant de vérifier et valider la méthode proposée.

7.2 Description du principe permettant d'obtenir l'état d'équilibre

La recherche de l'état d'équilibre est basée sur le raisonnement proposé par Le Martelot [45]. Cela consiste à déterminer, pour une masse et une énergie de mélange données, la pression et la température qui vérifient la fonction de saturation dans un volume fixé. Les quantités phasiques sont ensuite obtenues via les équations d'état Stiffened Gas que nous utilisons.

En notant '$_0$' l'état initial dans le volume et '$_{sat}$' l'état d'équilibre. L'état d'équilibre doit avoir la même masse que le mélange initial, cela s'écrit,

$$v_0 = Y_{1,sat} v_{1,sat} + (1 - Y_{1,sat}) v_{2,sat} \tag{7.2.1}$$

ce qui nous donne une première équation sur $Y_{1,sat}$ tant que $v_{1,sat} \neq v_{2,sat}$,

$$Y_{1,sat} = \frac{v_0 - v_{2,sat}}{v_{1,sat} - v_{2,sat}} \tag{7.2.2}$$

De la même manière, à l'aide de la conservation de l'énergie interne,

$$e_0 = Y_{1,sat} e_{1,sat} + (1 - Y_{1,sat}) e_{2,sat} \tag{7.2.3}$$

on obtient une seconde équation sur la fraction massique à l'équilibre tant que $e_{1,sat} \neq e_{2,sat}$

$$Y_{1,sat} = \frac{e_0 - e_{2,sat}}{e_{1,sat} - e_{2,sat}} \tag{7.2.4}$$

Naturellement il faut que 7.2.2 et 7.2.4 soient égales.

$$\frac{v_0 - v_{2,sat}}{v_{1,sat} - v_{2,sat}} = \frac{e_0 - e_{2,sat}}{e_{1,sat} - e_{2,sat}} \tag{7.2.5}$$

Cette équation ne dépend que de p, T et l'état initial. Avec $f_{sat}(p,T) = 0$, elles forment un système non linéaire dont les solutions vérifient que le mélange final a la même masse et la même énergie interne que le mélange initial et que les phases sont en équilibre des potentiels de Gibbs, c'est-à-dire $p = p_{sat}$ et $T = T_{sat}$. Cette méthode n'est techniquement pas particulièrement complexe mais peut être coûteuse.

On retrouvera parfois l'équation 7.2.5 sous une forme qui fait intervenir les enthalpies spécifiques phasiques h_k et la chaleur latente de vaporisation $L_v = h_{2,sat} - h_{1,sat}$,

$$\frac{h_{2,sat} - (e_0 - p_{sat} v_0)}{L_v} - \frac{v_{2,sat} - v_0}{v_{2,sat} - v_{1,sat}} = 0 \tag{7.2.6}$$

7.3 Proposition de recherche de l'état d'équilibre

Nous proposons une autre solution permettant d'obtenir l'état d'équilibre. Basé sur le même raisonnement et les mêmes hypothèses, nous allons exprimer explicitement $T = f_T(P)$ pour l'intégrer dans l'équation de la courbe de saturation et ainsi obtenir une fonction d'une seule variable : p. Cependant, nous verrons que la forme de ces fonctions est complexe et que la résolution n'est pas aussi directe qu'espéré. Toutefois, la mise en équation sous cette forme nous permettra d'observer plus clairement le comportement du processus de changement de phase et les répercussions sur les états thermodynamiques finaux.

Commençons par rappeler, en notant k une phase, les équations sur v_k et e_k,

$$v_k = \frac{(\gamma_k - 1)C_{v,k}T}{p + P_{\infty,k}} \tag{7.3.1}$$

$$e_k = \frac{p + \gamma_k P_{\infty,k}}{p + P_{\infty,k}} C_{v,k}T + q_k \tag{7.3.2}$$

On pose $\mathbb{V}_k(p)$ et $\mathbb{E}_k(p)$, fonctions de la pression seule, telles que, $v_k = \mathbb{V}_k(p)T$ et $e_k = \mathbb{E}_k(p)T + q_k$, soit,

$$\mathbb{V}_k(p) = \frac{(\gamma_k - 1)C_{v,k}}{p + P_{\infty,i}} \tag{7.3.3}$$

$$\mathbb{E}_k(p) = \frac{p + \gamma_i P_{\infty,k}}{p + P_{\infty,k}} C_{v,k} \tag{7.3.4}$$

Ainsi l'équation 7.2.5 qui relie les deux expressions de la fraction massique de composant à l'équilibre devient, en omettant la dépendance en p pour plus de clarté,

$$\frac{e_0 - (\mathbb{E}_2 T + q_2)}{(\mathbb{E}_1 T + q_1) - (\mathbb{E}_2 T + q_2)} = \frac{v_0 - \mathbb{V}_2 T}{\mathbb{V}_1 T - \mathbb{V}_2 T} \tag{7.3.5}$$

En développant, on se ramène à une équation du second degré en T,

$$T^2(\mathbb{V}_2\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2\mathbb{V}_1) + T(e_0(\mathbb{V}_1 - \mathbb{V}_2) - v_0(\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2) + \mathbb{V}_2 q_1 - \mathbb{V}_1 q_2) - v_0(q_1 - q_2) = 0 \tag{7.3.6}$$

équation qui n'a de solution réelle que si le déterminant,

$$\Delta(p) = [e_0(\mathbb{V}_1 - \mathbb{V}_2) - v_0(\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2) + \mathbb{V}_2 q_1 - \mathbb{V}_1 q_2]^2 - 4(\mathbb{V}_2\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2\mathbb{V}_1)v_0(q_2 - q_1) \tag{7.3.7}$$

n'est pas négatif. Auquel cas, on obtient les deux valeurs de température qui vérifient les conditions thermodynamiques du mélange,

$$T_+(p) = \frac{-(e_0(\mathbb{V}_1 - \mathbb{V}_2) - v_0(\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2) + \mathbb{V}_2 q_1 - \mathbb{V}_1 q_2) + \sqrt{\Delta}}{2(\mathbb{V}_2\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2\mathbb{V}_1)} \tag{7.3.8}$$

$$T_-(p) = \frac{-(e_0(\mathbb{V}_1 - \mathbb{V}_2) - v_0(\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2) + \mathbb{V}_2 q_1 - \mathbb{V}_1 q_2) - \sqrt{\Delta}}{2(\mathbb{V}_2\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2\mathbb{V}_1)} \tag{7.3.9}$$

Pour une pression donnée, il y a donc *deux valeurs* de température thermodynamiquement compatibles avec l'état du mélange. En introduisant ces expressions dans l'équation de saturation 4.2.3 on dispose de deux formulations qui ne dépendent que de p.

$$\ln\left(\frac{p + P_{\infty,v}}{(p + P_{\infty,l})^D}\right) - \left(A + \frac{B}{T_+(p)} + C\ln\left(T_+(p)\right)\right) = 0 \tag{7.3.10}$$

$$\ln\left(\frac{p + P_{\infty,v}}{(p + P_{\infty,l})^D}\right) - \left(A + \frac{B}{T_-(p)} + C\ln\left(T_-(p)\right)\right) = 0 \tag{7.3.11}$$

on écrira,

$$F_{sat}(p) = \ln\left(\frac{p + P_{\infty,v}}{(p + P_{\infty,l})^D}\right) - \begin{cases} A + \frac{B}{T_+(p)} + C\ln(T_+(p)) \\ ou \\ A + \frac{B}{T_-(p)} + C\ln(T_-(p)) \end{cases} \tag{7.3.12}$$

et on distinguera $F_{sat,T_+}(p)$ et $F_{sat,T_-}(p)$, les deux branches de cette fonction. Pour déterminer une méthode de résolution nous allons dans un premier temps observer le comportement de $T_+(p)$ et $T_-(p)$ puis, observer le comportement de $F_{sat}(p)$.

7.3.1 Observations sur $T_+(p)$ et $T_-(p)$

On a actuellement deux expressions de la température de mélange thermodynamiquement admissibles. Ces fonctions dépendent d'un état de mélange e_0, v_0 et de la pression p. Les expressions de T_+ et T_- sont symétriques pour les deux phases, nous ne négligerons donc pas l'une ou l'autre des expressions a priori. Dans les cas présentés par la suite, T_+ et T_- sont les fonctions avec la phase 1 liquide et la 2 vapeur. Ces fonctions donnent l'ensemble des températures possibles pour un mélange e_0, v_0 en fonction de p. Dans cette section nous allons,

— tracer $T_+(p)$ et $T_-(p)$ dans un cas particulier e_0, v_0,

— tracer pour un ensemble de mélanges initiaux e_0, v_0 les valeurs de $T_+(e_0, v_0, P_0)$ et $T_-(e_0, v_0, P_0)$ pour vérifier si l'on retrouve bien T_0, et en particulier identifier si l'une des deux expressions ne convient pas.

Prenons un mélange donné, défini initialement par $\alpha_g = 0.4, \alpha_l = 0.6, T_0 = 400K, P_0 = 10^5 Pa$, ce qui donne un couple e_0, v_0 en conséquence via les équations d'état. Les graphes de la figure 65, présentent les fonctions $T_+(p)$ et $T_-(p)$.

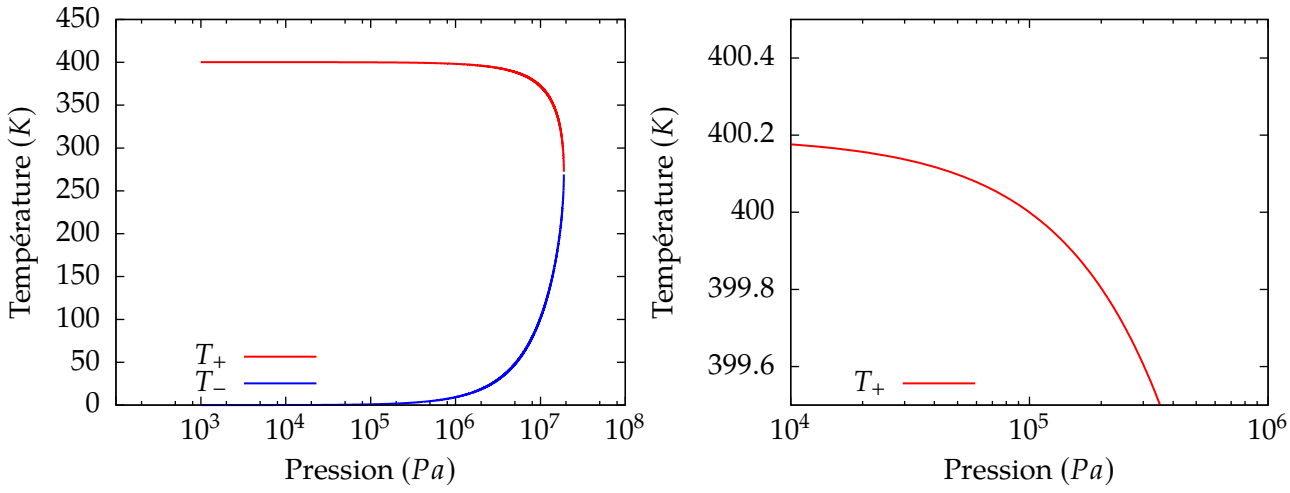


FIGURE 65 – Evaluation des fonctions T_+ et T_- en fonction de la pression $p \in [10^3, 10^8]$ pour le mélange initial fixé $\alpha_g = 0.4, \alpha_l = 0.6, T_0 = 400K, P_0 = 10^5 Pa$. A gauche, les deux fonctions T_+ et T_- sur la gamme de pression calculée. A droite, un zoom sur la fonction T_+ autour de la pression initiale $P_0 = 10^5\ Pa$. L'abscisse est donnée en logarithme.

Sur la première courbe, on voit que dans la zone $p >\sim 2.5 \times 10^7\ Pa$ les deux fonctions ne sont pas définies. C'est la zone dans laquelle $\Delta(e_0, v_0, p) < 0$. On observe également le point où l'on retrouve $T_+(p) = T_-(p)$ en $p \sim 2.5 \times 10^7$, c'est-à-dire le point qui vérifie $\Delta(e_0, v_0, p) = 0$. En connaissant la forme de $\Delta(e_0, v_0, p)$ nous pouvons alors en connaître le domaine de définition. L'annexe 9.1 présente le développement qui permet d'identifier le comportement de $\Delta(p)$ à celui d'un polynôme de degré 4 en pression. Cela signifie qu'il existe potentiellement jusqu'à 3 intervalles de définition sur $\mathbb{R}$ et on peut calculer les différentes racines de $\Delta(p)$ pour déterminer ces intervalles. Sur la seconde courbe, on peut voir une vue centrée sur le point qui vérifie $T_+(P_0) = T_0$. Cela permet de vérifier

que l'une des deux fonctions permet au moins de retrouver la température du mélange initial. Ainsi, on peut vouloir conjecturer que T_+ est la fonction à utiliser. Cependant, le graphe 66 présente les valeurs de $T_+(P_0)$ et $T_-(P_0)$ pour un ensemble de mélanges différents. Ces mélanges sont définis par $\alpha_g = 0.4, \alpha_l = 0.6, T_0 = 400K$ et $P_0 \in [10^3, 10^8]\ Pa$. On a donc pour chaque abscisse un mélange différent.

