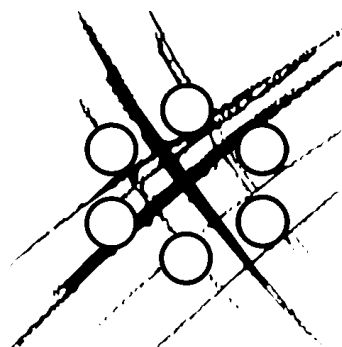


USER DOCUMENTATION : Models Documentation TrioCFD v1.9.2




Code Version	Date	Code manager	Authors
v1.9.2	7 décembre 2023	 F. BUFFA	TrioCFD Team
DES/ISAS/DM2S CEA SACLAY 91191 GIF-SUR-YVETTE CEDEX		<i>Input file</i> : models_report_TrioCFD.tex <i>Software</i> : TrioCFD	
		DES/ISAS/DM2S/STMF/LMSF/UD	

Table des matières

Table des matières	2
Liste des tableaux	5
I Introduction	5
1 TrioCFD overview	6
2 Document organisation	6
II Équations de conservations : masse, quantité de mouvement et énergie	7
1 Rappel des équations fondamentales de la dynamique des fluides	8
2 Conservation de la masse	8
3 Conservation de la quantité de mouvement	8
4 Forme du tenseur des contraintes visqueuses	9
5 Résumé	10
5.1 Cas général pour un fluide newtonien	10
5.2 Cas particulier d'une viscosité constante	11
5.3 Cas particulier des écoulements incompressibles avec viscosité variable	11
5.4 Cas particulier des écoulements incompressibles avec viscosité constante	11
6 Conservation de l'énergie	12
7 Approximation de Boussinesq en incompressible	13
8 Numérique dans TrioCFD	13
8.1 Schéma en temps (valable en VEF et VDF)	13
8.2 Schéma en espace VEF	14
8.3 Matrices volume-éléments finis pour l'approximation P1NC/P0	14
III Modèles de turbulence	15
1 Introduction	16
2 Simulations des grandes échelles	16
Smagorinski	17
LES-WALE	17

3	Modèle RANS	18
3.1	Équations de Reynolds	18
3.2	Modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$	18
3.3	Autres modèles à deux équations	19
3.4	Modèle ■ bas Reynolds ■	20
4	Lois de parois	22
4.1	Autres modèles de turbulence dans TrioCFD	22
IV	Modèles des écoulement diphasiques	23
1	Computational Multiphase Fluid Dynamics	24
1.1	Turbulence implementation in TrioCFMD	24
	Definition of dimensionnal and dimensionless variables	25
	Turbulence models implemented in TrioCFMD	26
	Boundary conditions implemented in TrioCFMD	27
	Description of the wall law algorithm implemented in TrioCFMD	30
	Implementation for multiphase flows	31
1.2	Multiphase CFD in TrioCFMD	32
	Definition of dimensionnal and dimensionless variables	32
	2-fluid 6-equation framework	33
	Determination of bubble diameter	33
	Constant diameter	33
	Interfacial forces	34
	Two-phase turbulence	35
	Interfacial heat transfer	36
	Heat flux partitioning	36
1.3	Homogeneous Equilibrium Model	38
	The non-viscous system of equation	38
	The equation of state	38
	The Navier-stokes system of equations	39
	Drift-flux models	39
2	Front-Tracking discontinu	41
2.1	Présentation du modèle	41
	Discussion sur les méthodes numériques	41
	Définition des grandeurs discrètes	46
3	Modèle à interface diffuse incompressible	55
3.1	Présentation du modèle	55
	Changement de variable	56
	Approximation de Boussinesq	56
	Formes du bilan de quantité de mouvement	56
3.2	Résolution numérique	57
	Equation de Cahn-Hilliard	57
	Equation de bilan de quantité de mouvement	58
3.3	Modification of the Phase_field baltik : generalization of the closure laws for the Navier-Stokes/Cahn-Hilliard binary model	58
	Chemical potential function $\frac{dW}{dc}$	58
	Kinetic parameter (so-called "mobility") κ	59
	Mass density ρ	60
	Dynamic viscosity μ function of c	61

V	The Arbitrary Lagrangian-Eulerian Method	62
1	The Arbitrary Lagrangian-Eulerian Method	63
1.1	ALE kinematic description	63
1.2	ALE form of governing equations	64
2	Principle of the ALE numerical method	65
VI	Sensitivity equation method for the Navier–Stokes equations applied to uncertainty propagation	66
1	Introduction	67
2	The physical model	68
2.1	The state equations	68
2.2	The sensitivity equations	68
3	Uncertainty propagation	69
VII	Perspectives	70
	Bibliographie	72

Liste des tableaux

III.3.1	Synthèse des valeurs des paramètres du modèle $\bar{k} - \bar{\epsilon}$ (repris de [42]).	19
---------	--	----

I. Introduction

I.1

TrioCFD overview

Le code de calcul **TrioCFD** est un logiciel open-source [23] pour les simulations en mécanique des fluides, adapté en particulier aux calculs massivement parallèles d'écoulements turbulents dans des configurations industrielles.

Il existe depuis le milieu des années 90 (et les travaux sur les Volumes-Eléments Finis dans [36]) et a trouvé des applications dans plusieurs sous-domaines de la mécanique des fluides.

Le présent document décrit les modèles physiques implémentés dans **TrioCFD**. De nombreuses références accessibles dans la littérature (dont 28 thèses) décrivent les méthodes numériques du code ou des applications originales. Ces références (thèses et articles) peuvent être retrouvées au format PDF sur le site internet [23]. Cette note technique complète la description qualitative du site web en précisant les modèles mathématiques qui sont utilisés dans les simulations. Compte tenu de la diversification des applications depuis 1992, on restreint la description aux écoulements monophasiques newtoniens, incompressibles et turbulents. Pour ce type d'écoulements de nombreux détails sont déjà disponibles dans plusieurs références dont [2, 4, 23, etc ...]. Cette note technique initie une documentation en faisant un effort de synthèse de la littérature existante, mais aussi d'homogénéisation des notations aussi bien entre les ■ modèles physiques ■ et la partie ■ méthodes numériques ■ qui font souvent l'objet de notations différentes entre les documents. Ici la partie numérique n'apparaît que dans la section 8 mais plusieurs nouvelles sections apparaîtront dans les versions ultérieures de la mise à jour de cette documentation.

Deux principales méthodes de discrétisation peuvent être utilisées dans **TrioCFD** : la méthode des Volumes-Eléments Finis (VEF) et celle des Volume-Différence Finies (VDF). Pour les VEF, les maillages associés à cette méthode doivent nécessairement être triangulaires (en 2D) ou tétraédriques (en 3D). Le code est programmé en langage C++ et est basé sur la base logicielle TRUST (TRio_U Software for Thermalhydraulics), dans lequel sont notamment programmé l'ensemble des méthodes numériques et des schémas de discrétisation utilisés dans **TrioCFD**. La base TRUST est aussi le noyau d'autres applications du service STMF. Il est possible de réaliser des implémentations locales dans le code via le concept de BALTIC (Building an Application Linked to TrIo_U Kernel), qui correspond à une brique de code (un ensemble de fichiers .cpp et .h) à modifier, puis de les intégrer éventuellement dans le code source une fois les développements vérifiés et validés. Pour résumer, **TrioCFD** s'appuie sur TRUST mais cette documentation ne concerne que la partie **TrioCFD**.

I.2

Document organisation

Afin de préciser les modèles mathématiques ainsi que leur domaine de validité, il est nécessaire de faire un rappel des équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie sans considération d'hypothèse simplificatrice. C'est l'objet de la section II dans laquelle les équations seront présentées sous

leur forme la plus générale. Dans la mesure du possible, les modèles mathématiques sont écrits aussi bien en notations vectorielles qu'en notations indicielles. En notation vectorielle, les vecteurs, les tenseurs et les matrices sont écrits en gras. Dans cette section, des rappels sont également effectués sur les définitions des tenseurs du taux de déformation et celui de rotation car ceux-ci sont utilisés dans la section suivante dédiée aux modèles de turbulence. Les modèles de turbulence en mécanique des fluides sont nombreux et plusieurs livres et publications de synthèse existent déjà (e.g. [14, 5]). Dans **TrioCFD**, les modèles qui sont développés sont ceux qui sont les plus couramment utilisés dans la littérature et qui font l'objet d'un consensus dans le domaine tels que la LES (Smagorinski et WALE) et les différentes déclinaisons du RANS $\bar{k} - \bar{\epsilon}$. Ils seront détaillés dans la section III.

Une base de cas tests d'environ 200 rapports de validations existe pour **TrioCFD**. La liste des cas tests de cette base est présenté en Annexe A du Rapport de validation (voir `TrioCFD_validation_report.pdf`). Dans les versions ultérieures de cette documentation, les modèles décrits seront illustrés par quelques rapports de validation. Plusieurs mises à jour de cette documentation sont à prévoir pour l'élargir petit à petit à l'ensemble des modèles accessibles dans le code.

II. Équations de conservations : masse, quantité de mouvement et énergie

II.1

Rappel des équations fondamentales de la dynamique des fluides

Dans cette section on rappelle les équations fondamentales de la dynamique des fluides. Elle permet d'introduire les principales notations et les équations aux dérivées partielles fondamentales sans hypothèses physiques simplificatrices. Les démonstrations peuvent être trouvées dans les références classiques. Dans la section 2, on rappelle l'équation de conservation de la masse (encore appelée équation de continuité) et dans la section 3 on rappelle l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Plusieurs formes mathématiques équivalentes entre elles existent dans la littérature : forme locale, forme locale notation vectorielle, forme locale conservative, forme locale conservative en notation vectorielle, formes macroscopiques, etc ... Ici on choisit la forme locale conservative avec notations vectorielles.

II.2

Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{II.2.0 eq1})$$

où $\rho \equiv \rho(\mathbf{x}, t)$ est la densité avec \mathbf{x} la position et t le temps, et $\mathbf{u} \equiv \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ la vitesse. D'autres formes équivalentes de cette équation peuvent être rencontrées en appliquant l'identité vectorielle $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho$ et en faisant apparaître la dérivée matérielle $d\rho/dt = \partial\rho/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho$.

II.3

Conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de la Quantité De Mouvement (QDM) traduit le principe fondamental de la dynamique qui indique que la variation de quantité de mouvement à l'intérieur d'un volume de contrôle est égale à la somme de toutes les forces extérieures qui lui sont appliquées. Les forces qui s'appliquent sur le

volume élémentaires peuvent être séparées en forces de volume et forces de surface. Ces dernières s'expriment comme un vecteur contrainte qui agit sur une surface, et ce vecteur contrainte s'exprime à son tour comme le produit scalaire d'un tenseur des contraintes \mathbf{T} (de composante T_{ij}) et du vecteur normal à la surface \mathbf{n} . La contrainte totale est décomposée en deux parties : $T_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij}$. La première est le tenseur des contraintes associées à la pression $-p\delta_{ij}$ où $p \equiv p(\mathbf{x}, t)$ est la pression et δ_{ij} est le symbole de Kronecker qui vaut un si $i = j$ et zéro sinon. La seconde, notée τ_{ij} est associée aux contraintes visqueuses. La pression agit de façon isotrope et sa valeur dépend de l'état thermodynamique du fluide. Les contraintes visqueuses sont liées à l'état de déformation du fluide

Comme pour l'équation de conservation de la masse, plusieurs formes mathématiques et équivalentes entre elles peuvent être déduites. Son écriture sous forme locale conservative est :

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{F}_v \quad (\text{II.3.0 eq1})$$

Dans l'équation (II.3.0 eq1), le membre de gauche de l'équation représente la quantité d'accélération par unité de volume. Les termes du membre de droite représentent respectivement (i) les forces associées à la pression par unité de volume, (ii) les contraintes visqueuses par unité de volume et (iii) la force externes par unité de volume. Lorsqu'on ne considère que la gravité elle s'exprime sous la forme : $\mathbf{F}_v = \rho \mathbf{g}$.

II.4

Forme du tenseur des contraintes visqueuses

Le tenseur des contraintes visqueuses τ est généralement exprimé en fonction des taux de déformation dans l'écoulement. On rappelle ci-dessous les définitions des tenseurs des taux de déformation et des taux de rotation à partir desquels sera exprimé le tenseur des contraintes visqueuses.

Rappel du tenseur des taux de déformation

L'accroissement de vitesse de deux particules fluides positionnées respectivement en \mathbf{r} et $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ et de vitesse \mathbf{u} et $\mathbf{u} + d\mathbf{u}$ s'exprime sous la forme $du_i = \sum_{j=1}^3 (\partial u_i / \partial x_j) dx_j$ au premier ordre par rapport aux composantes dx_j (pour $j = 1, 2, 3$). Dans cette expression, les quantités $G_{ij} = \partial u_i / \partial x_j$ sont les éléments d'un tenseur de rang deux, le tenseur des taux de déformation du fluide (ou des gradients de vitesse). En trois dimensions, il s'écrit sous la forme d'une matrice 3×3 qui peut être décomposée en une partie symétrique et une partie antisymétrique :

$$G_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.4.0 eq1})$$

Le premier terme est le tenseur des taux des déformations :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.4.0 eq2})$$

et il est symétrique ($S_{ij} = S_{ji}$). Le second terme est le tenseur des taux de rotation :

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.4.0 eq3})$$

et ce tenseur est antisymétrique ($\Omega_{ij} = -\Omega_{ji}$).

Forme du tenseur des contraintes visqueuses pour un fluide newtonien

Lorsque les fluides sont newtoniens la relation contrainte-déformation est linéaire et isotrope. La relation générale s'écrit :

$$\tau_{ij} = \eta \left(2S_{ij} - \frac{2}{3} S_{kk} \delta_{ij} \right) + \zeta S_{kk} \delta_{ij} \quad (\text{II.4.0 eq4})$$

qui fait apparaître deux viscosités, la viscosité dynamique $\eta \equiv \eta(\mathbf{x}, t)$ et la viscosité de volume ζ (ou deuxième viscosité). Le premier terme correspond à une déformation sans changement de volume tandis que le second terme correspond à une dilatation isotrope. Dans la majeure partie des applications on ne tient pas compte de la viscosité en volume ($\zeta = 0$) et le tenseur des contraintes s'écrit $\tau_{ij} = 2\eta S_{ij} - (2/3)\eta S_{kk} \delta_{ij}$, soit en utilisant la relation (II.4.0 eq2) :

$$\tau_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \eta \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (\text{II.4.0 eq5})$$

ou encore en notations vectorielles :

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\boldsymbol{\nabla} \mathbf{u} + \boldsymbol{\nabla}^T \mathbf{u}) - \frac{2}{3} \eta (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \quad (\text{II.4.0 eq6})$$

où \mathbf{I} est la matrice diagonale unité.

Fluide newtonien de viscosité constante

Lorsque la viscosité du fluide η est constante (i.e. $\eta(\mathbf{x}, t) = \eta_0 = \text{Cte}$), le terme des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}$ dans l'équation (II.3.0 eq1) s'exprime sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} &= \eta_0 \left[\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{2}{3} \eta_0 \frac{\partial}{\partial x_j} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \delta_{ij} \\ &= \eta_0 \left[\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \right] - \frac{2}{3} \eta_0 \frac{\partial}{\partial x_i} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \\ &= \eta_0 \nabla^2 u_i + \frac{\eta_0}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \end{aligned}$$

C'est-à-dire en notations vectorielles :

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} = \eta_0 \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{\eta_0}{3} \boldsymbol{\nabla} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \quad (\text{II.4.0 eq7})$$

II.5

Résumé

5.1 Cas général pour un fluide newtonien

Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement s'écrivent sous la forme générale :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{II.5.1 eq1a})$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\boldsymbol{\nabla} p + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{F}_v \quad (\text{II.5.1 eq1b})$$

où $\rho \equiv \rho(\mathbf{x}, t)$ et $\mathbf{u} \equiv \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ sont les inconnues du système d'équations. La loi d'état sur la pression et l'hypothèse de fluide newtonien pour le tenseur des contraintes permettent de fermer le système. La loi d'état sur la pression et les modèles de type **■** bas Mach **■** qui séparent la pression en une pression thermodynamique et une pression hydrodynamique sont présentés dans le chapitre suivant. Pour un fluide newtonien, le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\tau}$ est relié à celui des déformations \mathbf{D} par la relation :

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) - \frac{2}{3}\eta(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \quad (\text{II.5.1 eq2})$$

où la viscosité dynamique est notée $\eta \equiv \eta(\mathbf{x}, t)$ et la viscosité de volume ζ a été négligée.

5.2 Cas particulier d'une viscosité constante

Lorsque la viscosité est considérée constante (i.e. $\eta(\mathbf{x}, t) = \eta_0 = \text{Cte}$), le terme de divergence du tenseur des contraintes $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$ se simplifie à l'aide de la relation (II.4.0 eq7) et le système d'équations devient :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{II.5.2 eq3a})$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{\eta_0}{3} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{F}_v \quad (\text{II.5.2 eq3b})$$

5.3 Cas particulier des écoulements incompressibles avec viscosité variable

Lorsque le fluide est considéré incompressible (i.e. $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0 = \text{Cte}$) alors l'équation de conservation de la masse devient $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ (car $\partial \rho_0 / \partial t = 0$ et $\nabla \rho_0 = \mathbf{0}$), le terme non linéaire s'écrit $\nabla \cdot (\rho_0 \mathbf{u} \mathbf{u}) = \rho_0 \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ et le tenseur des contraintes visqueuses (Eq. (II.4.0 eq7)) se simplifie lui aussi en $\boldsymbol{\tau} = \eta(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})$.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{II.5.3 eq4a})$$

$$\rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho_0 \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\eta(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) \right] + \rho_0 \mathbf{F}_v \quad (\text{II.5.3 eq4b})$$

Dans cette formulation, la viscosité dynamique η reste dans le terme entre crochets car il peut dépendre de la position comme dans les modèles de turbulence.

5.4 Cas particulier des écoulements incompressibles avec viscosité constante

Enfin, lorsque le fluide est considéré incompressible et de viscosité dynamique η_0 constante, le tenseur des contraintes visqueuses (Eq. (II.4.0 eq7)) se simplifie une nouvelle fois en $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \eta_0 \nabla^2 \mathbf{u}$ et le système d'équations devient :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{II.5.4 eq5a})$$

$$\rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho_0 \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{u} + \rho_0 \mathbf{F}_v \quad (\text{II.5.4 eq5b})$$

II.6

Conservation de l'énergie

Plusieurs formes de l'équation de bilan de l'énergie sont possibles selon que l'on considère la conservation de l'énergie totale, l'énergie interne, l'enthalpie totale ou l'enthalpie. Des formulations peuvent être déduites sur la température ou même l'entropie. Dans la suite, on restreint la présentation à l'écriture de la conservation de l'énergie interne qui sera écrite sous forme équivalente sur l'équation de la température.

L'équation de bilan de l'énergie interne e s'écrit [10, p. 126] :

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} - p \nabla \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} \quad (\text{II.6.0 eq1})$$

Dans cette équation, le membre de gauche représente le taux de variation de l'énergie interne par unité de volume. Dans le membre de droite, le premier terme représente le flux de chaleur par unité de volume ; le second terme représente la puissance des forces de pression par unité de volume ; et le dernier terme représente la puissance des forces visqueuses par unité de volume. Ce dernier est la fonction de dissipation visqueuse qui est toujours positive ou nulle. Ainsi les forces visqueuses entraînent toujours un accroissement de l'énergie interne du fluide et donc de sa température.

L'équation de conservation de l'énergie interne peut se reformuler en une équation sur la température T . Cette équation prend deux formes différentes selon que l'on utilise la chaleur spécifique à volume constant C_v ou bien à pression constante C_p . Formulée en C_v , elle s'écrit :

$$\frac{\partial(\rho C_v T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_v T \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} + \rho T \frac{dC_v}{dt} \quad (\text{II.6.0 eq2a})$$

Formulée en C_p elle s'écrit :

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_p T \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \right) \frac{dp}{dt} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} + \rho T \frac{dC_p}{dt} \quad (\text{II.6.0 eq2b})$$

Remarque : lorsque le gaz est considéré parfait, i.e. $\rho = p_{th}/(RT)$ où R est la constante des gaz parfaits et p_{th} est la pression thermodynamique, le coefficient $(\partial \ln \rho / \partial \ln T)$ vaut $(\partial \ln \rho / \partial \ln T) = -1$. En supposant que le flux de chaleur est défini par la loi de Fourier $\mathbf{q} = -\lambda \nabla T$ où λ est la conductivité thermique, l'Eq. (II.6.0 eq2b) devient :

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_p T \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \frac{dp_{th}}{dt} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} + \rho T \frac{dC_p}{dt} \quad (\text{II.6.0 eq3})$$

L'introduction de la pression thermodynamique p_{th} sera utile pour les modèles ■ bas Mach ■.

II.7

Approximation de Boussinesq en incompressible

Pour des écoulements incompressibles, lorsque la densité est supposée constante $\rho = \rho_0 = \text{Cte}$, la densité n'est ni une fonction de la température ni de la composition du fluide (pour les mélanges miscibles). Dans ce cas, les effets de flottabilité sont uniquement pris en compte par les forces gravitationnelles. Cette simplification est connue comme l'■ approximation de Boussinesq ■ et valable en considérant que la variation de densité $\Delta\rho \ll \rho_0$. Dans ce cas, le terme force s'écrit dans les équations (II.5.3 eq4a)–(II.5.3 eq4b) ou (II.5.4 eq5a)–(II.5.4 eq5b) :

$$\mathbf{F}_v = -\mathbf{g}\beta_T(T - T_0) \quad (\text{II.7.0 eq1})$$

où β_T est le coefficient de dilatation thermique et T_0 une température de référence. Dans cette relation, le signe négatif indique que si la différence de température est positive $\Delta T = T - T_0 > 0$ (i.e. près de la paroi chaude en convection naturelle), alors la force est dirigée dans le sens opposé à la gravité \mathbf{g} .

II.8

Numérique dans TrioCFD

Dans ce document on détaille les méthodes numériques mises en œuvre dans TrioCFD pour le modèle incompressible défini par les équations (II.5.3 eq4a)–(II.5.3 eq4b). Deux méthodes de discrétisation spatiales sont possibles dans l'outil de calculs : la méthode des Volume-Éléments Finis (VEF) et celle des Volumes Différences Finies (VDF) mais on ne décrit que la partie VEF. Dans la suite, le domaine de calcul est noté Ω .

8.1 Schéma en temps (valable en VEF et VDF)

Après discrétisation, le système matrice-vecteur résolu s'écrit :

$$\begin{cases} \delta t^{-1} \mathbf{M} \mathbf{U}^{n+1} + \mathbf{A} \mathbf{U}^{n+1} + \mathbf{L}(\mathbf{U}^n) \mathbf{U}^{n+1} + \mathbf{B}^T \mathbf{P}^{n+1} &= \mathbf{F}^n + \delta t^{-1} \mathbf{M} \mathbf{U}^n, \\ \mathbf{B} \mathbf{U}^{n+1} &= 0. \end{cases} \quad (\text{II.8.1 eq1})$$

où $\mathbf{U}^{n+1} \in \mathbb{R}^{N_u}$ représente le vecteur vitesse discrétisé au temps $(n+1)\delta t$ où δt est le pas de temps et N_u est le nombre de degrés de liberté pour discrétiser spatialement la vitesse. Les matrices en gras seront définies ci-dessous car dépendantes de la discrétisation en espace. $\mathbf{P}^{n+1} \in \mathbb{R}^{N_p}$ représente la pression discrétisée au temps $(n+1)\delta t$ et N_p est le nombre de degrés de liberté pour discrétiser spatialement la pression.

Afin de découpler la vitesse et la pression, la résolution des équations (II.5.3 eq4a)–(II.5.3 eq4b) est réalisée en trois étapes [16, 93] :

— **étape de prédiction** : calculer \mathbf{U}^* solution de

$$\delta t^{-1} \mathbf{M} \mathbf{U}^* + \mathbf{A} \mathbf{U}^* + \mathbf{L}(\mathbf{U}^n) \mathbf{U}^* + \mathbf{B}^T \mathbf{P}^n = \mathbf{F}^n + \delta t^{-1} \mathbf{M} \mathbf{U}^n.$$

à cette étape $\mathbf{B} \mathbf{U}^* \neq 0$.

— **Calcul de la pression** : calculer P' solution de

$$\mathbf{B}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}^T P' = \delta t^{-1} \mathbf{B}U^*, \quad P^{n+1} = P' + P^n.$$

— **étape de correction** : calculer U^{n+1} solution de

$$\mathbf{M}U^{n+1} = \mathbf{M}U^* - \delta t \mathbf{B}^T P'.$$

Remarque : plusieurs solveurs ont été testés (SIMPLE, SIMPLER, PISO) qui, selon les problèmes ont montré une convergence relativement faible. Le solveur utilisé à ce jour est inspiré de la référence [46].

8.2 Schéma en espace VEF

La méthode numérique est basée sur la méthode des éléments finis de Crouzeix-Raviart non conformes [19], et détaillés dans [36, 48, 40, 4]. Pour ($d = 2$) (resp. $d = 3$), on considère l'espace xy de \mathbb{R}^2 (resp. l'espace xyz de \mathbb{R}^3) d'origine O . On note $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ ($\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$) les vecteurs de la base canonique. On considère $\mathcal{T}_h := \cup_{\ell=1}^{N_T} T_\ell$, un maillage régulier du domaine Ω constitué de simplexes (triangles en 2D et tétraèdres en 3D), de sommets $(S_i)_{i=1}^{N_S}$, où i est l'indice de N_S sommets. Le nombre de simplexes (sommets) est noté par N_T (resp. N_S). Soit $T_\ell \in \mathcal{T}_h$, la frontière de T_ℓ est constituée d'arêtes en 2D ou de faces en 3D, mais on les appellera **■** face **■** dans tous les cas. Soit $\bar{\mathcal{F}}_h = \cup_{k=1}^{\bar{N}_F} F_k$ l'ensemble des faces du maillage, et $\mathcal{F}_h = \cup_{k=1}^{N_F} F_k$ l'ensemble des faces intérieures, où \bar{N}_F (resp. N_F) est le nombre total (resp. interne) de faces. On note M_k le barycentre de la face F_k , et \mathbf{n}_k le vecteur normal unitaire sortant à F_k . Soit $P_1(T)$ l'ensemble des polynômes d'ordre 1 définis sur T . L'espace de discrétisation des vitesses est :

$$X_h := \{\mathbf{v}_h \mid \forall T \in \mathcal{T}_h, \mathbf{v}_h \in P_1(T)^d \text{ et } \forall F \in \mathcal{F}_h : [\mathbf{v}_h](\mathbf{x}_F) = \mathbf{0}\}, \quad (\text{II.8.2 eq2})$$

où \mathbf{x}_F représente le barycentre de la face F , et $[\mathbf{v}_h](\mathbf{x}_F)$ est le saut de \mathbf{v}_h sur la face F . On suppose que $\bar{F} = \bar{T} \cap \bar{T}'$, telle que $\mathbf{n}_F = \mathbf{n}_{T,F}$. Le saut $[\mathbf{v}_h](\mathbf{x}_F)$ est défini par :

$$[\mathbf{v}_h](\mathbf{x}_F) := \mathbf{v}_h|_{T_\ell}(\mathbf{x}_F) - \mathbf{v}_h|_{T_{\ell'}}(\mathbf{x}_F) \text{ if } \bar{F} = \bar{T}_\ell \cap \bar{T}_{\ell'}, \text{ et } \mathbf{n}_F = \mathbf{n}_{T_\ell}.$$

L'espace X_h est muni de la semi-norme $\|\mathbf{v}_h\|_h = \left(\sum_{\ell=1}^{N_T} |\mathbf{v}_h|_{1,T_\ell}|^2 \right)^{1/2}$, où $|\mathbf{v}_h|_{1,T_\ell}$ est la semi-norme de $\mathbf{v}_h|_{T_\ell} \in H^1(T_\ell)$. On note $X_{0,h} := \{\mathbf{v}_h \in X_h \mid \mathbf{u}_h|_{\partial\Omega} = 0\}$.

Soit $\lambda_i|_T$ la coordonnée barycentrique associée au sommet $S_i|_T$ et $(\mathbf{e}^\beta)_{\beta=1}^d$ les vecteurs de la base canonique.

Les fonctions de base associées à l'espace X_h sont les vecteurs $\left(\left(\varphi_i^\beta \right)_{i=1}^{N_F} \right)_{\beta=1}^d$ tels que $\varphi_i^\beta|_T = (1 - d\lambda_i|_T) \mathbf{e}^\beta$.

On appelle ψ_j la fonction caractéristique associée au triangle T_j .

