

# Modélisation et simulation numérique du changement de phase liquide–vapeur en cavité

Virginie Daru<sup>a,b,\*</sup>, Marie-Christine Duluc<sup>a,c</sup>, Olivier Le Maître<sup>a,d</sup>,  
Damir Juric<sup>a</sup>, Patrick Le Quéré<sup>a</sup>

<sup>a</sup> LIMSI-CNRS, UPR 3251, B.P. 133, 91403 Orsay cedex, France

<sup>b</sup> Laboratoire SINUMEF, ENSAM, 151, boulevard de l'hôpital, 75013 Paris, France

<sup>c</sup> CNAM, 292, rue Saint-Martin, 75141 Paris cedex 03, France

<sup>d</sup> LME, université d'Evry, 40, rue du Pelvoux, CE1455, 91020 Evry cedex, France

Reçu le 30 avril 2005 ; accepté après révision le 18 octobre 2005

Disponible sur Internet le 6 décembre 2005

Présenté par Sébastien Candel

---

## Résumé

Un modèle numérique d'écoulement avec changement de phase liquide–vapeur en cavité fermée est présenté. L'interface liquide–vapeur est décrite par une méthode de front tracking. Le liquide est considéré comme parfaitement incompressible, tandis que la vapeur est assimilée à un gaz parfait faiblement compressible. Ce modèle tient compte de la courbe de saturation. Des simulations sont réalisées à partir d'un cas-test 1D, assimilable à un autocuiseur. Les résultats sont comparés avec une solution approchée utilisant un modèle faible Mach. *Pour citer cet article : V. Daru et al., C. R. Mecanique 334 (2006).*

© 2005 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

## Abstract

**Modeling and numerical simulation of liquid–vapor phase change in an enclosed cavity.** A model for the simulation of boiling flow with phase change in a closed cavity is presented. A front-tracking method is used to deal with the liquid–vapor interface. The liquid phase is incompressible while the vapor phase is weakly compressible and obeys to the perfect gas law. This model can deal with large density ratio ( $\rho_l/\rho_v \simeq 1000$ ) flows while accounting for the saturation curve. Computations are performed on a 1D validation case, idealizing a pressure cooker. Results are compared with a low Mach number approximation. *To cite this article: V. Daru et al., C. R. Mecanique 334 (2006).*

© 2005 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

*Mots-clés :* Mécanique des fluides numérique ; Écoulement compressible ; Changement de phase ; Liquide–vapeur ; Courbe de saturation

*Keywords :* Computational fluid mechanics; Compressible flow; Phase-change; Liquid–vapor; Saturation curve

---

\* Auteur correspondant.

Adresses e-mail : [daru@limsi.fr](mailto:daru@limsi.fr) (V. Daru), [duluc@limsi.fr](mailto:duluc@limsi.fr) (M.-C. Duluc), [olivier.lemaitre@iup.univ-evry.fr](mailto:olivier.lemaitre@iup.univ-evry.fr) (O. Le Maître), [damir.juric@alum.wpi.edu](mailto:damir.juric@alum.wpi.edu) (D. Juric), [plq@limsi.fr](mailto:plq@limsi.fr) (P. Le Quéré).

## Abridged English version

Numerical simulation of boiling flows is a real challenge from both modeling and computational standpoints. It has received much attention in the recent past and is still the subject of intensive ongoing research. However, simulations of liquid–vapor flows with realistic physical properties and large density ratio between the phases ( $\simeq 1000$ ) are still unavailable in the literature. This is due to various modeling and numerical difficulties. For instance, it is necessary to consider variations of the vapor density with pressure and/or temperature, while in a closed cavity, any vapor production will lead to a significant pressure increase, which in turn affects the saturation temperature. Therefore, the model must account for the saturation curve which links pressure and temperature at the interface. Also, the numerical method for such problems needs to deal with incompressible (liquid) and weakly compressible (vapor) flows in the same computational domain. This difficulty can be overcome using different computational sub-domains for the two phases, but this approach is limited to small deformations of the interface. In contrast, the front-tracking techniques based on a one-field (one domain) formulation have shown to be effective in much complex situations in the limit of both incompressible phases (e.g. [1,2]). Thus, we present an extension of the one-field formulation of [4] to include phase-change processes. We report here early numerical tests for a 1D configuration similar to a pressure cooker.