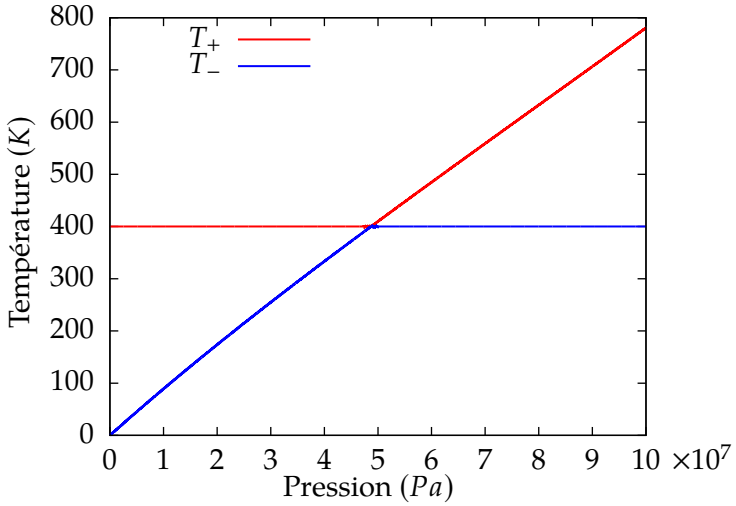


FIGURE 66 – Evaluation des valeurs $T_+(P_0)$ et $T_-(P_0)$ pour différents mélanges initiaux.

On observe ici que la fonction qui vérifie $T(P_0) = T_0$ n'est pas toujours la même. Dans l'immédiat, nous n'avons pas trouvé de méthode qui permet de savoir quelle expression de la température donne la valeur recherchée. Cependant, ce n'est pas nécessaire pour la suite et nous considérerons les **deux branches de solutions** possibles. Dans la section suivante, nous allons présenter le comportement de $F_{sat}(p)$.

7.3.2 Comportement de $F_{sat}(p)$

On s'intéresse maintenant au comportement de $F_{sat}(p)$, la fonction générale à annuler. On a réduit la dépendance de cette fonction à p uniquement en introduisant les expressions de T_+ et T_- dans la formulation générale de l'équation de la courbe de saturation pour obtenir l'équation 7.3.12. Le point qui vérifie $F_{sat}(p) = 0$ est le point d'équilibre thermodynamique. Or, on a vu précédemment qu'il existe deux branches de températures admissibles par le mélange. D'une manière similaire à la partie précédente, nous allons observer les deux branches $F_{sat,T_+}(p)$ et $F_{sat,T_-}(p)$. On se place dans le cas présenté précédemment, i.e. un mélange complètement défini $\alpha_g = 0.4, \alpha_l = 0.6, T_0 = 400K, P_0 = 10^5 Pa$ et on trace $F_{sat,T_+}(p)$ et $F_{sat,T_-}(p)$ pour $p \in [10^3, 10^8]$ sur le graphe 67.

Sur le premier graphe, on observe l'existence de la solution $F_{sat} = 0$ pour le mélange. Cela n'assure pas le fait que cette solution existe dans tous les cas. Nous pensons qu'une étude mathématique plus complète de l'équation de saturation sous cette forme permettrait de démontrer l'existence de cette solution ou alors d'identifier dans quelles conditions elle n'existe pas. La fonction F_{sat} est décroissante en T, on retrouve donc naturellement l'inversion de monotonie des branches F_{sat,T_-} et F_{sat,T_-} par rapport aux fonctions T_+ et T_-. Le point qui vérifie $F_{sat,T_+}(p) = F_{sat,T_-}(p)$ est un point de très forte pente, cela traduit une raideur particulière de F_{sat} en ce point. Nous sommes en mesure de penser que ce point vérifie $\frac{dF_{sat}}{dp}$ maximum. Sur la courbe de droite, on voit que $F_{sat}(P_0) \sim -1$, c'est-à-dire que l'état initial n'est pas à l'équilibre mais relativement proche. En effet, la température d'équilibre qui vérifierait $p_{sat} = 10^5\ Pa$ est $T_{sat}(p_{sat}) = 373.456\ K$ avec nos coefficients d'équations d'état.

Pour la suite, nous faisons l'hypothèse que *la solution $F_{sat}(p) = 0$ existe*, c'est en fait nécessaire pour toute personne désirant écrire un algorithme de recherche de solution sur la courbe de saturation.

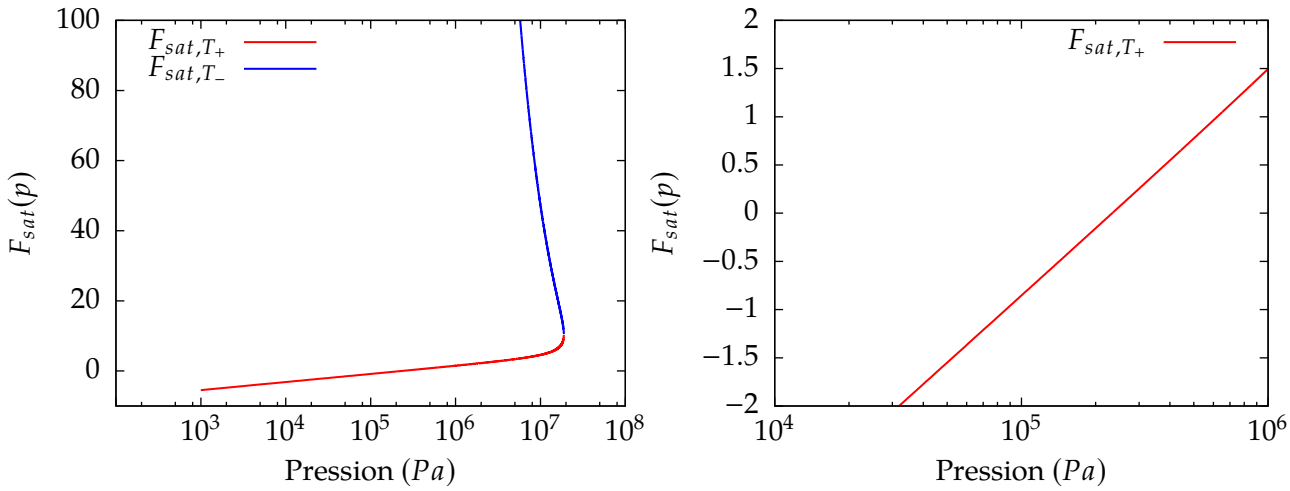


FIGURE 67 – Evaluation des fonctions F_{sat,T_+} et F_{sat,T_-} en fonction de la pression $p \in [10^3, 10^8]$ pour le mélange initial fixé $\alpha_g = 0.4, \alpha_l = 0.6, T_0 = 400K, P_0 = 10^5 Pa$. A gauche, les deux fonctions F_{sat,T_+} et F_{sat,T_-} sur la gamme de pression calculée, nous avons restreint l'affichage pour plus de clarté. La courbe de F_{sat,T_-} garde la même monotonie sur la zone où elle n'est pas représentée et atteint une valeur de ~ 800000 en $p = 10^3\ Pa$. A droite, un zoom sur la fonction F_{sat,T_-} autour de la pression initiale $P_0 = 10^5\ Pa$. L'abscisse est donnée en échelle logarithmique.

7.3.3 Résolution du processus de changement de phase

Finalement, d'après toutes les observations précédentes, voici l'algorithme de résolution que nous proposons. En données d'entrée, nous avons un état de mélange e_0, v_0 qui provient de l'étape d'avancée du système d'équations bilans 7.1.3. L'algorithme a donc pour but de résoudre, pour un mélange connu initial (e_0, v_0) l'équation $F_{sat}(p) = 0$, avec :

$$F_{sat}(p) = \ln\left(\frac{p + P_{\infty,v}}{(p + P_{\infty,l})^D}\right) - \begin{cases} A + \frac{B}{T_+(p)} + C\ln(T_+(p)) \\ ou \\ A + \frac{B}{T_-(p)} + C\ln(T_-(p)) \end{cases}$$

On appellera solution la pression p_{sat} qui vérifie $F_{sat}(p_{sat}) = 0$. Présenté sous cette forme, le comportement des fonctionnelles $T_+(p)$, $T_-(p)$ et $F_{sat}(p)$ est donc similaire au comportement observé sur les courbes 65 et 67. Pour la résolution, il faudra donc faire attention aux éléments suivants,

— nous n'avons pas les expressions des dérivées, nous allons utiliser une méthode qui ne les nécessite pas,

— la fonction $F_{sat}(p)$ n'est pas définie sur tout $\mathbb{R}^+$, il faut être capable de contenir la résolution au domaine de définition,

— il y a deux branches et on ne sait pas a priori où se trouve la solution.

Concernant le premier point, nous utilisons une librairie disponible en C++, la librairie *GSL* [9] qui nous permet de disposer de plusieurs méthodes de recherche de zéro. Celles qui ne nécessitent pas les expressions des dérivées et contiennent la résolution dans un domaine donné sont des méthodes d'encadrement de solution. Ce ne sont pas les méthodes les plus rapides, mais elles sont extrêmement fiables tant que l'on fournit un intervalle qui contient la solution.

Pour déterminer le domaine de définition, il faut regarder le signe de $\Delta(p)$. C'est un polynôme de degré 4 dont le comportement est présenté sur une partie de $\mathbb{R}^+$ sur la figure 68 pour le mélange initial $\alpha_g = 0.4, \alpha_l = 0.6, T_0 = 400\ K, P_0 = 10^5\ Pa$.

9. http ://www.gnu.org/software/gsl/

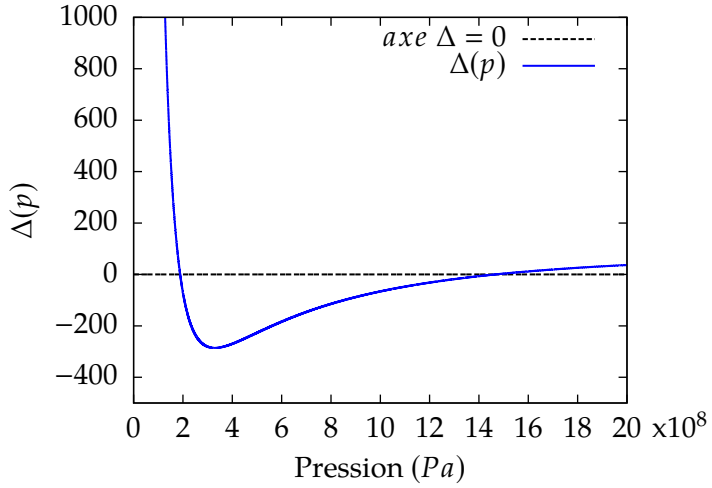


FIGURE 68 – Courbe de $\Delta(p)$ pour le mélange initial $\alpha_g = 0.4, \alpha_l = 0.6, T_0 = 400\ K, P_0 = 10^5\ Pa$.

On remarque qu'il y a deux valeurs positives qui vérifient $\Delta(p) = 0$ qui permettent de définir deux intervalles de définition sur $\mathbb{R}^+$. Cependant, nous ferons le choix de ne conserver que l'intervalle qui contient P_0 la pression initiale du système, c'est-à-dire l'intervalle $]0, P_{\Delta_0}]$ en notant P_{Δ_0} la première racine positive de $\Delta(p)$.

Concernant la branche de F_{sat} sur laquelle appliquer l'algorithme de la recherche, nous avons vu précédemment que les fonctionnelles T_+ et T_- étaient égales en P_{Δ_0} qui vérifie $\Delta(e_0, v_0, P_{\Delta_0}) = 0$. C'est également le cas pour F_{sat,T_+} et F_{sat,T_-}. Ainsi grâce au signe de $F_{sat}(P_{\Delta_0})$, on peut définir sur quelle branche utiliser la recherche de zéro.

Pour résumer, la résolution se déroule en quatres étapes,

— déterminer P_{Δ_0} la première racine positive de $\Delta(p)$,

— calculer $F_{sat}(P_{\Delta_0})$ et choisir la branche en fonction de son signe,

— appliquer une méthode de recherche de zéro sur la branche choisie dans l'intervalle $]0, P_{\Delta_0}]$ pour obtenir P_{sat},

— calculer $T_{sat}(p_{sat})$ l'expression de la température qui correspond à la branche choisie.

7.3.4 Bilan

Dans cette section, nous avons proposé un algorithme de résolution pour déterminer l'état d'équilibre des potentiels de Gibbs d'un mélange. Cette résolution est basée sur l'ensemble des observations que nous avons présentées et l'expérience acquise avec l'utilisation et la manipulation de cette méthode. L'objectif n'est pas de gagner du temps de calcul en comparaison à d'autres algorithmes de résolution de la littérature mais de pouvoir maîtriser la résolution à chaque étape. C'est quelque chose de nécessaire pour un code de recherche de manière à identifier si les comportements observés sont associés à la résolution ou au modèle.

7.4 Discussion sur l'emploi du modèle de changement de phase

Dans cette section, nous voulons souligner certains aspects qui concernent la prise en compte du changement de phase sous cette forme dans les modèles à interfaces diffuses.

7.4.1 Le couplage de modèles à interface diffuse

Le modèle mathématique est celui présenté en introduction, composé du système d'équations bilans d'Euler et d'une thermodynamique en équilibre des pressions, vitesses, températures et potentiels de Gibbs. Dans ce modèle, l'écoulement évolue donc à la saturation. C'est un comportement qui est souhaitable dans certaines zones de l'écoulement mais pas nécessairement sur tout le domaine. Or, on souhaite pouvoir être hors équilibre par endroits, c'est-à-dire ne pas vérifier $f_{sat}(p,T) = 0$. C'est le cas pour les phases vapeur qui peuvent être surchauffées et les phases liquides sous-refroidies. Pour ce faire, le modèle de changement de phase est couplé avec le modèle qui nous intéresse.

