

Étude d'un modèle
à deux vitesses et deux pressions
pour la simulation d'écoulements diphasiques

Mathieu Labois

Plan

- Introduction
- Détermination d'un modèle à deux vitesses et deux pressions
- Hiérarchie de modèles pour les écoulements diphasiques
- Méthodes de relaxation des pressions et vitesses
- Implémentation d'un programme parallèle de calcul
- Conclusion et perspectives

Introduction

- *Contexte :*
 - *Écoulements compressibles à faible vitesse*
 - *Phases non miscibles*
 - *On souhaite modéliser les transferts de masse, quantité de mouvement, chaleur entre les deux phases*



Modèle à deux vitesses et deux pressions

- Pour les deux phases:

- Équations de conservation de la masse

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \text{div}(\alpha_k \rho_k \underline{u}_k) = \Gamma_k$$

- Équations de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k \underline{u}_k}{\partial t} + \text{div}(\alpha_k \rho_k \underline{u}_k \otimes \underline{u}_k) + \nabla \alpha_k p_k = \underline{u}_\Gamma \Gamma_k + p_I \nabla \alpha_k + \underline{M}_k^d$$

- Équations de la conservation de l'énergie

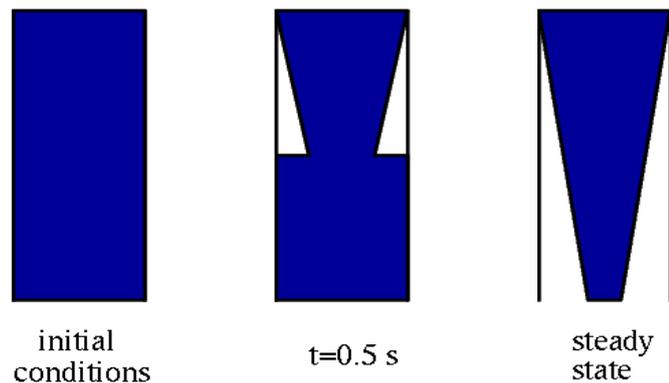
$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k e_k}{\partial t} + \text{div}(\alpha_k (\rho_k e_k + p_k) \underline{u}_k) = H_\Gamma \Gamma_k - p_I \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \underline{M}_k^d \cdot \underline{u}_\Gamma + Q_{I,k}$$

Modèle à deux vitesses et deux pressions

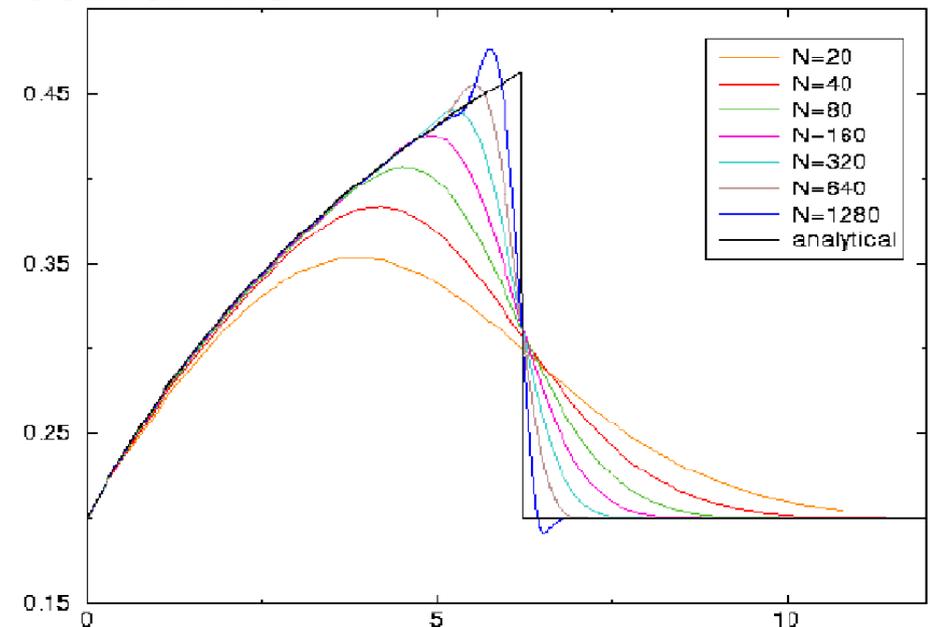
- Modèle standard, à six équations et une pression :

$$p_1 = p_2$$

- Systeme non hyperbolique, les résultats presentent des oscillations quand le maillage est raffiné