The model developed in the present paper uses a one-field formulation for the flow governed by the compressible Navier–Stokes equations (1). The motion of the interface is described using a front-tracking method [1]: the Heaviside function indicates the liquid ( $H = 0$ ) or the vapor phase ( $H = 1$ ). In this formulation, the fluid density is written  $\rho = \rho_l + H(\mathbf{x}, t)(\rho_v - \rho_l)$ , where the liquid density  $\rho_l$  is constant, and the vapor density  $\rho_v$  obeys to the perfect gas law. On the interface, classical jump conditions are used, Eqs. (2), (3), the last term in Eq. (3) being neglected in the computations. Other variables of the problem and fluid properties are similarly written. We consider water with a latent heat decreasing linearly with the temperature and a 2nd order polynomial approximation of the Dupré law Eq. (4). The time-stepping procedure is based on an explicit integration of the governing equations, followed by a projection step to enforce the mass conservation: at each time-step, the pressure field is solution of Eq. (7), which is solved using a direct solver. For validation purposes, an approximate solution for the test case is developed, considering a motionless liquid phase bounding a compressible vapor phase with phase change at the fixed interface (jump conditions are boundary conditions). Due to the very low vapor velocity involved in the test case, a low-Mach number approximation is used in the vapor domain where the equations to be solved are given by Eqs. (8). In this formulation the pressure in the vapor phase is split into two components: the thermodynamic pressure  $P(t)$ , solely function of time and the dynamic pressure  $p_d(x, t)$ , function of both time and space to enforce the mass conservation. The latter is, again, solution of an elliptic equation.

The test case configuration is similar to a pressure cooker: a 1D cavity with length  $L$  contains a liquid–vapor mixture initially under equilibrium conditions ( $P_0, T_0 = T_{\text{sat}}(P_0)$ ). The liquid phase is set in the left part of the cavity ( $0 \leq x \leq x_{s0}$ ) and the vapor in the right one ( $x_{s0} \leq x \leq L$ ). The initial location of the interface is denoted  $x_{s0}$ . The temperature of the cavity wall on the liquid side ( $x = 0$ ) is suddenly increased to  $T_w > T_0$ , while the opposite wall ( $x = L$ ) is thermally insulated. The system then undergoes a vaporization process to reach a new uniform equilibrium state ( $T_f = T_w, P_f = P_{\text{sat}}(T_f), x_{sf} < x_{s0}$ ). Numerical simulations are performed for a cavity with length  $L = 100 \mu\text{m}$ . The physical properties of the fluid (water) used in the calculations are indicated in Section 3. Two different initial locations of the interface were examined. Analytical expressions derived from classical thermodynamics allow the comparison between the theoretical and numerical equilibrium states. The interface location in the final steady-state  $x_{sf}$  is given by Eq. (11) and the amount of heat  $Q$  transferred to the fluid during the vaporization process is given by Eq. (12). The comparison is reported in Table 1 and shows an excellent agreement. As expected for this situation, the interface location is essentially unchanged. The fixed interface approximation in the low-Mach number model is therefore relevant.

Before starting the discussion on transient phenomena, it is worthwhile to consider the energy equation written in the dimensionless form, Eq. (14). It shows that the problem is governed by a single dimensionless number,  $Di_{lv}$ , which compares the two time-scales for the heat diffusion in the liquid and vapor domains. For  $x_{s0} = 0.9L$ ,  $Di_{lv} \gg 1$  and the vapor dynamics is dominated by the heat diffusion. In contrast, when  $x_{s0} = 0.1L$ ,  $Di_{lv} \sim 1$  and advection, compressibility and phase change effects are expected to become significant too, yielding much more complex dynamics. Transient results for  $x_{s0} = 0.9L$  are presented in Figs. 1–4. Time evolutions of the temperature fields are plotted in Fig. 1 for the two models. It is first shown that the two models (one-field formulation and low-Mach approximation) are in close agreement. The same agreement is observed for the thermodynamic pressure as a function of time re-

ported in Fig. 2. For the one-field model, plotted is the spatially averaged pressure, which however is nearly uniform in space (not shown). It is also reported that the pressure rise is not immediate but starts when the heat flux at the interface becomes significant with a non negligible vaporization rate as a result. The interfacial velocity computed for the one-field formulation is plotted in Fig. 3. The interfacial velocity presents a sharp acceleration at the early stage, followed by a longer relaxation period which ends when the equilibrium state is achieved. The maximal interfacial velocity is roughly  $10^{-7}$  m/s. The velocity fields at different times reported in Fig. 4 are exactly equal to zero in the liquid phase, and are almost linear function of  $x$  in the vapor phase with a maximum at the interface (and vanish on the right-hand wall).