Le système d'équations bilans du modèle de changement de phase est un sous-ensemble des systèmes d'équations bilans résolus dans les modèles en déséquilibre. Cette caractéristique rend possible le changement de modèle par application de la thermodynamique spécifique au changement de phase par endroits. En repérant les zones de l'écoulement dans lesquelles on souhaite appliquer le changement de phase par un critère ϵ_c, le modèle mathématique correspond alors au système d'équations bilans du modèle en déséquilibre complété de la thermodynamique d'origine si ce critère n'est pas respecté et de la thermodynamique du modèle de changement de phase si ce critère est respecté. La conséquence sur la résolution numérique est équivalente grâce au schéma complètement explicite puisqu'il n'y a que le module thermodynamique,

$$\Pi^{n+1} = f_{thermo}(Q^{n+1}) \tag{7.4.1}$$

à changer en fonction de ϵ_c. Usuellement, on fait le choix de prendre un critère qui permet de repérer l'interface car c'est la zone de l'écoulement dans laquelle on s'attend à retrouver les phénomènes d'échanges de masse. Nous utiliserons le produit des fractions massiques pour repérer l'interface, ainsi $\epsilon_c = Y_1 Y_2$ et il est fixé arbitrairement à 10^{-5}, comme dans les travaux de Chiapolino et al. [43]. Nous appliquerons donc le changement de phase uniquement dans le cas où $\epsilon_c > 10^{-5}$.

Finalement, bien que l'utilisation des modèles à interfaces diffuses permette de ne résoudre qu'un modèle sur l'ensemble du domaine et de ne pas avoir à repérer l'interface de manière générale, l'utilisation du changement de phase remet en question cet avantage. Ce qui est effectivement valable est que le système d'équations bilans résolu est le même sur tout le domaine, mais la fermeture thermodynamique associée en chaque point peut être différente.

7.4.2 Discussion sur le critère de déclenchement du transfert de masse

L'utilisation du critère qui repère l'interface permet de restreindre la zone sur laquelle employer le modèle de changement de phase, cela présente l'avantage de permettre d'obtenir des états hors équilibre en dehors des interfaces, en particulier des états métastables. Cependant, la présence d'une interface est alors nécessaire pour générer un transfert de masse. Ainsi, cela rend impossible les phénomènes de nucléation spontanée, par exemple lorsqu'un fluide est chauffé directement au contact d'une paroi ou lors de concentration d'énergie en un point du domaine comme dans les travaux de Supponen et al [80]. Dans le premier cas, on sait qu'il y a en réalité des sites de nucléation et donc présence d'une interface, mais à une échelle très fine que nous ne pourrons pas capturer. De plus, en choisissant un critère sur la fraction massique des composants alors les volumes de contrôle au contact de la paroi auront de très faibles quantités de vapeur, rendant potentiellement inapplicable le changement de phase.

Concernant la valeur limite du critère, des choix différents mèneront à des dynamiques de changement de phase qui ne seront pas les mêmes. Dans l'espace discret, la limite d'interface raide dans laquelle deux limites phases pures différentes occupent des mailles adjacentes est en fait une situation dans laquelle il n'y a pas de changement de phase parce que le critère n'est pas vérifié de part et d'autre. Cela peut soulever des questions quant au fait de vouloir tendre vers une interface raide avec l'utilisation de ces modèles.

7.4.3 Transition entre les modèles, obtention des limites phases pures

Lors de l'utilisation de modèles couplés déséquilibre-équilibre, on peut aisément repérer les zones pour lesquelles on va appliquer les différentes fermetures thermodynamiques. Cependant, au cours d'un calcul, il faut également que des volumes d'interface puissent apparaître pour enclencher le changement de phase mais aussi disparaître lorsque les volumes se vaporisent ou condensent complètement. Comme nous l'avons dit précédemment, avec un critère il n'y a pas de nucléation spontanée et donc pas de formations d'interfaces. La seule chose qui permet de générer des volumes d'interface est la diffusion numérique. La diffusion numérique apparaît dans le cas où les interfaces sont en mouvement et a comme origine les propriétés du schéma numérique employé. Les aspects propres à la résolution interviennent alors et sont susceptibles de donner des dynamiques de vaporisation différentes sur lesquelles nous n'avons ni le contrôle ni les moyens de juger. Concernant le passage d'un volume d'interface en limite phase pure, nous adoptons la démarche proposée dans les travaux de Chiapolino et al. [43]. Cela consiste à tester, avant de réaliser l'algorithme de changement de phase, si le volume en question ne vérifie pas un état en limite phase pure. C'est-à-dire situer l'état qu'aurait le mélange en limite phase pure par rapport à la courbe de saturation.

Concernant la résolution, on rappelle qu'avec le modèle à l'équilibre mécanique (UP), la masse et l'énergie de mélange sont obtenues à l'itération $n+1$ grâce aux équations bilans pour le mélange. En imposant une fraction massique correspondant à une limite phase pure liquide ou vapeur, on peut déterminer la pression et la température qu'aurait le mélange dans cet état. En notant $*$ l'état en limite phase pure que nous testons, on détermine $p^* = f_{p^*}(m^{n+1}, e^{n+1}, Y_l^*, Y_v^*)$ et $T^* = f_{T^*}(m^{n+1}, e^{n+1}, Y_l^*, Y_v^*)$ avec les équations 5.1.8 et 5.1.10 du modèle UPT. Nous utilisons ces formulations et non celles des fermetures du modèle UP car elles permettent de déterminer une température de mélange. La fonction f_{sat} est alors évaluée au point (p^*, T^*) et son signe nous permet, en fonction de la limite phase pure imposée, de déterminer si cet état est cohérent ou non. Les possibilités sont les suivantes, en notant ϵ_r la valeur qui définit la phase résiduelle (10^{-8} dans ce travail),

$$\begin{array}{ll} (Y_l = 1 - \epsilon_r \ et \ f_{sat}(p^*, T^*) > 0) & liquide\ sous\ refroidi \\ (Y_l = \epsilon_r \ et \ f_{sat}(p^*, T^*) < 0) & vapeur\ surchauffe \end{array}$$

Dans le cas où l'une de ces inégalités est vérifiée alors on détermine le reste des quantités thermodynamiques avec $p^{n+1} = p^*$ et $T^{n+1} = T^*$. La limite phase pure obtenue est dans un état qui vérifie les fermetures thermodynamiques du modèle UPT. C'est imposé par le nombre d'inconnues du système thermodynamique du modèle UP qui est trop grand par rapport aux données dont on dispose après cette étape. Si aucune de ces inégalités n'est vérifiée alors on applique l'algorithme de changement de phase qui va nous permettre d'obtenir $p^{n+1} = p_{sat}(e^{n+1}, m^{n+1})$ et $T^{n+1} = T_{sat}(p^{n+1})$.

7.4.4 Bilan, ce qui est fait dans micro-SCONE

Dans micro-SCONE, nous utiliserons donc le modèle UP décrit dans la partie 6 avec un système thermodynamique qui dépend du produit $Y_1 Y_2$. En pratique, on pourra tester l'application du changement de phase sur tout le domaine ou bien uniquement sur l'interface. Concernant la résolution, l'architecture modulaire permet de conserver tout ce qui a été construit jusque là et de ne modifier que la partie de résolution du système thermodynamique. L'algorithme est résumé sur le schéma 7.4.4 suivant,

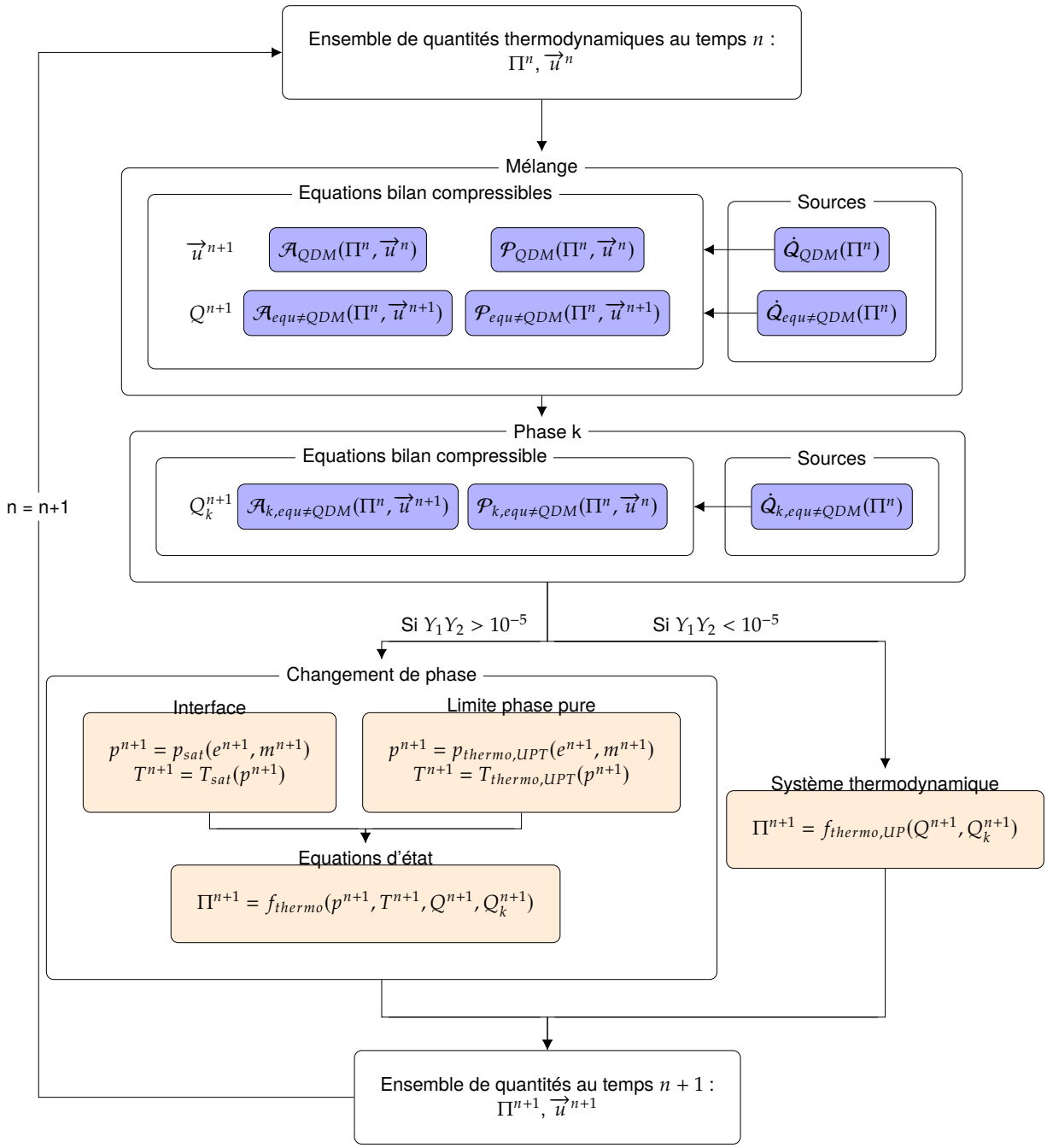


FIGURE 69 – Description de l'algorithme de résolution du modèle UP avec changement de phase.

La partie qui concerne le système d'équations bilans n'est pas modifiée. Les 5 équations du modèle UP sont traitées de la même manière que précédemment. Bien que non nécessaire dans la zone d'interface concernée par le changement de phase, les équations de masse phasiques sont utilisées pour déterminer $\dot{m}_k$ le débit massique de la phase k pour des besoins de post-traitement.

7.5 Vérification et validation du modèle UP avec changement de phase

7.5.1 Vérifications 0D

Le but de cette section est d'observer le comportement de la méthode présentée dans quelques cas qui ne concernent que l'étape thermodynamique, c'est-à-dire le calcul de l'état d'équilibre. Les tests que nous proposons sont les suivants,

— conservation de l'état d'équilibre : le but est de vérifier que l'état d'équilibre est un point fixe lorsque l'on y applique notre démarche,

— passage à l'équilibre à partir d'un état déséquilibré : le but est d'observer comment le mélange se ramène à l'équilibre.
— variation d'énergie : le but est d'illustrer le comportement lorsqu'une maille de mélange recoit de l'énergie.

Tout l'espace des paramètres ne sera pas traité, cependant, nous avons fait en sorte de tester un ensemble important de cas. Certains tests imposent une contrainte identique sur une vaste gamme de mélanges différents, d'autres une variété de contraintes sur un mélange donné.

7.5.1.1 Conservation de l'état d'équilibre

Dans ce cas test, on cherche à vérifier si une fois l'état d'équilibre atteint, cet état est conservé. C'est une étape importante pour s'assurer qu'une fois un calcul initialisé à l'équilibre, l'algorithme de changement de phase ne sera pas responsable de modifications involontaires de l'écoulement. Pour cela, partons d'un état initialement à l'équilibre et appliquons-y la méthode de changement de phase proposée.