H. Paillere, 2000

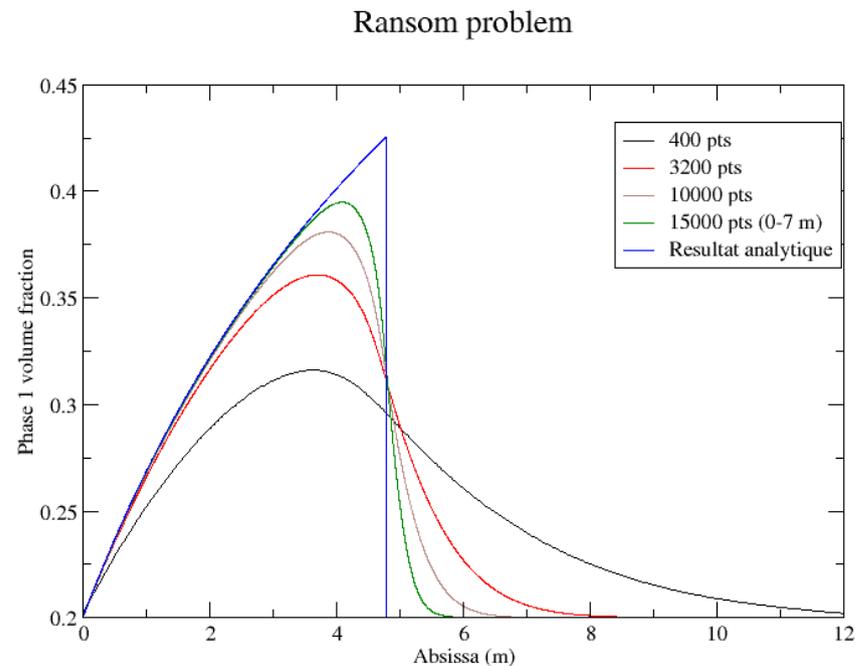


Modèle à deux vitesses et deux pressions

- On ajoute donc une équation sur la fraction volumique de la phase 1

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \underline{u}_\alpha \cdot \nabla \alpha_1 = \dot{\alpha}_1$$

- Système hyperbolique
- Écriture sous forme non-conservative



Fermeture du modèle

- De nombreux termes restent à modéliser:

- Termes interfaciaux :

$$\underline{u}_\alpha, \underline{u}_I, \underline{u}_\Gamma, p_I, H_\Gamma$$

- Termes d'échanges

$$\dot{\alpha}_1, \underline{M}^d, Q_I, \Gamma$$

- Pour cela, on utilise le second principe de la thermodynamique :
« *L'entropie d'un système isolé qui n'est pas à l'équilibre tendra à augmenter avec le temps et à atteindre un maximum à l'équilibre* »

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \text{div}(\alpha_1 \rho_1 s_1 \underline{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 s_2 \underline{u}_2) \geq 0$$

Fermeture du modèle

- On écrit l'équation d'entropie du système

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \rho s}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_1 \rho_1 s_1 \underline{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 s_2 \underline{u}_2) = \\
 & \left(\frac{1}{T_1} (p_I - p_1) (\underline{u}_\alpha - \underline{u}_1) - \frac{1}{T_2} (p_I - p_2) (\underline{u}_\alpha - \underline{u}_2) \right) \\
 & - \left(\frac{1}{T_1} (p_I - p_1) - \frac{1}{T_2} (p_I - p_2) \right) \dot{\alpha}_1 \\
 & + \left(\frac{1}{T_1} (\underline{u}_\alpha - \underline{u}_1) - \frac{1}{T_2} (\underline{u}_\alpha - \underline{u}_2) \right) \underline{M}^d \\
 & + \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) Q_I \\
 & + \left(\frac{g_2}{T_2} - \frac{g_1}{T_1} \right) \Gamma \\
 & + \left(\frac{1}{T_1} \left(H_\Gamma + \frac{(\underline{u}_\Gamma - \underline{u}_1)^2}{2} \right) - \frac{1}{T_2} \left(H_\Gamma + \frac{(\underline{u}_\Gamma - \underline{u}_2)^2}{2} \right) \right) \Gamma
 \end{aligned}$$

Fermeture du modèle

- On obtient notamment les termes d'échanges :

- Transfert de fraction volumique, en fonction des pressions p_k

$$\dot{\alpha}_1 = \frac{\lambda_p}{\varepsilon_p} (p_1 - p_2)$$

- Transfert de quantité de mouvement, en fonction des vitesses \underline{u}_k

$$\underline{M}^d = \frac{\lambda_u}{\varepsilon_u} (\underline{u}_2 - \underline{u}_1)$$

- Transfert de chaleur, en fonction des températures T_k

$$Q_I = \frac{\lambda_T}{\varepsilon_T} (T_2 - T_1)$$

- Transfert de masse, en fonction des potentiels chimiques g_k

$$\Gamma = \frac{\lambda_g}{\varepsilon_g} (g_2 - g_1)$$

Hiérarchisation de modèles diphasiques

- Le modèle à sept équations est coûteux
- Certaines grandeurs physiques s'équilibrent très rapidement

⇒ Relaxations des grandeurs physiques pour obtenir des modèles réduits

⇒ Modèles réduits à l'ordre 0 et à l'ordre 1, qui tiennent compte des déséquilibres sous certaines conditions

⇒ Obtention de lois d'états pour chaque modèle à partir des lois d'état de type « gaz raide »

Hiérarchisation de modèles diphasiques

- Le modèle complet s'écrit, avec $\underline{W} \in \mathbb{R}^N$

$$\frac{\partial \underline{W}}{\partial t} + A(\underline{W}) \frac{\partial \underline{W}}{\partial x} = \frac{R(\underline{W})}{\varepsilon} + S(\underline{W})$$

- On suppose connaître une paramétrisation $M(\underline{w})$, avec $\underline{w} \in \mathbb{R}^n$, du sous-espace $\{\underline{W} \in \mathbb{R}^N, R(\underline{W})=0\}$
- On pose $\underline{W} = M(\underline{w}) + \varepsilon \underline{V}$ avec $\underline{V} \in \text{Rng}(R'(M(\underline{w})))$
- On cherche la matrice de projection P sur $\ker(R'(M(\underline{w})))$, qui vérifie les propriétés $P \frac{\partial M(\underline{w})}{\partial \underline{w}} = Id(n)$ et $P \underline{V} = 0$
- On obtient le modèle réduit qui s'écrit à l'ordre 0

$$\frac{\partial \underline{w}}{\partial t} + P A(M(\underline{w})) \frac{\partial M(\underline{w})}{\partial \underline{w}} = P S(M(\underline{w})) + O(\varepsilon)$$