8.3 Matrices volume-éléments finis pour l'approximation P1NC/P0

Soit $(\mathbf{u}_h^n, p_h^n) \in X_h \times L_h$ l'approximation spatiale de (\mathbf{u}^n, p^n) dans $X_h \times L_h$ telle que :

$$\mathbf{u}_h^n := \sum_{\beta=1}^d \sum_{i=1}^{N_F} \left(U_i^\beta \right)^n \varphi_i^\beta, \quad p_h^n := \sum_{\ell=1}^{N_T} P_\ell^n \psi_\ell.$$

Posons : $U_n = ((U_i^\beta)^n)_{\beta,i} \in \mathbb{R}^{N_u}$, $F^n = ((\mathbf{f}^{n+1}, \varphi_i^\beta)_0)_{\beta,i} \in \mathbb{R}^{N_u}$, avec $N_u := d N_F$, et $p_h^n = (P_\ell^n)_\ell \in \mathbb{R}^{N_T}$.

— La matrice de masse $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N_u \times N_u}$ est composée de d blocs diagonaux égaux à $\mathbf{M}_F \in \mathbb{R}^{N_F \times N_F}$ tels que $(\mathbf{M}_F)_{i,j} = (\phi_i, \phi_j)_0$ avec $\phi_i|_T = (1 - d\lambda_i|_T)$.

Pour $d = 2$, on obtient que la matrice de masse 2D est diagonale :

$$(\mathbf{M}_F)_{i,j} = \delta_{ij} \sum_{\ell \mid M_i \in T_\ell} \frac{|T_\ell|}{3}.$$

La matrice de masse 2D de la méthode des éléments finis non conformes de Crouzeix-Raviart est égale à la matrice de masse 2D obtenue par la méthode des volumes finis décrite dans la thèse de Emonot [36]. Ce n'est plus le cas en 3D, mais dans le code TrioCFD c'est la la matrice de masse de la discrétisation en volumes finis qui est implémentée pour laquelle

$$(\mathbf{M}_F)_{i,j} = \delta_{ij} \sum_{\ell \mid M_i \in T_\ell} \frac{|T_\ell|}{4}.$$

- La matrice de rigidité $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N_u \times N_u}$ est composée de d blocs diagonaux égaux à $\mathbf{A}_F \in \mathbb{R}^{N_F \times N_F}$ tels que $(\mathbf{A}_F)_{i,j} = (\nabla \phi_i, \nabla \phi_j)_0$. On obtient :

$$(\mathbf{A}_F)_{i,j} = \sum_{\ell \mid M_i, M_j \in T_\ell} |T_\ell|^{-1} \mathbf{S}_{i,\ell} \cdot \mathbf{S}_{j,\ell},$$

où $\mathbf{S}_{i,\ell}$ est le vecteur \blacksquare face normale \blacksquare associé à la face opposée au sommet S_i dans le triangle T_ℓ .

La matrice de rigidité de la méthode des éléments finis non conformes de Crouzeix-Raviart est égale à la matrice de rigidité obtenue par la méthode des volumes finis décrite dans la thèse de Emonot.

- La matrice de couplage $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N_T \times N_u}$ est composée de d blocs tels que $\mathbf{B} = (\mathbf{B}^\beta)_{\beta=1}^d$, $\mathbf{B}^\beta \in \mathbb{R}^{N_T \times N_F}$ et :

$$(\mathbf{B}^\beta)_{\ell,j} = -\mathbf{S}_{j,\ell} \cdot \mathbf{e}^\beta$$

- Dans le cas où la pression est P_1 , on a $p_h^n = (P_i^n)_i \in \mathbb{R}^{N_S}$ et la matrice de couplage $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N_S \times N_u}$ est telle que :

$$(\mathbf{B}^\beta)_{i,k} = - \sum_{\ell \mid M_k, S_i \in T_\ell} ((d+1)d)^{-1} \mathbf{S}_{i,\ell} \cdot \mathbf{e}^\beta.$$

III. Modèles de turbulence

III.1

Introduction

Les modèles et méthodes numériques de turbulence peuvent être classées en trois catégories selon les échelles résolues : (1) la méthode de simulation numérique directe (Direct Numerical Simulation – DNS), (2) la simulation des grandes échelles (Large Eddy Simulation – LES) et (3) la méthode des équations de Navier-Stokes moyennées (Reynolds-Averaged Navier-Stokes – RANS). La DNS résout les équations de Navier-Stokes sans modèle de turbulence et toutes les échelles spatiales et temporelles de la turbulence sont résolues. Par conséquent, le maillage en DNS doit être suffisamment fin pour capturer les tourbillons de tailles s'étendant de la plus petite échelle de dissipation (échelle de Kolmogorov) jusqu'à l'échelle de longueur caractéristique de la taille du domaine. La théorie de la turbulence montre que le nombre de points du maillage en DNS 3D est de l'ordre de $O(Re^{9/4})$ où Re est le nombre de Reynolds turbulent. Les coûts de calcul de la DNS sont par conséquent très importants pour des forts nombres de Reynolds.

Contrairement à la DNS, la LES résout seulement les grandes structures des écoulements en filtrant les équations de Navier-Stokes avec un filtre spatial et la petite échelle non résolue est modélisée en utilisant des modèles de sous-grille. La gamme des échelles résolues en LES est beaucoup plus petite qu'en DNS et par conséquent les coûts de calcul sont réduits de façon significative. On présentera les deux principaux modèles LES dans la section 2.

Enfin, les modèles RANS sont composés d'un ensemble d'équations de Navier-Stokes moyennées, avec des modèles de turbulence pour fermer le tenseur de Reynolds supplémentaire qui est induit par les fluctuations. Les modèles RANS résolvent seulement l'écoulement moyen aux échelles macroscopiques et il s'agit de la méthode la plus économique pour la simulation de la turbulence. Dans la suite on présente un des modèles RANS dans la section 3.

III.2

Simulations des grandes échelles

L'approche de la turbulence basée sur la Simulation des Grandes Echelles (SGE, ou Large Eddy Simulation – LES) consiste à obtenir par résolution directe des équations de Navier-Stokes, les caractéristiques de grande taille de la turbulence pour n'avoir à modéliser que les mouvements de ■ petite taille ■. Les contributions des grandes échelles sont isolées en introduisant un opérateur de moyenne spatiale filtrée : $\tilde{f}(\mathbf{x}, t) = \int_V G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') f(\mathbf{x}', t) dV$ et toute fonction du champ de l'écoulement est décomposée en $f(\mathbf{x}, t) = \tilde{f}(\mathbf{x}, t) + f'(\mathbf{x}, t)$ où $f'(\mathbf{x}, t)$ est la fluctuation de sous-maille.

En appliquant l'opérateur de moyenne filtrée aux équations du mouvement on obtient :

$$\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{III.2.0 eq1a})$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\widetilde{u_i u_j}) = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (\text{III.2.0 eq1b})$$

La moyenne spatiale filtrée du produit $\widetilde{u_i u_j}$ est réécrite sous la forme :

$$\widetilde{u_i u_j} = \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \tilde{L}_{ij} + \tilde{R}_{ij}$$

où :

$$\tilde{L}_{ij} = \widetilde{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j \quad (\text{III.2.0 eq2a})$$

$$\tilde{R}_{ij} = \widetilde{\tilde{u}_i u'_j} + \widetilde{u'_j \tilde{u}_i} + \widetilde{u'_i u'_j} \quad (\text{III.2.0 eq2b})$$

La relation (III.2.0 eq2a) caractérise les tensions de Leonard tandis que la relation (III.2.0 eq2b) caractérise les tensions de Reynolds de sous-maille. Le problème de fermeture de la procédure SGE consiste à déterminer une relation de \tilde{R}_{ij} pour obtenir la solution d'une réalisation de l'écoulement.

Smagorinski

Le tenseur des contraintes de sous-maille \tilde{R}_{ij} peut être repris sous la forme :

$$\tilde{R}_{ij} = \tilde{T}_{ij} + \frac{1}{3} \tilde{R}_{kk} \delta_{ij}$$

Un des modèles de sous-maille très répandu est celui de Smagorinsky qui suppose une relation linéaire du tenseur anisotrope \tilde{T}_{ij} avec le champ des déformations filtré \tilde{S}_{ij} telle que :

$$\tilde{T}_{ij} = -2\nu_T \tilde{S}_{ij}$$

La viscosité tourbillonnaire des structures de sous-maille ν_T est choisie telle que :

$$\nu_T = (C_S \Delta)^2 \sqrt{\sum_{ij} \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}} \quad (\text{III.2.0 eq3})$$

où Δ est l'épaisseur du filtre et C_S est une constante positive qui peut varier selon les applications. Dans [100, p. 2203] les auteurs disent que la valeur peut varier de $C_S = 0.05$ à $C_S = 0.16$. Dans TrioCFD la valeur peut être spécifiée dans le fichier de données d'entrée. Par défaut, elle est fixée à $C_S = 0.18$ si elle n'est pas.

LES-WALE

Le modèle alternatif est le modèle LES-WALE (Wall Adaptive Local Eddy-viscosity) [76] :

$$\nu_T = (C_W \Delta)^2 \frac{(\tilde{S}_{ij}^d \tilde{S}_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (\tilde{S}_{ij}^d \tilde{S}_{ij}^d)^{5/4}} \quad (\text{III.2.0 eq4})$$

avec

$$\tilde{S}_{ij}^d = \tilde{S}_{ik} \tilde{S}_{kj} + \tilde{\Omega}_{ik} \tilde{\Omega}_{kj} - \frac{1}{3} \delta_{ij} (\tilde{S}_{mn} \tilde{S}_{mn} - \tilde{\Omega}_{mn} \tilde{\Omega}_{mn})$$

où $\tilde{\Omega}_{ij}$ est défini par

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

Dans l'Eq. (III.2.0 eq4), Δ est choisi à la taille de maille. Lorsque la valeur C_S est égale à 0.18, une valeur appropriée de C_w est comprise entre $0.55 \leq C_w \leq 0.6$ [76, p. 170]. Dans certaines conditions d'écoulements décrites dans [76, sec 3.1], la valeur la plus adaptée est $C_w = 0.5$, et c'est celle choisie dans les simulations ([76, pp. 191 and 192]).

III.3

Modèle RANS

3.1 Équations de Reynolds

La vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ et la pression $p(\mathbf{x}, t)$ du champ d'écoulement d'un fluide incompressible sont régies indépendamment de la température par les équations de continuité et de la quantité de mouvement :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{III.3.1 eq1})$$

$$\rho_0 \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{u} + \rho_0 \mathbf{F}_v \quad (\text{III.3.1 eq2})$$

Lorsque la vitesse et la pression sont traitées comme des fonctions aléatoires de l'espace et du temps dont on décompose les valeurs instantanées en :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= \bar{\mathbf{U}}(\mathbf{x}, t) + \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) \\ p(\mathbf{x}, t) &= \bar{P}(\mathbf{x}, t) + \tilde{p}(\mathbf{x}, t) \end{aligned}$$

où le symbole $\bar{(\)}$ indique l'opérateur de moyenne statistique (ou moyenne d'ensemble) et le symbole $\tilde{(\)}$ les fluctuations (ou écarts par rapport à ces moyennes), les équations moyennées de masse et de quantité de mouvement se traduisent par [14, sec 4 p 73–76] :

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{U}} = 0, \quad (\text{III.3.1 eq3})$$

$$\rho_0 \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{U}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{U}} \right] = \nabla \cdot \bar{\mathbf{\Sigma}} + \rho_0 \bar{\mathbf{F}}_v \quad (\text{III.3.1 eq4})$$

avec :

$$\bar{\mathbf{\Sigma}} = -\bar{P}\mathbf{I} + 2\eta_0 \bar{\mathbf{S}} - \rho_0 \overline{\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}} \quad \text{et} \quad \bar{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\nabla \bar{\mathbf{U}} + \nabla^T \bar{\mathbf{U}}) \quad (\text{III.3.1 eq5})$$

Le bilan de quantité de mouvement moyenne est appelée l'équation de Reynolds. Dans cette équation, les forces de surface font apparaître un terme supplémentaire $-\rho_0 \overline{\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}}$ qui représente l'agitation turbulente. Le système d'équations est ouvert en raison de la présence des corrélations des vitesses fluctuantes $\overline{\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}}$.

3.2 Modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$

De nombreuses modélisations du tenseur de Reynolds sont possibles, mais nous nous intéressons ici à la plus classique, basée sur l'hypothèse de Boussinesq :

$$\overline{\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}} = -\nu_T 2\bar{\mathbf{S}} + \frac{2}{3}\bar{k}\mathbf{I} \quad (\text{III.3.2 eq6})$$

Référence	C'_η	σ_k	σ_ϵ	C_{ϵ_1}	C_{ϵ_2}	écoulement
[55]	0.09	1.0	1.3	1.55	2.00	Haut Reynolds
[66]	0.09	1.0	1.3	1.44	1.92	Tourbillonnant
[15]	0.09	1.0	1.3	1.35	1.92	Bas Reynolds
[37]	0.09	1.0	1.3	1.39	1.80	Bas Reynolds
[75]	0.09	1.0	1.3	1.60	1.92	Jet
[6]	0.09	1.0	1.3	1.40	1.92	Flottabilité

TABLE III.3.1 – Synthèse des valeurs des paramètres du modèle $\bar{k} - \bar{\epsilon}$ (repris de [42]).

où ν_T est une viscosité turbulente scalaire qui traduit les effets d'agitation turbulente. Le terme en \bar{k} au second membre s'apparente à une pression par agitation turbulente et est intégré dans la pression \bar{P} . On obtient ainsi une équation fermée pour la vitesse moyenne. Dans le cadre du modèle à deux équations $\bar{k} - \bar{\epsilon}$ qui nous intéresse, une analyse dimensionnelle donne pour la viscosité turbulente :

$$\nu_T = C'_\eta \frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}} \quad (\text{III.3.2 eq7})$$

Le modèle $\bar{k} - \bar{\epsilon}$ permet de fermer le système d'équations (III.3.1 eq3)–(III.3.1 eq5) en résolvant deux équations supplémentaires, une sur l'énergie cinétique turbulente \bar{k} et l'autre sur le taux de dissipation $\bar{\epsilon}$ suivantes [14, p. 469] (repris de [67, Eq. (2.2-1 et 2.2-2)]) :

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} = \nu_T \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] - \bar{\epsilon} \quad (\text{III.3.2 eq8a})$$

$$\frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} = C_{\epsilon_1} \nu_T \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} \right] - C_{\epsilon_2} \frac{\bar{\epsilon}^2}{\bar{k}} \quad (\text{III.3.2 eq8b})$$

Les équations (III.3.2 eq8a) et (III.3.2 eq8b) sont des équations de type advection-diffusion avec des termes source. Le terme de production d'énergie cinétique turbulente (premier terme du membre de droite) joue un rôle important dans les modélisations pariétales. Les valeurs standards des cinq constantes du modèle C'_η , C_{ϵ_1} , C_{ϵ_2} , σ_k et σ_ϵ sont fixées par défaut à : $C'_\eta = 0.09$, $C_{\epsilon_1} = 1.44$, $C_{\epsilon_2} = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$ et $\sigma_\epsilon = 1.3$. Certaines d'entre elles peuvent aussi varier selon le type d'écoulement considéré (voir table III.3.1).

Notonq que, si l'on fait appel au modèle standard k- ϵ , ces deux équations sont gérées comme une seule équation (au format TRUST) avec une inconnue vectorielle (k- ϵ) de dimension 2. On peut également faire appel au modèle dit ■ bicéphale ■, où ces deux équations sont considérées séparément, ce qui permet par exemple d'utiliser des conditions aux limites différentes pour k et ϵ .

3.3 Autres modèles à deux équations

Modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ -■ réalisable ■

Alternativement au modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$, d'autres modèles de fermeture à deux équations existent dans la littérature : les modèles $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ modifiés (parmi eux le $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ -■ réalisable ■, modèle pour lequel les validations sont en cours). Le modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ -■ réalisable ■ s'écrit [89, Eq. (22) et (23) p. 233] :

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right) + \left(2\nu_T S_{ij} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} - \bar{\epsilon} \quad (\text{III.3.3 eq9a})$$

$$\frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} \right] + C_1 S \epsilon - C_2 \frac{\bar{\epsilon}^2}{\bar{k} + \sqrt{\nu \bar{\epsilon}}} \quad (\text{III.3.3 eq9b})$$

avec

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad C_1 = \max \left\{ 0.43, \frac{\eta}{5 + \eta} \right\}, \quad \eta = \frac{S\bar{k}}{\bar{\epsilon}} \quad (\text{III.3.3 eq10a})$$

et [89, Eq. (19) p. 232 et (21) p. 233] :

$$C_\eta = \frac{1}{A_0 + A_s U^{(*)} \frac{\bar{k}}{\bar{\epsilon}}}, \quad \text{où } A_0 = 4, \quad A_s = \sqrt{6} \cos \phi, \quad \phi = \frac{1}{3} \arccos \left(\sqrt{6} W \right), \quad W = \frac{S_{ij} S_{jk} S_{ki}}{(S_{ij} S_{ij})^{3/2}} \quad (\text{III.3.3 eq10b})$$

et une vitesse $U^{(*)}$ calculée par [89, Eq. (20) p. 232]

$$U^{(*)} = \sqrt{S_{ij} S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij} \tilde{\Omega}_{ij}}, \quad \tilde{\Omega}_{ij} = \Omega_{ij} - 2\epsilon_{ijk} \omega_k, \quad \Omega_{ij} = \bar{\Omega}_{ij} \epsilon_{ijk} \omega_k \quad (\text{III.3.3 eq10c})$$

où $\bar{\Omega}_{ij}$ est le taux de rotation moyen dans un repère de référence en rotation de vitesse angulaire ω_k . Dans TrioCFD, ce modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ ■ réalisable ■ a été développé et validé dans [3].

3.4 Modèle ■ bas Reynolds ■

Les lois de paroi, établies à partir de résultats expérimentaux, permettent d'éviter de calculer la solution des équations de Navier-Stokes et du modèle de turbulence proche de la paroi. Le modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$, couplé à une loi de paroi, permet ainsi de simuler le cœur de l'écoulement en se préservant d'un coût de calcul trop grand dû à un maillage trop fin proche de la paroi. Cependant, ce type de modèle est inadapté lorsque le premier point du maillage se trouve dans la sous-couche visqueuse ($y^+ < +30$). Plus le nombre de Reynolds est haut plus cette sous-couche visqueuse est d'épaisseur négligeable, ce qui rend le modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ avec loi de paroi bien adapté aux écoulements avec de grand nombre de Reynolds. C'est pourquoi ce modèle est appelé également modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ ■ haut-Reynolds ■. Lorsque l'on étudie des écoulements à faible nombre de Reynolds, la sous-couche visqueuse devient plus importante, ce qui rend l'utilisation d'une loi de paroi inadaptée. À faible nombre de Reynolds, il peut être préférable d'utiliser des modèles, appelés ainsi ■ bas-Reynolds ■, qui font désormais appel à des fonctions d'amortissement et des termes dépendants de la discrétisation pour prendre en compte la résolution numérique de la sous-couche visqueuse. Ces modèles permettent également d'étudier l'ensemble de l'écoulement notamment proche de la paroi (par exemple à des effets de recirculation, de décollement pour des géométries complexes). Le modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ bas-Reynolds laisse l'équation de transport de \bar{k} du modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ de base inchangée mais modifie celle de $\bar{\epsilon}$ par adjonction de termes d'atténuation dans la zone proche de la paroi où le nombre de Reynolds est localement plus faible. Du fait d'un maillage de paroi important, ce modèle est donc plus coûteux que le modèle $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ standard. Il existe plusieurs modèles bas-Reynolds dans la littérature [66, 67, 55, 65]. La forme générale de ces modèles peut s'écrire sous la forme (écriture inspirée de [55]) :

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} = \nu_T \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] - \bar{\epsilon} - \bar{\mathcal{K}} \quad (\text{III.3.4 eq11a})$$

$$\frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} = C_{\epsilon_1} \nu_T \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} f_{\epsilon_1} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} \right] - C_{\epsilon_2} f_{\epsilon_2} \frac{\bar{\epsilon}^2}{\bar{k}} \quad (\text{III.3.4 eq11b})$$

$$\nu_T = C_\eta f_\eta \frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}} \quad (\text{III.3.4 eq11c})$$

Modèle ■ bas-Reynolds ■ de Launder & Spalding [67]

Pour ce modèle, les termes $\bar{\mathcal{K}}$ et $\bar{\mathcal{E}}$ s'écrivent [67, Eqs. (2.3-4) et (2.3-5)] :

$$\bar{\mathcal{K}} = 2\nu \left(\frac{\partial \bar{k}^{1/2}}{\partial x_j} \right)^2, \quad \bar{\mathcal{E}} = 2.0\nu\nu_T \left(\frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j \partial x_l} \right) \quad (\text{III.3.4 eq12})$$

et les fonctions f_{ϵ_1} , f_{ϵ_2} , f_η sont données par [67, Eqs. (2.3-6) et (2.3-7)] :

$$f_{\epsilon_1} = 1, \quad f_{\epsilon_2} = 1.0 - 0.3e^{-Re_t^2}, \quad f_\eta = e^{-2.5/(1+Re_t/50)}$$

où Re_t est le nombre de Reynolds turbulent défini par $Re_t = \bar{k}^2 / \nu \bar{\epsilon}$. Les valeurs des coefficients empiriques sont $C_\eta = 0.09$, $C_{\epsilon_1} = 1.44$, $C_{\epsilon_2} = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$ et $\sigma_\epsilon = 1.3$.

Modèle de Jones & Launder [55]

Ce modèle est formulé dans la référence originale [55] en ne considérant qu'une seule dérivée spatiale $\partial/\partial y$ dans les équations (III.3.4 eq11a) et (III.3.4 eq11b). Dans ce cas, les termes $\bar{\mathcal{K}}$ et $\bar{\mathcal{E}}$ de ce modèle s'écrivent [55, Eqs. (8) et (9)] :

$$\bar{\mathcal{K}} = 2\nu \left(\frac{\partial \bar{k}^{1/2}}{\partial y} \right)^2, \quad \bar{\mathcal{E}} = 2.0\nu\nu_T \left(\frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial y^2} \right)$$

qui, en 3D s'écrivent de manière identique aux deux relations de l'équation (III.3.4 eq12). les fonctions f_{ϵ_1} , f_{ϵ_2} , f_η sont données par [55, Eq. (12)] :

$$f_{\epsilon_1} = 1, \quad f_{\epsilon_2} = 1.0 - 0.3e^{-Re_t^2}, \quad f_\eta = e^{-2.5/(1+Re_t/50)}$$

Les paramètres empiriques du modèle sont donnés par [55, Table 1] : $C_\eta = 0.09$, $C_{\epsilon_1} = 1.55$, $C_{\epsilon_2} = 2$, $\sigma_k = 1.0$ et $\sigma_\epsilon = 1.3$. Ce modèle ne se différencie du précédent (celui de Launder & Spalding) que par les valeurs des paramètres C_{ϵ_1} et C_{ϵ_2} .

Modèle de Lam & Bremhorst [65]

Dans ce modèle les termes $\bar{\mathcal{K}}$ et $\bar{\mathcal{E}}$ dans les équations (III.3.4 eq11a) et (III.3.4 eq11b) sont nuls et les fonctions f_{ϵ_1} , f_{ϵ_2} , f_η sont données par [65, Eq. (11), (12) et (13)] :

$$f_{\epsilon_1} = 1 + \left(\frac{A_c}{f_\eta} \right)^3, \quad f_{\epsilon_2} = 1 - e^{-Re_t^2}, \quad f_\eta = (1 - e^{-A_\eta Re_y})^2 \left(1 + \frac{A_t}{Re_t} \right)$$

où Re_y est le nombre de Reynolds turbulent qui varie avec la distance y à la paroi et qui est défini par $Re_y = \bar{k}^{1/2} y / \nu$. Les coefficients A_η , A_t et A_c sont calés en comparant les résultats numériques à des mesures expérimentales. Les valeurs obtenues sont ([65, sec. 3.1]) $A_\eta = 0.0165$, $A_t = 20.5$, et $A_c = 0.05$. Les valeurs des autres coefficients sont $C_{\epsilon_1} = 1.44$ et $C_{\epsilon_2} = 1.92$.

Modèle de Launder & Sharma [66]

Ce modèle est formulée pour les écoulements tourbillonnants (disque en rotation) pour lesquels les coordonnées indépendantes sont r et y où r est la distance radiale à l'axe du disque et y est la distance normale à la surface du disque. Dans ce cas, des termes supplémentaires qui impliquent le gradient de V_θ/r apparaissent dans les équations de \bar{k} et de $\bar{\epsilon}$. Les fonctions f_{ϵ_2} et f_η et les constantes sont légèrement différentes [66, Eqs. (5), (6)] :

$$f_{\epsilon_2} = 1.0 - 0.3e^{-Re_t^2}, \quad f_\eta = e^{-3.4/(1+Re_t/50)^2}$$

et [66, Eqs. (5), (6) et valeurs au-dessous] $C_\eta = 0.09$, $C_{\epsilon_1} = 1.44$, $C_{\epsilon_2} = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$ et $\sigma_\epsilon = 1.3$.

Dans TrioCFD

Dans TrioCFD, les modèles de turbulence en $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ ■ bas Reynolds ■ de Jones & Launder [55] et celui de Lam & Bremhorst [65] ont été mis en œuvre dans [78]. Les fonctions et paramètres de Launder & Sharma [66] sont également disponibles.

Lois de parois

Dans le cadre des études de turbulence, en particulier pour des cas avec des géométries complexes, la résolution des phénomènes physiques ayant lieu en proche paroi est généralement coûteuse en terme de temps de calcul car elle demande un maillage très fin dans ces zones où les gradients de vitesse et de température sont très élevés. Or il est primordial de prédire correctement ces phénomènes car par simple conservation du débit, une mauvaise description pariétale de la vitesse entraînera une mauvaise description au cœur de l'écoulement. Plutôt que de faire porter l'effort sur une résolution fine, il est alors classique de faire porter l'effort sur une modélisation du gradient de vitesse pariétal, qui permet de conserver un maillage relativement grossier à la paroi. Ces approches sont connues sous le nom de "lois de paroi" ou "traitement de paroi" (on rencontre très souvent les termes anglais de "wall functions" et "wall treatment") et permettent une diminution notable des temps de simulation. Elles sont depuis longtemps intégrées à la plupart des codes de calcul industriels.

Les lois disponibles avec le modèle $\bar{k}-\bar{\epsilon}$ dans **TrioCFD** sont formulées de manière à décrire continûment toute la couche limite. Pour la vitesse adimensionnée, la loi de paroi de Reichardt est utilisée [84] :

$$U^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(1 + \kappa y^+) + A \left(1 - e^{-y^+/11} - \frac{y^+}{11} e^{-y^+/3} \right)$$

avec

$$A = \frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{E}{\kappa} \right)$$

Les valeurs des constantes sont $\kappa = 0.415$ et $E = 9.11$. Asymptotiquement, on retrouve le comportement linéaire lorsque y^+ tend vers zéro, et le comportement logarithmique lorsque y^+ devient "grand". De plus, cette loi donne une description raisonnable de la zone tampon. Les quantités \bar{k} et $\bar{\epsilon}$ sont décrites, pour tout y^+ , par :

$$\begin{aligned} \bar{k}^+ &= 0.07 y^{+2} e^{-y^+/9} + \frac{1}{\sqrt{C_\eta}} \left(1 - e^{-y^+/20} \right)^2 \\ \bar{\epsilon}^+ &= \frac{1}{\kappa (y^{+4} + 15^4)^{1/4}} \end{aligned}$$

Ces formulations respectent le comportement généralement admis à la paroi, à savoir :

$$\bar{k}(y=0) = 0; \quad \frac{d\bar{k}}{dy}(y=0) = 0; \quad \frac{d\bar{\epsilon}}{dy}(y=0) = 0$$

4.1 Autres modèles de turbulence dans TrioCFD

Signalons que la loi développée par Ciofalo et Collins [17] est également disponible mais uniquement pour la discrétisation VDF de **TrioCFD** (maillages cartésiens). Il est également possible de modifier la valeur des constantes de la loi logarithmique, ou d'imposer la vitesse de frottement, mais cela semble assez peu utile dans les études industrielles. Concernant la LES, la loi de Werner et Wengle est également implémentée [101] ainsi que l'approche TBLE (Thin Boundary Layer Equation).