Le test est réalisé pour un ensemble de 10^4 mélanges dans la gamme $\alpha_v \in [5.10^{-5}, 1 - 5.10^{-5}]$ que nous parcourons avec un incrément $\partial\alpha_v = 10^{-4}$. Les volumes font $10^{-6}m^3$, et l'état initial est $P_0 = 10^5\,Pa$ et $T_0 = 373.456\,K$ qui est un état d'équilibre : $f_{sat}(P_0, T_0) = 0$. Les résultats sont présentés sur les courbes de la figure 70. Ces graphes représentent l'erreur absolue $\epsilon_{p_{sat}} = P_0 - p_{sat,calcul}$ obtenue sur la

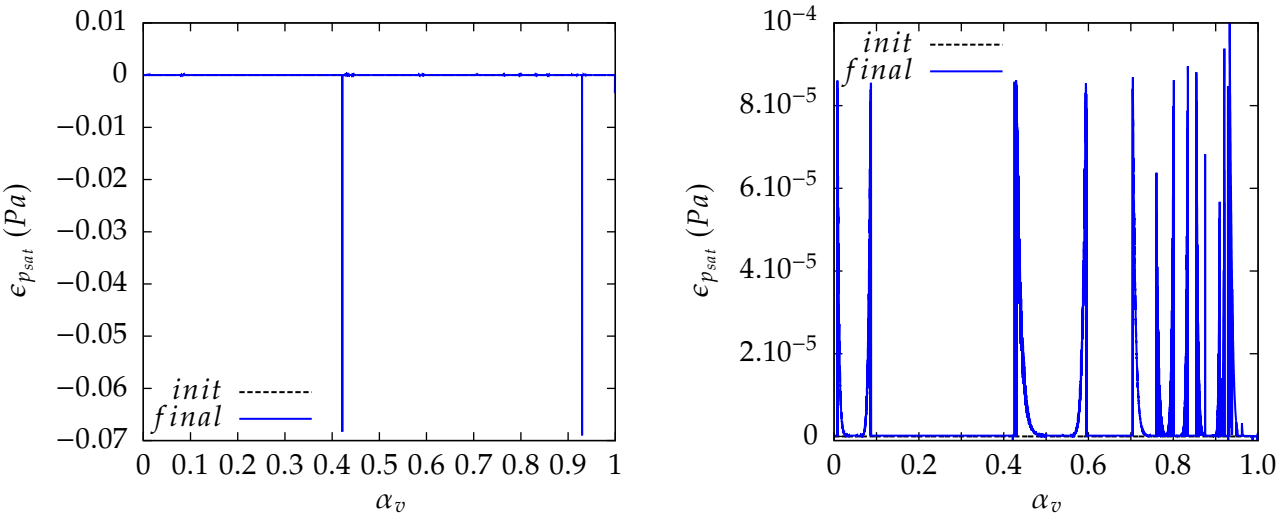


FIGURE 70 – Erreur absolue obtenue sur la pression après l'utilisation de l'algorithme de changement de phase pour un ensemble de mélanges $\alpha_v \in [5.10^{-5}, 1-5.10^{-5}]$ initialement à l'équilibre $P_0 = 10^5\,Pa$, $T_0 = 373.456\,K$. A gauche, toutes les erreurs obtenues. A droite, un focus plus proche de $\epsilon_{p_{sat}} = 0$.

pression après l'utilisation de l'algorithme de changement de phase avec un ensemble de mélanges initialement à l'équilibre. On espère retrouver $\epsilon_{p_{sat}}$ le plus faible possible. Sur le premier graphe, des variations de l'ordre de $0.07\,Pa$ sont observées pour quelques points. Cela illustre une irrégularité des difficultés que peut rencontrer l'algorithme de résolution qui déterminer l'état d'équilibre. Sur le second graphe, qui présente les résultats autour de la valeur de pression initiale, de légères variations inférieures à $10^{-4}\,Pa$ sont observées.

Les valeurs de l'erreur obtenues sont faibles, ce qui est satisfaisant. De plus, cette erreur peut être contrôlée à l'aide des paramètres numériques employés dans la méthode de résolution, par exemple le critère de convergence des méthodes de recherche de zéro que l'on emploie pour résoudre $F_{sat}(p) = 0$. Cela permet de valider en partie l'algorithme de calcul d'équilibre.

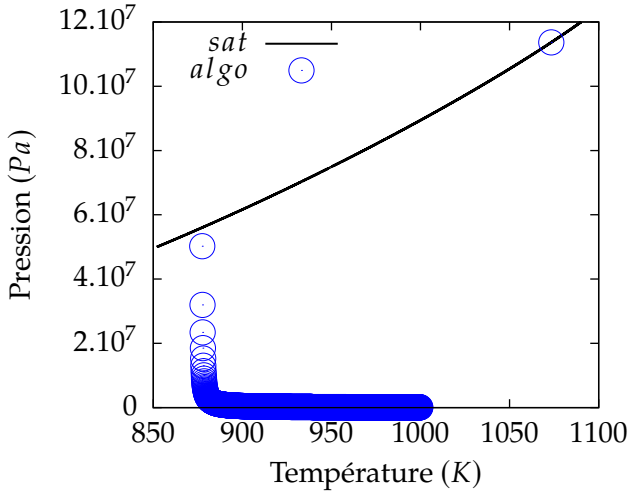
7.5.1.2 Obtention d'un état d'équilibre à partir d'un état déséquilibré

Dans ce cas test, on cherche à déterminer si l'équilibre peut être obtenu à partir d'un état éloigné. Cela permet de tester des gammes d'états que l'on peut rencontrer dans un écoulement d'intérêt

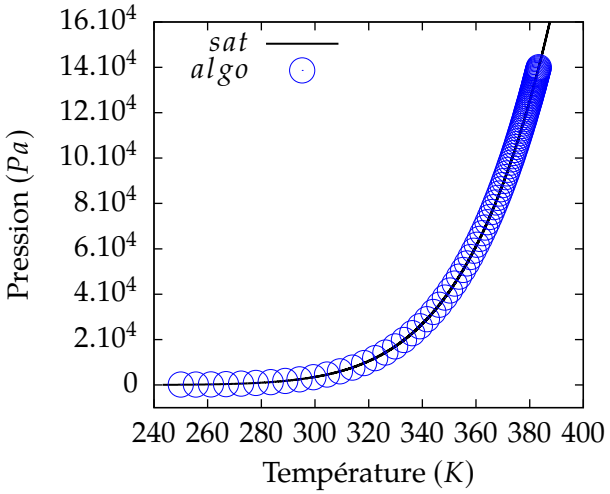
et l'obtention des limites phases pures. On s'intéresse en particulier à la capacité de l'algorithme à déterminer une solution et si cet état est cohérent physiquement.

La situation correspondante en cours de calcul est une situation dans laquelle on impose à un volume initialement hors de la saturation de l'atteindre. La situation notable dans laquelle on rencontre cette situation est si l'application du changement de phase est conditionnée par un critère qui repère l'interface, alors un volume initialement hors équilibre proche de l'interface peut dépasser ce critère par diffusion numérique et à ce moment-là subir l'algorithme de changement de phase.

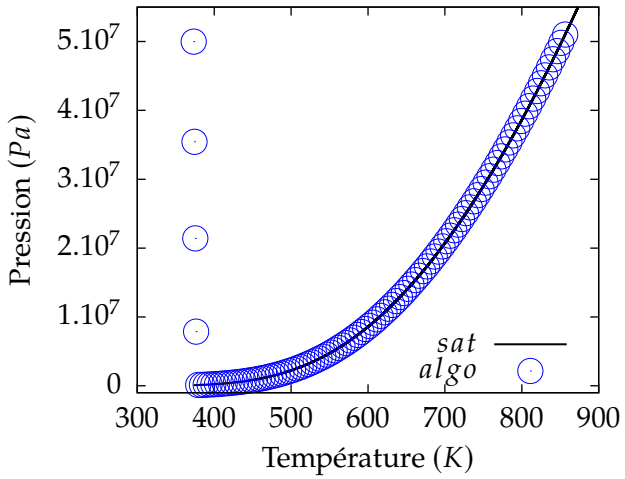
Ici, nous allons donc initialiser un mélange dans différents états arbitraires et observer son état après utilisation de l'algorithme de changement de phase. Le test est réalisé pour un ensemble de 10 mélanges dans la gamme $Y_{v,0} \in [5.10^{-6}, 1 - 5.10^{-6}]$ que nous parcourons avec un incrément $\partial Y_{v,0} = 10^{-5}$. Les volumes font $10^{-7} m^3$, et quatre états initiaux sont testés autour du point $p = 10^5\ Pa$ et $T = 373.456\ K$ qui est un état d'équilibre. Les courbes sont présentées sur la figure 71.



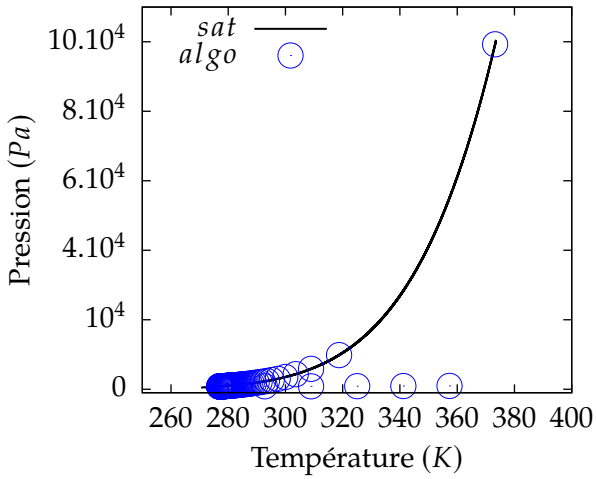
(a) ($P_0 = 10^5\ Pa, T_0 = 1000\ K > T_{sat}(P_0)$). La température initiale est supérieure à la température de saturation à P_0.



(b) ($P_0 = 10^5\ Pa, T_0 = 250\ K < T_{sat}(P_0)$). La température initiale est inférieure à la température de saturation à P_0.



(c) ($T_0 = 373.456\ K, P_0 = 5.10^7\ Pa > p_{sat}(T_0)$). La pression initiale est supérieure à la pression de saturation à T_0.



(d) ($T_0 = 373.456\ K, P_0 = 10^3\ Pa < p_{sat}(T_0)$). La pression initiale est supérieure à la inférieure de saturation à T_0.

FIGURE 71 – Etat final obtenu après passage dans l'algorithme de changement de phase dans l'espace (p, T) pour quatres états initiaux différents. Les états initiaux (P_0, T_0) sont spécifiés sous chaque courbe. La courbe de saturation est représentée en noir et les états finaux en cercles bleu. On ne représente qu'un échantillon des points calculés pour plus de clarté.

Ces graphes permettent de voir si l'état final obtenu est sur la courbe de saturation ou toujours en limite phase pure. On peut voir une continuité entre les limites phases pures et le passage sur la courbe de saturation, ce qui est satisfaisant. Les températures et pressions initiales utilisées correspondent à des majorations des situations que l'on peut obtenir dans le cas d'un calcul. Les états initiaux testés sont très éloignés de la saturation, cela permet d'illustrer la robustesse de la méthode.

Le graphe de la figure 72, présente la fraction massique obtenue après application de la méthode de changement de phase en fonction de la fraction massique initiale pour des mélanges initialement dans les états en déséquilibre précédents.

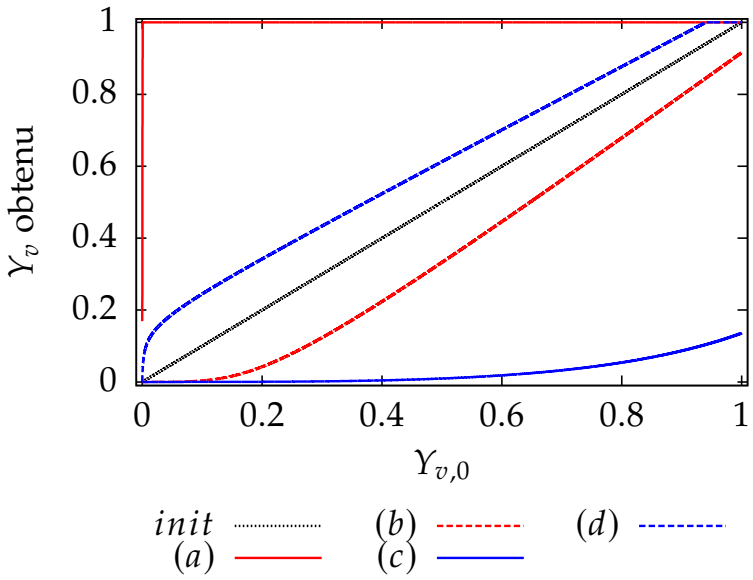


FIGURE 72 – Fraction massique de vapeur obtenue après application de l'algorithme de changement de phase pour un ensemble de mélanges initialement dans les quatre états en déséquilibre présentés. La légende correspond aux courbes précédentes, (a) ($P_0 = 10^5\ Pa, T_0 = 1000\ K > T_{sat}(P_0)$) , (b) ($P_0 = 10^5\ Pa, T_0 = 250\ K < T_{sat}(P_0)$), (c) ($T_0 = 373.456\ K, P_0 = 5.10^7\ Pa > p_{sat}(T_0)$) et (d) ($T_0 = 373.456\ K, P_0 = 10^3\ Pa < p_{sat}(T_0)$).

On y voit bien que le fait de partir d'un état surchauffé ou en dépression par rapport à l'équilibre tend à faire vaporiser le mélange et inversement. Ces résultats sont cohérents et très encourageants concernant le comportement de la méthode utilisée.

7.5.1.3 Evolution de l'état d'équilibre lors d'une variation d'énergie

Dans ce cas test, on cherche à observer le comportement d'un volume de fluide initialement à l'équilibre qui subit une variation d'énergie et auquel on applique l'algorithme de changement de phase. Cela correspond à une maille d'interface qui reçoit de l'énergie, par effet conductif ou radiatif par exemple.

Ce cas sera réalisé sur trois mélanges, initialement à l'équilibre $P_0 = 10^5\ Pa$ et $T_0 = 373.456\ K$ et dont les fractions massiques de liquide initiales seront initialement $Y_{l,0} = 0.1$, $Y_{l,0} = 0.5$ ou $Y_{l,0} = 0.9$. Pour chacun de ces mélanges, on réalise différents apports d'énergie interne, de 0 à 2 J. Les résultats sont présentés sur la figure 73,

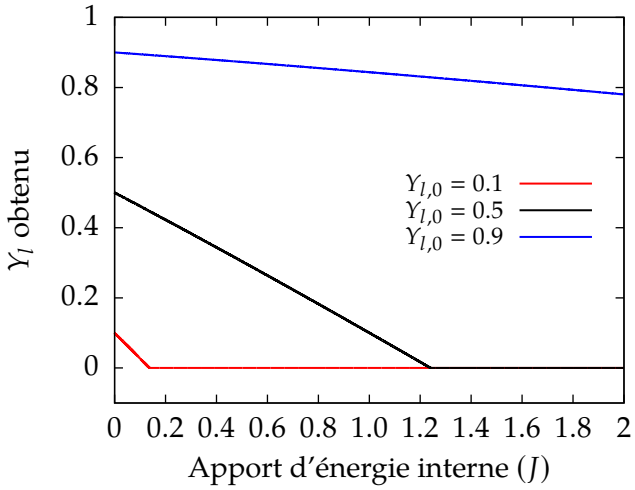


FIGURE 73 – Fraction massique de liquide obtenue après application du changement de phase pour un ensemble de variations d'énergie sur 3 mélanges initiaux différents.