Hiérarchisation des modèles diphasiques

- Relaxation des pressions :
on obtient le modèle bi-fluide standard à l'ordre 0

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_k \rho_k \underline{u}_k) = \Gamma_k$$

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k \underline{u}_k}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_k \rho_k \underline{u}_k \otimes \underline{u}_k) + \alpha_k \nabla p = \underline{u}_\Gamma \Gamma_k + \underline{M}_k^d$$

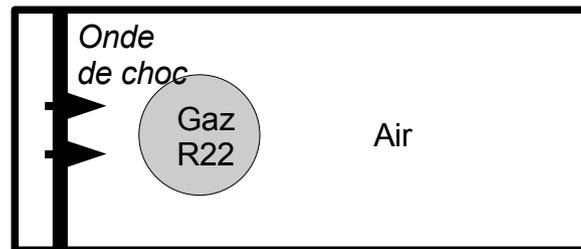
$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k e_k}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_k (\rho_k e_k + p) \underline{u}_k) = H_\Gamma \Gamma_k - p \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \underline{M}_k^d \cdot \underline{u}_\Gamma + Q_{I,k}$$

Hiérarchisation des modèles diphasiques

- Relaxation des vitesses :
on obtient un modèle réduit à cinq équations

- Système hyperbolique
$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \text{div}(\alpha_k \rho_k \underline{u}) = 0$$
$$\frac{\partial \rho \underline{u}}{\partial t} + \text{div} \rho_k \underline{u} \otimes \underline{u} + \nabla p = 0$$
$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \text{div}(\rho e + p) \underline{u} = 0$$
$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla \alpha_1 + \frac{\alpha_1 \alpha_2 (C_1 - C_2)}{\alpha_1 C_2 + \alpha_2 C_1} \text{div} \underline{u} = 0$$

- Utile pour les problèmes d'interface, par exemple



Hiérarchisation des modèles diphasiques

- Système à cinq équations à l'ordre 1 : des termes du deuxième ordre apparaissent

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_1 \rho_1 \underline{u}) = \varepsilon \operatorname{div}(B(\underline{w}) \nabla p)$$

$$\frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_2 \rho_2 \underline{u}) = -\varepsilon \operatorname{div}(B(\underline{w}) \nabla p)$$

$$\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \underline{u} \operatorname{div} \underline{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p = 0$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla p + A(\underline{w}) \operatorname{div} \underline{u} = \varepsilon (C(\underline{w}) |\nabla p|^2 + \operatorname{div}(D(\underline{w}) \nabla p))$$

$$\frac{\partial s_1}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla s_1 = \varepsilon (E(\underline{w}) |\nabla p|^2 + F(\underline{w}) \nabla p \cdot \nabla s_1)$$

- Possibilité de prendre en compte le déséquilibre des vitesses, pour des problèmes de sédimentation par exemple.

Hiérarchisation des modèles diphasiques

- Lois d'état pour le système à cinq équations

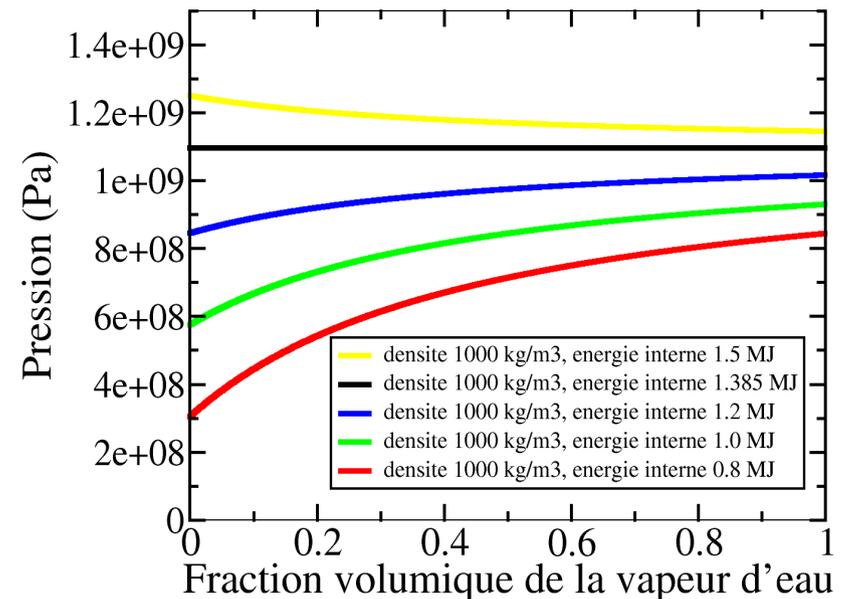
$$p_1(\rho_1, i_1) = (\gamma_1 - 1) \rho_1 (i_1 - i_{1,0}) - \gamma_1 p_{1,\infty}$$

$$p_2(\rho_2, i_2) = (\gamma_2 - 1) \rho_2 (i_2 - i_{2,0}) - \gamma_2 p_{2,\infty}$$



$$p(\rho, i, \alpha_1) = (\gamma(\alpha_1) - 1) \rho (i - i_0(\alpha_1)) - \gamma(\alpha_1) p_\infty(\alpha_1)$$

Pression en fonction de la fraction volumique
Modèle à cinq équations



- La pression du mélange dépend désormais également de la fraction volumique

Hiérarchisation des modèles diphasiques

- Après relaxation des températures, on obtient le modèle d'Euler multi-composant