Modèle $(\bar{k}, \bar{\omega})$ à venir

D'autres modèles de type $(\bar{k}, \bar{\omega})$ existent dans la littérature tels que les modèles $(\bar{k}, \bar{\omega})$ et $(\bar{k}, \bar{\epsilon})$ -SST (Shear Stress Transport). Les systèmes d'équations de ces modèles sont présentés dans la référence [5, sec 2.3.6 pp. 701–705] de laquelle on reprend le modèle (\bar{k}, ω) pour lequel la viscosité turbulence est :

$$\nu_T = \frac{\bar{k}}{\bar{\omega}}, \quad \bar{\omega} = \max \left\{ \omega, C_{lim} \sqrt{\frac{2S_{ij}S_{ij}}{\beta^*}} \right\}, \quad \text{avec } C_{lim} = \frac{7}{8}$$

Le modèle s'écrit [5, p. 702] (repris de [102]) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \sigma^* \frac{\bar{k}}{\omega} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] - \beta^* \bar{k} \omega + \tau_{ij} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \\ \frac{\partial \omega}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \sigma \frac{\bar{k}}{\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] - \beta \omega^2 + \frac{\sigma_d}{\omega} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} + a \frac{\omega}{\bar{k}} \tau_{ij} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j}\end{aligned}$$

avec :

$$\sigma_d = \begin{cases} 0 & \text{si } \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \leq 0 \\ \sigma_{d0} & \text{si } \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} > 0 \end{cases}, \quad f_\beta = \frac{1 + 85\chi_\omega}{1 + 100\chi_\omega}, \quad \chi_\omega = \left| \frac{\Omega_{ij}\Omega_{jk}S_{ki}}{(\beta^*\omega)^3} \right|, \quad \Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right)$$

Les coefficients sont les suivants :

$$a = 0.52, \quad \beta = \beta_0 f_\beta, \quad \beta_0 = 0.0708, \quad \beta^* = 0.09, \quad \sigma = 0.5, \quad \sigma^* = 0.6, \quad \sigma_{d0} = 0.125$$

IV. Modèles des écoulement diphasiques

IV.1

Computational Multiphase Fluid Dynamics

1.1 Turbulence implementation in TrioCFMD

A CFD module, called CMFD (Computational Multiphase Fluid Dynamics) is currently under development and will be able to handle single and multi-phase turbulent flows. TrioCFMD uses the PolyMAC numerical scheme [43, 44]. This scheme was initially developed for component scale codes. The resolution of the equations is done using semi-implicit ICE and SETS solvers. Turbulence is treated through two-equation models. There is an equation on the turbulent kinetic energy k and one on the turbulent dissipation rate ω or time scale τ . The equations for turbulent quantities are treated in the same way as the conservation equation for energy and solved in a Newton algorithm in the same matrix as the mass, velocity, pressure and temperature equations.

Turbulence acts on the momentum equation through a modified diffusivity as per the eddy-viscosity hypothesis. It acts on the energy equation through a SGDH transport term of which the user can tune the Prandtl number.

Work is still being done on the models presented in this section, and they are not fully validated. Data-sets can be found in `trio CFD-code/Multiphase/CMFD/share/Validation/Rapports_automatiques/` to launch calculations.

Definition of dimensionnal and dimensionless variables

Variable name	Expression
Distance from the face to the element	y
Normal unit vector of the face	\vec{n}
Velocity at the element center	\vec{u}
Perpendicular velocity at the element center	$\vec{u}_\perp = u_\perp \vec{n}$
Parallel velocity at the element center	$\vec{u}_\parallel = \vec{u} - (\vec{u} \cdot \vec{n}) \vec{n}$
Tangent unit vector	$\vec{t} = \vec{u}_\parallel / u_\parallel$
Hydraulic diameter	D_h
Dynamic viscosity in the element	μ
Volume mass in the element	ρ
Kinematic viscosity in the element	$\nu = \mu / \rho$
Turbulent dynamic viscosity in the element	μ_t
Turbulent kinematic viscosity in the element	$\nu_t = \mu_t / \rho$
Dimensionless turbulent kinematic viscosity in the element	$\nu_{t+} = \nu_t / \nu = \partial_{u_+} y_+ - 1$
Shear stress at the face	$\vec{\tau}_f = -\tau_f \vec{t}$
Friction velocity	$u_\tau = \sqrt{\tau_f / \rho}$
Dimensionless distance from face to element	$y_+ = y u_\tau \rho / \mu$
Dimensionless velocity	$u_+ = u_\parallel / u_\tau$
Turbulent kinetic energy	k
Dimensionless turbulent kinematic energy	$k_+ = k / u_\tau^2$
Turbulent dissipation frequency	ω
Dimensionless turbulent dissipation frequency	$\omega_+ = u_\tau^2 / \nu$
Turbulent time scale	$\tau = 1 / \omega$
Dimensionless turbulent time scale	$\tau_+ = 1 / \omega_+$
Temperature in the element	T
Temperature in the fluid at the wall	T_w
External temperature, i.e. temperature of the wall	T_{ext}
Thermal conductivity	$k_T =$
Heat capacity at constant volume	C_p
Thermal diffusivity	$\lambda = k_T / (\rho C_p)$
Heat transfer coefficient	h
Heat flux	$q = h \cdot (T_{\text{ext}} - T)$
Characteristic temperature	$T_* = q / (\rho C_p u_\tau)$
Dimensionless temperature difference	$\theta_+ = (T_{\text{ext}} - T) / T_*$
Prandtl number	$Pr = \nu / \lambda$
Turbulent Prandtl number	$Pr_t = \nu_t / \lambda_t$
Von Karman constant	$\kappa = 0.41$
Liquid fraction	α_l

Turbulence models implemented in TrioCMFD

All of the constants used in the models are user-defined in the calculation dataset. This enables an easy transition from one turbulence model to another. The models that one can use to launch a calculation are the following.

1988 Wilcox $k - \omega$

This is one of the first models that uses ω and not ϵ to model the energy dissipation [103]. Here, $\nu_t = \frac{k}{\omega}$. The turbulent equations are :

$$\begin{aligned}\partial_t \rho_l k + \nabla \cdot (\rho_l k \vec{u}_l) &= \tau_R :: \underline{\underline{\nabla \vec{u}_l}} - \beta_k \rho k \omega + \nabla(\rho_l(\nu_l + \sigma_k \nu_t) \underline{\underline{\nabla k}}) \\ \partial_t \rho_l \omega + \nabla \cdot (\rho_l \omega \vec{u}_l) &= \alpha_\omega \frac{\omega}{k} \tau_R :: \underline{\underline{\nabla \vec{u}_l}} - \beta_\omega \rho \omega^2 + \nabla(\rho_l(\nu_l + \sigma_\omega \nu_t) \underline{\underline{\nabla \omega}})\end{aligned}\quad (\text{IV.1.1 eq1})$$

The values of the constants are $\alpha_\omega = 0.55$, $\beta_k = 0.09$, $\beta_\omega = 0.075$, $\sigma_k = 0.5$ and $\sigma_\omega = 0.5$.

Kok $k - \omega$

This model [60] was introduced after the Menter SST $k - \omega$ model [73, 72] showed the importance of cross-diffusion. The differences with the 1988 Wilcox model reside in the addition of a cross-diffusion term ($\sigma_d \frac{\rho_l}{\omega} \max\{\underline{\underline{\nabla k}} \cdot \underline{\underline{\nabla \omega}}, 0\}$) and a modification of the value of some constants. The turbulent equations are :

$$\begin{aligned}\partial_t \rho_l k + \nabla \cdot (\rho_l k \vec{u}_l) &= \tau_R :: \underline{\underline{\nabla \vec{u}_l}} - \beta_k \rho k \omega + \nabla(\rho_l(\nu_l + \sigma_k \nu_t) \underline{\underline{\nabla k}}) \\ \partial_t \rho_l \omega + \nabla \cdot (\rho_l \omega \vec{u}_l) &= \alpha_\omega \frac{\omega}{k} \tau_R :: \underline{\underline{\nabla \vec{u}_l}} - \beta_\omega \rho \omega^2 + \nabla(\rho_l(\nu_l + \sigma_\omega \nu_t) \underline{\underline{\nabla \omega}}) + \sigma_d \frac{\rho_l}{\omega} \max\{\underline{\underline{\nabla k}} \cdot \underline{\underline{\nabla \omega}}, 0\}\end{aligned}\quad (\text{IV.1.1 eq2})$$

The values of the constants are $\alpha_\omega = 0.5$, $\beta_k = 0.09$, $\beta_\omega = 0.075$, $\sigma_k = 2/3$, $\sigma_\omega = 0.5$ and $\sigma_d = 0.5$.

Kok $k - \tau$

This is a variation of the 1999 Kok $k - \omega$. In this model [61], the time scale $\tau = \frac{1}{\omega}$ is introduced. We therefore have $\nu_t = k\tau$. There is an additional diffusion term that comes out of the calculation ($-8\rho_l(\nu_l + \sigma_\omega \nu_t) \|\underline{\underline{\nabla \sqrt{\tau}}}\|^2$). The turbulent equations become :

$$\begin{aligned}\partial_t \rho_l k + \nabla \cdot (\rho_l k \vec{u}_l) &= \tau_R :: \underline{\underline{\nabla \vec{u}_l}} - \frac{\beta_k \rho k}{\tau} + \nabla(\rho_l(\nu_l + \sigma_k \nu_t) \underline{\underline{\nabla k}}) \\ \partial_t \rho_l \tau + \nabla \cdot (\rho_l \tau \vec{u}_l) &= -\alpha_\omega \frac{\tau}{k} \tau_R :: \underline{\underline{\nabla \vec{u}_l}} + \beta_\omega \rho + \nabla(\rho_l(\nu_l + \sigma_\omega \nu_t) \underline{\underline{\nabla \tau}}) \\ &\quad + \sigma_d \rho_l \tau \min\{\underline{\underline{\nabla k}} \cdot \underline{\underline{\nabla \tau}}, 0\} - 8\rho_l(\nu_l + \sigma_\omega \nu_t) \|\underline{\underline{\nabla \sqrt{\tau}}}\|^2\end{aligned}\quad (\text{IV.1.1 eq3})$$

The $-8\rho_l(\nu_l + \sigma_\omega \nu_t) \|\underline{\underline{\nabla \sqrt{\tau}}}\|^2$ term presents important numerical difficulties close to the wall. In order to limit these issues, we have tried to implicit this term in 3 different ways. The comparison between these methods and the determination of the most robust solution is ongoing.

The constants are the same than in the 1999 Kok $k - \omega$ model : $\alpha_\omega = 0.5$, $\beta_k = 0.09$, $\beta_\omega = 0.075$, $\sigma_k = 2/3$, $\sigma_\omega = 0.5$, $\sigma_d = 0.5$.

2006 Wilcox $k - \omega$

The 2006 Wilcox k_ω model [104] is the same as the Kok k_ω with different coefficients. It is an update of the 1988 Wilcox $k - \omega$ model. The turbulent equations are the same as in equation IV.1.1 eq2. A notable difference is the introduction of a blending function for β_ω .

The values of the constants are : $\alpha_\omega = 0.52$, $\beta_k = 0.09$, $\beta_\omega = 0.0705 \cdot f(\Omega_{ij}, S_{ij})$, $\sigma_k = 0.6$, $\sigma_\omega = 0.5$, $\sigma_d = 0.125$.

Boundary conditions implemented in TrioCMFD

The boundary conditions at the wall for elements small enough to be in the viscous regime are usually $\vec{u} = 0$, $T = T_{\text{wall}}$, $k = 0$, $\tau = 0$, and something smart for ω ($\omega \rightarrow +\infty$ when $y \rightarrow 0$).

When the first element is too large for the viscous regime to be valid, different boundary conditions must be implemented.

Velocity

The viscous boundary condition on velocity is :

$$\vec{u} = 0 \quad (\text{IV.1.1 eq4})$$

The velocity function used in many codes when the first element is large is the log-law. We have :

$$u_{+\text{Log}} = \frac{1}{\kappa} \ln(y_+) + 5.1 \quad (\text{IV.1.1 eq5})$$

However, this is valid only for $30 \lesssim y_+ \lesssim 300$. In 1951, Reichardt [85] proposed a formulation valid for smaller y_+ :

$$u_{+\text{Rei}} = \frac{1}{\kappa} \ln(1 + 0.4y_+) + 7.8 \left(1 - \exp(-y_+/11) - \frac{y_+}{11} \exp(-y_+/3) \right) \quad (\text{IV.1.1 eq6})$$

Here, we use a blending proposed by Knopp [59] that is used in the Fun3D code [11] :

$$\phi = \tanh \left[\left(\frac{y_+}{27} \right)^4 \right] \quad (\text{IV.1.1 eq7})$$

$$u_+ = \phi u_{+\text{Log}} + (1 - \phi) u_{+\text{Rei}} \quad (\text{IV.1.1 eq8})$$

The boundary condition is enforced through the calculation of a shear stress that is calculated knowing u_{\parallel} in the first element.

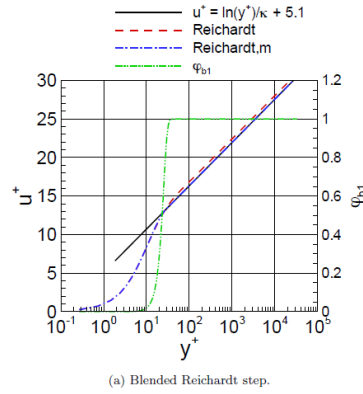


FIGURE IV.1.1 – RANS direct integration of the equations vs the Knopp proposal (figure from [59]).

For now, the boundary conditions that are implemented in TrioCMFD are equations (IV.1.1 eq4) and (IV.1.1 eq8).

Turbulent kinetic energy

Kalitzin et. al. [57] give a complete overview of the possible boundary conditions on the turbulent kinetic energy. Inside the viscous sublayer, the boundary condition on k is :

$$k_{\text{visc}} = 0 \quad (\text{IV.1.1 eq9})$$

In the log-law region, the boundary condition is :

$$k_{+,log} = 1/\sqrt{\beta_k} \quad (\text{IV.1.1 eq10})$$

One of the often used proposals is :

$$\partial_y k = 0 \quad (\text{IV.1.1 eq11})$$

However, there is no universally accepted blending function. Another proposal is to use the relation $\nu_{t+} = \partial_{u+} y_+ - 1$, but this has not been validated in a commercial code. This would yield :

$$k_+ = \nu_{t+} \omega_+ = (\partial_{u+} y_+ - 1) \omega_+ \quad (\text{IV.1.1 eq12})$$

$$\partial_y k_+ = (\partial_{u+} y_+ - 1) \frac{u_\tau^2}{\nu} \partial_y \omega - \frac{u_\tau}{\nu} \frac{\partial_{y+}^2 u_+}{(\partial_{y+} u_+)^2} \omega_+ \quad (\text{IV.1.1 eq13})$$

The formulations in equations (IV.1.1 eq9) and (IV.1.1 eq11) are implemented in TrioCMFD.

Another simple boundary condition is a home-made transition from the viscous boundary condition to the zero-flux boundary condition by imposing a flux at the wall :

$$\Phi_{k,wall} = (\nu_l + \nu_t)/y \cdot (1 - \tanh((y_+/20)^2)) \quad (\text{IV.1.1 eq14})$$

Finally, a boundary condition of equation IV.1.1 eq13 is implemented with an imposed k flux (see [64] for details on weak wall laws).

Turbulent dissipation rate ω

The treatment of ω at the wall is one of the difficulties of $k - \omega$ models, as $\omega \rightarrow +\infty$ at the wall.

Wilcox recommends to input the values of ω in the first element by using the theoretical value of the viscous sub-layer :

$$\omega_{\text{element}} = \frac{6\nu}{\beta_\omega y^2} \quad (\text{IV.1.1 eq15})$$

The boundary condition recommended by Menter in an SST $k - \omega$ [73] is at the wall :

$$\omega_{\text{wall}} = 10 \frac{6\nu}{\beta_\omega y^2} \quad (\text{IV.1.1 eq16})$$

Knopp proposed a blending function between the viscous and log-law regimes to obtain of ω [59] :

$$\phi = \tanh \left[\left(\frac{y_+}{10} \right)^2 \right] \quad (\text{IV.1.1 eq17})$$

$$\omega_{vis} = \frac{6\nu}{\beta_\omega y^2} \quad (\text{IV.1.1 eq18})$$

$$\omega_{log} = \frac{u_\tau}{\sqrt{\beta_k \kappa} y} \quad (\text{IV.1.1 eq19})$$

$$\omega_1 = \omega_{vis} + \omega_{log} \quad (\text{IV.1.1 eq20})$$

$$\omega_2 = (\omega_{vis}^{1.2} + \omega_{log}^{1.2})^{1/1.2} \quad (\text{IV.1.1 eq21})$$

$$\omega = \phi \omega_1 + (1 - \phi) \omega_2 \quad (\text{IV.1.1 eq22})$$

They also recommend to enforce the theoretical value of ω in the first element. This is also what is done in [11].

It is also possible to calculate the derivative of this theoretical value to obtain a flux to input in the first element :

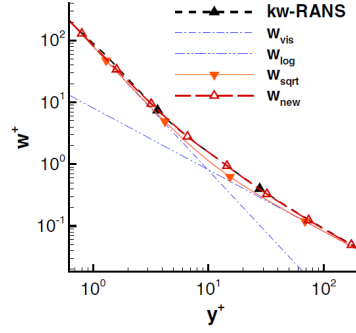


FIGURE IV.1.2 – RANS direct integration of the equations vs the Knopp proposal (image from [59]).

$$\partial_y \phi = \frac{u_\tau}{10\nu} \left(1 - \tanh \left[\left(\frac{y_+}{10} \right)^4 \right]^2 \right) \quad (\text{IV.1.1 eq23})$$

$$\partial_y \omega_{vis} = -\frac{12\nu}{\beta_\omega y^3} \quad (\text{IV.1.1 eq24})$$

$$\partial_y \omega_{log} = -\frac{u_\tau}{\sqrt{\beta_k} \kappa y^2} \quad (\text{IV.1.1 eq25})$$

$$\partial_y \omega_1 = \partial_y \omega_{vis} + \partial_y \omega_{log} \quad (\text{IV.1.1 eq26})$$

$$\partial_y \omega_2 = (\omega_{vis}^{1.2} + \omega_{log}^{1.2})^{1/1.2} \quad (\text{IV.1.1 eq27})$$

$$\partial_y \omega = \partial_y \phi \omega_1 + \phi \partial_y \omega_1 - \partial_y \phi \omega_2 + (1 - \phi) \partial_y \omega_2 \quad (\text{IV.1.1 eq28})$$

For now, the only boundary condition that is implemented is (IV.1.1 eq28), but work is ongoing on other possible boundary conditions.

Turbulent time scale τ

The simplest boundary condition on τ is :

$$\tau_{wall} = 0 \quad (\text{IV.1.1 eq29})$$

This is used in [88] for example.

Another possibility is to enforce a weak boundary condition by using $\tau = \frac{1}{\omega}$. This gives us :

$$\partial_y \tau = -\frac{\partial_y \omega}{\omega^2} \quad (\text{IV.1.1 eq30})$$

For now, the boundary conditions implemented on tau are (IV.1.1 eq29) and (IV.1.1 eq30). Work is ongoing on other possible boundary conditions.

Temperature

The heat transfer coefficient that we have implemented is the one proposed by Kader [56]. It is compatible with adaptive wall functions. It is based on experiments and was later confirmed by DNS [74]. It is valid in an range where $6 \cdot 10^{-3} \inf Pr < 6 \cdot 4^4$, for $Pr_t \approx 0.85$.

$$\Gamma = \frac{10^{-2}(Pr y_+)^4}{1 + 5Pr^3 y_+} \quad (\text{IV.1.1 eq31})$$

$$\beta = (3.85Pr^{1/3} - 1.3)^2 + 2.12 \ln(Pr) \quad (\text{IV.1.1 eq32})$$

$$\theta_+ = Pr y_+ \exp(-\Gamma) + \left\{ 2.12 \ln \left[(1 + y_+) \frac{2.5(2 - 2y/D_h)}{1 + 4(1 - 2y/D_h)^2} \right] + \beta \right\} \exp(-1/\Gamma) \quad (\text{IV.1.1 eq33})$$

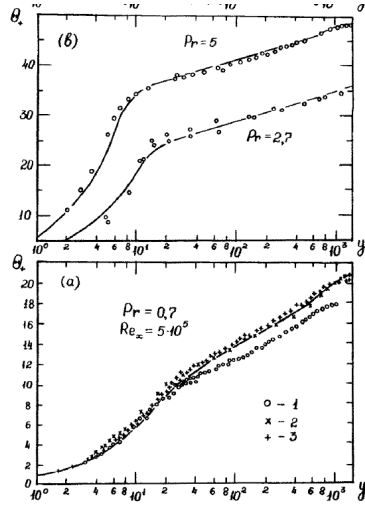


FIGURE IV.1.3 – Experimental results vs Kader formula for different Prandtl numbers (figure from [56]).

Description of the wall law algorithm implemented in TrioCMFD

Historic TrioCFD algorithm in VEF

In VEF, the turbulent model used is $k - \epsilon$. The velocity is defined as a vector located at the center of the faces. Turbulent quantities (i.e. k and ϵ) as well. The information present in this subsection was determined by reading the source code.

For the velocity equation :

1. Calculate turbulent quantities at each face that is connected to a boundary element :
 - a) Calculate $u_{||}$ at the center of the face
 - b) Calculate the friction viscosity u_{τ} using an iterative method that reconstructs the complete viscous sublayer, using $\frac{u_{||}}{u_{\tau}} = u_{+}(\frac{y u_{\tau}}{\nu})$
 - c) Calculate the shear stress $\tau_f = \rho u_{\tau}^2$
2. Calculate the velocity diffusion terms :
 - a) Calculate the velocity diffusion for a $u = 0$ boundary condition on the whole domain
 - b) In the boundary elements, retract from the velocity diffusion the (viscosity * velocity gradient) at the boundary face terms. Input the shear stress calculated with the wall law instead.
3. Iterate one time step of the momentum equation
4. Update the turbulent quantity boundary conditions :
 - a) Iterate one time step of the transport equation for k and ϵ .
 - b) Use the equations on the turbulent quantities presented above to determine $\epsilon(y)$ and $k(y)$ at the faces connected to boundary elements.
 - c) Input them in said faces at the end of each iteration (during the iterations, they are free to move as TrioCFD isn't designed to fix values inside elements or on faces as this would create a specific treatment for some internal faces and elements).

In VEF, the temperature is also located at the faces. To calculate the temperature diffusion, TrioCFD uses a separate equation to calculate the turbulence on temperature, recalculating u_{τ} , k and ϵ at the faces connected to a boundary element. Usually a Prandtl turbulence model is used to save calculation costs. When $k - \epsilon$ is used :

1. Calculate u_{τ} in the faces connected to a boundary edge as for the velocity equation
2. Calculate an equivalent distance to the edge using $u_{\tau} a u$ to have the right heat flux while still using T_{wall} at the edge in the diffusion operator.
3. Iterate one time step of the conservation equation on the temperature.
4. Iterate the equations for k and ϵ as above.

Fun3D algorithm

See [11].

1. Calculate u_{\parallel}
2. Calculate the friction viscosity u_{τ} using Newton's method, using $\frac{u_{\parallel}}{u_{\tau}} = u_+ \left(\frac{y u_{\tau}}{\nu} \right)$
3. Calculate the shear stress $\tau_f = \rho u_{\tau}^2$
4. Obtain the momentum flux from the wall $-\tau_f \vec{t}$
5. No heat transfer
6. Turbulent quantities BL : it seems $\omega_{\text{element}} = \omega_{\text{theoretical}}$ from equation (IV.1.1 eq22), $k_{\text{wall}} = 0$ are used (unclear in the paper)

TrioCMFD algorithm

1. Calculate u_{\parallel}
2. Calculate the friction viscosity u_{τ} using dichotomic algorithm, using $\frac{u_{\parallel}}{u_{\tau}} = u_+ \left(\frac{y u_{\tau}}{\nu} \right)$
3. Calculate the shear stress $\tau_f = \rho u_{\tau}^2$
4. Obtain a friction coefficient at the wall $\alpha = \tau_f / u_{\parallel}$ that will be used to calculate the momentum flux
5. Use the equation on the turbulent heat flux presented above to determine $q_{\text{wall} \rightarrow \text{phase } n}$
6. Calculate one of the following BC's on k :
 - Use the equations on the turbulent quantities presented above to determine $\partial_y k(y)$ and use it as Neumann BC
 - Use $k = 0$
 - Use $\partial_y k = 0$
 - Use equation (IV.1.1 eq14)
7. Either :
 - Calculate one of the following BC's on ω :
 - Use the equations on the turbulent quantities presented above to determine $\partial_y \omega(y)$ and use it as Neumann BC
 - Calculate one of the following BC's on τ :
 - Use the equations on the turbulent quantities presented above to determine $\partial_y \tau(y)$ and use it as Neumann BC
 - Use $\tau = 0$
8. Iterate one time step of the complete system of equations (momentum, mass, energy, pressure, turbulent quantities)

Implementation for multiphase flows

The implementation of shear-induced turbulence for single-phase flows was done by adding the liquid fraction α_l as a factor in all conservation equations for turbulent quantities. For example, equation IV.1.1 eq3 becomes :

$$\begin{aligned}
 \partial_t \alpha_l \rho_l k + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l k \vec{u}_l) &= \alpha_l \tau_R :: \underline{\underline{\nabla \vec{u}_l}} - \frac{\beta_k \alpha_l \rho k}{\tau} + \nabla (\alpha_l \rho_l (\nu_l + \sigma_k \nu_t) \nabla k) \\
 \partial_t \alpha_l \rho_l \tau + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \tau \vec{u}_l) &= -\alpha_{\omega} \alpha_l \frac{\tau}{k} \tau_R :: \underline{\underline{\nabla \vec{u}_l}} + \beta_{\omega} \alpha_l \rho + \nabla (\alpha_l \rho_l (\nu_l + \sigma_{\omega} \nu_t) \nabla \tau) \\
 &\quad - 8 \alpha_l \rho_l (\nu_l + \sigma_{\omega} \nu_t) ||\underline{\underline{\nabla \sqrt{\tau}}}||^2 + \sigma_d \alpha_l \rho_l \tau \min \{ \underline{\underline{\nabla k}} \cdot \underline{\underline{\nabla \tau}}, 0 \}
 \end{aligned} \tag{IV.1.1 eq34}$$

1.2 Multiphase CFD in TrioCFMD

TrioCFMD uses the PolyMAC numerical scheme [43, 44]. This scheme was initially developed for multi-phase component scale codes. TrioCFMD is based on a 2-fluid 6-equation Euler-Euler framework called Pb_Multiphase. The resolution of the equations is done using semi-implicit ICE and SETS solvers that are located in TRUST. TrioCFMD regroups interfacial terms that are specific to CFD applications. This includes interfacial forces, energy transfer, wall heat flux partitioning, bubble diameter determination...

Work is still being done on the models presented in this section, and they are not fully validated.