For this test case, Fig. 1 shows that the vapor temperature evolves monotonically in time to its equilibrium value and is nearly uniform in space as expected from the dimensional analysis which indicates that the dynamics is dominated by the diffusion of heat: interfacial and vapor temperatures are therefore identical at any time. A different behavior is reported for  $x_{s,0} = 0.1L$ . For this case, the liquid layer separating the heated wall and the interface is thinner leading to higher heat fluxes and a higher vaporization rate at the early stage of the process. As a consequence, the magnitude of the pressure increase is larger and heats the vapor through compressibility effects. Although, on the interface the evolutions of the temperature and pressure are not independent but constrained by the saturation curve. Differentiating this dependence with time gives  $dT_{\text{sat}}/dt = (dT_{\text{sat}}/dP) \cdot (dP/dt)$ . For water, the pressure-induced temperature increase is larger in the vapor (compressibility effect) than at the interface (saturation curve), giving rise to a temperature gradient. Then, if the heat diffusion is not fast enough to homogenize the vapor temperature the temperature gradient is sustained and in turn enhances the vaporization rate, favoring the compressibility effects. The consequence of this dynamics is clearly visible in the curves given in Fig. 5, corresponding to  $x_{s,0} = 0.1L$ , where the maxima of the vapor temperature are achieved at the insulated wall while the minima stand at the interface. It has to be underlined that the maximal vapor temperature even temporarily exceeds  $T_w$ . Also, Fig. 5 exhibits small but noticeable discrepancies between the one-field formulation and the low-Mach approximation. Since for this test case the maximal Mach number is less than  $10^{-3}$  and the interface motion negligible, the differences in the two models predictions are likely due to the front-tracking treatment. This claim is verified in Fig. 6 where an improvement in the agreement between the two models is achieved by using a refined mesh (500 mesh points instead of 200) in the one-field model. This observation calls for an improvement of the front-tracking algorithm.

To conclude, this Note has presented preliminary computations of 1D boiling flows. From the modeling point of view the main focus was on the satisfaction of the saturation curve and realistic density ratio. It is shown that the compressible one-field formulation, coupled with a front-tracking algorithm, efficiently predicts equilibrium states. Comparisons with a fixed interface low-Mach approximation have shown that transient behaviors are also correctly accounted for by the model. However, the model requires very refined grids when compressibility effects are significant compared to heat diffusion in the vapor, i.e. when  $Di_v \sim 1$ . For such situations, the description of the interface has to be improved. Current efforts include the extension of the model to 2D configurations and surface tension effects.

## 1. Introduction

La simulation numérique des écoulements liquide–vapeur dans des conditions « réalistes » est un véritable défi eu égard aux multiples difficultés rencontrées, relatives aussi bien à la modélisation physique qu’aux méthodes numériques. En effet, il s’agit de représenter un écoulement comportant une interface liquide–vapeur de dynamique rapide avec changement de phase. Du point de vue numérique, le problème du suivi d’une interface à travers laquelle les propriétés du fluide sont discontinues a fait l’objet d’un grand nombre de travaux. Parmi les méthodes sur grille fixe, la méthode de ‘front-tracking’ que nous utilisons, fondée sur un suivi explicite de l’interface représentée par une suite de marqueurs, a fait la preuve d’une remarquable précision pour des simulations de différents écoulements multiphasiques [1]. En particulier, elle a été récemment utilisée pour effectuer des simulations d’écoulements multiphasiques incompressibles tridimensionnels avec changement de phase [2]. Cependant, le modèle incompressible n’est pas approprié pour décrire correctement, par exemple, une configuration où les phases liquide et vapeur coexistent dans une enceinte fermée ou encore une configuration dans laquelle la détermination de la pression thermodynamique est nécessaire (exemple : un autocuiseur avant ouverture de la soupape).

On présente ici un modèle destiné à décrire ces écoulements avec changement de phase liquide–vapeur à l’intérieur d’une enceinte fermée. Le modèle retenu est un modèle à un fluide dans lequel l’écoulement est régi par un jeu d’équations unique pour les deux phases selon une approche comparable à celle développée par Juric et Tryggvason

en incompressible [3]. La phase vapeur est compressible tandis que la phase liquide reste parfaitement incompressible, le suivi d'interface étant effectué par front tracking. La formulation retenue fait apparaître une seule pression, qui est la pression totale. Dans un travail précédent, ce modèle a été testé et validé sur un écoulement liquide–gaz 2D sans changement de phase à l'intérieur d'une cavité chauffée [4].

Les premiers résultats obtenus dans un cas 1D pour un écoulement liquide–vapeur avec changement de phase sont comparés pour les valeurs stationnaires aux relations classiques issues de la thermodynamique. Dans le but de valider les simulations transitoires, un deuxième modèle a été mis en œuvre, utilisant une résolution séparée dans le liquide et dans la vapeur. Dans la phase vapeur, ce modèle utilise une approximation de type « faible Mach ». Une comparaison est réalisée entre les deux approches. Les premiers résultats mettent notamment en évidence l'effet de la compressibilité sur la vaporisation à l'interface.