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_k \rho_k \underline{u}) = 0$$

$$\frac{\partial \rho \underline{u}}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_k \underline{u} \otimes \underline{u} + \nabla p = 0$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho e + p) \underline{u} = 0$$

- Après relaxation des potentiels chimiques, on obtient les équations d'Euler monophasiques
- Ces deux modèles sont complétés par des lois d'état spécifiques

Méthodes de relaxation des pressions et vitesses

- On revient à l'étude du modèle complet à 7 équations
- Certaines grandeurs, comme la vitesse et la pression, s'équilibrent très rapidement par rapport à l'évolution du système général.
- Relaxations non instantanées ; apparition de certains phénomènes physiques à cause de ces déséquilibres
- Dans le modèle complet, les termes $\dot{\alpha}_1$ pour les pressions et \underline{M}^d pour les vitesses permettent ce retour à l'équilibre

Méthodes de relaxation : cas test

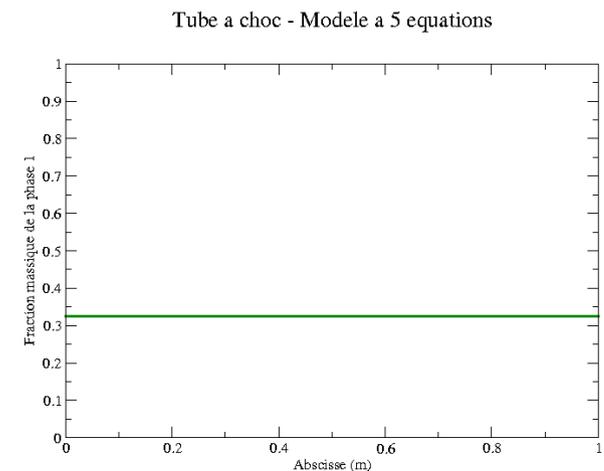
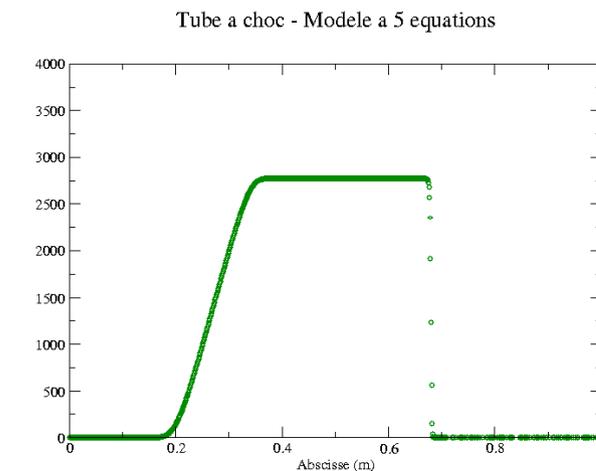
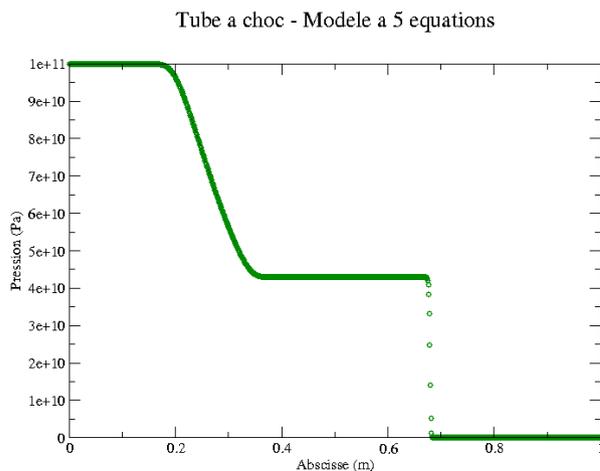
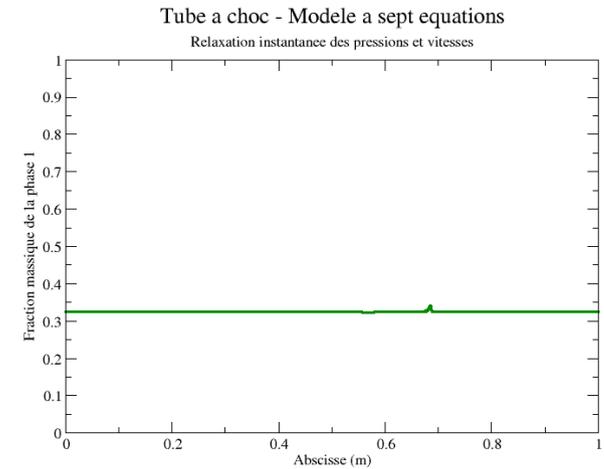
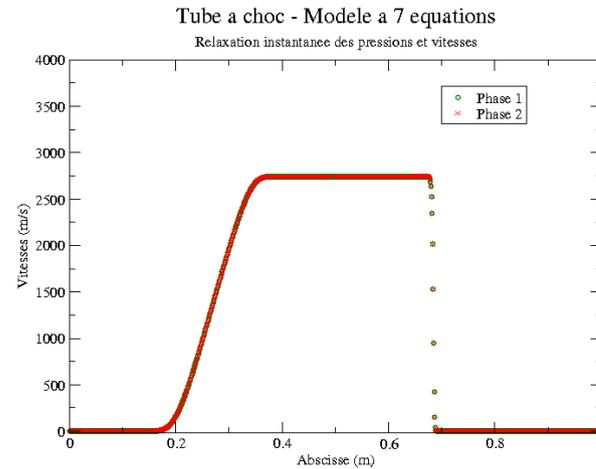
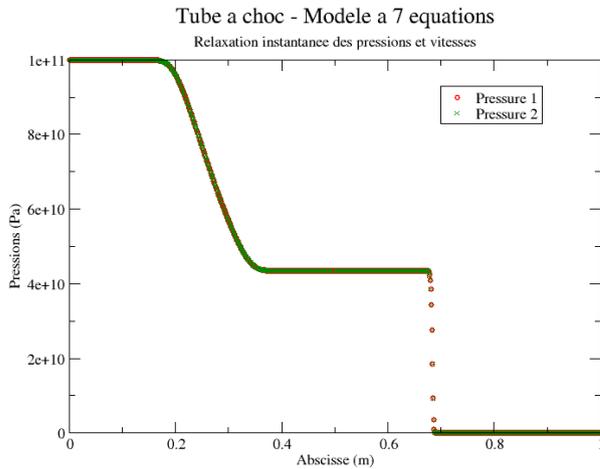
- Tube à choc contenant un mélange epoxy – spinel homogène
- Haute pression 10^{11} Pa, basse pression 10^5 Pa
- Calcul arrêté à $t = 25 \mu s$
- Maillage de $1001 * 5 * 5$ noeuds
- Calcul parallèle sur 8 processeurs, effectué sur Nef