L'axe des abscisses indique l'énergie apportée en Joules, il y a 10^4 incréments de 2×10^{-4} J. L'apport d'énergie tend à faire vaporiser le mélange, ce qui est conforme à nos attentes. De plus, la transition entre le fait d'obtenir un mélange proche de la limite phase pure et d'obtenir la limite phase pure est continue, ce qui est satisfaisant. Dans le cas de mélanges qui se rapprochent d'un état complètement liquide alors l'énergie qui doit être apportée pour la vaporisation est conséquente. A ce stade, nous ne sommes pas en mesure de juger si ce comportement est limitant. Une étude plus complète sur les gammes d'énergie échangées lors des transferts de chaleur par effets radiatifs, auxquels on peut s'attendre dans le cas de l'interaction combustible réfrigérant, pourrait permettre d'évaluer la dynamique de vaporisation pour plusieurs mélanges et de caractériser plus finement le comportement des volumes d'interface. C'est un travail qui ne sera pas réalisé dans le cadre de cette thèse mais qui sera nécessaire pour de futures études.

7.5.2 Validation 1D, tube à choc multiphasique

Le but de cette section est de réaliser un cas $1D$ disponible dans la littérature pour valider le comportement de l'algorithme de changement de phase.

Ce cas test, emprunté des travaux de Chiapolino et al. [43], est ici réalisé avec le modèle UP sans transferts de chaleur mais avec changement de phase. C'est un tube à choc composé initialement d'un mélange liquide-vapeur avec une discontinuité de température et de pression. La configuration est rappelée sur le schéma 74, et les coefficients des EOS dans le tableau 17,

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$q(J.kg^{-1})$	$q'(J.kg^{-1}.K^{-1})$
Liquide	2.35	1816	10^9	-1167×10^3	0
Vapeur	1.43	1040	0	2030×10^3	-23×10^3

TABLE 17 – Coefficients des équations d'états pour le cas test de tube à choc multiphasique avec changement de phase.

Le domaine est composé de 100 mailles ($\Delta x = 10^{-3} m$) et Δt vérifie le critère CFL. Les résultats obtenus sont présentés sur la figure 75,

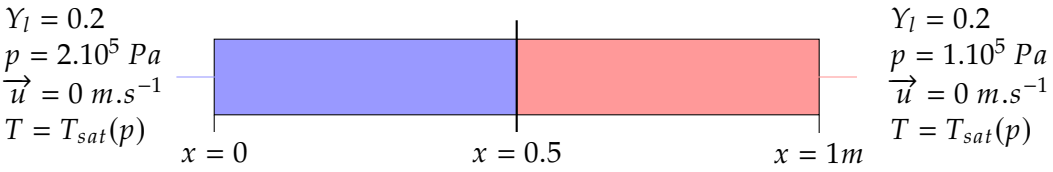


FIGURE 74 – **Configuration du cas test de tube à choc multiphasique avec changement de phase.**

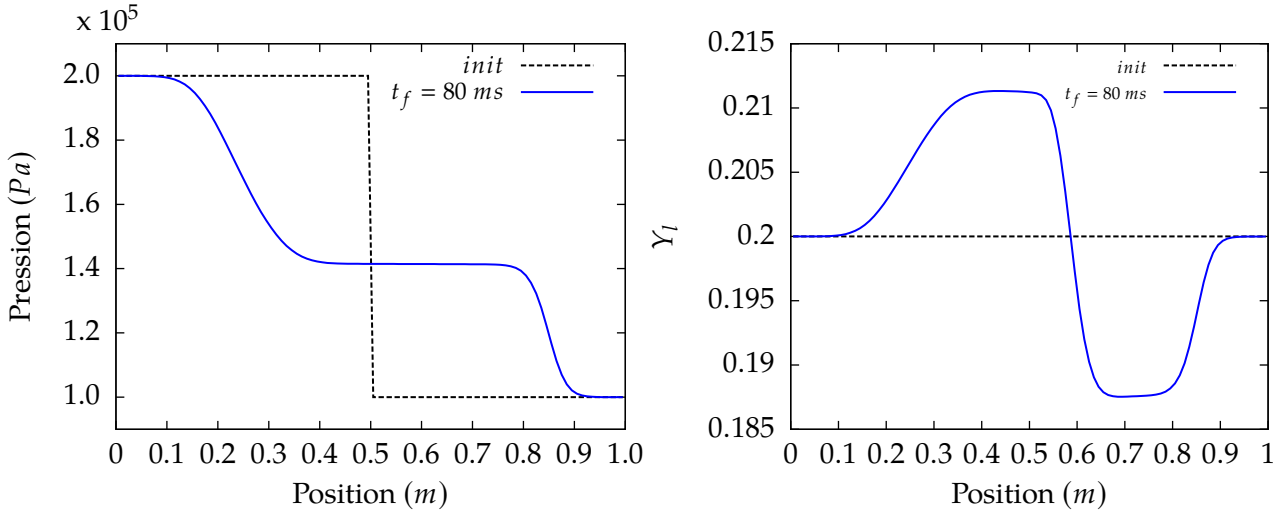


FIGURE 75 – Profils de pression et de fraction massique de liquide pour le cas de tube à choc 1D avec changement de phase.

L'onde de compression, à droite de la discontinuité initiale, génère une vaporisation du liquide. L'onde de détente, quant à elle, génère une condensation de la vapeur. Ce résultat, bien que contre-intuitif est conforme aux phénomènes mis en jeu. L'état obtenu lors de la compression affecte également la température et l'état d'équilibre obtenu est cohérent vis-à-vis de cet état final. Dans ce cas test, le changement de phase a été généré par les effets compressibles uniquement et non par des transferts de chaleur. C'est encourageant pour le traitement de problèmes de cavitation. Les autres cas tests de tube à choc $1D$ présentés dans [43] ont également été réalisés avec des accords qualitatifs.

7.6 Application en configuration d'intérêt, film de vapeur chauffé

Le but de cette section est d'utiliser l'ensemble des développements réalisés jusqu'ici pour observer le comportement dans une situation qui se rapproche de notre configuration d'intérêt. Ce cas test est similaire au cas présenté dans la section 6.4.2, c'est un cas $1D$ de film de vapeur chauffé dont la configuration est rappelée sur la figure 76, ici initialisé en fraction massique de composant.

FIGURE 76 – **Configuration du test de film de vapeur chauffé avec changement de phase**

Les conditions aux limites sont des conditions de température imposée sur la face gauche et de flux de chaleur nul sur la face opposée. Pour la pression, ce sont des conditions de réflexion qui sont imposées de part et d'autre du domaine. Les transferts de chaleur seront pris en compte et l'interface sera testée raide et initialement diffuse avec la régularisation 5.3.29 avec le paramètre $l = 0.0001$. Ce cas test a été réalisé avec et sans le critère ϵ_c pour déclencher le changement de phase. Les EOS sont celles de l'eau dont les paramètres et les conductivités thermiques sont rappelées dans le tableau 18,

	γ	$C_v(J.kg^{-1}.K^{-1})$	$P_\infty(Pa)$	$q(J.kg^{-1})$	$\lambda(W.m^{-1}.K^{-1})$
Eau Liquide	3.423	1231.2	8.99×10^8	-1.15×10^6	0.6
Eau Vapeur	1.358	1247	0	1.97×10^6	2.7×10^{-2}

TABLE 18 – Paramètres des SG EOS de l'eau liquide et vapeur

Les paramètres numériques sont $\Delta x = 10^{-4}$ et Δt qui vérifie le critère CFL et les résultats sont présentés sur les graphes des figures 77 et 78,

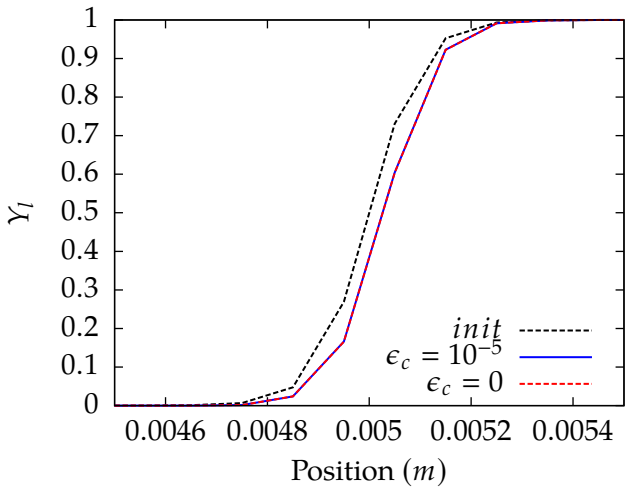


FIGURE 77 – Profils de fraction massique de la phase liquide à l'instant initial et à $t = 50\mu s$. Deux valeurs du critère de déclenchement du changement de phase ϵ_c sont testés, $\epsilon_c = 10^{-5}$ qui permet de ne repérer que l'interface et $\epsilon_c = 0$ qui autorise le changement de phase sur tout le domaine.

Sur cette première figure, on peut voir la forme de l'interface à l'instant initial et à $t = 50\mu s$ dans le cas avec et sans critère pour le changement de phase. On remarque que dans les deux cas, le profil obtenu est identique et que l'interface n'est pas vraiment entrée en mouvement. Les écarts entre l'état initial et final sont attribués au changement de phase. Le cas avec interface raide n'est pas présenté car aucune modification de l'interface n'a été observée.

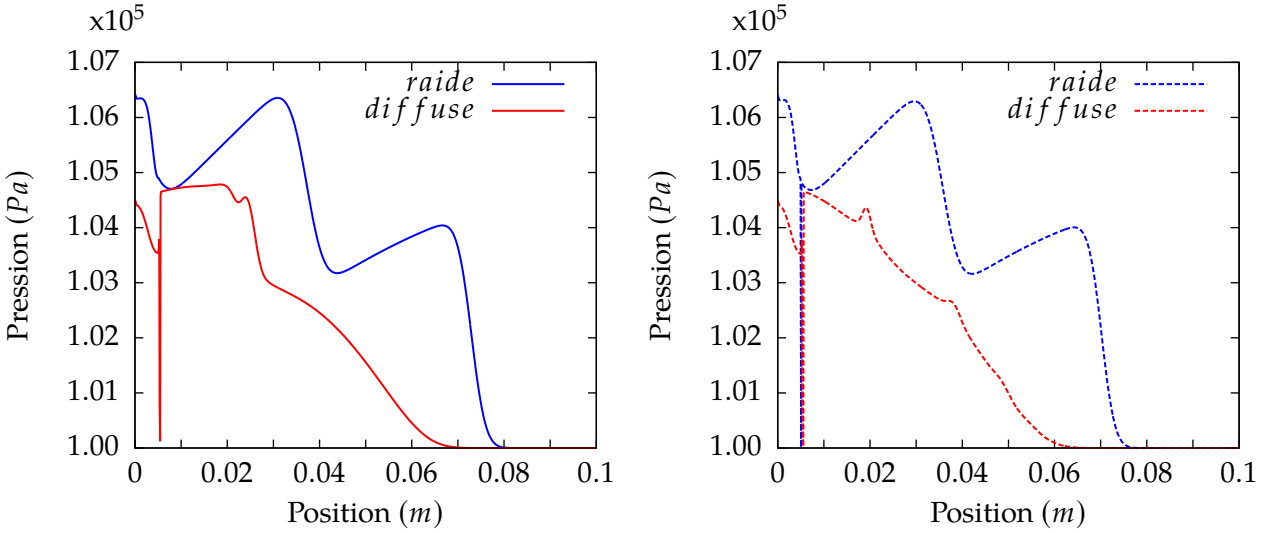


FIGURE 78 – Profils de pression à $t = 50\mu s$ pour les cas avec interface initialement raide et diffuse. Deux valeurs du critère de déclenchement du changement de phase ϵ_c sont testés, à gauche $\epsilon_c = 10^{-5}$ qui permet de ne repérer que l'interface et à droite $\epsilon_c = 0$ qui autorise le changement de phase sur tout le domaine.

Les profils de pression observés pour les interfaces raides sont comparables à ceux obtenus pour le cas sans changement de phase dans la section 6.4.2. Ce résultat est naturel puisque le changement de phase n'est pas déclenché dans le cas avec critère et que les limites phases pures sont obtenues de part et d'autre de l'interface sans créer de zone de mélange dans le cas sans critère. Concernant les cas avec interface initialement diffuse, on voit un comportement original. Cette fois-ci les ondes ne sont plus totalement transmises, la partie liquide du domaine ne voit que l'augmentation de pression dans le film de vapeur qui est due aux réflexions d'ondes entre le mur et l'interface. En effet, une partie de l'énergie qui devrait être transmise intervient dans le changement de phase, cela agit comme un élément qui absorbe les ondes de pression.

Dans les cas où le changement de phase se déclenche, on observe un comportement particulier sur l'interface. Il y a existence d'un 'pic' de pression composé d'une ou deux mailles proches en bordure de la limite phase pure liquide. C'est l'état obtenu lorsque l'algorithme de changement de phase détermine la pression de la limite phase pure. Le peu de vapeur alors présent dans ces volumes est instantanément condensé, ce qui tend à abaisser la pression du volume. Ce comportement est localisé et ne se transmet pas dans l'écoulement. Les ondes sont correctement transmises comme on peut le voir dans le cas sans critère avec interface raide sur le graphe de droite. Cette discontinuité est une conséquence de la manière de vérifier si le fluide a atteint une limite phase pure ou non. Le fait d'imposer une fraction massique donnée à cet instant agit comme une discontinuité dans l'écoulement, il faudrait pouvoir réaliser la transition de manière plus régulière. Il est extrêmement difficile de juger de la conséquence de cette discontinuité de comportement sur la réponse du modèle. Cependant, il n'a été observé que dans des cas avec des phases résiduelles imposées à des valeurs faibles, ici 10^{-8}, et jamais dans les cas test précédents. Cela illustre le besoin de continuer à utiliser ces modèles et méthodes dans une plus grande vaste gamme de situations pour en cerner les limites et améliorations potentielles.