Definition of dimensionnal and dimensionless variables

Variable name	Expression
Vapor phase	v
Liquid phase	l
Distance to the wall	y
Normal unit vector from the wall	\vec{n}
Velocity of phase k	\vec{u}_k
Dynamic viscosity of phase k	μ_k
Volume mass of phase k	ρ_k
Kinematic viscosity of phase k	$\nu_k = \mu_k / \rho_k$
Turbulent dynamic viscosity of the carrying phase	μ_t
Turbulent kinematic viscosity of the carrying phase	$\nu_t = \mu_t / \rho$
Reynold's stress tensor of the carrying phase	$\underline{\tau_R} = - \langle u_i u_j \rangle$
Turbulent kinetic energy of the carrying phase	k
Turbulent kinetic energy dissipation of the carrying phase	ϵ
Temperature of phase k	T_k
Temperature of the wall	T_{wall}
Thermal conductivity of phase k	$\lambda_k =$
Heat capacity at constant volume of phase k	Cp_k
Forced convection heat transfer coefficient	h_{fc}
Liquid fraction	α_l
Void fraction	α_v
Internal energy of phase k	e_k
Mass transfer to phase k	Γ_k
Mass transfer to phase k	Γ_k
Interfacial forces applied to phase k	\vec{F}_{ki}
Volume forces applied to phase k (i.e. gravity)	\vec{F}_k
Interfacial heat flux to phase k	q_{ki}
Wall heat flux to phase k	q_{kp}
Interfacial area between phase l and v	a_i
Bubble diameter of phase v	$d_b = \frac{6\alpha_v}{a_i}$
Bubble nucleation and departure from wall diameter	d_{dep}
Vapor/liquid saturation temperature	T_{sat}
Vapor/liquid latent heat	L_{vap}
Vapor/liquid surface tension	σ
Percentage of wall surface occupied by sliding bubbles	S_{sl}
Bubble Reynold's number	$Re_b = \frac{\ \vec{u}_v - \vec{u}_l\ d_b}{\nu_l}$
Bubble turbulent fluctuation Weber number	$We = \frac{(\epsilon d_b)^{2/3} \rho_l d_B}{\sigma}$
Eotvos number	$Eo = \frac{g(\rho_l - \rho_v) d^2}{\sigma}$
Turbulent Prandtl number of the liquid	$Pr_t \sim 1$
Superheat Jacob number	$Ja_{\text{sup}} = \frac{\rho_l C_{pl} (T_{\text{wall}} - T_{\text{sat}})}{\rho_v L_{\text{vap}}}$
Subcooling Jacob number	$Ja_{\text{sub}} = \frac{\rho_l C_{pl} (T_{\text{sat}} - T_l)}{\rho_v L_{\text{vap}}}$

2-fluid 6-equation framework

TrioCMFD is based on the Pb_Multiphase framework that was originally developed for component scale codes [43, 44]. This framework contains the multiphase terms that are common to component scale codes and CFD, that we do not need to add in TrioCMFD. Equation (IV.1.2 eq35) presents the terms that are already included in TRUST and the terms that we have added TrioCMFD.

$$\begin{aligned}
 (\mathcal{M}_k) \quad & \underbrace{\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}_k)}_{\text{TRUST}} = \underbrace{\Gamma_k}_{\text{TrioCMFD}} \\
 (\mathcal{Q}_k) \quad & \underbrace{\frac{\partial \alpha_k \rho_k \vec{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k)}_{\text{TRUST}} = \underbrace{-\alpha_k \nabla P}_{\text{TRUST}} + \underbrace{\nabla \cdot [\alpha_k \mu_k \nabla \vec{u}_k]}_{\text{TRUST}} + \underbrace{-\alpha_k \rho_k \overline{u'_i u'_j}}_{\text{TrioCMFD}} + \underbrace{\vec{F}_{ki} + \vec{F}_k}_{\text{TrioCMFD}} \\
 (\mathcal{E}_k) \quad & \underbrace{\frac{\partial \alpha_k \rho_k e_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k h_k \vec{u}_k)}_{\text{TRUST}} = \underbrace{\nabla \cdot [\alpha_k \lambda_k \nabla T_k]}_{\text{TRUST}} + \underbrace{-\alpha_k \rho_k \overline{u'_i e'_k}}_{\text{TrioCMFD}} - \underbrace{p \left[\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \vec{u}_k) \right]}_{\text{TRUST}} + \underbrace{q_{ki} + q_{kp}}_{\text{TrioCMFD}}
 \end{aligned} \tag{IV.1.2 eq35}$$

The implementation of single-phase turbulence is treated in a separate section (terms $\nabla \cdot [-\alpha_k \rho_k \overline{u'_i u'_j}]$ and $\nabla \cdot [-\alpha_k \rho_k \overline{u'_i e'_k}]$).

One physical quantity that is necessary for the implementation of multiphase terms is the bubble diameter. Section 1.2 presents the possibilities in CMFD. The other sections present the implementation of interfacial forces, two-phase turbulence, interfacial heat transfer and heat flux partitioning.

Determination of bubble diameter

Constant diameter

The first closure for the bubble diameter is to fix a single constant diameter to all elements in the system.

User-defined or experimental diameter field

Inspired by [91, 92], we also wanted to fix an experimentally determined diameter. The TRUST field framework can be used to fix a bubble diameter field. This gives the user different possibilities :

- A constant field (redundant with the constant diameter)
- A field that is a function of (x, y, z) coordinates and/or time
- A field that can be inputted from an data file

1-group interfacial area transport equation

Finally, we implemented the one-group interfacial area transport model proposed by Yao and Morel for nuclear applications [106]. The interfacial area a_i is a volume density of area and is therefore in m^{-1} . The governing equations of this model are :

$$\underbrace{\partial_t a_i + \vec{u} \cdot \nabla(a_i)}_{\text{Convection}} = \frac{2}{3} \frac{a_i}{\alpha_v} \left(\underbrace{\frac{\Gamma_v}{\rho_v}}_{\text{Condensation}} - \underbrace{\alpha_v \frac{\partial_t \rho_v}{\rho_v}}_{\Delta \rho} \right) + \underbrace{\pi d_{\text{dep}}^2 \Phi_N}_{\text{Nucleation}} + \frac{36\pi}{3} \left(\frac{\alpha}{a_i} \right)^2 \left(\underbrace{\Phi_{Coal}}_{\text{Coalescence}} + \underbrace{\Phi_{Bkp}}_{\text{Breakup}} \right) \tag{IV.1.2 eq36}$$

The phenomena taken into account in this equation are :

- **Convection**
- **Condensation** : Γ_v is the phase transfer term. The expression $\frac{2}{3} \frac{a_i}{\alpha_v} \frac{\Gamma_v}{\rho_v}$ allows us to take into account the change of bubble radius due to condensation or evaporation.

- $\Delta\rho$: the expression $-\frac{2}{3}\frac{\alpha_i}{\alpha_v}\alpha_v\frac{\partial_t\rho_v}{\rho_v}$ allows us to take into account the change of bubble radius due to a change of volume mass, due to pressure and temperature variations.
- **Nucleation** : d_{dep} is the nucleation diameter of the bubbles at the wall. This is calculated inside the wall heat transfer model. Another output of this model is the evaporative wall heat transfer Φ_e (in Wm^{-2}). Φ_N can be determined using :

$$\Phi_N = \frac{\Phi_e}{L_{\text{vap}} \cdot \rho_v \cdot \frac{\pi}{6} d_{\text{dep}}^3} \quad (\text{IV.1.2 eq37})$$

- **Coalescence** : Φ_{Coal} is the number of coalescing bubbles by second by unit volume. Along with the breakup term, this is the main difference between one-group interfacial area frameworks. The formulation proposed by Yao and Morel is :

$$\Phi_{\text{Coal}} = -(\epsilon d_b)^{1/3} \cdot \frac{\alpha_v^2}{d_b^4} \cdot K_{c1} \cdot \frac{1}{g(\alpha_v) + K_{c2}\alpha_v\sqrt{We/We_{cr}}} \cdot \exp\left(-K_{c3}\sqrt{\frac{We}{We_{cr}}}\right) \quad (\text{IV.1.2 eq38})$$

Where $d_b = \frac{6\alpha_v}{\alpha_i}$ is the average bubble diameter, $K_{c1} = 2.86$, $K_{c2} = 1.922$, $K_{c3} = 1.017$, $We_{cr} = 1.24$, $g(\alpha) = \frac{\alpha_{\text{max}}^{1/3} - \alpha^{1/3}}{\alpha_{\text{max}}^{1/3}}$, $\alpha_{\text{max}} = \pi/6$.

- **Breakup** : Φ_{Bkp} is the number of bubbles that breakup by second by unit volume. Along with the coalescence term, this is the main difference between one-group interfacial area frameworks. The formulation proposed by Yao and Morel is :

$$\Phi_{\text{Bkp}} = (\epsilon d_b)^{1/3} \cdot \frac{\alpha_v(1 - \alpha_v)}{d_b^4} \cdot K_{b1} \cdot \frac{1}{1 + K_{b2}(1 - \alpha_v)\sqrt{We/We_{cr}}} \cdot \exp\left(-\frac{We}{We_{cr}}\right) \quad (\text{IV.1.2 eq39})$$

Where $d_b = \frac{6\alpha_v}{\alpha_i}$, $K_{b1} = 1.6$, $K_{b2} = 0.42$, $We_{cr} = 1.24$.

More coalescence and fragmentation models will certainly be available in the future. The other terms of the equation are generic and common to all 1-group interfacial area transport models.

Interfacial forces

In this section, the expression given is the force acting on the gas phase. The opposite force acts on the liquid phase.

Drag

The general formulation for a drag force is of the form :

$$\overrightarrow{F_{l \rightarrow v}} = -\frac{3}{4}C_D \frac{\alpha_v \rho_l}{d_b} \|\overrightarrow{u_v} - \overrightarrow{u_l}\| (\overrightarrow{u_v} - \overrightarrow{u_l}) \quad (\text{IV.1.2 eq40})$$

The drag coefficient that is implemented is the Tomiyama drag [94] :

$$C_D = \begin{cases} \max(\min(16/Re_b(1 + .15Re^{.687}), 48/Re_b), 8Eo/(3 + 12)), & \text{No contamination} \\ \max(\min(24/Re_b(1 + .15Re^{.687}), 72/Re_b), 8Eo/(3Eo + 12)), & \text{Slight contamination} \\ \max(24/Re_b(1 + .15Re^{.687}), 8Eo/(3Eo + 12)), & \text{High contamination} \end{cases} \quad (\text{IV.1.2 eq41})$$

Where $Eo = \frac{g(\rho_l - \rho_v)d^2}{\sigma}$. This formulation was chosen as, as shown in [91], it yields similar results as other closures and one can adjust the level of contamination.

Lift

The general formulation for a drag force is of the form :

$$\overrightarrow{F_{l \rightarrow v}} = -C_L \rho_l \alpha_v (\overrightarrow{u_v} - \overrightarrow{u_l}) \wedge \overrightarrow{u_l} \quad (\text{IV.1.2 eq42})$$

The lift coefficient that is implemented is the Tomiyama lift [95] :

$$C_L = \begin{cases} \min(.288 \tanh(.121 Re_b), f(Eo)), & Eo < 4 \\ f(Eo), & 4 \leq Eo \leq 10.7 \end{cases} \quad (\text{IV.1.2 eq43})$$

Where $f(Eo) = .00105Eo^3 - .0159Eo^2 - .0204Eo + .474$.

Dispersion

The bubble dispersion formulation implemented is the one proposed by Burns et al. [8] :

$$\vec{F}_{l \rightarrow v} = -\frac{3}{4} \frac{C_D}{d_b} \alpha_v |\vec{u}_g - \vec{u}_l| \frac{\mu_{\text{turb}}}{Pr_{\alpha, \text{turb}}} \left(\frac{\nabla \alpha_v}{\alpha_v} - \frac{\nabla \alpha_l}{\alpha_l} \right) \quad (\text{IV.1.2 eq44})$$

Where $Pr_{\alpha, \text{turb}} = 1$

Wall correction

The wall correction term implemented is the one proposed by Lubchenko et al. [68]. Is is based on geometrical arguments. It consists in modifying the lift coefficient and the dispersion close to the wall.

Close to the wall, the lift coefficient becomes :

$$C_L \rightarrow \begin{cases} 0, & y/d_B < 1/2 \\ C_L \left(3 \left(\frac{2y}{d_B} - 1 \right)^2 - 2 \left(\frac{2y}{d_B} - 1 \right)^3 \right), & 1/2 \leq y/d_B < 1 \\ C_L, & y/d_B \geq 1 \end{cases} \quad (\text{IV.1.2 eq45})$$

The expression of the turbulent dispersion force is modified by replacing $\nabla \alpha_v$ by :

$$\nabla \alpha_v \rightarrow \alpha_v \frac{1}{y} \frac{d_B - 2y}{d_B - y} \vec{n} \quad (\text{IV.1.2 eq46})$$

Tchen

The Tchen force [13] is implemented with the following expression :

$$\overrightarrow{F_{l \rightarrow v}} = \alpha_v \rho_l \partial_t \vec{u}_l \quad (\text{IV.1.2 eq47})$$

Two-phase turbulence

By two-phase turbulence, we mean the effect of the bubbles on the turbulence in the liquid phase. To model this, we implemented the models developed during the PhD of Antoine Ducluzeau [18, 27, 28]. The authors divide the velocity fluctuations caused by the movement of bubbles in the fluid in two parts : wake-induced turbulence and wake-induced fluctuations. The total Reynolds stress tensor is the sum of all single-phase (calculated using 2-equation turbulence models) and two-phase turbulence.

$$\underline{\underline{\tau_R}} = \underline{\underline{\tau_R}}_{\text{single-phase}} + \underline{\underline{\tau_R}}_{\text{WIF}} + \underline{\underline{\tau_R}}_{\text{WIT}} \quad (\text{IV.1.2 eq48})$$

Wake-induced turbulence

Wake-induced turbulence is the isotropic contribution of bubbles to the velocity fluctuations. It comes from the instabilities of bubble wakes. It takes the shape of an additional transport equation for the bubble-induced turbulent kinetic energy k_{WIT} .

$$\underline{\underline{\tau_R}}_{\text{WIT}} = k^{WIT} \frac{2}{3} \delta_{ij} \quad (\text{IV.1.2 eq49})$$

$$\frac{Dk^{WIT}}{DT} = \underbrace{C_D \nabla^2 k^{WIT}}_{\text{Diffusion}} - \underbrace{\frac{2\nu C'_D Re_b}{C_A^2 d_b^2} k^{WIT}}_{\text{Dissipation}} + \underbrace{\alpha_v \frac{(\rho_l - \rho_v)}{\rho_l} g |\vec{u}_v - \vec{u}_l| \left(0.9 - \exp\left(-\frac{Re_b}{Re_b^c}\right) \right)}_{\text{Production}} \quad (\text{IV.1.2 eq50})$$

Where $C_A = 2.7$, $Re_b^c = 170$, C'_D is a user-inputted drag coefficient C_D is a turbulent diffusion coefficient.

Wake-induced fluctuations

Wake-induced fluctuations are the anisotropic effects of the average wake. These fluctuations are primarily in the direction of the liquid-gas velocity difference, i.e. in the vertical direction. No transport equation is necessary to model this term.

$$\underline{\tau}_{R_{WIF}} = \alpha_v |\vec{u}_v - \vec{u}_l|^2 \begin{bmatrix} 3/20 & 0 & 0 \\ 0 & 3/20 & 0 \\ 0 & 0 & 1/5 + 3C_v/2 \end{bmatrix} \quad (\text{IV.1.2 eq51})$$

Where $C_v = 0.36$.

Interfacial heat transfer

The Ranz-Marshall model [83] for interfacial heat transfer is the only one implemented in the code for now :

$$q_{ki} = \frac{6\alpha_v \lambda_l}{d_b^2} \left(2 + 0.6 \left(\frac{d_b \|\vec{u}_l - \vec{u}_v\|}{\mu_l} \right)^{1/2} \left(\frac{\mu_l C_{pl}}{\lambda_l} \right)^{1/3} \right) (T_v - T_l) \quad (\text{IV.1.2 eq52})$$

This formulation has many shortcomings and work is ongoing to select and implement better closures.

Heat flux partitioning

The model for the wall heat flux partitioning in nucleate boiling regime implemented is the one developed by Kommajosyula during his PhD thesis [62].

In this model, the wall heat flux is separated in 3 distinct contributions :

$$\Phi_{NB} = \underbrace{\Phi_{fc}}_{\text{convection}} + \underbrace{\Phi_{sc}}_{\text{sliding}} + \underbrace{\Phi_e}_{\text{evaporation}} \quad (\text{IV.1.2 eq53})$$

Intermediate quantities that require computing

Jacob numbers are the first computed quantities. We have, for the superheating and subcooling numbers respectively :

$$Ja_{\text{sup}} = \frac{\rho_l C_{pl} \times (T_{\text{wall}} - T_{\text{sat}})}{\rho_v L_{\text{vap}}} \quad (\text{IV.1.2 eq54})$$

$$Ja_{\text{sub}} = \frac{\rho_l C_{pl} \times (T_{\text{sat}} - T_l)}{\rho_v L_{\text{vap}}} \quad (\text{IV.1.2 eq55})$$

Departure diameter is then calculated using the following correlation fitted by the authors :

$$d_{\text{dep}} = 18.9 \cdot 10^{-6} \times \left(\frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_v} \right)^{0.27} \times Ja_{\text{sup}}^{0.75} \times (1 + Ja_{\text{sub}})^{-0.3} \times u_l^{-0.26} \quad (\text{IV.1.2 eq56})$$

A **bubble growth constant** is calculated to later determine the growth time (for now we ignore the contribution of microlayer evaporation) :

$$K = \left(1.55 - 0.05 \cdot \frac{T_{\text{wall}} - T_{\text{sat}}}{T_{\text{sat}} - T_l} \right) \times 2 \cdot \sqrt{3/\pi} \times Ja_{\text{sup}} \times \frac{\lambda_l}{\rho_l C_{pl}} \quad (\text{IV.1.2 eq57})$$

Bubble growth time is calculated using the two previous quantities :

$$t_{\text{growth}} = \left(\frac{d_{\text{dep}}}{4K} \right)^2 \quad (\text{IV.1.2 eq58})$$

Bubble wait time is calculated using the following correlation fitted by the authors :

$$t_{\text{wait}} = \frac{0.0061 \times Ja_{\text{sub}}}{T_{\text{wall}} - T_{\text{sat}}} \quad (\text{IV.1.2 eq59})$$

The **time to reform the thermal boundary layer** is calculated as :

$$t_{BL} = \frac{\lambda_l^2}{h_{fc}^2 \pi \nu_l} \quad (\text{IV.1.2 eq60})$$

N. B. : this formulation is a correction of the one present in equation (4.5) of [62].

Bubble departure frequency is therefore :

$$f_{\text{dep}} = \frac{1}{t_{\text{wait}} + t_{\text{growth}}} \quad (\text{IV.1.2 eq61})$$

The **nucleation site density** N'' is calculated using the 2003 Hibiki-Ishii model [51].

The **active site density** is a correction of N'' that takes into account the suppression of some sites by others by using a Lambert's function. An approximation proposed in [62] gives :

$$N''_a = \begin{cases} N'' & \text{for } N_0 N'' < e^{-1} \\ \frac{0.2689 N_0 N'' + 0.2690}{N_0} & \text{for } e^{-1} \leq N_0 N'' < e \\ \frac{\log(N_0 N''_a) - \log(\log(N_0 N''))}{N_0} & \text{for } e \leq N_0 N'' \end{cases} \quad (\text{IV.1.2 eq62})$$

Where $N_0 = f_{\text{dep}} t_{\text{growth}} \pi (d_{\text{dep}}/2)^2$.

The **bubble sliding area** of a single bubble is then given by :

$$A_{sl} = \frac{1}{\sqrt{N''_a}} d_{\text{dep}} \quad (\text{IV.1.2 eq63})$$

Using $\frac{1}{\sqrt{N''_a}}$ as the average distance between two nucleation sites.

The **sliding surface occupation** can then finally be computed :

$$S_{sl} = \min(1, A_{sl} N''_a f_{\text{dep}} t_{BL}) \quad (\text{IV.1.2 eq64})$$

Convection

$$\Phi_{fc} = \underbrace{(1 - S_{sl})}_{\% \text{ free surface}} \times h_{fc} \times (T_{\text{wall}} - T_{\text{liquid}}) \quad (\text{IV.1.2 eq65})$$

Where h_{fc} is calculated using the Kader adaptive temperature wall law [56].

Sliding

Sliding acts as an enhancement of the single-phase forces convection :

$$\Phi_{sl} = 2S_{sl} \times h_{fc} \times (T_{\text{wall}} - T_{\text{liquid}}) \quad (\text{IV.1.2 eq66})$$

Evaporation

The heat transfer due to evaporation is :

$$\Phi_e = \frac{\pi}{6} \cdot \rho_v \cdot L_{\text{vap}} \cdot d_{\text{dep}}^3 \cdot f_{\text{dep}} \cdot N''_a \quad (\text{IV.1.2 eq67})$$

1.3 Homogeneous Equilibrium Model

Disclaimer : this documentation is a very short, incomplete and inaccurate introduction to the modelling of an homogeneous equilibrium model in TrioCFD. Being a work in progress, this documentation will be revised in a near future.

The CMFD baltik gathers the development of the multiphase CFD in TrioCFD. This approach designates all RANS approaches for multiphase flows. It is based on the Pb_Multiphase problem. The model uses instantaneous relaxation of a fully unequilibrated model rather than a direct approach as in [45].

The Homogeneous Equilibrium Model (HEM hereafter) is an approximation of a multiphase flow where the phases are mechanically and thermally coupled. They move at the same velocity and have the same temperature which may not be their saturated temperature if the fluids are not of the same type.

The non-viscous system of equation

A non viscous two-phase flow can be describe by Euler's equations where every thermodynamical variable in the system describes the mixing as the sum of each phase's contributions :

$$\begin{aligned}\partial_t(\rho) + \partial_x(\rho u) &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + P) &= 0, \\ \partial_t(\alpha \rho E) + \partial_x(\rho u H) &= 0,\end{aligned}$$

whit $E = e + \frac{u^2}{2}$ the total energy of the system and $H = h + \frac{u^2}{2}$ the total enthalpy. e et h are the internal energy and internal enthalpy of the mixing. They both depend on the volume fraction and properties of each phase :

$$\rho e \triangleq \alpha_G \rho_G e_G + (1 - \alpha_G) \rho_L e_L \quad (\text{IV.1.3 eq68})$$

$$\rho h \triangleq \alpha_G \rho_G h_G + (1 - \alpha_G) \rho_L h_L. \quad (\text{IV.1.3 eq69})$$

The mixing density ρ is defined by :

$$\rho \triangleq \alpha_G \rho_G + (1 - \alpha_G) \rho_L \quad (\text{IV.1.3 eq70})$$

with ρ_L and ρ_G the liquid and gas densities, respectively. The void fraction α_G stands for the attendance rate of the gaz phase. It is defined between 0 and 1.

The system unkowns are α_G , P_k , T_k , v_k et ρ_k , but the applied simplification ($P_G = P_L$, $T_G = T_L$ et $v_G = v_L$) allows for a reduction of the number of equations. To close the system, a equation of state (EOS) for each phase is needed as well as a thermodynamics relationship for the mixing between the system pressure, another thermodynamics variable (temperature, enthalpy, or density), and the void fraction.

The equation of state

In this section, the different approach for the choice of the equation of state are presented. They are all available in Pb_HEM.

Incompressible

For the incompressible case, both densities are taken constant in each phase.

Quasi-compressible formulation

For the quasi compressible case, the densities only depend on the temperature. The following equations of state can thus be used for a range of temperature between 50°C and 263°C [87] :

$$\rho(T) = -0.0023864182T^2 - 0.22507878T + 1007.1165. \quad (\text{IV.1.3 eq71})$$

Compressible case

A stiffened gas equation has been added to the code. It allows to guarantee the hyperbolicity of the system as the sound velocity is always positive, being squared. It is defined as follows :

$$P(\rho, e) = (\gamma - 1)\rho(e - q) - \gamma P_\infty \quad (\text{IV.1.3 eq72})$$

$$P(\rho, T) = \rho(\gamma - 1)C_v T - \gamma P_\infty \quad (\text{IV.1.3 eq73})$$

$$T(\rho, h) = \frac{h - q}{C_p} \quad (\text{IV.1.3 eq74})$$

$$c^2 = \gamma \frac{P + P_\infty}{\rho}, \quad (\text{IV.1.3 eq75})$$

with $\gamma = C_p/C_v$ the polytropic coefficient, C_p and C_v the calorimetric coefficients, and P_∞ a constant reference pressure.

More complex equations of state

More complex equations of state will be available in the near future with the use of an library of equations of state (as the commercial RefProp library for instance) through a in-house code.

The Navier-stokes system of equations

The complete system of equations is defined as follows :

$$\partial_t(W) + \nabla(F_c - F_v) = S, \quad \text{où} \quad W = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho U \\ \rho E \\ \varepsilon_{turb} \end{pmatrix}, F_c = \begin{pmatrix} \rho V \otimes U \\ (\rho E + P)U \\ \varepsilon_{turb} U \end{pmatrix}, F_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{\bar{\tau}}^v + \bar{\bar{\tau}}^t \\ (\bar{\bar{\tau}}^v + \bar{\bar{\tau}}^t) \cdot U - Q^v - Q^t \\ S_{turb} \end{pmatrix} \quad (\text{IV.1.3 eq76})$$

Source terms are added to the previous Euler system of equations. W stands for the conservative variables, F_c et F_v for the convective and viscous flux respectively, S the sources terms, and ε_{turb} the turbulence model variables.

The viscous stress tensor $\bar{\bar{\tau}}$ can be defined following the Boussinesq hypothesis.

Several turbulence model can be defined, as defined in the more complete model.

Drift-flux models

The drift-flux model is an appropriate choice whenever the two-phase flow is strongly coupled, and only a small kinematic disequilibrium between the phases may appear [50]. The system is then described by the mixture balance equations for mass, momentum and energy, supplemented by the formulation of a relative velocity accounting for the kinematic disequilibrium between both phases. At this time, the drift-flux models implemented in TrioCFD may be used in the case of gas-liquid two-phase flows where the gas phase is dispersed in the liquid phase.

Zuber and Findlay [107] introduced in 1965 a formulation of the void-fraction-weighted mean gas velocity (or intrinsic averaged gas velocity) as a function of the area-averaged mixture velocity :

$$\vec{V}_g = \frac{\langle \alpha_g * \vec{v}_g \rangle}{\langle \alpha_g \rangle} = C_0 \vec{J} + \vec{V}_{g0} \quad (\text{IV.1.3 eq77})$$

where \vec{V}_g is the void-fraction-weighted mean gas velocity, C_0 is the distribution parameter, \vec{V}_{g0} the void-fraction-weighted mean drift velocity and \vec{J} denotes the area-averaged mixture velocity. The latter is the volume average of the mixture local velocity \vec{j}

$$\vec{J} = \langle \vec{j} \rangle$$

which can be expressed in terms of the local phase velocities \vec{v}_l and \vec{v}_g and the phase fractions α_l and α_g as follows :

$$\vec{j} = \alpha_g \vec{v}_g + \alpha_l \vec{v}_l \quad (\text{IV.1.3 eq78})$$

The constitutive equations for the drift-flux model, originally developed to calculate intrinsic averaged velocities in vertical upward two-phase flows [107][53], where later on extended at the local scale to three-dimensional and more complex flows [70][69], thereby allowing to define a local drift velocity in stream and transverse directions.

In TrioCFD, several drift velocities are proposed at the component and local scales :

At the component scale (for instance nuclear core reactor, steam generator, ...), the porous medium is represented by an homogeneous equivalent medium and intrinsic average velocities are, amongst others, unknowns of the system. Two different drift-velocities may be chosen to close the system of equations :

- Either the distribution parameter C_0 and the void-fraction-weighted mean drift velocity vector \vec{V}_{g0} are used-defined constants.
- Or fitted for the bubbly flow regime as proposed by Hibiki and Ishii [50] :

$$C_0 = (1.2 - 0.2 \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}}) (1 - \exp(-18 \langle \alpha_g \rangle)) \quad (\text{IV.1.3 eq79})$$

$$V_{g0} = \sqrt{2} \left(\frac{g \Delta \rho}{\rho_f^2} \right)^{1/4} (1 - \langle \alpha_g \rangle)^{1.75}, \quad (\text{IV.1.3 eq80})$$

The vector \vec{V}_{g0} is oriented in the upward vertical direction. Let us recall that the drift-flux model established by Hibiki and Ishii [50] is valid for one-dimensional upward two-phase flows.

At the local scale

- Either the distribution parameter C_0 and a local gas drift-velocity vector are used-defined constants.
- Or the three-dimensional drift-velocity is derived as proposed by Manninen [70]. The dispersed gas phase is assumed in equilibrium in the continuous liquid phase such that the force balance applied to the dispersed phase equates to zero, thereby leading to the formulation of the relative velocity in the stream and transverse directions :

$$\vec{F}_{FI} = K \|\vec{u}_g - \vec{u}_l\| \underbrace{(\vec{u}_g - \vec{u}_l)}_{\text{relative velocity}} = -\vec{F}_{lift} - \vec{F}_{buoyancy} - \vec{F}_{centrifugal} - \vec{F}_{dispersion} \quad (\text{IV.1.3 eq81})$$

As of now, the local relative velocity is defined in the case of a dispersed gas phase in a continuous liquid phase in a vertical pipe, so that the centrifugal acceleration is not taken into account and the transverse component of the relative velocity is given only by the dispersion, lift and drag terms.

IV.2

Front-Tracking discontinu

2.1 Présentation du modèle

Le modèle *Front-Tracking discontinu* a pour objectif de résoudre des problèmes instationnaires de type croissance de bulles en paroi et instabilités par exemple. Les méthodes numériques existantes ont toutes des défauts qui rendent difficiles ou impossibles ce type de calculs. C'est pour cette raison qu'une méthode numérique adaptée à ces problèmes a été construite : la méthode mixte Front-Tracking/VOF. A l'heure actuelle, celle-ci traite principalement des simulations axisymétriques ou bidimensionnelles afin de concentrer les efforts sur la qualité de la physique des simulations, mais la méthode tridimensionnelle est d'ores et déjà en cours de mise en oeuvre.

Après avoir défini les critères de qualité attendus de la solution numérique, les différentes méthodes disponibles vont rapidement être présentées. Les manquements des méthodes existantes sur les critères définis seront ensuite explicités.

La méthode choisie comme base de travail sera alors définie et l'algorithme le plus proche des critères imposés sera finalement décrit.

Discussion sur les méthodes numériques

L'objectif de ce module est de simuler numériquement les interactions des interfaces avec des objets de petite taille (sondes optiques par exemple) et les phénomènes liés à l'ébullition et à la crise d'ébullition.