Relaxations instantanées

- On suppose que les pressions et les vitesses s'équilibrent instantanément
- Résolution numérique du système en plusieurs pas (Lallemand et Saurel, 2000):
 - Résolution du système hyperbolique
 - Résolution d'un système d'EDO pour la relaxation des vitesses
 - Résolution d'un système d'EDO pour la relaxation des pressions

Relaxations instantanées

- Cette méthode peut être utilisée de la même manière que les modèles réduits



Relaxations à temps fini

- On suppose que les pressions et les vitesses s'équilibrent rapidement, mais pas instantanément
- Deux méthodes de résolution étudiées :
 - Résolution numérique en un pas unique :
 - Calcul explicite des termes sources de relaxation
 - Ce terme est ajouté au résidu convectif
 - Résolution numérique en deux pas
 - Résolution du système hyperbolique
 - Résolution implicite des systèmes d'EDO dûs aux relaxations

Relaxations à temps fini : méthode à un pas

- Méthode facile à implémenter

$$\underline{W}_i^{n+1} = \underline{W}_i^n + \Delta t \left(R_c(\underline{W}_i^n) + R_r(\underline{W}_i^n) \right)$$

- Méthode instable si $\varepsilon \ll \Delta t$: il faudrait calculer le pas de temps des itérations en fonction du temps de relaxation.
- Méthode adaptée au cas $\varepsilon > \Delta t$ (Température, potentiel chimique)

Relaxations à temps fini : méthode à deux pas

- Résolution explicite du système hyperbolique

$$\underline{W}_i^{n+1/2} = \underline{W}_i^n + \Delta t R_c(\underline{W}_i^n)$$

- Résolution implicite du système d'EDO dû aux relaxations

$$\begin{aligned} \underline{W}_i^{*,v} &= \underline{W}_i^{n+1/2} + \Delta t R_V(\underline{W}_i^{*,v}) \\ \underline{W}_i^{n+1} &= \underline{W}_i^{*,v} + \Delta t R_P(\underline{W}_i^{n+1}) \end{aligned}$$

- La relaxation des vitesses se fait avant celle des pressions

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \text{div}(\alpha_k \rho_k \underline{u}_k) = \Gamma_k$$

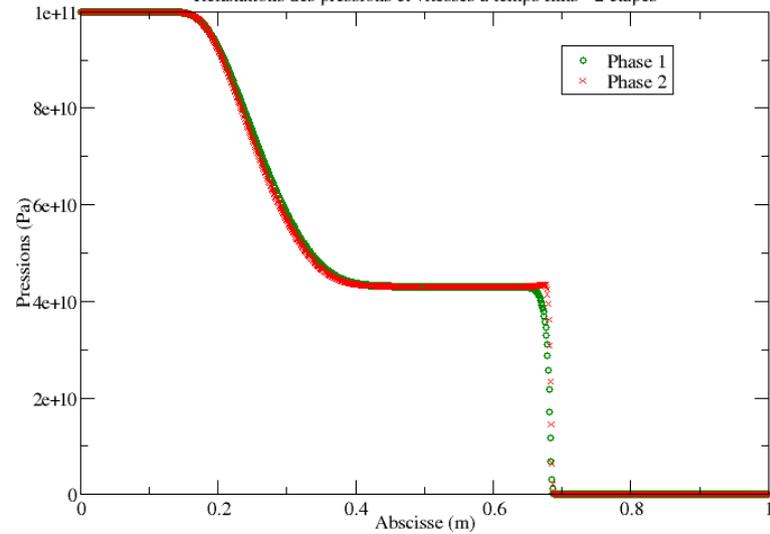
$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k \underline{u}_k}{\partial t} + \text{div}(\alpha_k \rho_k \underline{u}_k \otimes \underline{u}_k) + \alpha_k \nabla p = \underline{u}_\Gamma \Gamma_k + \underline{M}_k^d$$

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k e_k}{\partial t} + \text{div}(\alpha_k (\rho_k e_k + p) \underline{u}_k) = H_\Gamma \Gamma_k - p \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \underline{M}_k^d \cdot \underline{u}_\Gamma + Q_{I,k}$$