Dans cette situation, on s'attendait à ce que le film de vapeur soit mis en mouvement, ce qui n'a pas été observé ici. D'autres cas tests ont été réalisés sur des temps plus longs et/ou en diminuant la taille du film de vapeur, augmentant la température de paroi et les conductivités thermiques des composants. L'objectif était d'accélérer la réponse du système, cependant aucun résultat ne montre un déplacement de l'interface. En général, l'interface se raidit par changement de phase jusqu'à atteindre une situation dans laquelle le critère n'est plus vérifié et la dynamique n'est pas suffisante pour générer de la diffusion numérique. Cela crée une situation stable dans laquelle le film de vapeur s'échauffe et la pression du système augmente de manière identique aux résultats de la partie précédente sans changement de phase.

Nous identifions deux pistes qui peuvent expliquer l'absence de mouvement d'interface,

— le cas test proposé se serait pas cohérent, au sens où le film de vapeur ne devrait effectivement pas être mis en mouvement. A cause des effets de compressibilité, le chauffage par conduction ne suffirait pas à générer un changement de phase significatif. Bien que contre-intuitif, nous ne disposons pas d'assez de données expérimentales pour infirmer/confirmer quel doit être le comportement réel. Il est également possible que malgré les tests réalisés, les conditions étudiées ne soient pas encore suffisantes pour observer le mouvement de l'interface.

— le traitement du changement de phase ne serait pas adapté à l'étude de ce type de problème. En effet, d'une manière similaire à la partie précédente, il est possible que la prise en compte trop locale des transferts de masse ne permette pas de retrouver la dynamique attendue. On retrouverait ici une limitation pratique qui concerne la prise en compte de phénomènes d'échanges dans le cas d'interfaces raides. L'absence d'échanges inter-volumes n'autorise pas le transfert de masse dans les volumes en limite phase pure qui sont en contact. L'existence du critère ϵ_c ne fait que marquer cet effet de manière plus intense mais il n'en est pas responsable. Le traitement serait donc 'trop local' car intra-maille seulement. Pour pallier ce problème, une idée serait de faire intervenir le voisinage des volumes moyens dans la modélisation des termes d'échanges, par des gradients de quantité par exemple.

7.7 Conclusion

Dans cette partie, nous nous sommes intéressés à la prise en compte du changement de phase par mise à l'équilibre des potentiels de Gibbs avec des équations d'état de type stiffened gas.

Dans un premier temps, nous avons vu que ce choix menait à la définition d'un problème thermodynamique sous la forme d'un système non linéaire dont la résolution pose des difficultés. D'une part, il existe plusieurs températures admissibles pour un mélange donné. D'autre part, ces fonctions ne sont pas définies sur tout $\mathbb{R}^+$. La recherche de solution, sans précaution, peut alors être particulièrement compliquée. Le comportement des différentes fonctions qui interviennent a été présenté et un algorithme de détermination de l'état d'équilibre a été proposé basé sur ces observations.

Ensuite, nous avons abordé la prise en compte du changement de phase sous cette forme avec l'utilisation de modèles à interface diffuse déséquilibrés. Cela consiste à un couplage de modèle par l'intermédiaire d'un critère qui repère l'interface. Se posent alors les questions concernant la dynamique de changement de phase en fonction de ce critère et l'obtention des limites phases pures. Numériquement, le changement de phase se présente comme la résolution d'un système thermodynamique. C'est une étape réalisée après l'avancée par le système d'équations bilans qui prend en entrée une masse et une énergie de mélange qui peuvent être fournies quelque soit le modèle en déséquilibre utilisé. Ainsi, cela ne pose pas de problématique d'implémentation particulière et l'architecture modulaire qu'utilise micro-SCONE permet de réaliser le changement aisément.

La méthode de résolution proposée a été vérifiée et validée sur un ensemble de cas tests. Les cas tests $0D$ ont permis de s'assurer que la méthode de résolution et l'implémentation sont robustes et capables de gérer de nombreuses situations. Lors de ces tests, les limites phases pures sont obtenues comme limite continue, ce qui est cohérent et très satisfaisant. Le cas test de tube à choc avec changement de phase $1D$ nous a permis de valider qualitativement le comportement de la méthode de changement de phase.

Finalement, un cas de film de vapeur chauffé avec transferts de chaleur et changement de phase a été présenté. Contrairement à ce qui pouvait être attendu, l'interface n'a pas été mise en mouvement. Les raisons susceptibles d'expliquer ce comportement sont variées. Il y a la configuration du cas de calcul dans laquelle il est possible que le comportement ne soit pas celui attendu mais également le modèle et la résolution qui apportent chacun des approximations et limitations. En particulier, il est possible que la prise en compte uniquement locale du changement de phase puisse expliquer le comportement observé. Nous pensons que c'est un point sur lequel il est possible de revenir pour proposer des améliorations.

" Il faut se méfier de la chose écrite. Au-delà de sa noblesse, elle ne reflète toujours que la vérité de celui qui tient le crayon."

- *Blast*, Manu Larcenet

Huitième partie
Conclusion générale

8.1 Bilan des travaux

Ce travail de thèse s'inscrit dans le contexte de la recherche concernant les accidents graves de réacteurs nucléaires, en particulier l'amélioration de la sûreté des installations existantes et futures. Dans ce cadre, des travaux sont menés sur la modélisation et la simulation des explosions de vapeur à l'échelle réacteur. En particulier, dans la perspective de construire une filière de réacteurs refroidis au sodium, il faudra établir un dossier de sûreté qui prenne en compte l'évaluation des risques associés à une explosion de vapeur. Le CEA a entrepris de disposer d'un code de calcul dédié à ces études, SCONE, actuellement en cours de développement. Cependant, dans le but de faire évoluer les codes de calcul d'interaction corium-réfrigérant, comme SCONE, vers plus de prédictivité et de fiabilité, la connaissance fine des phénomènes qui interviennent à l'échelle locale apparait aujourd'hui comme une nécessité. La compréhension de ces phénomènes a motivé le développement d'un outil de calcul appelé micro-SCONE. A terme, il devra permettre de réaliser des études d'interaction combustible-réfrigérant à l'échelle d'une goutte de combustible fondu, de la phase d'ébullition en film stable jusqu'à sa fragmentation complète.

L'objectif principal de cette thèse était de poser les fondements d'un tel outil de calcul et de contribuer au développement des modèles qui permettent de traiter les écoulements multiphasiques impliqués dans l'explosion de vapeur locale.

Dans ce but, nous avons tout d'abord passé en revue quelques expériences de petite échelle dans la partie **II**. Cela nous a permis d'observer les phénomènes qui nous intéressent et de situer l'état de la connaissance autour de l'interaction combustible-réfrigérant locale. Les besoins spécifiques pour simuler l'explosion de vapeur ont été ensuite identifiés. Puis, un ordre de priorité des effets physiques à prendre en compte à été proposé : ce sont les effets compressibles, les transferts de chaleur par conduction et le changement de phase du réfrigérant. L'idée est de pouvoir reproduire le plus tôt possible dans le développement de micro-SCONE les transitions de comportement observées expérimentalement que l'on retrouve illustrées dans une Thermal Interaction Zone. La détermination d'un modèle adapté à la prise en compte de ces effets et la construction informatique de micro-SCONE ont ensuite été menées en parallèle.

Le choix de modèle mathématique s'est porté sur la famille de modèles compressibles à interfaces diffuses dont nous avons présenté les fondamentaux dans la partie **III**. Néanmoins, il existe différentes déclinaisons de ces modèles parmi lesquelles il faut déterminer celles capable de traiter notre problème d'explosion de vapeur.

Ainsi, après avoir introduit certaines spécificités de l'architecture logicielle partagée par SCONE et micro-SCONE et le schéma numérique dans la partie **IV**, le modèle à l'équilibre thermomécanique

a été présenté dans la partie **V**. En particulier, nous avons implémenté, vérifié puis validé ce modèle pour des applications dans lesquelles les transferts thermiques étaient intenses. Une illustration des capacités d'extension à trois phases a également été proposée. Cependant, l'hypothèse d'échanges de chaleur instantanés nous est apparue trop restrictive dans le cadre de notre application. Cela ne permet pas de réaliser des simulations en absence de transferts de chaleur. Ainsi, pour retrouver le comportement de transport pur dans la limite où les effets de conduction de chaleur sont négligeables, nous avons fait le choix de changer de modèle.

La partie **VI** présente alors le modèle à l'équilibre mécanique qui le permet. Cependant, ce modèle autorise les phases à avoir des températures différentes au sein d'un même volume ce qui rend la prise en compte des transferts thermiques plus délicate. En particulier, les conséquences de la localité des échanges dans les modèles à l'équilibre mécanique avec transferts de chaleur existants ont été jugées trop limitantes. Cela ne permet pas de retrouver les échanges de chaleur inter-phases inter-volumes nécessaires pour nos travaux. Une modélisation qui permet de prendre en compte les échanges de chaleur entre phases à la surface d'un volume moyen a donc été proposée. Cela permet de disposer d'un moteur thermique pour les cas qui nous intéressent et de retrouver de très bons accords sur les cas de validation testés. Le modèle a ensuite été appliqué dans une situation $1D$ de film de vapeur chauffé dans le but d'aborder une configuration proche de notre applicaton. Bien que l'on observe la propagation des ondes de pression générées par le chauffage du mur et les différentes réflexions d'ondes sur l'interface liquide-vapeur, cette dernière n'est essentiellement pas mise en mouvement.

Le changement de phase a ensuite été introduit dans la partie **VII**. Ce qui est communément appelé 'modèle à changement de phase' consiste en fait en un couplage de modèles. Le système d'équations bilans d'un modèle quelconque est complété de ses fermetures thermodynamiques propres ou bien de la thermodynamique spécifique à l'équilibre des potentiels de Gibbs dans certaines zones de l'écoulement. La détermination de cet état d'équilibre a été particulièrement detaillée dans le but d'illustrer les difficultés liées à la résolution du système d'équations non linéaires. La méthode proposée a été vérifiée et validée dans de nombreux cas tests $0D$, qui permettent d'y accorder une confiance importante. Le modèle à l'équilibre mécanique avec transferts de chaleur et changement de phase a été appliqué dans le cas 1D de film de vapeur chauffé précédent. Dans ce cas, nous pensions observer la mise en mouvement de l'interface. Cependant, mise à part une altération du comportement acoustique, l'interface n'a pas exhibé la dynamique attendue. En abordant les raisons qui peuvent expliquer ce comportement, nous avons retrouvé la difficulté d'évaluer les comportements qui doivent être attendus sans disposer de résultats expérimentaux. La localité des échanges de masse nous a également parue limitante.

Finalement, l'ensemble de ce travail a permis de progresser dans la modélisation des écoulements multiphasiques compresssibles avec transferts de chaleur par conduction et changement de phase ainsi que de construire une application logicielle complexe. L'outil micro-SCONE dispose dorénavant de deux modèles multiphasiques compressibles avec transferts de chaleur et changement de phase : les modèles à l'équilibre thermomécanique et à l'équilibre mécanique.

Cependant, la construction de micro-SCONE s'est accompagnée de difficultés récurrentes. Il y a les spécificités liées à la nature des phénomènes physiques de l'explosion de vapeur : hautes températures et couplages forts de phénomènes, qui rendent complexes l'appréhension des cas de validation et les interprétations. Concernant la modélisation, la prise en compte locale et instantanée des phénomènes d'échanges a été plusieurs fois responsables de limitations ou comportements jugés trop restrictifs.

Ainsi, l'état actuel de micro-SCONE ne doit pas être considéré comme abouti. Ce travail de thèse représente un point de départ dans la construction de l'application micro-SCONE et les simulations visées ne seront possibles qu'au terme de travaux supplémentaires. Nous décrirons dans la section suivante les principales directions préconisées pour poursuivre ce projet.

8.2 Perspectives

En tant que premier travail dédié à la construction de micro-SCONE nous avons soulevé différentes questions autour de la modélisation principalement. Nous pensons donc naturellement qu'il est nécessaire d'aborder les futurs développements en prenant en compte des évolutions de modèle. De plus, divers éléments annexes ont eu des implications et pourraient être améliorés tels que des aspects numériques et logiciels. Les principales évolutions que nous envisageons s'articulent autour de ces points.

Nous pensons que divers apects liés à **l'élaboration des modèles** multiphasiques à interfaces diffuses doivent être étudiés. En effet, nous avons vu que pour pouvoir disposer des échanges interphases dans la limite d'une interface raide, il faut faire intervenir les échanges inter-volumes. Lors de l'élaboration des modèles, c'est au moment du choix des relations d'interfaces que l'hypothèse de localité des échanges est réalisée. Le fait de ne pas faire cette hypothèse permettra de proposer des relations d'interfaces plus générales. La description que l'on propose dans la partie **VI** qui permet de prendre en compte l'ensemble des transferts de chaleur peut être un point de départ. Cependant, la dérivation des modèles multiphasiques moyennés n'a pas été reprise avec les conditions d'interfaces proposées. Cela soulève potentiellement des questions sur la production d'entropie. Un travail complet serait à mener de ce côté-là.

Certains choix arbitraires ont également été réalisés lors de l'élaboration de ces modèles. C'est le cas lors de la modélisation des efforts de pression moyens et de leur travail ainsi que de l'équation de fraction volumique. Dans cette thèse, nous avons adopté la méthodologie usuelle employée par la communauté pour construire ce type de modèles. Cela mène à l'utilisation d'une forme de l'équation d'évolution de la fraction volumique pour laquelle certaines incertitudes résident. Par exemple, cela ne permet pas de vérifier que les fractions volumiques restent comprises entre 0 et 1, autrement dit, la conservation du volume n'est pas nécessairement vérifiée. Toutefois, cela conduit à un système d'équations bilans qui présente l'avantage d'être hyperbolique. C'est un raisonnement intéressant pour la résolution de problèmes qui ne prennent en compte que les effets compressibles mais qui pourrait avoir des conséquences lors de la prise en compte d'effets supplémentaires.