L'interaction des interfaces avec les petites structures est un problème gouverné par la dynamique des lignes de contact et la tension de surface. Lors de l'ébullition, les mécanismes suivants sont susceptibles de jouer un rôle fondamental et doivent pouvoir être traités numériquement :

- la croissance d'une bulle de vapeur sur une paroi chauffée,
- le processus de formation d'un film de liquide sous la bulle,
- l'instabilité de recul de la ligne de contact (pour déterminer si elle peut jouer un rôle dans la détermination du flux critique),
- le remouillage des parois.

Tous ces problèmes nécessitent la prise en compte d'un écoulement diphasique avec changement de phase où la tension de surface est du même ordre de grandeur que les forces d'inertie, de dissipation visqueuse ou de gravité. Les lignes de contact y jouent un rôle essentiel dont la méthode numérique doit rendre compte.

Revue de quelques méthodes numériques existantes

La revue présentée ici sera relativement sommaire car un tel exercice a déjà été mené par ailleurs (voir [20], [30], [77]). Seules les différentes caractéristiques des méthodes disponibles seront explicitées afin de justifier le choix de la méthode de départ.

Les méthodes de suivi lagrangiennes

L'approche qui vient immédiatement à l'esprit consiste à décrire les interfaces par un maillage mobile. Cette approche conduit à deux classes de méthodes : d'une part les méthodes de suivi lagrangiennes et mixtes eulériennes lagrangiennes (appelées méthodes ALE pour Arbitrary Lagrangian Eulerian) et d'autre part les méthodes de front-tracking.

Dans les premières (voir par exemple [71]), tout le maillage du fluide se déforme de sorte que les interfaces soient à chaque instant une ligne du maillage. Avec une telle formulation, les conditions aux limites de contrainte mécanique, de vitesse ou de flux de chaleur sont naturelles, mais les changements de topologie des interfaces sont pratiquement hors de portée pour des raisons de complexité géométrique. Cette méthode est utilisée lorsqu'on cherche des résultats très précis sur des géométries relativement simples.

Les méthodes à double maillage eulérien/lagrangien

Dans la méthode de front-tracking [96], [90], [30], un maillage surfacique mobile représente les interfaces tandis que la vitesse, la pression, la température et les autres grandeurs volumiques sont discrétisées sur un maillage fixe.

Dans cette approche, les conditions aux limites aux interfaces sont difficiles à maîtriser. Certaines propriétés accessibles dans une approche lagrangienne, comme les propriétés de conservation du volume ou les bilans d'énergie sur les phases sont très compliquées à vérifier lorsque les interfaces ne coïncident pas avec les lignes du maillage.

Ces méthodes sont donc caractérisées par des imprécisions au niveau des bilans, compensées par un grand nombre d'astuces permettant de rendre ces imprécisions acceptables.

Beaucoup moins lourdes que les méthodes lagrangiennes, les méthodes de Front-Tracking bénéficient de toute l'expérience acquise en simulation d'écoulements monophasiques. La gestion du maillage surfacique des interfaces reste une difficulté majeure, notamment lors des changements de topologie, mais les contraintes sur ce maillage sont nettement moins sévères que pour le maillage volumique des méthodes lagrangiennes. Elles se révèlent bien plus efficaces pour résoudre l'écoulement monophasique à l'intérieur des phases, où le schéma classique "Marker And Cell" reste une valeur sûre.

Les méthodes purement eulériennes

La méthode la plus répandue et l'une des plus robustes à ce jour est la méthode VOF (Volume Of Fluid [52]). Dans cette méthode, on discrétise le champ de masse volumique sur le même maillage fixe que la vitesse, la pression et la température. De ce champ de masse volumique, on déduit par des algorithmes géométriques la position des interfaces dans chaque maille. Cette position permet de calculer l'effet de la tension de surface sur le fluide et les variations de masse volumique dans chaque maille.

Selon le niveau de raffinement de l'algorithme de reconstruction, on obtient une méthode plus ou moins facile à mettre en oeuvre. La prise en compte de la tension de surface dépend énormément de cet algorithme de reconstruction et les méthodes les plus précises sont tout aussi complexes à mettre en oeuvre que les méthodes de front-tracking.

En revanche, le suivi des interfaces est réalisé par un algorithme de transport sur le maillage eulérien. On évite ainsi une grande partie des difficultés d'ordre algorithmique liées au maillage mobile.

Parmi les autres méthodes purement eulériennes, on trouve aussi les méthodes dites "level-set", où l'indicatrice de phase est une fonction continue discrétisée. Les interfaces sont implicitement définies comme l'isovaleur 0.5 de l'indicatrice de phase. L'indicatrice est associée à une équation de transport qui comporte obligatoirement un terme anti-diffusif (la définition de ce terme pose quelques difficultés).

Ces méthodes présentent encore moins de difficultés numériques que les méthodes VOF, car les grandeurs physiques sont régulières.

On peut citer la méthode fondée sur les équations du second-gradient [21]. Plus proche de la physique, elle ne manque pas d'élégance puisque les propriétés physiques propres aux interfaces -telles que la tension de surface ou la chaleur latente de changement d'état- sont naturellement prises en compte par les équations d'évolution des variables eulériennes. Les grandeurs physiques sont continues à l'échelle du maillage et c'est sans doute la méthode la plus simple à mettre en oeuvre numériquement.

Le compromis complexité/précision/efficacité

Les méthodes ont été citées dans l'ordre décroissant d'efficacité numérique, de précision et de complexité. Les méthodes lagrangiennes sont naturellement les plus précises car la discrétisation des champs de grandeurs physiques respecte la topologie de ces champs : les lignes du maillage suivent les discontinuités du champ physique.

Ces méthodes sont aussi les plus compliquées à mettre en oeuvre.

Les méthodes mixtes eulériennes-lagrangiennes constituent un compromis intéressant car elles évitent la gestion compliquée d'un maillage volumique mobile qui suive les champs physiques mais conservent une information précise sur la localisation des discontinuités.

Les méthodes purement eulériennes sont en général les plus simples car elles évitent la gestion d'un maillage mobile, mais les discontinuités des champs sont représentées par une grandeur sur le maillage eulérien et la localisation n'est donc pas très précise.

Ces méthodes requièrent donc souvent un maillage plus fin pour obtenir la même précision.

Il semble qu'à l'heure actuelle, toutes les méthodes citées ont été appliquées à des calculs d'écoulements diphasiques en 3D, et la plupart l'ont été pour des écoulements avec transfert de masse.

Critères de qualité de la méthode

Duquennoy ([30], [9]) a mis en oeuvre une méthode de front-tracking dans laquelle il a plus spécifiquement amélioré la prise en compte du changement de phase et des lignes de contact.

Le travail qu'il a réalisé a mis en évidence plusieurs points faibles de la méthode de front-tracking :

- les courants parasites,
- le défaut de conservation de la masse,
- les limitations liées aux lignes de contact,
- la cohérence de la description du champ de température.

Ces points faibles constituent autant de critères de sélection d'une méthode mieux adaptée aux problèmes considérés.

Les courants parasites

On appelle courants parasites les courants observés dans une simulation numérique ayant atteint un état stationnaire d'équilibre alors qu'aucune énergie n'est injectée dans le système.

Ces courants résultent d'erreurs de discrétisation de la tension de surface et ont de graves conséquences sur les résultats des calculs.

La première conséquence est qu'ils rendent certains calculs impossibles. D'après Duquennoy [30], l'intensité des courants parasites augmente lorsque la valeur du nombre d'Ohnesorge diminue (la longueur D est la dimension caractéristique des gouttes ou des bulles) :

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sigma \rho_l D} \quad (\text{IV.2.1 eq1})$$

En pratique, avec de l'eau à pression atmosphérique et une dimension caractéristique de l'ordre du centimètre, les courants parasites rendent les interfaces complètement instables aux temps longs. La simulation de phénomènes lents dont la durée excède quelques secondes est alors impossible.

La deuxième conséquence est qu'ils rendent irréalistes les calculs anisothermes où le transfert de chaleur n'est pas dominé par la conduction. Lors de la croissance d'une bulle de vapeur à haute pression par exemple, la géométrie des couches limites thermiques détermine l'intensité du transfert de masse en dehors des lignes de contact et de la micro-couche. Or, les courants parasites détruisent complètement ces couches limites, rendant le calcul du champ de température irréaliste.

Il est donc extrêmement important de réduire l'intensité des courants parasites au moins jusqu'à un niveau tel que la valeur du nombre de Péclet soit très inférieure à 1. Dans ce cas, les courants parasites n'ont plus

aucune influence sur le champ de température.

La conservation du volume

Cette propriété est un enjeu très important pour la méthode de front-tracking comme pour la méthode VOF. Par nature, la méthode VOF a de bonnes propriétés de conservation du volume mais certaines étapes de l'algorithme sont approximatives et la conservation est inexacte dans la plupart des algorithmes existants [34].

La méthode de front-tracking mise en oeuvre par Duquennoy présente une erreur encore plus importante que les méthodes VOF sur le bilan de volume des phases, d'une part en raison de la méthode d'interpolation par splines utilisée pour garantir la régularité du maillage lagrangien, d'autre part en raison de l'algorithme de transport de ce maillage.

L'erreur sur le bilan de volume a des conséquences importantes sur la simulation de la croissance de bulles en paroi : dans certains cas, le volume de la bulle diminue alors que le fluide est partout surchauffé.

Si l'erreur est moins importante, le temps de croissance et le diamètre au détachement peuvent être mal prédits.

Par conséquent, l'exactitude du bilan de volume des phases est un ingrédient indispensable de la méthode numérique.

Les lignes de contact

La méthode de front-tracking [30] n'est pas la seule dans laquelle des conditions aux limites sur les angles de contact ont été mises en oeuvre. Cependant, c'est peut-être, avec les méthodes lagrangiennes, celle pour laquelle l'expression d'une condition aux limites d'angle de contact est la plus directe. La formulation utilisée par Duquennoy empêche pour l'instant la simulation d'angles inférieurs à 30° environ et la modélisation de l'angle de contact est mal contrôlée (l'angle de contact dynamique notamment n'est pas modélisé rigoureusement).

La cohérence du champ de température

La formulation précédente du front-tracking n'assure pas exactement la condition aux limites $T = T_{sat}$ aux interfaces. Ainsi, on peut observer qu'une bulle de vapeur initialement à T_{sat} se réchauffe au contact d'un liquide surchauffé, ce qui contredit le sens physique.

Cette incohérence, ainsi que l'imprécision de la formulation du transfert de masse aux interfaces n'est pas compatible avec la mise en oeuvre d'un modèle précis de transfert de chaleur singulier aux lignes de contact.

Choix d'implémentation : une méthode de front-tracking

Argumentaire

Le choix s'est porté sur une méthode de front-tracking pour les raisons suivantes :

- Il nous faut une méthode capable de gérer des grandes déformations, relativement facile à mettre en oeuvre et extensible au 3D, ce qui fait des méthodes purement lagrangiennes de mauvais candidats (notamment pour le passage au 3D).
- La méthode doit pouvoir traiter des problèmes où la tension de surface est dominante sans aucun champ de vitesse parasite. Or, à notre connaissance, il n'existe pas de formulation de la méthode VOF sans maillage lagrangien qui vérifie ce critère, alors que nous en avons trouvé une pour le front-tracking.
- Nous disposons déjà d'une bonne expérience des méthodes de Front-Tracking ainsi que d'une base logicielle suite à la thèse de Duquennoy [30].

Pourtant, la méthode originale de front-tracking présente de nombreux inconvénients, dont le plus important est peut-être la présence de courants parasites. C'est la raison pour laquelle de nombreux aspects de la formulation initiale ont été profondément modifiés, à commencer par la démarche de discrétisation des équations continues.

Démarche de discrétisation des équations continues

Sur le fond, cette démarche change radicalement par rapport à la méthode initiale [96] : l'ancienne approche consiste à appliquer un opérateur de filtrage aux équations de Navier-Stokes pour rendre toutes les grandeurs continues (masse volumique, champ de vitesse, etc.) puis à discrétiser ces équations filtrées.

Les outils d'analyse numérique classiques prédisent alors une convergence rapide en fonction de la discrétisation car la solution du problème est régulière.

L'inconvénient de la méthode est que l'on converge rapidement vers la solution du problème filtré et non vers la solution du problème réel. En ce sens, la méthode n'est même pas "consistante".

Si on fait décroître le support de la fonction de filtrage en même temps que l'on raffine le maillage, on ne dispose d'aucun résultat de convergence de la méthode numérique.

Ainsi, dans la méthode de front-tracking mise en oeuvre par Duquennoy, l'intensité des courants parasites est constante lorsqu'on raffine le maillage.

La méthode ne converge donc pas vers la solution du problème continu.

La nouvelle approche est fondée sur des bilans sur des volumes de contrôle, exactement comme dans une méthode de volumes finis classique. On discrétise donc directement les équations de Navier-Stokes, y compris les discontinuités aux interfaces.

Pour obtenir la convergence en maillage de la méthode, un modèle de sous-maille des grandeurs physiques doit être introduit dans les éléments où ces grandeurs sont discontinues. Ainsi, on utilise une représentation discrète un peu plus fine des champs physiques qui tient compte de la position des interfaces. La convergence obtenue est d'ordre 1 si on utilise un modèle de sous-maille d'ordre zéro dans les éléments contenant des interfaces. Des modèles de sous-maille plus raffinés permettraient d'augmenter la précision de la méthode et on devrait pouvoir obtenir les mêmes qualités qu'une méthode lagrangienne.

Résumé des apports essentiels de la méthode

Cette nouvelle approche de discrétisation est empruntée aux méthodes VOF et n'est donc pas nouvelle. Les apports essentiels du travail mené dans TrioCFD concernent :

- les algorithmes de transport, pour assurer un bilan de masse exact des phases,
- la discrétisation de la tension de surface et de la gravité pour éliminer pratiquement les courants parasites,
- le calcul du flux de chaleur aux interfaces pour une meilleure précision,
- la prise en compte des lignes de contact.

La méthode proposée peut être étendue à des schémas en trois dimensions et à d'autres types de discrétisations eulériennes.

On propose en effet une formulation des différentes grandeurs physiques (en particulier les forces de tension de surface et de gravité) et des opérateurs d'interpolation qui s'étend directement en trois dimensions.

D'autre part, pour peu que la discrétisation de la vitesse et de la pression permette d'écrire un bilan de volume discret, le schéma est extensible à des discrétisations plus riches que celle du schéma MAC (par exemple la discrétisation Volume-éléments finis [35], [49]).

On peut remarquer que les approches "VOF" et "front-tracking" semblent converger vers une même formulation. La formulation VOF d'origine a ainsi été modifiée [79] par l'ajout d'un maillage lagrangien des interfaces. Elle constitue maintenant une méthode "VOF avec marqueurs" (à notre connaissance, une telle méthode n'existe cependant pas encore en 3D). Cette méthode de front-tracking comporte déjà un maillage lagrangien des interfaces et la discrétisation actuelle des grandeurs à partir de bilans sur les volumes de contrôles la rapproche des méthodes VOF.

Une telle convergence est peut-être le signe que l'on s'approche d'une formulation optimale pour ce type de problèmes...

Définition des grandeurs discrètes

Nous utiliserons les conventions de notation suivantes pour les grandeurs discrètes :

- les grandeurs discrétisées sur le maillage eulérien (fixe) sont notées avec une barre supérieure : pression \overline{P} , température \overline{T} , divergence de la vitesse $\overline{\nabla \cdot \vec{v}}$, etc.
- les grandeurs discrétisées sur le maillage lagrangien (des interfaces) sont notées avec un chapeau : vitesse \hat{v} , courbure \hat{c} , tension de surface $\hat{\sigma}$, flux de masse \hat{m} , etc.

Le maillage de l'interface

En deux dimensions, l'interface est définie par un maillage constitué de noeuds reliés par des segments. Par convention, les segments sont orientés de sorte que la vapeur se trouve à gauche. En trois dimensions, l'interface sera une réunion de triangles dont la normale est orientée vers la vapeur.

Pour le bon fonctionnement des algorithmes, le maillage doit vérifier certaines propriétés topologiques :

- deux segments d'interface ne se coupent jamais,
- soit les interfaces sont fermées, soit leurs extrémités (les noeuds n'ayant qu'un seul segment raccordé) sont situées sur un bord du domaine,
- les interfaces définissent donc des volumes fermés, on demande que toutes les interfaces définissant le bord d'un volume aient leurs normales orientées dans la même direction.

Ces propriétés assurent la cohérence topologique du maillage, en particulier la définition du contenu (gaz ou liquide) des volumes définis par les interfaces. Les interfaces sont considérées comme une succession de segments. En particulier, on ne cherche pas à augmenter l'ordre de la méthode par l'utilisation de splines pour le calcul de l'indicatrice. En effet, les propriétés topologiques énoncées plus haut sont plus faciles à vérifier avec l'utilisation des segments. Les algorithmes sont plus faciles à mettre en oeuvre et plus robustes. Si cette méthode simple donne des résultats satisfaisants, on peut penser qu'en trois dimensions, un maillage en triangles n'ayant pas plus de propriétés de régularité conviendra aussi. Au vu des difficultés rencontrées dans la gestion des maillages surfaciques en trois dimensions, il semble judicieux de privilégier les méthodes les plus simples et les plus robustes.

Définitions

On appellera Γ l'ensemble des interfaces et E un élément d'interface (segment en 2D et triangle en 3D).

Nous utiliserons quelques fois la notion de "portion d'interface connexe complète". La connexité signifie que l'on peut passer d'un noeud à n'importe quel autre de la portion d'interface en traversant des éléments de proche en proche. On parle de portion complète si pour tout élément de la portion, ses voisins y sont aussi. Ainsi, si une portion complète a des bords, ces derniers sont forcément sur un bord du domaine.

Courbure des interfaces

La courbure est calculée aux noeuds du maillage surfacique. Ce choix est impératif pour que la tension de surface qui en résulte n'admette que la solution "courbure constante" pour solution stationnaire du problème. Si on choisissait de discrétiser la courbure aux centres des segments, elle serait nulle pour un profil d'interface ondulé et ce profil serait une solution numérique stationnaire.

On peut envisager deux formulations de la courbure discrète :

- une formulation fondée sur une interpolation géométrique,
- une formulation fondée sur la différentielle de l'énergie d'interface.

Formulation géométrique

La première est la plus intuitive en deux dimensions : on utilise la définition géométrique de la courbure

$$c(s) \triangleq \frac{\partial t}{\partial s} \cdot n \quad (\text{IV.2.1 eq2})$$

où s est l'abscisse curviligne en paramétrage normal. Traçons le cercle passant par le point de l'interface et ses deux voisins. La courbure bidimensionnelle est l'inverse signé du rayon R du cercle (courbure positive si le centre du cercle est dans la vapeur, négative sinon). En géométrie axisymétrique, il faut ajouter la courbure dans l'autre direction qui s'écrit $c_2 = \sin\theta/x$.

Relations de passage conservatives entre le maillage eulérien et le maillage lagrangien

Plusieurs étapes de l'algorithme nécessitent de passer d'une grandeur définie aux noeuds des interfaces à une grandeur définie sur le maillage fixe et réciproquement. On voudra écrire des bilans exacts sur ces grandeurs et nous avons besoin d'une définition rigoureuse des opérateurs d'interpolation. On définit ci-dessous des opérateurs d'interpolation et les relations de conservation qu'ils vérifient. On note $\bar{\mathcal{G}}$ l'opérateur permettant de passer d'une grandeur surfacique à une grandeur volumique, et $\hat{\mathcal{G}}$ l'opérateur réciproque. Pour des champs discrets \hat{f} et \bar{f} , on note :

$$\hat{f} = \hat{\mathcal{G}}(\bar{f}) \quad (\text{IV.2.1 eq3})$$

$$\bar{f} = \bar{\mathcal{G}}(\hat{f}) \quad (\text{IV.2.1 eq4})$$

Remarque importante : ces opérateurs ne sont pas inverses l'un de l'autre. Si l'on passe d'une grandeur surfacique à une grandeur volumique, puis à nouveau à une grandeur surfacique, l'intégrale est conservée mais les valeurs aux noeuds subissent une diffusion numérique due aux interpolations successives :

$$\hat{\mathcal{G}}(\bar{\mathcal{G}}(\hat{f})) \neq \hat{f} \quad (\text{IV.2.1 eq5})$$

La propriété la plus importante vérifiée par ces opérateurs est la relation de conservation suivante, où Γ représente une portion connexe complète d'interfaces et Ω l'ensemble des éléments du maillage eulérien traversés par Γ :

$$\int_{\Gamma} \tilde{f}(x) ds = \int_{\Omega} \bar{f}(\Omega) d\Omega \quad (\text{IV.2.1 eq6})$$

Indicatrice de phase et masse volumique

L'indicatrice discrète \bar{I} d'un élément de volume Ω est définie comme la fraction du volume de l'élément occupée par la phase gazeuse. C'est donc le taux de vide moyen dans l'élément. La masse volumique $\bar{\rho}$ d'un élément est la masse volumique moyenne dans cet élément, définie par :

$$\bar{\rho} \triangleq \frac{1}{V_{\Omega}} \int_{\Omega} \rho d\Omega \quad (\text{IV.2.1 eq7})$$

On a les relations suivantes :

$$\bar{\rho} = \rho_v \bar{I} + \rho_l (1 - \bar{I}) \quad (\text{IV.2.1 eq8})$$

$$\bar{I} = \frac{\bar{\rho} - \rho_l}{\rho_v - \rho_l} \quad (\text{IV.2.1 eq9})$$

L'indicatrice est calculée en fonction de la position des noeuds de l'interface par un algorithme géométrique exact. L'algorithme est identique à celui proposé par Popinet [79], sauf que nous n'utilisons que les segments de l'interface et non une interpolation par splines.

Discrétisation de la vitesse et de la pression

Choix d'une formulation en vitesse ou en quantité de mouvement

Nous disposons d'une discrétisation de la masse volumique, au travers de l'indicatrice.

Il s'agit maintenant de choisir si on discrétise la vitesse v ou la quantité de mouvement ρv . Il s'agit en fait de faire le choix de privilégier la conservation du volume ou la conservation de la quantité de mouvement.

Dans le premier cas, on définit la vitesse discrète sur une face comme la moyenne de la vitesse sur cette face et au cours du pas de temps. La condition d'incompressibilité est alors très facile à écrire et se traduit de manière exacte en termes de variables discrètes :

$$\overline{\nabla \cdot \bar{v}} = 0 \Leftrightarrow \forall \Omega, \int_{\partial\Omega} \bar{v} \cdot \bar{n} ds = 0 \quad (\text{IV.2.1 eq10})$$

En revanche, un bilan de masse local et la conservation de la quantité de mouvement sont beaucoup plus compliqués à obtenir. On peut cependant écrire un bilan de masse global, comme on le verra par la suite. Il faut pour cela définir la valeur de la quantité de mouvement discrète $\bar{\rho} \bar{v}$ à partir des autres grandeurs

discrètes.

Si l'on choisit de discrétiser la quantité de mouvement $\overline{\rho v}$, sa conservation est facile à obtenir (il suffit d'écrire sa variation sous forme de flux au bord des volumes de contrôle) et un bilan de masse exact peut être écrit. En revanche, la condition d'incompressibilité devient ambiguë localement, dans les régions où la masse volumique varie. En effet, on doit évaluer la vitesse par une formule du type :

$$\bar{v} \triangleq \frac{\overline{\rho v}}{\bar{\rho}} \quad (\text{IV.2.1 eq11})$$

Pour illustrer les problèmes liés à cette discrétisation, considérons un problème dont la solution est un champ de vitesse \bar{v} uniforme. On discrétise la quantité $\overline{\rho v}$ qui est donc discontinue aux interfaces. Les différents éléments du schéma numérique (opérateurs de diffusion et de convection notamment) introduisent des erreurs numériques lors du traitement de cette grandeur discontinue, en particulier une diffusion numérique. Si on tente ensuite de calculer une vitesse \bar{v} en divisant par $\bar{\rho}$, la vitesse n'est plus uniforme.

Une telle erreur aurait des conséquences fâcheuses en front-tracking. Elle augmenterait d'ailleurs avec le rapport de masse volumique. Les interfaces ne seraient pas transportées sans déformation même si la solution du problème est un champ de vitesse uniforme. Cela implique que l'on modifie l'énergie de surface des interfaces, ce qui conduit à des courants parasites ou des instabilités numériques.

Il n'est pas exclu que l'on puisse construire un schéma numérique de transport de \bar{v} qui ait de bonnes propriétés, mais le choix retenu pour l'instant est d'utiliser une discrétisation de la vitesse.

Discrétisation

Dans la mise en oeuvre actuelle, la discrétisation de la vitesse et de la pression est de type "marker and cell". La pression est discrétisée au centre des volumes de contrôle Ω_x et Ω_y . Dans la formulation classique on donne les définitions suivantes pour la vitesse :

- les faces verticales portent une composante de vitesse horizontale $\overline{v_x}$,
- les faces horizontales portent une composante de vitesse verticale $\overline{v_y}$,
- et en 3D, on définit de même la troisième composante de vitesse.

Les composantes sont supposées constantes sur les volumes de contrôle $\Omega' = 0$ centrés sur chaque face. La vitesse a alors les deux interprétations suivantes :

$$\overline{v_x} = \int_{\Gamma_x} v \cdot x ds \quad (\text{IV.2.1 eq12})$$

$$\overline{v_x} = \frac{1}{\rho} \int_{\Omega_x} \rho v_x d\Omega \quad (\text{IV.2.1 eq13})$$

La première permet d'écrire le bilan de masse conservatif sur Ω et de définir l'incompressibilité du fluide sur les équations discrètes :

$$\int_{\partial\Omega} v \cdot n ds = \int_{\Omega} \nabla \cdot v d\Omega = 0 \quad (\text{IV.2.1 eq14})$$

La deuxième permet d'écrire un bilan de quantité de mouvement discret conservatif, à condition que $\bar{\rho}$ soit constant.

Si la masse volumique n'est pas constante dans le temps, l'écriture des bilans devient très compliquée. Avec le schéma en temps explicite utilisé actuellement, le bilan n'est respecté qu'approximativement dans les éléments où la masse volumique varie.

Discrétisation de l'énergie interne

Là encore, il faut choisir la grandeur discrète pour représenter l'énergie interne du fluide. Une discrétisation de l'énergie permet d'écrire facilement un schéma conservatif, ce qui semble important dans le cas du changement de phase. Dans ce cas, le calcul du flux de chaleur de la loi de Fourier et de l'évaporation implique une estimation de la température en fonction de l'énergie interne. Or tout comme avec la quantité de mouvement, on doit pour cela diviser l'énergie par une grandeur qui tend vers zéro dans la vapeur. Une mauvaise estimation de cette grandeur peut conduire à des températures non bornées, en violation du deuxième principe de la thermodynamique.

Si on discrétise la température au contraire, le deuxième principe est facile à vérifier (il conduit aux critères de stabilité en temps des schémas explicites), mais la conservation de l'énergie est plus difficile à assurer dans les régions où ρc_P varie.