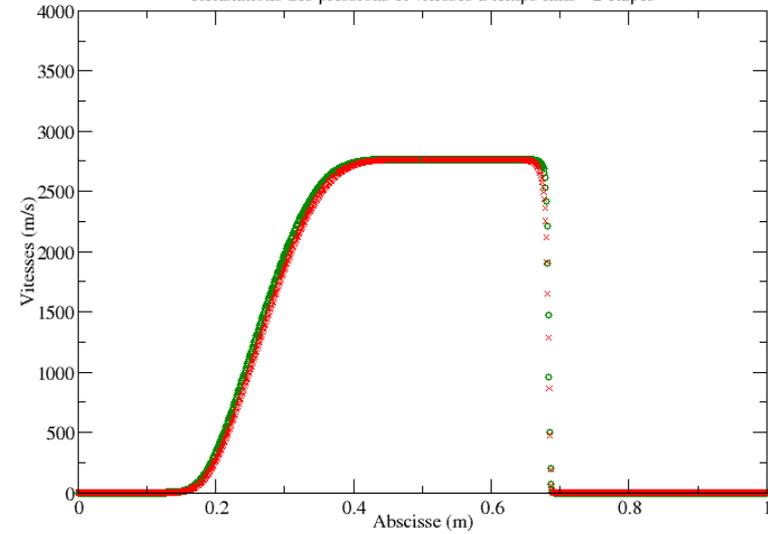
Étude d'un modèle à deux vitesses et deux pressions pour la simulation d'écoulements diphasiques

Relaxations à temps fini : méthode à deux pas

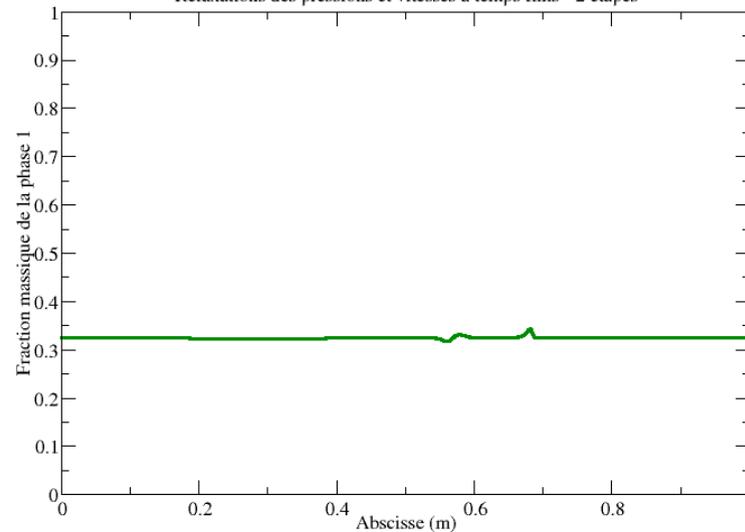
Tube a choc - Modele a 7 equations
Relaxations des pressions et vitesses a temps finis - 2 etapes



Tube a choc - Modele a 7 equations
Relaxations des pressions et vitesses a temps finis - 2 etapes



Tube a choc - Modele a 7 equations
Relaxations des pressions et vitesses a temps finis - 2 etapes



Relaxations à temps fini : méthode à deux pas

- Méthode stable : la résolution numérique du système de relaxation converge pour des temps de relaxation des pressions

$$\varepsilon_p = 10^{-15} \Delta t$$

- Pour la résolution numérique des relaxations des vitesses, une solution analytique à l'EDO peut être trouvée, si le paramètre de relaxation λ_u ne dépend pas des vitesses : la méthode est inconditionnellement stable.
- Méthode adaptée aux temps de relaxation petits devant le pas de temps convectif.