De manière plus générale, nous pensons qu'il est important de faire intervenir les échelles spatiales et temporelles. Cela permettrait d'une part de distinguer les problèmes à interfaces des problèmes d'inclusions, d'autre part d'évaluer la cohérence des relations d'interfaces en fonction des temps et volumes d'observations. Il sera peut-être nécessaire pour cela de conserver une formulation intégrale des bilans et non une forme d'équations locales aux dérivées partielles. L'objectif principal de ce travail serait d'identifier les domaines de validité des différents modèles.

Ce premier travail de développement informatique a également permis de souligner des **besoins techniques**. Ces aspects concernent principalement le fait de pouvoir réaliser dans des temps plus courts des calculs plus complexes en gérant les contraintes liées au compressible. Pour cela il est envisageable de changer de méthode numérique, par exemple utiliser une méthode implicite, ou bien d'améliorer la précision en augmentant l'ordre du schéma. La solution retenue dans le cadre du projet de développement est d'utiliser les capacités de parallélisation de micro-SCONE sur d'importantes ressources informatiques disponibles au CEA. Il y a également d'autres aspects liés aux conditions aux limites qui nous apparaissent importants. Pour ne pas être affecté par les réflexions d'onde sur les bords du domaine, il est possible de disposer de conditions de transmission d'ondes ou bien de reculer la limite du domaine. C'est la seconde solution qui a été utilisée dans ce travail, cependant, avec un maillage cartésien régulier, cela s'accompagne de temps de calculs qui augmentent très rapidement. En conservant cette approche, il faudra alors étudier la possibilité d'utiliser un maillage non régulier ou bien des méthodes de Raffinement de Maillage Adaptatif. Ces solutions techniques doivent toutefois être abordées avec précaution en s'assurant que les modèles et la méthode numérique employée soient adaptés au préalable. Cette remarque est également importante au moment d'envisager des évolutions sur l'ordre du schéma numérique. En particulier, le raidissement de l'interface lié à la réduction de la diffusion numérique risque de poser des complications tant que les problèmes de

localité n'ont pas été corrigés dans le modèle.

De plus, pour compléter le travail actuel, il manque **une phase applicative** de prospection avec l'outil développé. Cela nécessite un travail d'identification de cas tests bien documentés et un parcours de l'espace des paramètres plus complet et systématique. L'objectif sera naturellement de reproduire les transitions de comportement de la TIZ. Enfin, il faudra par la suite ajouter les effets identifiés dans la partie **II** : la tension de surface, la viscosité, le rayonnement et le triphasique.

Neuvième partie

Annexe

9.1 Détermination de la forme de $\Delta(p)$

L'expression de $\Delta(p)$ est la suivante,

$$\Delta(p) = [e_0(\mathbb{V}_1 - \mathbb{V}_2) - v_0(\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2) + \mathbb{V}_2 q_1 - \mathbb{V}_1 q_2]^2 - 4(\mathbb{V}_2\mathbb{E}_1 - \mathbb{E}_2\mathbb{V}_1)v_0(q_2 - q_1) \tag{9.1.1}$$

avec,

$$\mathbb{V}_i(p) = \frac{(\gamma_i - 1)C_{v,i}}{p + P_{\infty,i}} \tag{9.1.2}$$

$$\mathbb{E}_i(p) = \frac{p + \gamma_i P_{\infty,i}}{p + P_{\infty,i}} C_{v,i} \tag{9.1.3}$$

Ce qui permet d'exprimer une formulation qui fait apparaître clairement la dépendance en p,

$$\begin{aligned}\Delta(p) = \Bigg[& e_0 \left(\frac{(\gamma_1 - 1)C_{v,1}}{p + P_{\infty,1}} - \frac{(\gamma_2 - 1)C_{v,2}}{p + P_{\infty,2}} \right) - v_0 \left(\frac{p + \gamma_1 P_{\infty,1}}{p + P_{\infty,1}} C_{v,1} - \frac{p + \gamma_2 P_{\infty,2}}{p + P_{\infty,2}} C_{v,2} \right) \\ & + \frac{(\gamma_2 - 1)C_{v,2}}{p + P_{\infty,2}} * q_1 - \frac{(\gamma_1 - 1)C_{v,1}}{p + P_{\infty,1}} * q_2 \Bigg]^2 \\ & - 4 \left(\frac{(\gamma_2 - 1)C_{v,2}}{p + P_{\infty,2}} \frac{p + \gamma_1 P_{\infty,1}}{p + P_{\infty,1}} C_{v,1} - \frac{p + \gamma_2 P_{\infty,2}}{p + P_{\infty,2}} C_{v,2} \frac{(\gamma_1 - 1)C_{v,1}}{p + P_{\infty,1}} \right) v_0(q_2 - q_1)\end{aligned} \tag{9.1.4}$$

ou bien,

$$\begin{aligned}\Delta(p) = & \frac{1}{(p + P_{\infty,1})^2 (p + P_{\infty,2})^2} \Bigg[e_0 \left((\gamma_1 - 1)C_{v,1}(p + P_{\infty,2}) - (\gamma_2 - 1)C_{v,2}(p + P_{\infty,1}) \right) \\ & - v_0 \left((p + \gamma_1 P_{\infty,1})(p + P_{\infty,2})C_{v,1} - (p + \gamma_2 P_{\infty,2})(p + P_{\infty,1})C_{v,2} \right) \\ & + (\gamma_2 - 1)C_{v,2}(p + P_{\infty,1}) * q_1 - (\gamma_1 - 1)C_{v,1}(p + P_{\infty,2}) * q_2 \Bigg]^2 \\ & - \frac{4(p + P_{\infty,1})(p + P_{\infty,2})}{(p + P_{\infty,1})^2 (p + P_{\infty,2})^2} \left((\gamma_2 - 1)C_{v,2}(p + \gamma_1 P_{\infty,1})C_{v,1} - (p + \gamma_2 P_{\infty,2})C_{v,2}(\gamma_1 - 1)C_{v,1} \right) v_0(q_2 - q_1)\end{aligned} \tag{9.1.5}$$

On voit que $\Delta(p)$ n'est pas définie en $-P_{\infty,1}$ et $-P_{\infty,2}$, qui sont des valeurs négatives ou nulles. Ainsi, sur $\mathbb{R}^+$, les racines de $\Delta(p)$ sont celles du dénominateur,

$$\begin{aligned}& \Delta(p) = 0 \iff \\ & 0 = \Bigg[e_0 \left((\gamma_1 - 1)C_{v,1}(p + P_{\infty,2}) - (\gamma_2 - 1)C_{v,2}(p + P_{\infty,1}) \right) \\ & - v_0 \left((p + \gamma_1 P_{\infty,1})(p + P_{\infty,2})C_{v,1} - (p + \gamma_2 P_{\infty,2})(p + P_{\infty,1})C_{v,2} \right) \\ & + (\gamma_2 - 1)C_{v,2}(p + P_{\infty,1}) * q_1 - (\gamma_1 - 1)C_{v,1}(p + P_{\infty,2}) * q_2 \Bigg]^2 \\ & - 4v_0(q_2 - q_1)(p + P_{\infty,1})(p + P_{\infty,2}) \left((\gamma_2 - 1)C_{v,2}(p + \gamma_1 P_{\infty,1})C_{v,1} - (p + \gamma_2 P_{\infty,2})C_{v,2}(\gamma_1 - 1)C_{v,1} \right)\end{aligned}$$

On remarque que c'est un polynôme de degré 4 en p, qui permet d'écrire après développement,

$$\begin{aligned}&\Delta(p) = 0 \Longleftrightarrow \\ &A^2p^4 + (2AB - D)p^3 + (2CA + B^2 - E)p^2 + (2BC - F)p + C^2 - G = 0\end{aligned} \tag{9.1.6}$$

avec,

$$A = v_0\left(C_{v,2} - C_{v,1}\right) \tag{9.1.7a}$$

$$\begin{aligned}B = \Big[&e_0\left((\gamma_1 - 1)C_{v,1} - (\gamma_2 - 1)C_{v,2}\right) - v_0\left(C_{v,1} * (P_{\infty,2} + \gamma_1 P_{\infty,1}) - C_{v,2} * (P_{\infty,1} + \gamma_2 P_{\infty,2})\right) \\ &+ \left((\gamma_2 - 1)C_{v,2} * q_1 - (\gamma_1 - 1)C_{v,1} * q_2\right)\Big]\end{aligned} \tag{9.1.7b}$$

$$\begin{aligned}C = &e_0\left((\gamma_1 - 1)C_{v,1}P_{\infty,2} - (\gamma_2 - 1)C_{v,2}P_{\infty,1}\right) \\ &- v_0\left(C_{v,1} * P_{\infty,2} * \gamma_1 P_{\infty,1} - C_{v,2} * P_{\infty,1} * \gamma_2 P_{\infty,2}\right) \\ &+ \left((\gamma_2 - 1)C_{v,2}P_{\infty,1} * q_1 - (\gamma_1 - 1)C_{v,1}P_{\infty,2} * q_2\right)\end{aligned} \tag{9.1.7c}$$

$$D = 4v_0(q_2 - q_1) * \left[(\gamma_2 - 1)C_{v,2}C_{v,1} - (\gamma_1 - 1)C_{v,1}C_{v,2}\right] \tag{9.1.7d}$$

$$\begin{aligned}E = 4v_0(q_2 - q_1) * \Big[&\left((\gamma_2 - 1)C_{v,2}\gamma_1 P_{\infty,1}C_{v,1} - \gamma_2 P_{\infty,2}C_{v,2}(\gamma_1 - 1)C_{v,1}\right) \\ &+ (P_{\infty,1} + P_{\infty,2}) * \left((\gamma_2 - 1)C_{v,2}C_{v,1} - (\gamma_1 - 1)C_{v,1}C_{v,2}\right)\Big]\end{aligned} \tag{9.1.7e}$$

$$\begin{aligned}F = 4v_0(q_2 - q_1)\Big[&(P_{\infty,1} + P_{\infty,2}) * \left((\gamma_2 - 1)C_{v,2}\gamma_1 P_{\infty,1}C_{v,1} - \gamma_2 P_{\infty,2}C_{v,2}(\gamma_1 - 1)C_{v,1}\right) \\ &+ P_{\infty,1}P_{\infty,2} * \left((\gamma_2 - 1)C_{v,2}C_{v,1} - (\gamma_1 - 1)C_{v,1}C_{v,2}\right)\Big]\end{aligned} \tag{9.1.7f}$$

$$G = 4v_0(q_2 - q_1)P_{\infty,1}P_{\infty,2} * \left((\gamma_2 - 1)C_{v,2}\gamma_1 P_{\infty,1}C_{v,1} - \gamma_2 P_{\infty,2}C_{v,2}(\gamma_1 - 1)C_{v,1}\right) \tag{9.1.7g}$$

Les racines de ce polynôme sont disponibles dans la littérature.

Bibliographie

Références

[1] Lucas David, François Beauchamp, Alexandre Allou, Kevin Daudin, and Richard Saurel. A small scale experiment and a simplified model to investigate the runaway of sodium-water reaction. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 144 :118542, December 2019.

[2] Georges Berthoud. Vapor Explosions. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 32(1) :573–611, 2000.

[3] D. F. Fletcher. Steam explosion triggering : a review of theoretical and experimental investigations. *Nuclear Engineering and Design*, 155(1) :27–36, April 1995.

[4] Renaud Meignen, Bruno Raverdy, Stephane Picchi, and Julien Lamome. The challenge of modeling fuel–coolant interaction : Part II – Steam explosion. *Nuclear Engineering and Design*, 280 :528–541, December 2014.

[5] Jie Liu, Seiichi Koshizuka, and Yoshiaki Oka. The Role of Fragmentation Mechanism in Large-Scale Vapor Explosions. *JSME International Journal Series B*, 47(2) :268–276, 2004.

[6] Roberta Concilio Hansson, Hyun Sun Park, and Truc-Nam Dinh. Dynamics and preconditioning in a single-droplet vapor explosion. *Nuclear Technology*, 167(1) :223–234, 2009.

[7] Erik de Malmazet. *Etude de la fragmentation de gouttes chaudes en ébullition en film dans un écoulement d'eau*. Thesis, Grenoble INPG, January 2007.

[8] M. L. Corradini, B. J. Kim, and M. D. Oh. Vapor explosions in light water reactors : A review of theory and modeling. *Progress in Nuclear Energy*, 22(1) :1–117, January 1988.

[9] Pei Shen, Wenzhong Zhou, Nathalie Cassiaut-Louis, Christophe Journeau, Pascal Piluso, and Yehong Liao. Corium behavior and steam explosion risks : A review of experiments. *Annals of Nuclear Energy*, 121 :162–176, November 2018.

[10] Georges Berthoud and Luc Gros D'Aillon. Film boiling heat transfer around a very high temperature thin wire immersed into water at pressure from 1 to 210bar : Experimental results and analysis. 48(9) :1728–1740.

[11] Mohamed M. K. Farahat. Transient-boiling heat transfer from spheres to sodium. Technical Report ANL-7909, Argonne National Lab. (ANL), Argonne, IL (United States), January 1972.

[12] D. R. Armstrong, G. T. Goldfuss, and R. H. Gebner. Explosive interaction of molten UO2 and Liquid Sodium. Technical report, Argonne National Lab., Ill.(USA), 1976.

[13] M. Furuya and T. Arai. Effect of surface property of molten metal pools on triggering of vapor explosions in water droplet impingement. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(17–18) :4439–4446, August 2008.