La formulation actuelle utilise une discrétisation de la température et n'est donc pas conservative en énergie. On pose :

$$\bar{T} \triangleq \frac{\int_{\Omega} \rho c_P T d\Omega}{\int_{\Omega} \rho c_P d\Omega} \quad (\text{IV.2.1 eq15})$$

De façon cohérente avec cette définition, la capacité calorifique de l'élément s'écrit :

$$\overline{\rho c_P} \triangleq \frac{\int_{\Omega} \rho c_P d\Omega}{V_{\Omega}} = \rho_v c_{P_v} \bar{T} + \rho_l c_{P_l} (1 - \bar{T}) \quad (\text{IV.2.1 eq16})$$

Transfert de chaleur et de masse aux interfaces

Température de saturation

D'après les équations continues utilisées, la température de saturation locale dépend de la courbure des interfaces et s'exprime en fonction des pressions de part et d'autre de l'interface :

$$T_{sat} = T_{sat}(P), \text{ avec } P \begin{cases} = P_v + \frac{\rho_v}{\rho_l - \rho_v} \sigma c + \frac{1}{2} P_r \\ = P_l + \frac{\rho_l}{\rho_l - \rho_v} \sigma c + \frac{1}{2} P_r \end{cases} \quad (\text{IV.2.1 eq17})$$

Avec la demie-somme des deux expressions de la pression, on obtient la relation suivante :

$$P = \frac{1}{2} \left(P_v + P_l + \frac{\rho_l + \rho_v}{\rho_l - \rho_v} \sigma c \right) \quad (\text{IV.2.1 eq18})$$

Or, à l'équilibre, le champ de pression discret \bar{P} vérifie l'équation construite à partir des termes sources de tension de surface :

$$\bar{P} = \bar{\kappa} \bar{I} - \bar{\rho} \bar{\phi} + P_0, \text{ avec } \begin{cases} \bar{\kappa} = \sigma c + (\rho_v - \rho_l) \phi = \text{constante} \\ P_0 = \text{constante} \end{cases} \quad (\text{IV.2.1 eq19})$$

De cette propriété, on déduit une expression de la pression dans le liquide et dans la vapeur de part et d'autre de l'interface :

$$P_l = P_0 - \rho_l \phi = \bar{P} - \bar{\rho} \bar{\phi} - \kappa \bar{I} - \rho_l \phi \quad (\text{IV.2.1 eq20})$$

$$P_v = P_0 - \rho_v \phi + \kappa = \bar{P} - \bar{\rho} \bar{\phi} - \kappa \bar{I} + \rho_v \phi + \kappa \quad (\text{IV.2.1 eq21})$$

Cette expression est symbolique car la définition exacte de ϕ n'est pas précisée (la seule valeur connue est celle de $\bar{\kappa}$, dont on sait qu'elle est constante à l'équilibre). Remplaçons maintenant les expressions de P_l et P_v dans l'équation IV.2.1 eq18 :

$$P = \bar{P} + \bar{\rho} \bar{\phi} - \kappa \bar{I} + \frac{1}{2} \left(\kappa - (\rho_v + \rho_l) \phi + \frac{\rho_l + \rho_v}{\rho_l - \rho_v} \sigma c \right) \quad (\text{IV.2.1 eq22})$$

$$P = \bar{P} + \bar{\rho} \bar{\phi} - \kappa \bar{I} + \kappa \quad (\text{IV.2.1 eq23})$$

Cette propriété suggère d'utiliser l'expression suivante, exacte à l'équilibre, de la température de saturation en fonction des champs discrets \bar{P} , \bar{I} et $\bar{\kappa}$:

$$\bar{T}_{sat} \triangleq T_{sat}(P), \text{ avec } P \triangleq \bar{P} + \bar{\rho} \bar{\phi} + (1 - I) \bar{\kappa} \quad (\text{IV.2.1 eq24})$$

Cette équation paraît très simple à mettre en oeuvre. De plus, si $\bar{\kappa}$ est constante, le système discret peut-être simultanément à l'équilibre mécanique et à l'équilibre thermique. En effet, d'une part le champ de vitesse nul est solution du système ce qui correspond à l'équilibre mécanique, et d'autre part \bar{T}_{sat} est constant donc le champ de température constant $T = T_{sat}$ est une solution stationnaire du système d'équations (en présence de gravité, ce résultat n'est pas immédiat sur le système discret). Malheureusement, elle introduit

un couplage extrêmement fort entre l'équation de température et l'équation de quantité de mouvement. Sans un traitement particulier (traitement implicite de la variation de température de saturation), le schéma numérique est très instable.

Enthalpie de changement de phase

On définit maintenant la puissance volumique de changement de phase sur un volume de contrôle Ω . C'est l'intégrale du flux de chaleur des phases vers les interfaces contenues dans ce volume :

$$\bar{h} \triangleq \frac{1}{V_\Omega} \int_{\Gamma \cap \Omega} \dot{q} ds \quad (\text{IV.2.1 eq25})$$

Dans la formulation continue des équations, le flux \dot{q} s'exprime à partir du flux de chaleur de part et d'autre de l'interface :

$$(\text{IV.2.1 eq26})$$

On peut construire un équivalent discret de cette formulation et calculer un flux de chaleur \hat{q} discrétisé aux noeuds de l'interface de la façon suivante (la méthode employée par Duquennoy [30] et [90]) :

$$\hat{q} \triangleq k_l \frac{\hat{T}_l - T_{sat}}{\delta} + k_v \frac{\hat{T}_v - T_{sat}}{\delta} \quad (\text{IV.2.1 eq27})$$

Cette méthode a plusieurs inconvénients :

- il faut interpoler la température au-delà de l'interface, ce qui pose problème près des bords du domaine,
- il faut ensuite construire explicitement un terme source pour l'énergie sur le maillage fixe et ce terme source peut conduire à des incohérences (par exemple le transfert de chaleur d'une phase à l'autre alors que physiquement l'interface doit être à T_{sat}),
- le contrôle précis du flux de chaleur près des lignes de contact est compliqué.

Pour ces raisons, on lui préfère une formulation différente, plus proche des raisonnements VOF. À partir de la température discrète \bar{T} d'un élément, on reconstruit un modèle de sous-maille du champ de température continu dans l'élément en utilisant la position des interfaces. De ce champ de température, on déduit la valeur du flux de chaleur \dot{q} et de l'enthalpie de changement de phase \hat{q} .

Le modèle de sous-maille mis en oeuvre pour l'instant est simple et peu précis. On modélise le flux de chaleur \dot{q} à l'interface comme

$$\dot{q} \triangleq \frac{k(\bar{T} - \overline{T_{sat}})}{\delta_R + \delta} \quad (\text{IV.2.1 eq28})$$

où k est la conductivité thermique du liquide, δ_R l'épaisseur équivalente de résistance d'interface et δ une dimension caractéristique égale au quart de la taille de l'élément Ω (cette valeur permet de retrouver le flux de chaleur moyen lorsque l'interface traverse un élément de volume de part en part).

On écrit ensuite la puissance volumique de changement de phase sous la forme suivante :

$$\bar{h} \triangleq \frac{\dot{q} \cdot \text{surface}(\Gamma \cap \Omega)}{V_\Omega} \quad (\text{IV.2.1 eq29})$$

La variation de température \bar{T} qui en résulte en un pas de temps Δt est :

$$\Delta \bar{T} = -\frac{\bar{h}}{\rho c_P} \Delta t \quad (\text{IV.2.1 eq30})$$

Il convient donc de majorer cette valeur pour assurer la stabilité en temps du schéma (pour que la température ne passe pas d'une valeur supérieure à T_{sat} à une valeur inférieure). On impose :

$$|\bar{h}| \leq \rho c_P |\bar{T} - \overline{T_{sat}}| \Delta t \quad (\text{IV.2.1 eq31})$$

On a choisi de privilégier le transfert de chaleur dans le liquide, ce qui convient pour les calculs du chapitre suivant. Pour être plus précis, il faudrait explorer le champ de température des mailles voisines pour déterminer quelle est la part du flux de chaleur provenant du liquide et de la vapeur. Une autre solution consiste à

discrétiser deux champs de température - un pour le liquide et un pour la vapeur - à l'image des méthodes moyennées.

Un modèle encore plus fruste peut être utilisé : on utilise une conductivité thermique infinie dans l'élément. Ainsi, les éléments contenant une interface ont toujours une température $T = T_{sat}$. La précision spatiale de ce modèle n'est pas beaucoup plus faible que celle du précédent (il est consistant et d'ordre 1 en espace) mais le flux de chaleur est discontinu en temps lorsque l'interface pénètre un nouvel élément. Ces discontinuités provoquent des à-coups de vitesse et de pression qui rendent les calculs difficilement exploitables

Flux de masse aux interfaces

On voudrait définir le transfert de masse volumique sur le maillage eulérien comme suit :

$$\hat{m} \triangleq \frac{1}{V_\Omega} \int_{\Omega \cap \Gamma} \dot{m} ds \quad (\text{IV.2.1 eq32})$$

Puisque $\dot{q} = \mathcal{L}\dot{m}$, la relation entre \bar{h} et \bar{m} s'écrit :

$$\bar{m} = \frac{\bar{h}}{\mathcal{L}} \quad (\text{IV.2.1 eq33})$$

Toutefois, pour des raisons de stabilité (numérique) de l'énergie de tension interfaciale, il est nécessaire de réduire les irrégularités du champ \bar{h} . Le flux de masse \bar{m} servira en effet à définir la divergence discrète du champ de vitesse pour l'équation de quantité de mouvement. L'irrégularité de \bar{h} se traduira donc par une irrégularité du champ de vitesse et donc de la géométrie des interfaces.

Nous avons constaté des instabilités du profil des interfaces dans certains cas, qui ont pu être réduites par un léger filtrage spatial du flux de masse. Ce filtrage consiste à passer de façon conservative de \bar{m} à \hat{m} , puis à nouveau à \bar{m} . Le flux total est conservé mais il subit une diffusion numérique suffisante pour résoudre ce problème. De plus, on ajoute au flux de masse \hat{m} la contribution singulière \hat{m}_s des lignes de contact, et à \bar{m} la contribution \bar{m}_f de l'évaporation des films de liquide en paroi.

L'expression des flux de masse sur les deux maillages est donc la suivante :

$$\hat{m} \triangleq \frac{1}{\mathcal{L}} \hat{\mathcal{G}}(\bar{h}) + \hat{m}_s \quad (\text{IV.2.1 eq34})$$

$$\bar{m} \triangleq \bar{\mathcal{G}}(\hat{m} + \bar{m}_f) \quad (\text{IV.2.1 eq35})$$

Divergence discrète de la vitesse

On considère un élément Ω du maillage eulérien de bord $\partial\Omega$ traversé par une interface Γ . On note Ω_l le volume occupé par le liquide et Ω_v le volume occupé par la vapeur. On a la relation suivante pour le champ de vitesse continu :

$$\int_{\partial\Omega} v \cdot n ds = \underbrace{\int_{\Omega_l} \nabla \cdot v d\Omega}_{=0} + \underbrace{\int_{\Omega_v} \nabla \cdot v d\Omega}_{=0} + \int_{\Gamma} (v_v - v_l) \cdot n ds \quad (\text{IV.2.1 eq36})$$

$$\int_{\partial\Omega} v \cdot n ds = \int_{\Gamma} \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) ds \quad (\text{IV.2.1 eq37})$$

Cette propriété des équations continues se traduit sous la forme suivante, où l'on définit la divergence discrète de la vitesse dans l'élément Ω :

$$\overline{\nabla \cdot v}(\Omega) \triangleq \bar{m} \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) \quad (\text{IV.2.1 eq38})$$

Le schéma numérique de projection assure alors la propriété suivante du champ de vitesse discret quel que soit le volume Ω réunion d'éléments du maillage eulérien :

$$\int_{\partial\Omega} \bar{v} \cdot n ds = \overline{\nabla \cdot v}(\Omega) \bar{V}_\Omega \quad (\text{IV.2.1 eq39})$$

Variation de volume

Considérons un volume de fluide Ω de bord $\partial\Omega$ dans l'espace continu. En utilisant l'équation IV.2.1 eq9, la variation du volume de gaz dans ce volume s'écrit :

$$\partial_t \int_{\Omega} I d\Omega = \frac{1}{\rho_v - \rho_l} \partial_t \int_{\Omega} \rho d\Omega = -\frac{1}{\rho_v - \rho_l} \int_{\partial\Omega} \rho v \cdot n ds \quad (\text{IV.2.1 eq40})$$

En s'inspirant de cette équation, on définit la grandeur discrète suivante sur les éléments du maillage eulérien, où la valeur de ρ reste à définir :

$$\overline{V'} \triangleq \frac{1}{(\rho_l - \rho_v) \text{volume}(\Omega)} \int_{\partial\Omega} \rho v \cdot n ds \quad (\text{IV.2.1 eq41})$$

Pour la suite, on veut que V' vérifie la propriété globale suivante pour un ensemble d'éléments Ω_i contenant une interface (on sépare les frontières de Ω_i en trois domaines, selon que la frontière est en contact avec un élément plein de liquide, de vapeur ou mixte) :

$$\int_{\Gamma_l} \rho_l v \cdot n ds + \int_{\Gamma_v} \rho_v v \cdot n ds + \int_{\Gamma_b} \rho v \cdot n ds = (\rho_l - \rho_v) \int_{\Omega_i} V' d\Omega \quad (\text{IV.2.1 eq42})$$

Pour obtenir cette propriété, la masse volumique ρ sur une face doit être calculée de la façon suivante en fonction des masses volumiques ρ_1 et ρ_2 des éléments voisins :

$$\rho_1 = \rho_l \text{ ou } \rho_2 = \rho_l \Rightarrow \rho \triangleq \rho_l, \quad (\text{IV.2.1 eq43})$$

$$\rho_1 = \rho_v \text{ ou } \rho_2 = \rho_v \Rightarrow \rho \triangleq \rho_v, \quad (\text{IV.2.1 eq44})$$

sinon

$$\rho \triangleq (\rho_l + \rho_v)/2 \quad (\text{IV.2.1 eq45})$$

Le choix fait pour le troisième cas n'est pas impératif et on a même intérêt à utiliser une meilleure approximation de la masse volumique moyenne sur la face. Il n'a cependant pas d'incidence sur les propriétés de conservation que l'on veut obtenir.

Remarque : cette valeur de la masse volumique aux faces est spécifique au calcul de V' (on utilise une autre expression pour les bilans de quantité de mouvement).

Bilan de masse des phases

Le but de cette démonstration un peu technique est d'obtenir une condition géométrique sur le déplacement des noeuds de l'interface pour que le bilan de masse des inclusions soit respecté exactement. Comme nous l'avons mentionné au début du chapitre, cette propriété est un ingrédient essentiel et non trivial de la méthode numérique. La démonstration commence par la définition du bilan de masse continu.

Définition du bilan de masse des phases

On veut assurer la conservation de la masse des phases dans la formulation discrète des équations. Pour un domaine $\Omega(t)$ borné par des interfaces mobiles Γ_i et des bords fixes Γ_b et ne contenant qu'une seule phase de masse volumique ρ , le bilan continu s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega(t)} \rho d\Omega = \underbrace{\int_{\Gamma_i} -\dot{m} n \cdot n_e ds}_{\text{transfert de masse}} - \underbrace{\int_{\Gamma_b} \rho v \cdot n_e ds}_{\text{entrée de fluide}} \quad (\text{IV.2.1 eq46})$$

où n est la normale aux interfaces dirigée vers la vapeur et n_e est la normale extérieure au domaine Ω . En divisant par ρ (constant dans les phases), on obtient une équation équivalente qui exprime le bilan de volume des phases :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega(t)} d\Omega = \partial_t \text{vol.}(\Omega) = \int_{\Gamma_i} -\frac{\dot{m}}{\rho} n \cdot n_e ds - \int_{\Gamma_b} -v \cdot n_e ds \quad (\text{IV.2.1 eq47})$$

Le volume Ω des interfaces discrétisées est calculable exactement, de même que l'intégrale du débit volumique sur les bords et du flux de masse sur les interfaces. On cherche à exprimer une condition locale sur le déplacement des interfaces pour que le bilan discret global soit vérifié.

Bilan de volume d'une interface

Considérons une portion d'interface connexe Γ_i complète (si cette surface a des bords, ils sont situés sur un bord du domaine fluide). Cette interface divise le fluide en deux parties Ω_l et Ω_v désignées en fonction de la phase directement adjacente à l'interface, chaque volume contenant éventuellement d'autres interfaces Γ_j . Pour chacun des deux volumes, on considère la somme des variations de volume [IV.2.1 eq47](#) des phases qu'il contient. Les interfaces Γ_j intérieures au volume contribuent pour deux termes au bilan, une fois pour le liquide et une fois pour la vapeur. Le bilan total s'écrit (par exemple pour le volume Ω_l) :

$$\partial_t vol.(\Omega_l) = \int_{\Gamma_i} -\frac{\dot{m}}{\rho_l} ds - \int_{\Gamma_b} v \cdot n_e ds + \int_{\Gamma_j} \left(-\frac{\dot{m}}{\rho_l} + \frac{\dot{m}}{\rho_v} \right) ds \quad (\text{IV.2.1 eq48})$$

Considérons les deux derniers termes de cette somme. Le dernier a une contrepartie discrète exacte donnée par l'équation [IV.2.1 eq38](#) :

$$\int_{\Gamma_j} \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) ds - \int_{\Gamma_b} v \cdot n_e ds = \int_{\overline{\Omega_l}} (\nabla \cdot v) d\Omega - \int_{\Gamma_b} v \cdot n_e ds \quad (\text{IV.2.1 eq49})$$

Le bilan de masse discret [IV.2.1 eq39](#) ne s'applique qu'à un domaine borné par des faces du maillage. Considérons donc les volumes discrets $\overline{\Omega}_v$, $\overline{\Omega}_l$ et $\overline{\Omega}_i$. Le bilan discret appliqué à $\overline{\Omega}_v$ et $\overline{\Omega}_l$ donne, par exemple sur $\overline{\Omega}_l$:

$$\int_{\Gamma_j} \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l} \right) ds - \int_{\Gamma_{b,l}} v \cdot n_e ds = \int_{\overline{\Omega_l}} v \cdot n_e ds \quad (\text{IV.2.1 eq50})$$

Utilisons cette expression dans l'équation [IV.2.1 eq48](#). Le bord Γ_b se décompose en $\Gamma_{l,b}$ (pris en compte dans le bilan discret) et $\Gamma_{b,i} \cap \Gamma_b$ qui n'est pas pris en compte.

$$\partial_t vol.(\Omega_l) = \int_{\Gamma_i} -\frac{\dot{m}}{\rho_l} n \cdot n_e ds + \int_{\overline{\Omega_l}} v \cdot n_e ds + \int_{\Gamma_{b,i} \cap \Omega_l} v \cdot n_e ds \quad (\text{IV.2.1 eq51})$$

$$= -\partial_t vol.(\Omega_v) = - \int_{\Gamma_i} \frac{\dot{m}}{\rho_v} n \cdot n_e ds - \int_{\overline{\Omega_v}} v \cdot n_e ds + \int_{\Gamma_{b,i} \cap \Omega_v} v \cdot n_e ds \quad (\text{IV.2.1 eq52})$$

Les intégrales sur $\Gamma_{b,i}$ n'ont pas de contrepartie discrète exacte (le domaine d'intégration est une fraction de maille qui change au cours du pas de temps), sauf si la vitesse $v \cdot n_e$ est explicitement nulle (condition aux limites de paroi fixe par exemple). Ainsi, le bilan discret de volume des phases est exact seulement si les lignes de contact sont situées sur des bords fermés du domaine. Supposons pour la suite que c'est le cas.

Expression du bilan de volume discret d'une interface

En multipliant $\partial_t vol.(\Omega_l)$ par ρ_l et $\partial_t vol.(\Omega_v)$ par ρ_v et en sommant, on a :

$$\rho_v \partial_t vol.(\Omega_v) - \rho_l \partial_t vol.(\Omega_v) = \rho_l \int_{\overline{\Omega_l}} v \cdot n_e ds + \rho_v \int_{\overline{\Omega_v}} v \cdot n_e ds \quad (\text{IV.2.1 eq53})$$

Enfin, en utilisant la propriété [IV.2.1 eq42](#) :

$$\partial_t vol.(\Omega_v) = \int_{\overline{\Omega_i}} V' d\Omega \quad (\text{IV.2.1 eq54})$$

Comme les vitesses discrètes sont constantes au cours d'un pas de temps Δt , on a :

$$\Delta vol.(\Omega_v) = \Delta t \int_{\overline{\Omega_i}} V' d\Omega \quad (\text{IV.2.1 eq55})$$

Pour assurer la conservation du volume des phases, il faut donc s'assurer que la variation de volume géométrique de chaque portion d'interface connexe au cours du pas de temps est égale à l'intégrale discrète de

V' . Pour cela, on attribue à chaque noeud d'interface une variation de volume V'_i , à l'aide des relations de passage conservatives. Le déplacement de chaque noeud devra alors contribuer à la variation de volume qui lui est associée.

Bilan de volume d'une interface

On a obtenu une condition géométrique sur le déplacement des interfaces et les vitesses sur le maillage fixe pour respecter le bilan de masse exact des phases. Cette condition utilise uniquement la grandeur locale V' pour le maillage fixe. On a essentiellement utilisé deux ingrédients :

- le bilan exact de volume sur le champ de vitesse discret dans les phases, procuré par le schéma de projection (équation IV.2.1 eq39),

- et la répartition conservative des flux de masse \dot{m} , sur les volumes contenant les interfaces.

Le bilan à partir de la variation de volume V' est semi-local : les V' et le déplacement de chaque noeud ne dépendent que des vitesses eulériennes sur un voisinage du noeud. On n'a cependant pas de propriété de bilan local. En particulier, on ne peut pas écrire l'équation idéale suivante sur la variation de l'indicatrice au cours du pas de temps, qui est l'équivalent discret de l'équation IV.2.1 eq40 :

$$\Delta \int_{\Omega} I d\Omega = - \frac{\Delta t}{\rho_v - \rho_l} \int_{\partial\Omega} \rho v \cdot n ds \quad (\text{IV.2.1 eq56})$$

Cette propriété très intéressante nécessiterait plusieurs ingrédients dont au moins les deux suivants :

- une expression exacte de V' , notamment dans l'expression (le calcul "exact" est à la base des méthodes VOF, et sa construction est loin d'être triviale),

- un transport des interfaces qui respecte exactement la variation de volume V' élément par élément (il faudrait pour cela que l'interface ait suffisamment de noeuds, au moins un par élément, et cette condition est contradictoire avec le critère de stabilité de la tension de surface qui impose exactement l'inverse).

En fait, une telle propriété oblige pratiquement à utiliser la formulation VOF et même ainsi, elle est difficile à obtenir (voir [34]). Cet algorithme présente cependant deux avantages par rapport à une correction globale telle que celle mise en oeuvre par Juric [90] :

- on obtient non seulement une conservation globale exacte du volume, mais aussi une conservation "quasi-locale",

- il tient implicitement compte des flux de masse aux entrées du domaine et des variations de volume des autres interfaces du domaine.

IV.3

Modèle à interface diffuse incompressible

3.1 Présentation du modèle

Le modèle *Phase Field* est un modèle à interface diffuse dédié à la simulation numérique directe d'écoulements diphasiques incompressibles de fluides non miscibles. Dans les modèles à interface diffuse, les interfaces séparant les phases du système ne sont pas modélisées comme des surfaces de discontinuité mais comme des zones volumiques de transition à travers lesquelles toutes les grandeurs physiques varient de manière continue. Ces modèles sont basés sur l'introduction d'un paramètre d'ordre caractéristique des phases. Dans le modèle présenté ici, ce paramètre d'ordre est représentatif du taux de présence volumique de l'une des phases, que l'on note φ . Afin de prendre en compte les phénomènes capillaires, importants en simulation numérique directe, l'énergie du système est supposée dépendre de φ mais également de $\nabla\varphi$ sous la forme suivante :

$$E = W(\varphi) + \frac{\alpha}{2} (\nabla\varphi)^2 \quad (\text{IV.3.1 eq1})$$

où α est appelée coefficient de capillarité interne. La fonction $W(\varphi)$ est une fonction double-puit dont la forme la plus simple est :

$$W(\varphi) = \beta\varphi^2(1-\varphi)^2 \quad (\text{IV.3.1 eq2})$$

où β est une constante caractéristique du modèle.

Les coefficients α et β sont caractéristiques de la tension interfaciale σ et de l'épaisseur h des interfaces. En effet, on a les relations suivantes :

$$\sigma = \frac{\sqrt{2\alpha\beta}}{6} \quad (\text{IV.3.1 eq3})$$

$$h = 4\sqrt{\frac{\alpha}{2\beta}} \quad (\text{IV.3.1 eq4})$$

La tension interfaciale σ est une caractéristique des fluides en présence et l'épaisseur h est en général choisie égale à environ 4 ou 5 fois la taille des mailles.

Par application de second principe de la thermodynamique, on peut montrer que les équations du mouvement sont les suivantes :

$$\frac{d\varphi}{dt} = \nabla \cdot \left[\kappa(\varphi) \nabla \left(\tilde{\mu} + \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{u^2}{2} \right) \right] \quad (\text{IV.3.1 eq5})$$

$$\rho(\varphi) \frac{du}{dt} = -\nabla P + \tilde{\mu} \nabla \varphi + \rho(\varphi) g + \nabla \cdot \tau \quad (\text{IV.3.1 eq6})$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (\text{IV.3.1 eq7})$$

où

$$\tilde{\mu} = \frac{dW}{d\varphi} - \nabla \cdot (\alpha \nabla \varphi) \quad (\text{IV.3.1 eq8})$$

est le potentiel chimique généralisé et

$$\rho(\varphi) = \rho_1 + \varphi(\rho_2 - \rho_1) \quad (\text{IV.3.1 eq9})$$

est la masse volumique, ρ_1 et ρ_2 représentant la masse volumique des phase correspondant à $\varphi = 0$ et $\varphi = 1$ respectivement.

Dans le système précédent, d/dt représente la dérivé convective, P est la pression et τ le tenseur des contraintes visqueuses.

L'équation d'évolution de φ (équation IV.3.1 eq5) est appelée **équation de Cahn-Hilliard**. Le coefficient κ apparaissant dans cette équation est appelé **mobilité** et peut dépendre de φ de manière quadratique :

$$\kappa(\varphi) = a\kappa_0\varphi(1 - \varphi) \quad (\text{IV.3.1 eq10})$$

où a et κ_0 sont des constantes.

A noter que le terme $\tilde{\mu}\nabla\varphi$ apparaissant dans l'équation de bilan de quantité de mouvement (équation IV.3.1 eq6) représente les **forces capillaires**.

Changement de variable

Pour des raisons de simplicité de programmation, l'équation de Cahn-Hilliard est considérée comme une équation de convection-diffusion de concentration. Le second membre de l'équation de Cahn-Hilliard (équation IV.3.1 eq5) est considéré comme un terme source, de même que le terme en $\tilde{\mu}\nabla\varphi$ de l'équation de bilan de quantité de mouvement (équation IV.3.1 eq6).

Pour des raisons de symétrie, la "concentration", *i.e.* l'inconnue de l'équation de Cahn-Hilliard, est définie par :

$$c = \varphi - \frac{1}{2} \quad (\text{IV.3.1 eq11})$$

c varie alors de $-1/2$ à $+1/2$ à la traversée d'une interface. Les relations de fermeture $W(\varphi)$, $\rho(\varphi)$ et $\kappa(\varphi)$ doivent donc être modifiées en conséquence :

$$W(\varphi) = \beta \left(c - \frac{1}{2}\right)^2 \left(c + \frac{1}{2}\right)^2 \quad (\text{IV.3.1 eq12})$$

$$\rho(\varphi) = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2} + c(\rho_2 - \rho_1) \quad (\text{IV.3.1 eq13})$$

$$\kappa(\varphi) = a\kappa_0 \left(\frac{1}{2} + c\right) \left(\frac{1}{2} - c\right) \quad (\text{IV.3.1 eq14})$$

Approximation de Boussinesq

Le modèle général peut être dégradé en utilisant l'**approximation de Boussinesq** dans laquelle la masse volumique est supposée constante mis à part dans le terme de gravité où elle est linéarisée. Cette approximation est celle classiquement utilisée dans **TrioCFD** et les variables servant à la résolution numérique du système d'équations ainsi obtenu sont celles classiquement utilisées dans **TrioCFD**. En particulier, la "pression" utilisée pour la résolution couplée des équations de bilan de quantité de mouvement et de divergence nulle de la vitesse est en fait $(P/\rho_m - gz)$, où $\rho_m = (\rho_1 + \rho_2)/2$ est la masse volumique moyenne et z la coordonnée verticale (suivant la direction de la gravité). Etant donnée la forme IV.3.1 eq13 de la fonction $\rho(c)$, le terme source lié à la gravité, a l'expression suivante :

$$\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_m} cg \quad (\text{IV.3.1 eq15})$$

Cette forme permet de définir la valeur du paramètre **beta_co** (*i.e.* $(\rho_2 - \rho_1)/\rho_m$).

Formes du bilan de quantité de mouvement

Différentes formes du bilan de quantité de mouvement sont possibles et quatre sont actuellement disponibles. Si ces formes sont équivalentes au niveau continu, elles peuvent potentiellement donner des résultats différents du fait de la discrétisation spatiale et de la résolution numérique. Ces formes modifient la définition de la "pression" utilisée pour la résolution de l'équation de Poisson lors de la résolution du bilan de quantité de mouvement (cf paragraphe 3.2). Les formes disponibles sont les suivantes :

Forme 1

$$-\nabla P + \tilde{\mu}\nabla c = -\nabla(P - \tilde{\mu}c) - c\nabla\tilde{\mu} \quad (\text{IV.3.1 eq16})$$

Forme 2

$$-\nabla P + \tilde{\mu} \nabla c = -\nabla (P + W + c \nabla \cdot (\alpha \nabla c)) + c \nabla [\nabla \cdot (\alpha \nabla c)] \quad (\text{IV.3.1 eq17})$$

Forme 3

$$-\nabla P + \tilde{\mu} \nabla c = -\nabla \left(P + W - \alpha \frac{(\nabla c)^2}{2} + c \nabla \cdot (\alpha \nabla c) \right) + c \nabla [\nabla \cdot (\alpha \nabla c)] - \nabla \left(\alpha \frac{(\nabla c)^2}{2} \right) \quad (\text{IV.3.1 eq18})$$

Forme 4

$$-\nabla P + \tilde{\mu} \nabla c = -\nabla (P + W) - \nabla \cdot (\alpha \nabla c) \nabla c \quad (\text{IV.3.1 eq19})$$

La première forme (équation IV.3.1 eq16) est en général préférée aux autres, plus historiques. Cette forme présente en effet l'avantage numérique d'avoir un terme source nul à l'équilibre, ce dernier étant en particulier caractérisé par la condition $\tilde{\mu} = cste$. En revanche, la "pression" ($P - \tilde{\mu}c$ est constante à la traversée d'une interface courbe à l'équilibre, ce qui ne correspond pas à la pression habituelle des physiciens ; la pression habituelle du physicien est en fait, P).