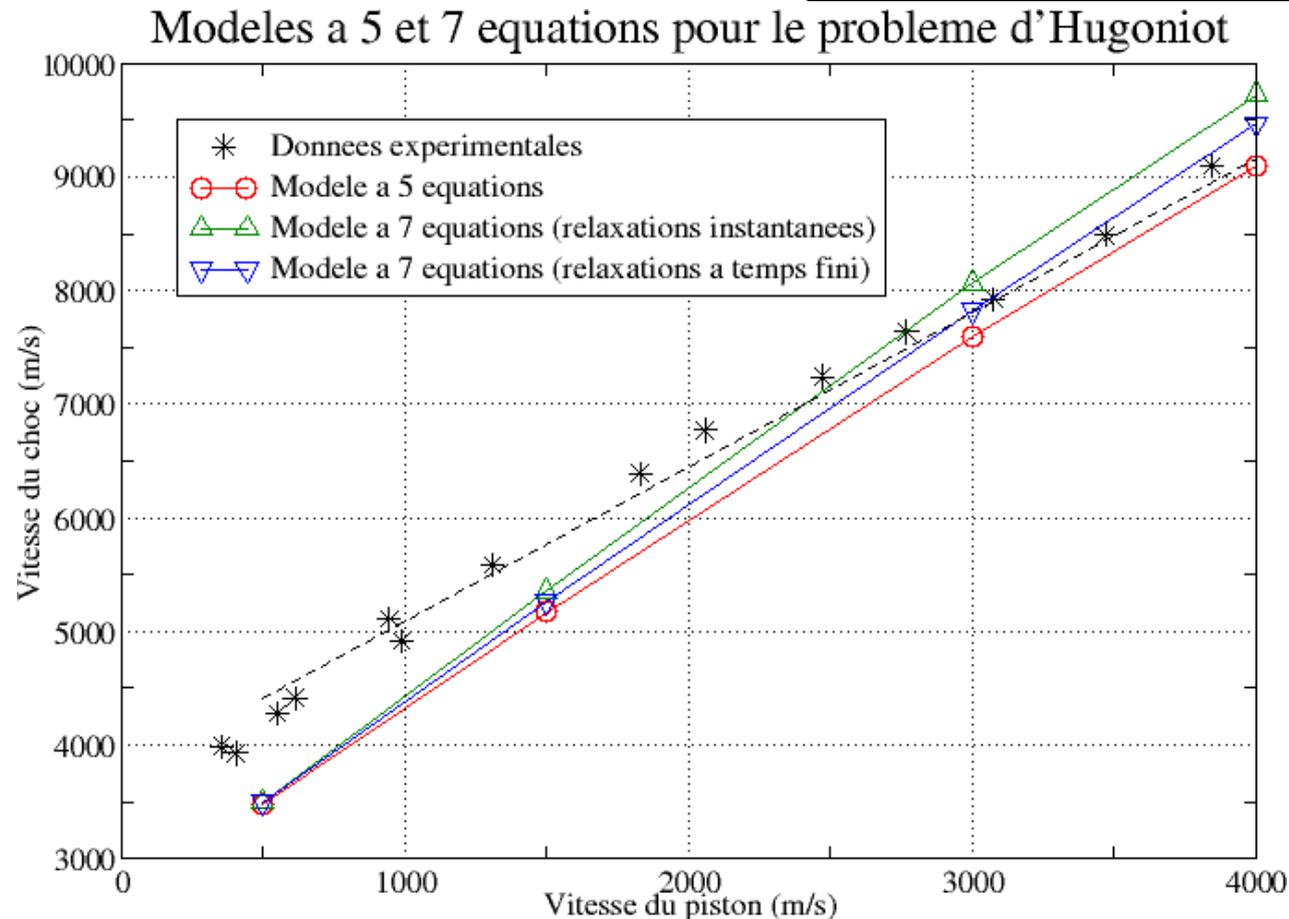
Méthodes de relaxation : efficacité numérique

- Résolution du problème de tube à choc sur 8 processeurs
- Calcul parallèle sur 8 processeurs du cluster Nef

	Temps de calcul
Modèle a 7 équations Pas de relaxation	4 min 07 s
Modèle a 7 équations Relaxations instantanées	4 min 08 s
Modèle a 7 équations Relaxation en 2 étapes	4 min 10 s
Modèle réduit a 5 équations	1 min 34 s

Validation des méthodes de relaxations

- On étudie le problème d'Hugoniot



Implémentation d'un programme parallèle de calcul

- Problèmes de mécanique des fluides très coûteux
- Utilisation de la plate forme NUM3SIS, massivement parallèle
- Utilisation des clusters nef et Grid'5000
- Implémentation des modèles à 5 et 7 équations
- Implémentation des méthodes de relaxation des pressions et vitesses.

Implémentation d'un programme parallèle de calcul

- Exemple de calcul : Interaction choc – bulle de gaz R22

Conditions initiales :

Air :	Gaz R22 :
densité 1 kg m^{-3}	densité 2.985 kg m^{-3}
pression 10^5 Pa	pression 10^5 Pa

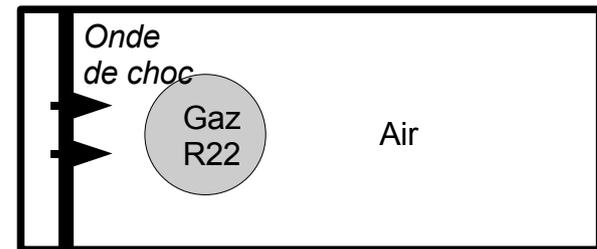
Domaine de $0.2225 \times 0.095 \times 0.095 \text{ m}$