[14] Yuan Zhou, Meng Lin, Mingjun Zhong, Xiao Yan, and Yanhua Yang. Molten metal and water direct contact interaction research – I. Photographic experiment study. *Annals of Nuclear Energy*, 70 :248–255, August 2014.

[15] T. A. Dullforce, D. J. Buchanan, and R. S. Peckover. Self-triggering of small-scale fuel-coolant interactions : I. experiments. 9(9) :1295.

[16] Lloyd S. Nelson and Patricia M. Duda. Steam explosion experiments with single drops of iron oxide melted with a CO2 laser.

[17] Takeo Takashima. Observations of initiation stage of spontaneous vapor explosions for droplet scale. *Heat Transfer—Asian Research*, 37(1) :41–55, January 2008.

[18] Rongyuan Sa, Minoru Takahashi, and Kiyofumi Moriyama. Study on fragmentation behavior of liquid lead alloy droplet in water. *Progress in Nuclear Energy*, 53(7) :895–901, September 2011.

[19] Vernier P. Gouzy A. Amblard M., Semeria R. and Najuc M. Contact entre du bioxyde d'uranium fondu et un réfrigérant sodium et eau. Rapport T.T. n°96, CEA, 1970.

[20] Raridon Jr D. Armstrong D.R., Testa F.J. Interaction of sodium with molten uo2 and stainless steel using a dropping mode of contact. ANL - 7890, Argonne National Laboratory, 1971.

[21] Mizuta H. Fragmentation of Uranium Dioxide after Molten Uranium Dioxide-Sodium Interaction. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 11(11) :480–487, November 1974.

[22] Zhi-Gang Zhang and Ken-Ichiro Sugiyama. Fragmentation of a Single Molten Metal Droplet Penetrating into Sodium Pool : Thermal and Hydrodynamic Effects on Fragmentation in Stainless Steel. *Nuclear Technology*, 175(3) :619–627, September 2011.

[23] Zhi-Gang Zhang and Ken-Ichiro Sugiyama. Fragmentation of a single molten metal droplet penetrating into sodium pool. IV. Thermal and hydrodynamic effects on fragmentation in copper. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 49(6) :602–609, June 2012.

[24] Satoshi Nishimura, Ken-ichiro Sugiyama, Izumi Kinoshita, Wataru Itagaki, and Nobuyuki Ueda. Fragmentation Mechanisms of a Single Molten Copper Jet Penetrating a Sodium Pool—Transition from Thermal to Hydrodynamic Fragmentation in Instantaneous Contact Interface Temperatures below Its Freezing Point—. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 47(3) :219–228, March 2010.

[25] Shifali Singh. *Radioscopie X pour les interactions corium-sodium lors d'un scénario d'accident grave*. Thesis, Université Paris-Saclay.

[26] Claude Brayer, Dmitry Grishchenko, Nathalie Cassiaut-Louis, and Pascal Piluso. Application of x-ray radioscopy for investigations of the 3-phase-mixture resulting from the fragmentation of a high temperature molten material jet in water. In *Proceedings of the 8th International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2013*.

[27] Christophe Journeau, Laurence Aufore, Léonie Berge, Claude Brayer, Nathalie Cassiaut-Louis, Nicolas Estre, Frédéric Payot, Pascal Piluso, Jean-Christophe Prele, Shifali Singh, Magali Zabiégo, Eric Pluyette, Frédéric Serre, and Béatrice Teisseire. Corium-sodium and corium-water fuel-coolant-interaction experimental programs for the PLINIUS2 prototypic corium platform. 205(1) :239–247.

[28] Alix Le Belguet. *Etude de l'ébullition en film du sodium autour d'une sphère à haute température*. PhD thesis, Université Grenoble Alpes, 2013.

[29] L. A. Dombrovskii and L. I. Zaichik. The Dynamics of Vapor Void under Conditions of Thermal Interaction of a Hot Spherical Particle with Ambient Water. *High Temperature*, 38(6) :938–947, November 2000.

[30] Yu. P. Ivochkin, Yu. A. Zeigarnik, and K. G. Kubrikov. Mechanisms Governing Fine Fragmentation of Hot Melt Immersed in Cold Water. *Thermal Engineering*, 65(7) :462–472, July 2018.

[31] K. Flory, R. Paoli, and R. Mesler. Molten metal-water explosions. *Chem. Eng. Progr. 65 : No. 12, 50-4(Dec 1969).*

[32] J. Gylys, R. Skvorcinskiene, L. Paukstaitis, M. Gylys, and A. Adomavicius. Film boiling influence on the spherical body's cooling in sub-cooled water. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 95 :709–719, April 2016.

[33] I. Sher, R. Harari, R. Reshef, and E. Sher. Film boiling collapse in solid spheres immersed in a sub-cooled liquid. *Applied Thermal Engineering*, 36 :219–226, April 2012.

[34] V. V. Yagov, A. R. Zabirov, P. K. Kanin, and M. A. Denisov. Heat Transfer in Film Boiling of Subcooled Liquids : New Experimental Results and Computational Equations. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 90(2) :266–275, March 2017.

[35] Lucia Rueda Villegas. *Simulation numérique directe de l'effet Leidenfrost*. PhD thesis, École Doctorale Mécanique, Énergétique, Génie civil et Procédés (Toulouse) ; 154236012, 2013.

[36] Yuan Zhou, Zhengming Zhang, Meng Lin, Yuan Minghao, and Yan Xiao. Numerical simulation of fragmentation of melt drop triggered by external pressure pulse in vapor explosions. *Annals of Nuclear Energy*, 57 :92–99, July 2013.

[37] Meng Lin, Yuan Zhou, Mingjun Zhong, Xiao Yan, and Yanhua Yang. Molten metal and water direct contact interaction research – II. Numerical analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 70 :256–265, August 2014.

[38] Kunihito Matsumura and Hideki Nariai. Thermal interaction zone of vapor explosion with tin-water drop experiment. 2004.

[39] Kunihito Matsumura and Hideki Nariai. Self-Triggering Mechanism of Vapor Explosions for a Molten Tin and Water System. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 33(4) :298–306, April 1996.

[40] M. A. Alchalabi, N. Kouraytem, E. Q. Li, and S. T. Thoroddsen. Vortex-induced vapor explosion during drop impact on a superheated pool. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 87 :60–68, October 2017.

[41] Richard Saurel, Fabien Petitpas, and Remi Abgrall. Modelling phase transition in metastable liquids : application to cavitating and flashing flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 607, July 2008.

[42] Gloria Faccanoni, Samuel Kokh, and Grégoire Allaire. Modelling and simulation of liquid-vapor phase transition in compressible flows based on thermodynamical equilibrium. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 46(5) :1029–1054, September 2012.

[43] Alexandre Chiapolino, Pierre Boivin, and Richard Saurel. A simple phase transition relaxation solver for liquid-vapor flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 83(7) :583–605, 2017.

[44] Fabien Petitpas and Sebastien Le Martelot. A discrete method to treat heat conduction in compressible two-phase flows. *Computational Thermal Sciences : An International Journal*, 6(3), 2014.

[45] Sebastien Le martelot. *Contribution à la simulation numérique directe de l'ébullition*. Thèse de doctorat, Aix-Marseille Université, France, 2013.

[46] Kevin Schmidmayer, Fabien Petitpas, Eric Daniel, Nicolas Favrie, and Sergey Gavrilyuk. A model and numerical method for compressible flows with capillary effects. *Journal of Computational Physics*, 334 :468–496, April 2017.

[47] Donald A. Drew and Stephen L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*. Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, New York, 1999.

[48] Mamoru Ishii and Takashi Hibiki. *Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow*. Springer-Verlag, New York, 2 edition, 2011.

[49] Roland Borghi and Fabien Anselmet. *Turbulent multiphase flows with heat and mass transfer*. WILEY-ISTE, 2013.

[50] Mathieu Labois. *Modélisation des déséquilibres mécaniques pour les écoulements diphasiques : approches par relaxation et par modèle réduit*. Thèse de doctorat, Université de Provence - Aix-Marseille I, October 2008.

[51] Clément Le Touze. *Couplage entre modèles diphasiques à « phases séparées » et à « phase dispersée » pour la simulation de l'atomisation primaire en combustion cryotechnique*. Thèse de doctorat, Université Nice Sophia Antipolis, December 2015.

[52] M. R. Baer and J. W. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6) :861–889, November 1986.

[53] A. K. Kapila, R. Menikoff, J. B. Bdzil, S. F. Son, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : Reduced equations. *Physics of Fluids*, 13(10) :3002–3024, September 2001.

[54] Ashwin Chinnayya, Eric Daniel, and Richard Saurel. Modelling detonation waves in heterogeneous energetic materials. *Journal of Computational Physics*, 196(2) :490–538, May 2004.

[55] O Le Métayer, J Massoni, and R Saurel. Élaboration des lois d'état d'un liquide et de sa vapeur pour les modèles d'écoulements diphasiques. *International Journal of Thermal Sciences*, 43(3) :265–276, March 2004.

[56] Richard Saurel, Pierre Boivin, and Olivier Le Métayer. A general formulation for cavitating, boiling and evaporating flows. *Computers & Fluids*, 128 :53–64, April 2016.

[57] Richard Saurel and Rémi Abgrall. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2) :425–467, April 1999.

[58] Francis H. Harlow and Anthony A. Amsden. Numerical calculation of almost incompressible flow. *Journal of Computational Physics*, 3(1) :80–93.

[59] Francis H. Harlow and Anthony A. Amsden. Numerical calculation of multiphase fluid flow. *Journal of Computational Physics*, 17(1) :19–52.

[60] Michel Valette. MC3D V3.2 : résolution numérique des équations. Note technique SMTH/LDTA-2000-015, CEA.

[61] Y. Tobita, Sa Kondo, H. Yamano, Koji Morita, W. Maschek, P. Coste, and T. Cadiou. The development of SIMMER-III, an advanced computer program for lmfr safety analysis, and its application to sodium experiments. *Nuclear Technology*, 153(3) :245–255, 1 2006.

[62] Thibaud Vazquez-Gonzalez. *Schémas numériques mimétiques et conservatifs pour la simulation d'écoulements multiphasiques compressibles*. Thèse de doctorat, June 2016.

[63] E. F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics : a practical introduction*. Springer-Verlag, Berlin ; New York, 2nd ed edition, 1999.

[64] Thomas Y. Hou and Philippe G. LeFloch. Why nonconservative schemes converge to wrong solutions : error analysis. *Mathematics of Computation*, 62(206) :497–530, 1994.

[65] Donald E. Burton. Exact conservation of energy and momentum in staggered-grid hydrodynamics with arbitrary connectivity. In Harold E. Trease, Martin F. Fritts, and W. Patrick Crowley, editors, *Advances in the Free-Lagrange Method Including Contributions on Adaptive Gridding and the Smooth Particle Hydrodynamics Method*, Lecture Notes in Physics, pages 7–19, Berlin, Heidelberg, 1991. Springer.

[66] Raphaèle Herbin, Jean-Claude Latché, and Trung Nguyen. Consistent explicit staggered schemes for compressible flows part II : the Euler equation. 2013.

[67] Antoine Llor and Thibaud Vazquez-Gonzalez. Geometry, Energy, and Entropy Compatible (GEEC) Variational Approaches to Various Numerical Schemes for Fluid Dynamics. In *Geometric Science of Information*, pages 559–567, Cham, 2019. Springer International Publishing.

[68] Fochesato Christophe and Zabiégo Magali. Implementation of the ICE scheme in the parallel dune framework. *International Conference on Multiphase Flow*, 2016.

[69] E. Goncalves, Y. Hoarau, and D. Zeidan. Simulation of shock-induced bubble collapse using a four-equation model. *Shock Waves*, February 2018.

[70] Alexandre Chiapolino, Pierre Boivin, and Richard Saurel. A simple and fast phase transition relaxation solver for compressible multicomponent two-phase flows. *Computers & Fluids*, 150 :31–45, June 2017.

[71] Eric Goncalves and Dia Zeidan. Numerical simulation of unsteady cavitation in liquid hydrogen flows. *International Journal of Engineering Systems Modelling and Simulation*, 9 :41–51, 01 2017.

[72] D. Zeidan, R. Touma, and A. Slaouti. Application of a thermodynamically compatible two-phase flow model to the high-resolution simulations of compressible gas-magma flow : velocity non-equilibrium computations in volcanology. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 76(5) :312–330, October 2014.

[73] D. Lemmonier. Transferts conductifs en régimes variables. Cours de l'Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, Poitiers, France, 2020.

[74] Thermophysical properties database of materials for light water reactors and heavy water reactors. IAEA-TECDOC-1496, International Atomic Energy Agency, 2006.

[75] Richard Saurel, Fabien Petitpas, and Ray A. Berry. Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures. *Journal of Computational Physics*, 228(5) :1678–1712, March 2009.

[76] Fabien Petitpas, Richard Saurel, Byoung-Kwon Ahn, and Sung-Ho Ko. Modelling cavitating flow around underwater missiles. *International Journal of Naval Architecture and Ocean Engineering*, 3(4) :263–273, 2011.

[77] N. Favrie and S. L. Gavrilyuk. Diffuse interface model for compressible fluid – Compressible elastic–plastic solid interaction. *Journal of Computational Physics*, 231(7) :2695–2723, April 2012.

[78] Angelo Murrone and Hervé Guillard. A five equation reduced model for compressible two phase flow problems. *Journal of Computational Physics*, 202(2) :664–698, January 2005.

[79] S. LeMartelot, B. Nkonga, and R. Saurel. Liquid and liquid–gas flows at all speeds. *Journal of Computational Physics*, 255 :53–82, December 2013.

[80] Outi Supponen, Danail Obreschkow, and Mohamed Farhat. Rebounds of deformed cavitation bubbles. *Physical Review Fluids*, 3(10) :103604, October 2018. arXiv : 1810.12287.