3.2 Résolution numérique

Le système d'équations IV.3.1 eq5 à IV.3.1 eq10 est résolu numériquement en deux étapes principales :

1. résolution de l'équation de Cahn-Hilliard (équation IV.3.1 eq5), ce qui permet de déterminer φ^{n+1} et $\tilde{\mu}^{n+1}$;
2. résolution de l'équation de bilan de quantité de mouvement (équation IV.3.1 eq6) couplée à la contrainte (IV.3.1 eq7) par une méthode de projection qui permet de déterminer u^{n+1} et P^{n+1} .

La résolution de l'équation de Cahn-Hilliard peut se faire soit de manière explicite, soit de manière implicite. La résolution implicite est effectuée soit par une méthode du point fixe soit par une méthode de Newton-Krylov et permet essentiellement d'augmenter le pas de temps de stabilité (parfois de manière significative). Les schémas de discrétisation en temps des équations de Cahn-Hilliard et de bilan de quantité de mouvement peuvent être différents.

Equation de Cahn-Hilliard

L'avancée en temps du champ de c s'effectue en deux grandes sous-étapes :

1. détermination de $c^{n+1/2}$ en tenant compte uniquement du membre de droite de l'équation de Cahn-Hilliard ; cette étape peut être résolue soit de manière explicite, soit de manière implicite.
2. détermination de c^{n+1} en prenant en compte le terme de convection ; c'est pour cette seconde étape que l'on peut choisir le schéma en temps (Euler, Runge-Kutta, etc.).

La résolution explicite de la première sous-étape permet de résoudre l'équation suivante :

$$\frac{c^{n+1/2} - c^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \left[\kappa(c^n) \nabla \left(\tilde{\mu}^n + \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{(u^n)^2}{2} \right) \right] \quad (\text{IV.3.2 eq20})$$

La résolution implicite mérite plus d'explications car elle est basée sur l'utilisation d'une approximation semi-implicite de $\tilde{\mu}$. Pour tout champ ϕ , on note :

$$\phi^{n+1/4} = \theta \phi^{n+1/2} + (1 - \theta) \phi^n, \text{ avec } \theta \in [0; 1] \quad (\text{IV.3.2 eq21})$$

Pour des raisons de stabilité et de précision, la valeur de θ est imposée à 0.6.

$$\frac{c^{n+1/2} - c^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \left[\kappa(c^n) \nabla \left(\tilde{\mu}^{n+1/4} + \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{(u^n)^2}{2} \right) \right] \quad (\text{IV.3.2 eq22})$$

avec

$$\tilde{\mu}^{n+1/4} = W(c^{1/4}) + \nabla \cdot (\alpha \nabla c^{n+1/4}) \quad (\text{IV.3.2 eq23})$$

Le système d'équations [IV.3.2 eq22](#) - [IV.3.2 eq23](#) est non linéaire (du fait de la non linéarité de $W(c)$) et est résolu de manière itérative soit par une méthode du point fixe, soit par une méthode de Newton-Krylov (également appelée méthode GMRES non linéaire). A noter que, pour des raisons de simplification du système non linéaire, la mobilité est toujours déterminée au pas de temps n et non pas au pas de temps $(n + 1)$.

Equation de bilan de quantité de mouvement

L'équation de bilan de quantité de mouvement, couplée à la contrainte de divergence nulle de la vitesse, est résolue par une méthode de projection dont on rappelle ici les grandes étapes. Pour simplifier ici, on considère uniquement un schéma d'Euler explicite et l'on met l'équation de bilan de quantité de mouvement sous la forme suivante :

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla P + F \quad (\text{IV.3.2 eq24})$$

où le vecteur F représente toutes les forces autres que celle de pression. Cette équation est discrétisée de la manière suivante :

$$\rho^n \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = -\nabla P^{n+1} + F \quad (\text{IV.3.2 eq25})$$

où le pas de temps auquel est évalué F n'est pas précisé car cela peut dépendre des problèmes traités. Cependant, les dépendances en u de F doivent être explicites.

Après division par ρ^n application de l'opérateur de divergence et prise en compte de la condition [IV.3.1 eq7](#), on obtient l'équation de Poisson sur la pression suivante :

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho^n} \nabla P^{n+1} \right) = \nabla \cdot \left(\frac{F}{\rho^n} \right) \quad (\text{IV.3.2 eq26})$$

La matrice en pression associée à la discrétisation de cette équation dépend du champ ρ^n et doit par conséquent être assemblée à chaque pas de temps. C'est la raison pour laquelle les méthodes liées aux assembleurs ont dues être modifiées.

3.3 Modification of the Phase_field baltik : generalization of the closure laws for the Navier-Stokes/Cahn-Hilliard binary model

Since version v1.8.3, the baltik Phase Field has had changes in order to generalize the thermodynamic landscape, the density law and so on of this binary Cahn-Hilliard model coupled with the Navier-Stokes equations (isothermal).

Chemical potential function $\frac{dW}{dc}$

The chemical potential function $\frac{dW}{dc}$ is associated with the homogeneous contribution W (so-called “thermodynamic landscape”) function of $c = \varphi - \frac{1}{2}$ to the energy density E .

TrioCFD v1.8.2 : the potential has the following prescribed form

$$\frac{dW}{dc} = \beta \left(4c \left(c - \frac{1}{2} \right) \left(c + \frac{1}{2} \right) \right) \quad (\text{IV.3.3 eq27})$$

Modification since 1.8.3 : the potential is written as :

$$\frac{dW}{dc} = \beta \times \begin{cases} 4c \left(c - \frac{1}{2} \right) \left(c + \frac{1}{2} \right) & \text{if } \text{Op}_W = \text{default} \\ \mathbf{f}_W & \text{if } \text{Op}_W = \text{fonction } \mathbf{f}_W \end{cases} \quad (\text{IV.3.3 eq28})$$

where \mathbf{f}_W is a univariate function (as read by the `lire_f` of the `Table` class of TRUST) whose variable c should be referred as `var` e.g. `(4.*val*(val+0.5)*(val-0.5))`.

Syntax evolution :

Input file excerpt in v1.8.2	Input file excerpt since v1.8.3
<pre> Convection_diffusion_Phase_field { ... sources { Source_Con_Phase_field { ... beta \$\beta\$... } } ... } </pre>	<pre> Convection_diffusion_Phase_field { ... sources { Source_Con_Phase_field { ... beta \$\beta\$ potentiel_chimique { Op\$_W\$ } ... } } ... } </pre>

Kinetic parameter (so-called “mobility”) κ

The kinetic parameter (so-called “mobility”) κ that is either a constant or a function of c in the Cahn-Hilliard equation.

TrioCFD v1.8.2 : the mobility is written as :

$$\kappa = \kappa_0 \times \begin{cases} 1 & \text{if Op}_K = \text{non} \\ a \left(\frac{1}{2} + c \right) \left(\frac{1}{2} - c \right) & \text{if Op}_K = \text{oui} \end{cases} \quad (\text{IV.3.3 eq29})$$

Modification since v1.8.3 : the mobility is written as :

$$\kappa = \kappa_0 \times \begin{cases} 1 & \text{if Op}_K = \text{non} \\ a \left(\frac{1}{2} + c \right) \left(\frac{1}{2} - c \right) & \text{if Op}_K = \text{default} \\ af_K & \text{if Op}_K = \text{fonction f}_K \end{cases} \quad (\text{IV.3.3 eq30})$$

where f_K is a univariate function (as read by the `lire_f` of the `Table` class of TRUST) whose variable c should be referred as `var`.

Syntax evolution :

Input file excerpt in v1.8.2	Input file excerpt since v1.8.3
<pre> Convection_diffusion_Phase_field { ... sources { Source_Con_Phase_field { ... kappa \$\kappa_0\$ kappa_variable Op\$_K\$ multiplicateur_de_kappa \$a\$... } } ... } </pre>	<pre> Convection_diffusion_Phase_field { ... sources { Source_Con_Phase_field { ... kappa \$\kappa_0\$ kappa_variable { Op\$_K\$ } multiplicateur_de_kappa \$a\$... } } ... } </pre>

Mass density ρ

The mass density ρ is described as a function of c .

TrioCFD v1.8.2 : the mass density has the following prescribed form :

$$\rho = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2} + c \frac{\rho_2 - \rho_1}{2} \quad (\text{IV.3.3 eq31})$$

Modification since v1.8.3 : different mass density formulation are available depending if the Boussinesq approximation (input parameter $\text{Op}_{\text{Boussinesq}}$) is made ($\text{Op}_{\text{Boussinesq}} = \text{oui}$) or not ($\text{Op}_{\text{Boussinesq}} = \text{non}$)

— if $\text{Op}_{\text{Boussinesq}} = \text{oui}$, it can be written in terms of the fluid properties as :

$$\rho = \rho_0 (1 + \beta_c c) \quad (\text{IV.3.3 eq32})$$

— otherwise, for both $\text{Op}_{\text{Boussinesq}} = \text{oui}$ and $\text{Op}_{\text{Boussinesq}} = \text{non}$, it can take the following prescribed form :

$$\rho = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2} + c \frac{\rho_2 - \rho_1}{2} \quad (\text{IV.3.3 eq33})$$

— or be of the general form :

$$\rho = F_\rho \quad (\text{IV.3.3 eq34})$$

where F_ρ is a TRUST input field giving $\frac{d\rho}{dc}$.

Syntax evolution :

Input file excerpt in v1.8.2	Input file excerpt since v1.8.3
- if $\text{Op}_{\text{Boussinesq}} = \text{oui}$	
Not available	<pre> Lire fluide { ... rho Champ_Uniforme 1 \$\rho_0\$ beta_co Champ_Uniforme 1 \$\beta_c\$... } ... Navier_Stokes_phase_field { ... approximation_de_boussinesq oui { } ... }</pre>
- whatever the value of $\text{Op}_{\text{Boussinesq}}$	
<pre> Convection_diffusion_Phase_field { ... rho_1 \$\rho_1\$ rho_2 \$\rho_2\$... }</pre>	<pre> Convection_diffusion_Phase_field { ... rho_1 \$\rho_1\$ rho_2 \$\rho_2\$... }</pre>
- if ρ has a general form	
Not available	<pre> Navier_Stokes_phase_field { ... approximation_de_boussinesq Op\$_{\text{Boussinesq}}\$ { rho_fonc_c F\$_\rho\$ F\$_{\rho'}\$ } ... }</pre>

Dynamic viscosity μ function of c

The dynamic viscosity μ is either constant or described as a function of c . The dynamic viscosity (and actually the kinematic viscosity ν) is treated differently depending on the input parameters `OpBoussinesq` (Boussinesq approximation) and the `Opconstant μ` (constant dynamic viscosity approximation) that can both be set to `oui` (activated) or `non` (deactivated) :

```
Navier_Stokes_phase_field {
  ...
  approximation_de_boussinesq Op$_{\text{Boussinesq}}$
  viscosite_dynamique_constant Op$_{\text{constant } \mu}$
  ...
}
```

TrioCFD v1.8.2 :

- if `OpBoussinesq = oui` or `Opconstant μ = oui`, the dynamic viscosity is constant and given by :

$$\mu = \mu_0 \quad (\text{IV.3.3 eq35})$$

- if `OpBoussinesq = non` and `Opconstant μ = non`, the dynamic viscosity has the following prescribed form :

$$\mu = \frac{\mu_1 + \mu_2}{2} + c \frac{\mu_2 - \mu_1}{2} \quad (\text{IV.3.3 eq36})$$

Modification since v1.8.3 :

- if `OpBoussinesq = oui` or `Opconstant μ = oui`, the dynamic viscosity is constant and given by :

$$\mu = \mu_0 \quad (\text{IV.3.3 eq37})$$

- if `OpBoussinesq = non` and `Opconstant μ = non`, the dynamic viscosity can take the following prescribed form :

$$\mu = \frac{\mu_1 + \mu_2}{2} + c \frac{\mu_2 - \mu_1}{2} \quad (\text{IV.3.3 eq38})$$

- or be of the general form :

$$\mu = F_\mu \quad (\text{IV.3.3 eq39})$$

where F_μ is a TRUST input field associated1.

Syntax evolution :

Input file excerpt in v1.8.2	Input file excerpt since v1.8.3
- if $\text{Op}_{\text{Boussinesq}} = \text{oui}$ or $\text{Op}_{\text{constant } \mu} = \text{oui}$	
<pre> Lire fluide { ... mu Champ_Uniforme 1 \$\mu_0\$... } </pre>	<pre> Lire fluide { ... mu Champ_Uniforme 1 \$\mu_0\$... } </pre>
- if $\text{Op}_{\text{Boussinesq}} = \text{non}$ and $\text{Op}_{\text{constant } \mu} = \text{non}$	
<pre> Convection_diffusion_Phase_field { ... mu_1 \$\mu_1\$ mu_2 \$\mu_2\$... } </pre>	<pre> Navier_Stokes_phase_field { ... viscosite_dynamique_constante non { mu_1 \$\mu_1\$ mu_2 \$\mu_2\$ } ... } </pre>
- if μ has a general form	
Not available	<pre> Navier_Stokes_phase_field { ... viscosite_dynamique_constante non { rho_fonc_c F\$_\mu\$ } ... } </pre>

V. The Arbitrary Lagrangian-Eulerian Method

V.1

The Arbitrary Lagrangian-Eulerian Method

To determine the flow of a fluid, it is necessary to describe the kinematics of all its material particles throughout time. To do so, one can adopt either an Euler description of motion, in which a fluid particle is identified by its initial position, or a Lagrange description of motion, in which a fluid particle is identified by its instantaneous position. Both descriptions are totally equivalent, leading to different forms of the Navier-Stokes equations that can be discretized on a stationary mesh grid (Euler) or a mesh grid that follows the motion of the fluid particles (Lagrange). In both cases, the mesh grids do not account for the motion of the boundaries, which makes the numerical simulations of the related Navier-Stokes equations delicate. To overpass this problem, several approaches, such as the immersed boundary methods [80, 82, 81], or the Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) method [26, 41, 63] have been developed.

Here, we rely on the ALE method. In the ALE approach, the fluid flow is computed in a domain that is deformed in order to follow the movement of the fluid-solid interface. It provides a hybrid description not associated with the fluid particles and the laboratory coordinates. We associate the description with a moving imaginary mesh that follows the fluid domain. The motion of the ALE computational mesh is independent of the material motion, the approach treats the mesh as a frame that moves with the arbitrary velocity \mathbf{v}_{ALE} . In the Eulerian approach, this velocity is zero, whereas it is equal to the velocity of the fluid particles in the Lagrangian approach. But in the ALE method, this velocity is equal to neither zero nor the velocity of the fluid particles; it varies smoothly and arbitrarily between both of them. This method is a Lagrangian description in zones and directions near solid, and Eulerian elsewhere.

1.1 ALE kinematic description

In the ALE kinematic description, neither the Lagrangian (material frame) configuration $R_{\mathbf{X}}$ (coordinates are denoted by \mathbf{X}), nor Eulerian (spatial frame) configuration $R_{\mathbf{x}}$ (coordinates are denoted \mathbf{x}) is taken as the reference. A third domain is considered, the referential configuration (ALE frame) $R_{\boldsymbol{\xi}}$ in which the reference coordinates (also called mixed coordinates) $\boldsymbol{\xi}$ allows the identification of the grid points [26].

Fig. V.1.1 illustrates this configurations and the transformations which relate them. The referential domain is mapped into the material domain by Ψ and into the spatial domain by Φ . The mapping from the material domain to the referential domain, is representing by :

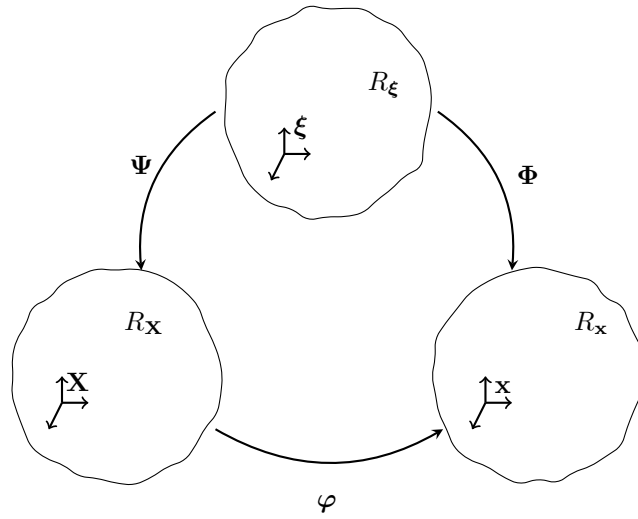
$$\begin{aligned} \Psi^{-1} : R_{\mathbf{X}} \times [t_0, t_{end}[&\longrightarrow R_{\boldsymbol{\xi}} \times [t_0, t_{end}[, \\ (\mathbf{X}, t) &\longmapsto \Psi^{-1}(\mathbf{X}, t) = (\boldsymbol{\xi}, t), \end{aligned} \tag{V.1.1 eq1}$$

and his gradient is :

$$\frac{\partial \Psi^{-1}}{\partial (\mathbf{X}, t)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbf{X}} & \mathbf{v}_{ALE} \\ \mathbf{0}^T & 1 \end{pmatrix}, \tag{V.1.1 eq2}$$

where $\mathbf{0}^T$ is a null row-vector and the velocity \mathbf{v}_{ALE} is defined as :

$$\mathbf{v}_{ALE}(\mathbf{X}, t) = \left. \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t), \tag{V.1.1 eq3}$$

FIGURE V.1.1 – Lagrangian \mathbf{X} , Eulerian \mathbf{x} , ALE $\boldsymbol{\xi}$ frame references and transformations relating them.

where the index in the partial derivatives indicates the variables that remain constant during the derivation. The Jacobian J determinant :

$$J(\mathbf{X}, t) = \det \left(\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbf{X}} \Big|_t \right) (\mathbf{X}, t), \quad (\text{V.1.1 eq4})$$

provides a link between the referential coordinates $\boldsymbol{\xi}$ and the material coordinates \mathbf{X} . It also relates the current volume element dV in the reference frame and the associated volume element dV_0 in the initial configuration :

$$dV(\boldsymbol{\xi}, t) = J(\mathbf{X}, t) dV_0(\boldsymbol{\xi}, t). \quad (\text{V.1.1 eq5})$$

The time rate of change of the Jacobien is given by [25] :

$$\frac{\partial J}{\partial t} \Big|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) = J(\mathbf{X}, t) \nabla \cdot \mathbf{v}_{ALE}(\boldsymbol{\xi}, t). \quad (\text{V.1.1 eq6})$$

1.2 ALE form of governing equations

In order to relate the time derivative in the material and referential domains, let a scalar physical quantity be described by $f(\mathbf{X}, t)$ in the material description and by $f^*(\boldsymbol{\xi}, t)$ in the referential domain. Using the mapping $\boldsymbol{\Psi}^{-1}$ (V.1.1 eq1), the transformation from the material description f of the scalar physical quantity to the referential description f^* can be related as :

$$f(\mathbf{X}, t) = f^*(\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{X}, t), t) \quad \text{or} \quad f = f^* \circ \boldsymbol{\Psi}^{-1}, \quad (\text{V.1.2 eq7})$$

and its gradient is given by :

$$\frac{\partial f}{\partial (\mathbf{X}, t)} (\mathbf{X}, t) = \frac{\partial f^*}{\partial (\boldsymbol{\xi}, t)} (\boldsymbol{\xi}, t) \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}^{-1}}{\partial (\mathbf{X}, t)} (\mathbf{X}, t), \quad (\text{V.1.2 eq8})$$

which is amenable to the matrix form :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \quad \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\mathbf{X}} \right) = \left(\frac{\partial f^*}{\partial \boldsymbol{\xi}} \quad \frac{\partial f^*}{\partial t} \Big|_{\boldsymbol{\xi}} \right) \begin{pmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \mathbf{X}} & \mathbf{v}_{ALE} \\ \mathbf{0}^T & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{V.1.2 eq9})$$

after block multiplication, it leads to the fundamental ALE relation between the material and the referential time derivatives :

$$\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) = \frac{\partial f^*}{\partial t} \Big|_{\boldsymbol{\xi}} (\boldsymbol{\xi}, t) + \mathbf{v}_{ALE} \frac{\partial f^*}{\partial \boldsymbol{\xi}} (\boldsymbol{\xi}, t) \quad (\text{V.1.2 eq10})$$

Using the identity $\nabla \cdot (f^* \otimes \mathbf{v}_{ALE}) = f^* \nabla \cdot \mathbf{v}_{ALE} + \mathbf{v}_{ALE} \nabla f^*$, equation (V.1.1 eq6) results is :

$$J \nabla \cdot (f^* \otimes \mathbf{v}_{ALE}) = f^* \left. \frac{\partial J}{\partial t} \right|_{\xi} + J \mathbf{v}_{ALE} \cdot \nabla f^*. \quad (\text{V.1.2 eq11})$$

Finally, from equation (V.1.2 eq11), results :

$$\left. \frac{\partial(Jf)}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} (\mathbf{X}, t) = J(\mathbf{X}, t) \left(\left. \frac{\partial f^*}{\partial t} \right|_{\xi} + \nabla \cdot (f^* \otimes \mathbf{v}_{ALE}) \right) (\xi, t). \quad (\text{V.1.2 eq12})$$

By applying (V.1.2 eq12) to the Navier-Stokes equations, we obtain the local form of the Navier-Stokes equations in a reference frame moving at an arbitrary velocity \mathbf{v}_{ALE} :

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial(J\mathbf{v})}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} (\mathbf{X}, t) = J(\mathbf{X}, t) \left(\nu \Delta \mathbf{v} - \nabla \cdot ((\mathbf{v} - \mathbf{v}_{ALE}) \otimes \mathbf{v}) - \frac{1}{\rho} \nabla p \right) (\xi, t), \\ \nabla \cdot \mathbf{v}(\xi, t) = 0. \end{cases} \quad (\text{V.1.2 eq13})$$

The ALE method gives a formulation of the Navier-Stokes equations in a conservative form with a modification of the transport velocity by the grid's velocity. Furthermore, we can remark that both purely Lagrangian or Eulerian mesh description are contained in the ALE form as particular cases. Chosen $\Psi = \mathbf{I}$ it implies $\mathbf{X} = \xi$ and $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{ALE}$ which results into a Lagrangian description ; the Eulerian description corresponds to $\Phi = \mathbf{I}$ which is equivalent to $\mathbf{x} = \xi$ and it implies $\mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0}$.

In the ALE framework, the choice of appropriate fluid mesh velocity is important. This arbitrary mesh velocity keeps the movement of the meshes under control according to the physical problem, and it depends on the numerical simulations. In general, a new elasticity equation is solved. For moderate deformations, one can pose an auxiliary Laplace problem that is known as harmonic mesh motion [29] :

$$\begin{cases} \Delta \mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0} & \text{in the fluid domain,} \\ \mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{v}_S & \text{at a solid interface,} \\ \mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0} & \text{at a free surface,} \end{cases} \quad (\text{V.1.2 eq14})$$

from which the kinematics of the mesh grid is updated, i.e. $\mathbf{x}^{new} = \mathbf{x}^{old} + \Delta t \mathbf{v}_{ALE}$.

V.2

Principle of the ALE numerical method

To determine the flow of a fluid, it is necessary to describe the kinematics of all its material particles throughout time. To do so, one can adopt either an Euler description of motion, in which a fluid particle is identified by its instantaneous position, or a Lagrange description of motion, in which a fluid particle is identified by its initial position. Both descriptions are totally equivalent, leading to different forms of the Navier-Stokes equations that can be discretized on a stationary mesh grid (Euler) or a mesh grid that follows the motion of the fluid particles (Lagrange). In both cases, the mesh grids do not account for the motion of the boundaries, which makes the numerical simulations of the related Navier-Stokes equations delicate.

To overpass this problem, several approaches, such as the immersed boundary methods [80, 82, 81], or the Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) method [26, 41, 63] have been developed. In the ALE approach, a fluid particle is identified by its position relative to a frame moving with a nonuniform velocity \mathbf{v}_{ALE} . In this new frame of reference, the Navier-Stokes equations write

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (\text{V.2.0 eq1a})$$

$$\frac{\partial J\mathbf{v}}{\partial t} = J \left(\nu \Delta \mathbf{v} - \nabla \cdot ((\mathbf{v} - \mathbf{v}_{ALE}) \otimes \mathbf{v}) - \frac{1}{\rho} \nabla p \right), \quad (\text{V.2.0 eq1b})$$

with J the Jacobian of the transformation between the ALE and the Lagrange descriptions. The ALE method is actually a hybrid description between the Euler and the Lagrange descriptions, both of them corresponding to the particular cases $\mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0}$ and $\mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{v}_{particle}$, respectively.

In the ALE framework, the choice of \mathbf{v}_{ALE} is arbitrary as long as the deformation of the mesh grid remains under control. For moderate deformations, \mathbf{v}_{ALE} is usually defined as the solution of an auxiliary Laplace problem, see [29] :

$$\Delta \mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0} \quad \text{in the fluid domain,} \quad (\text{V.2.0 eq2a})$$

$$\mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{v}_{solid} \quad \text{at a solid interface,} \quad (\text{V.2.0 eq2b})$$

$$\mathbf{v}_{ALE} = \mathbf{0} \quad \text{at a free surface,} \quad (\text{V.2.0 eq2c})$$

from which the kinematics of the mesh grid is updated, i.e. $\mathbf{x}^{new} = \mathbf{x}^{old} + \Delta t \mathbf{v}_{ALE}$.

VI. Sensitivity equation method for the Navier–Stokes equations applied to uncertainty propagation

VI.1

Introduction

Sensitivity analysis (SA) studies how changes in the input of a model affect the output, and it is essential for many engineering applications, such as uncertainty quantification, optimal design, and to answer *what if* questions, i.e. what happens to the solution of the model if the input parameters change. These tasks can be performed in many different ways, depending on the nature of the model considered. In this work, we consider systems that can be modelled with partial differential equations (PDEs). The sensitivity variable itself is defined as the derivative of the state (i.e., the output of the model) with respect to the parameters of interest.

In the framework of PDEs, one can distinguish two main classes of methods : the *differentiate-then-discretise* methods and the *discretise-then-differentiate* methods. As the names say, in the first case the state model is formally differentiated with respect to the parameter of interest, providing an analytical sensitivity system which can then be discretised with the most appropriate numerical scheme. The second class of methods swaps the two steps which, in the general case, are not commutative. A detailed comparison between the two classes of methods can be found in [47] for optimisation problems. In this work, we focus on the first class, and, in particular, on the continuous sensitivity equation method [7, 33, 32, 12, 39].

The main aim of this work is to give an estimate of the variance of the solution of the Navier–Stokes equations when there are uncertain parameters and then to use the estimated variance to compute confidence intervals. This goes under the name of forward uncertainty propagation, which is part of the broader field of uncertainty quantification (UQ). Many strategies and techniques have been proposed in the literature to tackle UQ problems, particularly in the case of PDEs models : Monte Carlo method [86], polynomial chaos [98, 105, 58, 24], random space partition [1], to name but a few. A review of these methods applied to fluid dynamics problems can be found in [99].

Methods of uncertainty propagation based on SA are particularly efficient in terms of computational time if compared, for instance, to methods like Monte Carlo. However, since SA is based on Taylor expansions of the state variable with respect to the parameter of interest, these methods are intrinsically local [22] : they can be used only for random variables with a small variance. The Monte Carlo approach does not require this assumption ; however, it is not applicable for realistic unsteady test cases in $2D$ and $3D$, due to its high computational cost. In this work we propose an approach based on the sensitivity equation method : under the hypothesis of small variance of the input parameters, we can provide a first-order estimate of the variance of the solution at a reasonable computational cost.

VI.2

The physical model

In this section, we present the physical model as well as some stability estimates for it and its sensitivity.