Vitesse du choc : Mach 1.22

Simulation de l'évolution du système
pendant $700 \mu\text{s}$

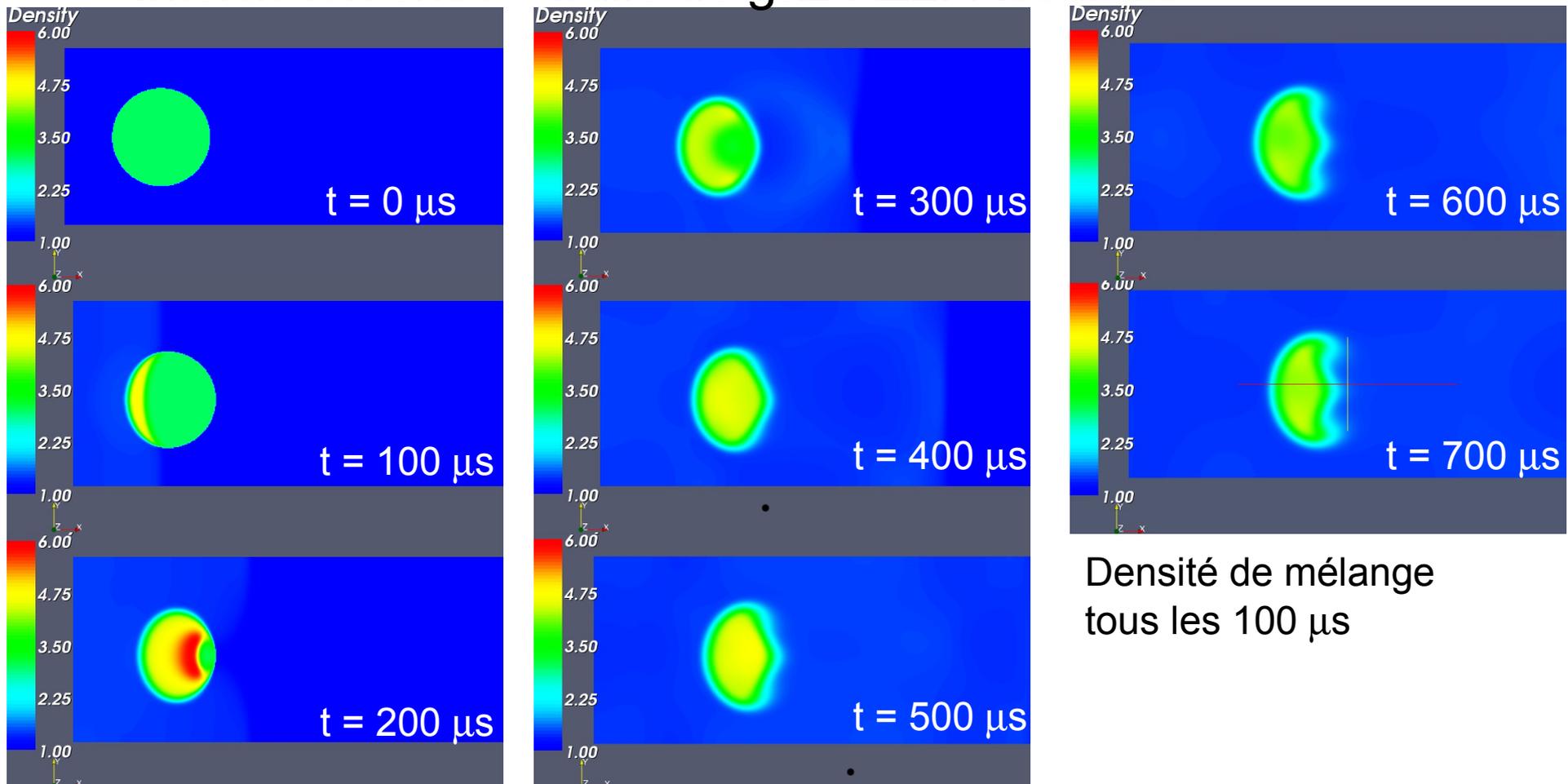
- Utilisation du modèle réduit à cinq équations

Maillage de 18 millions de noeuds ; 90 millions d'inconnues par itération
3250 itérations en 4h sur 128 processeurs.



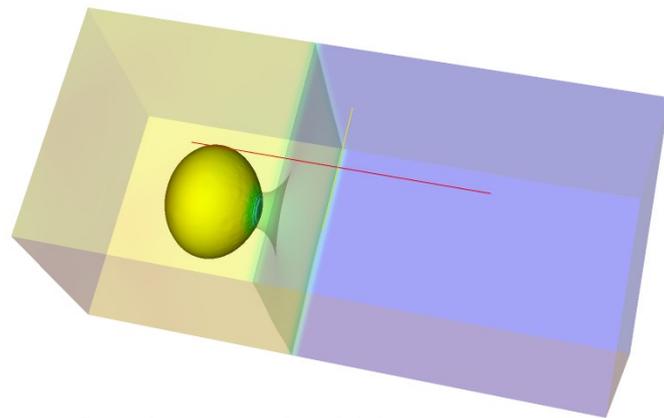
Implémentation d'un programme parallèle de calcul

- Interaction choc – bulle de gaz R22: Résultats

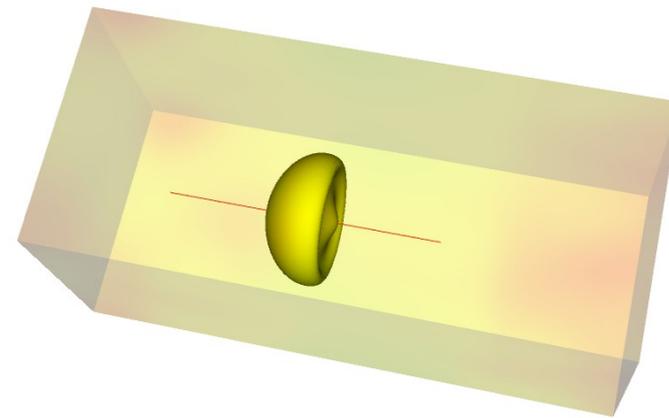


Implémentation d'un programme parallèle de calcul

- Interaction choc – bulle de gaz R22 : Résultats



Système après 200 μ s



Système après 700 μ s

Conclusion

- Plusieurs modèles disponibles pour résoudre numériquement un écoulement diphasique en fonction de
 - La configuration du problème
 - La complexité souhaitée
- Différentes méthodes de relaxation des pressions et vitesses à temps fini ont été étudiées et validées
- Programme de résolution massivement parallèle

Perspectives

- Implémentation du modèle réduit à cinq équations avec termes du second ordre
- Étude du comportement du modèle complet pour les écoulements à faible Mach
- Changement de phase par méthodes de relaxation du potentiel chimique

Étude d'un modèle
à deux vitesses et deux pressions
pour la simulation d'écoulements diphasiques

Mathieu Labois

Fonctionnalités de NUM3SIS

- Résolution des équations d'Euler, des modèles diphasiques à 5 et 7 équations
- Ordre 2 en espace et en temps
- Schémas explicite et implicite sans matrice
- Possibilité d'ajouter des packages supplémentaires