2.1 The state equations

Let us consider the domain Ω in Figure VI.2.1 : it is a channel with walls on the top and the bottom and an obstacle of square section at distance x_D from the inflow boundary. The Navier-Stokes system and the boundary conditions for this domain are :

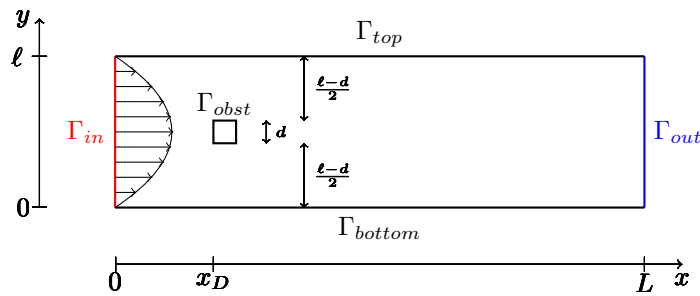


FIGURE VI.2.1 – Domain for the first test case.

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f} & \Omega, t > 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 & \Omega, t > 0, \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = 0 & \Omega, t = 0, \\ \mathbf{u} = -g(y)\mathbf{n} & \text{on } \Gamma_{in}, \\ \mathbf{u} = 0 & \text{on } \Gamma_w = \Gamma_{obst} \cup \Gamma_{top} \cup \Gamma_{bottom}, \\ (\nu \nabla \mathbf{u} - pI)\mathbf{n} = 0 & \text{on } \Gamma_{out}, \end{cases} \quad (\text{VI.2.1 eq1})$$

where $\mathbf{u} = (u^x, u^y)^t$ is the velocity, p is the pressure, \mathbf{f} the external force and $g(y)$ the prescribed inflow condition. The first equation models the conservation of the momentum and the second one the conservation of the mass. In the following, they will be referred to as, respectively, the momentum equation and the mass equation. We impose no slip boundary condition of the walls of the domain, a prescribed velocity at the inflow and a homogeneous Neumann boundary condition at the outflow.

2.2 The sensitivity equations

We now consider \mathbf{u} as a function of space, time and a scalar uncertain parameter a , $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t; a)$ and we write a formal Taylor expansion with respect to a :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t; a + \delta a) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{u}_k(\mathbf{x}, t; a) \delta a^k, \quad (\text{VI.2.2 eq2})$$

where $\mathbf{u}_0 = \mathbf{u}$ and the coefficient \mathbf{u}_k is the k -th derivative of \mathbf{u} with respect to a :

$$\mathbf{u}_k(\mathbf{x}, t; a) := \frac{d^k}{da^k} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t; a),$$

and it is called the k -th order sensitivity. To consider more than one parameter of interest, the sensitivity should be defined as the gradient of the state with respect to the vector of parameters and a multi-dimensional Taylor expansion would be necessary, but this is not treated in this work. A similar expansion can be done for the pressure p , and the data \mathbf{f} , \mathbf{d} , and g . In order to write the equations for the sensitivities, one can replace (VI.2.2 eq2) into (VI.2.1 eq1) and then factorise according to the powers of δa . For $k = 0$ we obtain the state system (VI.2.1 eq1). For $k = 1$, we obtain the first order sensitivity equations. In this work, we consider only first-order sensitivity and the notation $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_a$ will be employed. This choice is common [7, 33, 32, 12, 39] because in most cases first order sensitivities provide enough information. It is possible to consider higher order sensitivities if necessary, but this is not investigated in this work. The first order sensitivity equations, referred to as the sensitivity equations in short, are :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial_t \mathbf{u}_a - \nu \Delta \mathbf{u}_a + (\mathbf{u}_a \cdot \nabla) \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}_a + \nabla p_a = \mathbf{f}_a & \Omega, t > 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{u}_a = 0 & \Omega, t > 0, \\ \mathbf{u}_a(\mathbf{x}, 0) = 0 & \Omega, t = 0, \\ \mathbf{u}_a = -g_a(y) \mathbf{n} & \text{on } \Gamma_{in}, \\ \mathbf{u}_a = 0 & \text{on } \Gamma_w, \\ (\nu \nabla \mathbf{u}_a - p_a I) \mathbf{n} = 0 & \text{on } \Gamma_{out}, \end{array} \right. \quad (\text{VI.2.2 eq3})$$

where $\Gamma_w := \Gamma_{obst} \cup \Gamma_{top} \cup \Gamma_{bottom}$. These are known as the Oseen equations : an introduction on the subject can be found in [97], both for the theoretical and the numerical aspects. A similar problem is investigated, although only from a numerical point of view, in [31, 33], where they use the sensitivity for shape optimization problems : in their case an expansion of the normal $\mathbf{n} = \sum \mathbf{n}_k(\mathbf{x}; a) \delta a^k$ is necessary, which leads to more complicated boundary conditions. Remark : if ν is considered as the parameter of interest, the second member of the first equation should be $\bar{\mathbf{f}}_a := \mathbf{f}_a + \nu_a \Delta \mathbf{u}$ and the Neumann boundary condition should have the additional term $\nu_a \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$, but this case is not considered in this work.

VI.3

Uncertainty propagation

In this section, we want to show how the sensitivity can be used to give a first order estimate of the variance of the model output. In this context, the parameter a is a random variable with a known distribution, expected value μ_a , and variance σ_a^2 . Let $X(\mathbf{x}, t; a)$ be a physical variable (i.e. the horizontal or vertical velocity, or the pressure), whose expected value μ_X and variance σ_X^2 we want to estimate. To do this, we start from a Taylor expansion of X with respect to the parameter a centred in the expected value of a , μ_a :

$$X(\mathbf{x}, t; a) = X(\mathbf{x}, t; \mu_a) + (a - \mu_a) X_a(\mathbf{x}, t; a) + o(|a - \mu_a|^2), \quad (\text{VI.3.0 eq1})$$

where $X_a = \partial_a X$ is the sensitivity of X with respect to the parameter a . Computing the expected value of the right and left-hand side of (VI.3.0 eq1), one obtains the following first order estimate :

$$\mu_X(\mathbf{x}, t) = E[X(\mathbf{x}, t; a)] \simeq X(\mathbf{x}, t; \mu_a) + E[(a - \mu_a)] X_a(\mathbf{x}, t; a) = X(\mathbf{x}, t; \mu_a). \quad (\text{VI.3.0 eq2})$$

Using again the Taylor expansion (VI.3.0 eq1) and the estimate just obtained for the average (VI.3.0 eq2), we obtain an estimate of the variance :

$$\sigma_X^2(\mathbf{x}, t) = E[(X(\mathbf{x}, t; a) - \mu_X(\mathbf{x}, t))^2] \simeq E[(a - \mu_a)^2] X_a^2(\mathbf{x}, t; a) = \sigma_a^2 X_a^2(\mathbf{x}, t; a). \quad (\text{VI.3.0 eq3})$$

The estimates (VI.3.0 eq2)-(VI.3.0 eq3) are valid only where the Taylor expansion (VI.3.0 eq1) holds, i.e. for small variances of the random parameter σ_a^2 . However, one can have an estimate of the variance with just one simulation of the state and one of the sensitivity, which is a minimal computational cost when compared to methods such as Monte Carlo that require thousands of simulations of the state to estimate the variance. In the general case, when more than one parameter is uncertain, to provide an estimate of the variance, one would need one simulation for the state and as many simulations of the sensitivity as the number of uncertain parameters [38]. This makes the sensitivity approach really affordable and highly competitive when the number of uncertain parameters is small enough. In the next subsection, we compare the results of the SA approach with the well-known Monte Carlo method [86].

The estimated variance can be used for multiple purposes. In this work, we use it to compute some confidence intervals for the physical variables, i.e. find an interval CI_X such that the probability that X falls into CI_X is bigger than $1 - \alpha$. Standard choices for α are 0.05 or 0.01. If the distribution of the random variable X is known, some precise estimates for the extrema of the interval exist. However, SA does not provide any insight of what the distribution of the output is. Therefore we start from Chebyshev inequality [54], which states that for any random variable with finite expected value and variance

$$P(|X - \mu_X| \geq \lambda) \leq \frac{\sigma_X^2}{\lambda^2}.$$

By imposing the desired level for confidence interval, i.e. $\alpha = \frac{\sigma_X^2}{\lambda^2}$, one gets $\lambda = \frac{\sigma_X}{\sqrt{\alpha}}$, therefore

$$CI_X = \left[\mu_X - \frac{\sigma_X}{\sqrt{\alpha}}, \mu_X + \frac{\sigma_X}{\sqrt{\alpha}} \right]. \quad (\text{VI.3.0 eq4})$$

VII. Perspectives

Plusieurs perspectives d'amélioration de ce document initial sont d'ores et déjà à prévoir. D'une part, il s'agit de compléter et de détailler les modèles physiques des cas tests de validation déjà existants tels que les modèles d'écoulement quasi-compressibles (modèles de type ■ bas Mach ■) ou encore les modèles qui impliquent des couplages avec les équations du transport d'espèces. D'autre part, les sections seront complétées avec les méthodes numériques dédiées à la résolution des modèles physiques.

Bibliographie

- [1] Remi Abgrall and Pietro Marco Congedo. A semi-intrusive deterministic approach to uncertainty quantification in non-linear fluid flow problems. *Journal of Computational Physics*, 235 :828–845, 2013.
- [2] P.-E. Angeli, U. Bieder, and G. Fauchet. Overview of the triocfd code : Main features, V&V procedures and typical applications to nuclear engineering. In *NURETH-16, Chicago, IL, August 30-September 4*, 2015.
- [3] P.-E. Angeli and N. Leterrier. Implémentation et validation du modèle de turbulence k-epsilon réalisable dans TrioCFD. Technical Report DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF/NT/2018-64015/A, CEA, 2019.
- [4] P.-E. Angeli, A. Puscas, G. Fauchet, and A. Cartalade. FVCA8 benchmark for the Stokes and Navier-Stokes Equations with the TrioCFD Code – Benchmark Session. In *C. Cancès et P. Omnès, éditeurs : Finite Volumes for Complex Applications VIII – Methods and Theoretical Aspects*, pages 181 – 203. Springer, 2017.
- [5] C.D. Argyropoulos and N.C. Markatos. Recent advances on the numerical modelling of turbulent flows. *Applied Mathematical Modelling*, 39(2) :693 – 732, 2015.
- [6] A. Majid Bahari and Kourosh Hejazi. Investigation of buoyant parameters of k - ϵ turbulence model in gravity stratified flows. *International Journal of Physical and Mathematical Sciences*, 3(7) :494 – 501, 2009.
- [7] J. Borggaard and J. Burns. A PDE sensitivity equation method for optimal aerodynamic design. *Journal of Computational Physics*, 136(2) :366 – 384, 1997.
- [8] Alan D. Burns, Thomas Frank, Ian Hamill, , and Jun-Mei Shi. The favre averaged drag model for turbulent dispersion in eulerian multi-phase flows. In *5th International Conference on Multiphase Flow*, 2004.
- [9] O. Lebaigue C. Duquennoy and J. Magnaudet. A numerical model of gas-liquid-solid contact line. *Fluid Mechanics and its Applications*, 62, 2000.
- [10] Sébastien Candel. *Mécanique des fluides*, 2ème Ed. Dunod, 2001.
- [11] Jan-Renee Carlson, Veer N. Vatsay, and Jeery Whitey. Node-centered wall function models for the unstructured flow code fun3d. In *22nd AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, page 2758, 2015.
- [12] C. Chalons, R. Duvigneau, and C. Fiorini. Sensitivity analysis and numerical diffusion effects for hyperbolic PDE systems with discontinuous solutions. The case of barotropic Euler equations in Lagrangian coordinates. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 40(6) :A3955–A3981, 2018.
- [13] Tchen Chan-Mou. Mean Value and Correlation Problems connected with the Motion of Small Particles suspended in a turbulent fluid. Springer - Science + Business Media, 1947.
- [14] Patrick Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides*. CÉPADUÈS-ÉDITIONS, 2000.
- [15] Kuei-Yuan Chien. Predictions of channel and boundary-layer flows with a low-reynolds-number turbulence model. *AIAA Journal*, 20(1) :33–38, 1982.
- [16] A. J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Math. Comp.*, 22(104) :745–762, 1968.

-
- [17] M. Ciofalo and M.W. Collins. k - ϵ predictions of heat transfer in turbulent recirculating flows using an improved wall treatment. Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals, 15(1) :21–47, 1989.
 - [18] Antoine Du Cluzeau. Modélisation physique de la dynamique des écoulements à bulles par remontée d'échelle à partir de simulations fines. phdthesis, Université de Perpignan Via Domitia, October 2019.
 - [19] M. Crouzeix and P.-A. Raviart. Conforming and nonconforming finite element methods for solving the stationary stokes equations. RAIRO, Sér. Anal. Numer., 33, 1977.
 - [20] D. Torres D. Jamet and J. U. Brackbill. On the theory and computation of surface tension : The elimination of parasitic currents through energy conservation in the second gradient method. Journal of Computational Physics, 182 :262–276, 2002.
 - [21] N. Coutris D. Jamet, O. Lebaigue and J. M. Delhay. The second gradient method for the liquid-vapor flows with phase change. Journal of Computational Physics, 169 :624–651, 2001.
 - [22] C. Delenne. Propagation de la sensibilité dans les modèles hydrodynamiques. PhD thesis, Montpellier II, 2014.
 - [23] DES-CEA. Code CEA TrioCFD. http://trio CFD.cea.fr/Pages/Presentation/TrioCFD_code.aspx.
 - [24] Bruno Després, Gaël Poëtte, and Didier Lucor. Robust uncertainty propagation in systems of conservation laws with the entropy closure method. In Uncertainty quantification in computational fluid dynamics, pages 105–149. Springer, 2013.
 - [25] J. Donea, S. Giuliani, and J.-P. Halleux. An arbitrary lagrangian-eulerian finite element method for transient dynamic fluid-structure interactions. Computer methods in applied mechanics and engineering., 33 :689–723, 1982.
 - [26] J. Donea, A. Huerta, J. Ph. Ponthot, and A. Rodríguez-Ferran. Arbitrary Lagrangian–Eulerian Methods. American Cancer Society, 2004.
 - [27] A. du Cluzeau, G. Bois, and A. Toutant. Analysis and modelling of reynolds stresses in turbulent bubbly up-flows from direct numerical simulations. Journal of Fluid Mechanics, 866 :132–168, mar 2019.
 - [28] A. du Cluzeau, G. Bois, A. Toutant, and J.-M. Martinez. On bubble forces in turbulent channel flows from direct numerical simulations. Journal of Fluid Mechanics, 882, nov 2019.
 - [29] F. Duarte, R. Gormaz, and S. Natesan. Arbitrary Lagrangian-Eulerian method for Navier-Stokes equations with moving boundaries. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering., 193 :4819–4836, 2004.
 - [30] C. Duquenois. Développement d’une approche de simulation numérique directe de l’ébullition en paroi. Thèse de doctorat, 2000.
 - [31] R. Duvigneau and D. Pelletier. Evaluation of nearby flows by a shape sensitivity equation method. In 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, page 127, 2005.
 - [32] R. Duvigneau and D. Pelletier. A sensitivity equation method for fast evaluation of nearby flows and uncertainty analysis for shape parameters. International Journal of Computational Fluid Dynamics, 20(7) :497–512, 2006.
 - [33] R. Duvigneau, D. Pelletier, and J. Borggaard. An improved continuous sensitivity equation method for optimal shape design in mixed convection. Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals, 50(1) :1–24, 2006.
 - [34] R. Scardovelli E. Aulisa, S. Manservigi and S. Zaleski. A geometrical area-preserving volume-of-fluid advection method. Journal of Computational Physics, 192(1) :355–364, 2003.
 - [35] P. Emonot. Méthodes de volumes-éléments finis : application aux équations de navier-stokes et résultats de convergence. Thèse de doctorat, 2003.
 - [36] Ph. Emonot. Méthode de volumes éléments finis : applications aux équations de Navier-Stokes et résultats de convergence. PhD thesis, Université Claude Bernard – Lyon I, 1992.
-

-
- [37] Sixin Fan, Budugur Lakshminarayana, and Mark Barnett. Low-reynolds-number k-epsilon model for unsteady turbulent boundary-layer flows. AIAA Journal, 31(10) :1777–1784, 1993.
 - [38] C. Fiorini. Sensitivity analysis for nonlinear hyperbolic systems of conservation laws. PhD thesis, Université Paris Saclay, 2018.
 - [39] C. Fiorini, C. Chalons, and R. Duvigneau. A modified ensitivity equation method for Euler equations in presence of shocks. Numerical methods for partial differential equations, 2019.
 - [40] T. Fortin. Une méthode éléments finis à décompositoin L^2 d'ordre élevé motivée par la simulation d'écoulement diphasique bas Mach. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie – Paris VI, 2006.
 - [41] G. Fourestey and S. Piperno. A second-order time-accurate ALE Lagrange-Galerkin method applied to wind engineering and control of bridge profiles. Computer methods in applied mechanics and engineering, 193 :4117–4137, 2004.
 - [42] A. Genty. Optimisation de paramètres du modèle de turbulence $k-\epsilon$ pour les écoulements avec stratification thermique. étude préliminaire. Technical Report DEN/DANS/DM2S/STMF/LATF/NT/2019-65405/A, CEA, 2019.
 - [43] Antoine Gerschenfeld. Schéma numérique polymac. application à l'ocs triomc. unification des échelles sous-canal et cfd. Technical report, DEN/DANS/DM2S/STMF/LMEC, 2018.
 - [44] Antoine Gerschenfeld and Yannick Gorsse. Development of a robust multiphase low solver on general meshes ; application to sodium boiling at the subchannel scale. In NURETH 2022, 2022.
 - [45] Eric Goncalves and Regiane Fortes Patella. Numerical simulation of cavitating flows with homogeneous models. Computers & Fluids, 38(9) :1682–1696, oct 2009.
 - [46] J.-L. Guermond and L. Quartapelle. On stability and convergence of projection methods based on pressure poisson equation. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 26(9) :1039–1053, 1998.
 - [47] M. D. Gunzburger. Perspectives in flow control and optimization, volume 5. Siam, 2003.
 - [48] S. Heib. Nouvelles discrétisations non structurées pour des écoulements de fluides à incompressibilité renforcée. PhD thesis, Université Paris 6, 2003.
 - [49] S. Heib. Nouvelles discrétisations non structurées pour des écoulements de fluides à incompressibilité renforcée. Thèse de doctorat, 2003.
 - [50] Takashi Hibiki and Mamoru Ishii. Distribution parameter and drift velocity of drift-flux model in bubbly flow. International Journal of Heat and Mass Transfer, 45(4) :707–721, 2002.
 - [51] Takashi Hibiki and Mamoru Ishii. Active nucleation site density in boiling systems. International Journal of Heat and Mass Transfer, 46(14) :2587–2601, jul 2003.
 - [52] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. Journal of Computational Physics, 39 :201, 1981.
 - [53] Mamoru Ishii. One-dimensional drift-flux model and constitutive equations for relative motion between phases in various two-phase flow regimes. Technical report, Argonne National Lab., Ill.(USA), 1977.
 - [54] J. Jacod and P. Protter. Probability essentials. Springer Science & Business Media, 2012.
 - [55] W.P Jones and B.E Launder. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. International Journal of Heat and Mass Transfer, 15(2) :301 – 314, 1972.
 - [56] B.A. Kader. Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers. Int. J. Heat Mass Transfer, 24(9) :1541–1544, 1981.
 - [57] Georgi Kalitzin, Gorazd Medic, Gianluca Iaccarino, and Paul Durbin. Near-wall behavior of RANS turbulence models and implications for wall functions. Journal of Computational Physics, 204(1) :265–291, mar 2005.
 - [58] O.M. Knio and O.P. Le Maitre. Uncertainty propagation in CFD using polynomial chaos decomposition. Fluid Dynamics Research, 38(9) :616–640, September 2006.
-

-
- [59] Tobias Knopp, Thomas Alrutz, and Dieter Schwamborn. A grid and flow adaptive wall-function method for rans turbulence modelling. Journal of Computational Physics, 220 :19–40, 2006.
 - [60] J.C. Kok. Resolving the dependence on free-stream values for the k-omega turbulence model. Technical Report NLR-TP-99295, National Aerospace Laboratory NLR, 1999.
 - [61] J.C. Kok and S.P. Spekreijse. Efficient and accurate implementation of the k-omega turbulence model in the nlr multi-block navier-stokes system. Technical Report NLR-TP-2000-144, National Aerospace Laboratory NLR, 2000.
 - [62] Ravikishore Kommajosyula. Development and assessment of a physics-based model for subcooled flow boiling with application to CFD. PhD thesis, 2020.
 - [63] B. Koobus, C. Farhat, and H. Tran. Computation of unsteady viscous flows around moving bodies using the k- ϵ turbulence model on unstructured dynamic grids. Computer methods in applied mechanics and engineering, 190 :1441–1466, 2000.
 - [64] O. Kuzman, S. Mierka, and S. Turek. On the implementation of the k-epsilon turbulence model in incompressible flow solvers based on a finite element discretisation. In International Journal of Computing Science and Mathematics archive, volume 1, pages 193–206, 2007.
 - [65] C.K.G. Lam and K. Bremhorst. A Modified Form of the k- ϵ Model for Predicting Wall Turbulence. Journal of Fluids Engineering, 103(3) :456–460, 09 1981.
 - [66] B.E. Launder and B.I. Sharma. Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. Letters in Heat and Mass Transfer, 1(2) :131 – 137, 1974.
 - [67] B.E. Launder and D.B. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 3(2) :269 – 289, 1974.
 - [68] Nazar Lubchenko, Ben Magolan, Rosie Sugrue, and Emilio Baglietto. A more fundamental wall lubrication force from turbulent dispersion regularization for multiphase CFD applications. International Journal of Multiphase Flow, 98 :36–44, jan 2018.
 - [69] Mostafa Mahdavi, Mohsen Sharifpur, and Josua P Meyer. Implementation of diffusion and electrostatic forces to produce a new slip velocity in the multiphase approach to nanofluids. Powder Technology, 307 :153–162, 2017.
 - [70] Mikko Manninen, Veikko Taivassalo, and Sirpa Kallio. On the mixture model for multiphase flow. 1996.
 - [71] B. Maury. Characteristics ale method for the unsteady 3d navier-stokes equations with a free surface. Journal of Computational Fluid Dynamics, 6 :175–188, 1996.
 - [72] F. R. Menter, M. Kuntz, and R. Langtry. Ten years of industrial experience with the sst turbulence model. In Turbulence, Heat and Mass Transfer 4, 2003.
 - [73] Florian R. Menter. Zonal two equation k- ω turbulence models for aerodynamic flows. In American Institute of Aeronautics and Astronautics 24th Fluid Dynamics Conference. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1993. AIAA 93-2906.
 - [74] Bojan M. Mitrovic, Phuong M. Le, and Dimitrios V. Papavassiliou. On the prandtl or schmidt number dependence of the turbulent heat or mass transfer coefficient. Chemical Engineering Science, 59 :543–555, 2004.
 - [75] R.C. Morgans, B.B. Dally, G.J. Nathan, P.V. Lanspeary, and D.F. Fletcher. Application of the revised wilcox (1998) k- ω turbulence model to a jet in co-flow. In Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries CSIRO, Melbourne, Australia, 6-8 December, 1999.
 - [76] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. Flow, Turbulence and Combustion, 62(3) :183–200, Sep 1999.
 - [77] C. Duquennoy O. Lebaigue, D. Jamet and N. Coutris. Review of existing methods for direct numerical simulation of liquid-vapor two-phase flows. Technical report, 6th International Conference on Nuclear Engineering, 1998.
-

-
- [78] M. Peybernès. Modèles de turbulence dans TrioCFD. Technical Report DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF/NT/16-009/A, CEA, 2016.
 - [79] S. Popinet. Stabilité et formation de jets dans les bulles cavitantes : développement d’une méthode de chaîne de marqueurs adaptée au traitement numérique des équations de navier-stokes avec surfaces libres. Thèse de doctorat, 2000.
 - [80] M. A. Puscas and L. Monasse. A three-dimensional conservative coupling method between an inviscid compressible flow and a moving rigid solid. SIAM Journal on Scientific Computing., 37 :B884–B909, 2015.
 - [81] M. A. Puscas, L. Monasse, A. Ern, C. Tenaud, and C. Mariotti. A conservative embedded boundary method for an inviscid compressible flow coupled with a fragmenting structure. International Journal for Numerical Methods in Engineering., 103 :970–995, 2015.
 - [82] M. A. Puscas, L. Monasse, A. Ern, C. Tenaud, C. Mariotti, and V. Daru. A time semi-implicit scheme for the energy-balanced coupling of a shocked fluid flow with a deformable structure. Journal of Computational Physics., 296 :241–262, 2015.
 - [83] W. E. Ranz and W.R. Marshall. Evaporation from droplets. Chem. Eng. Prog., 48(3) :141–146, 1952.
 - [84] H. Reichardt. Die wärmeübertragung in turbulenten reibungsschichten. ZAMM – J. Appl. Math. Mech., 20(6) :297–328, 1940. Translation : HEAT TRANSFER THROUGH TURBULENT FRICTION LAYERS.
 - [85] H. Reichardt. Vollständige darstellung der turbulenten geschwindigkeitsverteilung in glatten leitungen. Z. angew. Math. Mech., 31(7) :208–219, 1951.
 - [86] C. Robert and G. Casella. Monte Carlo statistical methods. Springer Science & Business Media, 2013.
 - [87] M.G. Rodio and U. Bieder. Comparison between compressible, dilatable and incompressible fluid hypotheses efficiency in liquid conditions at high pressure and large temperature differences. European Journal of Mechanics - B/Fluids, 76 :32–49, 2019.
 - [88] Dillon Shaver, Aleks Obabko, Ananias Tomboulides, Victor Coppo-Leite, Yu-Hsiang Lan, MiSun Min, Paul Fischer, and Christopher Boyd. Nek5000 developments in support of industry and the nrc. Technical Report ANL/NSE-20/48, Argonne National Laboratory, 2020.
 - [89] Tsan-Hsing Shih, William W. Liou, Aamir Shabbir, Zhigang Yang, and Jiang Zhu. A new $k-\epsilon$ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. Computers & Fluids, 24(3) :227 – 238, 1995.
 - [90] S. Shin and D. Juric. Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity. Journal of Computational Physics, 180 :427–470, 2002.
 - [91] Rosemary Sugrue. A Robust Momentum Closure Approach for Multiphase Computational Fluid Dynamics Applications. PhD thesis, 2017.
 - [92] Rosemary Sugrue, Ben Magolan, Nazar Lubchenko, and Emilio Baglietto. Assessment of a simplified set of momentum closure relations for low volume fraction regimes in star-ccm+ and openfoam. Annals of Nuclear Energy, 110 :79–87, dec 2017.
 - [93] R. Temam. Une méthode d’approximation de la solution des équations de navier-stokes. S. M. F., 96 :115–152, 1968.
 - [94] Akio Tomiyama, Isao Kataoka, Iztok Zun, and Tadashi Sakaguchi. Drag coefficients of single bubbles under normal and micro gravity conditions. JSME International Journal Series B Fluids and Thermal Engineering, 1998.
 - [95] Akio Tomiyama, Hidesada Tamai, Iztok Zun, and Shigeo Hosokawa. Transverse migration of single bubbles in simple and shear flows. Chemical Engineering Science, 57 :1849–1858, 2002.
 - [96] S. O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous incompressible multi-fluid flows. Journal of Computational Physics, 100 :25–37, 1992.
 - [97] J. Volker. Lecture notes on numerical methods for incompressible flow problems II, **Chapter 4**, 2014.
-

- [98] R. Walters. Towards stochastic fluid mechanics via polynomial chaos. In 41st AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, USA, 2003.
- [99] R. W. Walters and L. Huyse. Uncertainty analysis for fluid mechanics with applications. Technical report, National aeronautics and space administration, Hampton, VA, Langley research center, 2002.
- [100] M. Weickert, G. Teike, O. Schmidt, and M. Sommerfeld. Investigation of the LES WALE turbulence model within the lattice boltzmann framework. Computers & Mathematics with Applications, 59(7) :2200 – 2214, 2010. Mesoscopic Methods in Engineering and Science.
- [101] M. Werner and M. Wengle. Large-eddy simulation of turbulent flow over and around a cube in a plate channel. In 8th Symposium on Turbulent Shear Flows, Munich, Germany, 1991.
- [102] David C. Wilcox. Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. AIAA Journal, 26(11) :1299–1310, 1988.
- [103] David C. Wilcox. Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. AIAA Journal, 26(11) :1299–1310, nov 1988.
- [104] David C. Wilcox. Turbulence Modeling for CFD. DCW Industries, 2006.
- [105] D. Xiu and George E. Karniadakis. Modeling uncertainty in flow simulations via generalized polynomial chaos. Journal of computational physics, 187(1) :137–167, 2003.
- [106] Wei Yao and Christophe Morel. Volumetric interfacial area prediction in upward bubbly two-phase flow. International Journal of Heat and Mass Transfer, 47(2) :307–328, jan 2004.
- [107] Novak Zuber and J ASME Findlay. Average volumetric concentration in two-phase flow systems. 1965.