## 2. Modèles mathématiques et résolution numérique

### 2.1. Modèle à pression unique

L'écoulement obéit aux équations de Navier–Stokes sous la forme compressible générale (les effets de dissipation visqueuse, de gravité et de tension superficielle sont négligés dans cette première approche) :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) + \nabla p = \operatorname{div}(\bar{\boldsymbol{\tau}}) \\ \rho c_v \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_v \mathbf{v} \cdot \nabla T = \operatorname{div}(k \nabla T) - T \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_{\rho} \cdot \operatorname{div}(\mathbf{v}) + \dot{m} L_v \cdot \nabla H \end{cases} \quad (1)$$

complétées par la loi d'état générale  $\rho = \rho_l = H(\mathbf{x}, t)(\rho_v - \rho_l)$ . Dans ce travail, la vapeur est assimilée à un gaz parfait,  $\rho_v = p/(rT)$  et le liquide, incompressible, est de masse volumique constante  $\rho_l$ .  $H(\mathbf{x}, t)$  est une fonction de Heaviside repérant le liquide ou le gaz, telle que  $H(\mathbf{x}, t) = 1$  dans le gaz et  $H(\mathbf{x}, t) = 0$  dans le liquide. La méthode de suivi lagrangien de l'interface liquide–gaz nous permet de construire une telle fonction sur le maillage eulérien discrétisant l'ensemble du domaine fluide [2]. Dans l'équation de l'énergie, le dernier terme modélise le changement de phase ;  $\dot{m}$  est la densité de flux de masse interfacial et  $L_v$  la chaleur latente, donnée par :  $L_v = L_{v0} + (c_{pv} - c_{pl})(T - T_0)$ , avec  $L_{v0}$ , la chaleur latente à la température de saturation  $T_0$ .

Ce modèle est complété par les relations de saut à l'interface (supposée de masse nulle), qui permettent de calculer sa vitesse. Si l'on fait l'hypothèse que l'interface est fine et sans masse, elles s'écrivent [5] :

$$\rho_l(\mathbf{v}_l - \mathbf{s}) \cdot \mathbf{n} = \rho_v(\mathbf{v}_v - \mathbf{s}) \cdot \mathbf{n} = \dot{m} \quad (2)$$

$$(\mathbf{q}_v - \mathbf{q}_l) \cdot \mathbf{n} = -\dot{m} L_v - \frac{\dot{m}^3}{2} \left( \frac{1}{\rho_v^2} - \frac{1}{\rho_l^2} \right) \quad (3)$$

avec  $\mathbf{s}$  la vitesse de l'interface,  $\mathbf{n}$  la normale à l'interface et  $\mathbf{q}$  la densité de flux de chaleur. La relation de saut pour la quantité de mouvement n'est pas explicitée ici car non directement utilisée dans la résolution. Dans les simulations nous négligerons le dernier terme dans le membre de droite de (3).

Enfin la fermeture du modèle nécessite la donnée de la température à l'interface, que nous imposons égale à la température de saturation  $T_{\text{sat}}(p)$ , régie par la loi de Dupré. Pour le fluide (eau) et la plage de température étudiés, cette loi peut être lissée par un polynôme du second degré :

$$T_{\text{sat}}(p) = -5,92 \times 10^{-10} p^2 + 3,862 \times 10^{-4} p + 340,18 \quad (4)$$

La résolution numérique de ces équations repose sur une méthode de type projection, classique pour les écoulements incompressibles. On ne présente ici que la discrétisation temporelle, dans la mesure où la discrétisation spatiale utilise classiquement des formules aux différences finies centrées. Pour ces premiers résultats, nous avons employé une discrétisation spatiale centrée d'ordre 2 et une discrétisation explicite d'ordre 1 en temps. Par ailleurs la discrétisation

de l'équation de l'énergie ne posant pas de problème particulier, on ne la présentera pas. L'équation de continuité est discrétisée de façon implicite, soit :

$$\frac{1}{\delta t} \left( H^{n+1} \left( \frac{p^{n+1}}{rT^{n+1}} - \rho_l \right) - H^n \left( \frac{p^n}{rT^n} - \rho_l \right) \right) + \text{div}(\rho \mathbf{v})^{n+1} = 0 \quad (5)$$

L'équation de quantité de mouvement est discrétisée comme :

$$\frac{(\rho \mathbf{v})^{n+1} - (\rho \mathbf{v})^n}{\delta t} = -\nabla p^{n+1} + \text{div}(\boldsymbol{\tau} - \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v})^n = -\nabla p^{n+1} + A^n \quad (6)$$

En prenant la divergence de (6) et en combinant avec (5), on obtient l'équation pour la pression :

$$\nabla^2 p^{n+1} - \frac{1}{\delta t^2} \left( H^{n+1} \left( \frac{p^{n+1}}{rT^{n+1}} - \rho_l \right) - H^n \left( \frac{p^n}{rT^n} - \rho_l \right) \right) = \frac{1}{\delta t} \text{div}(\rho \mathbf{v})^n + \text{div}(A)^n. \quad (7)$$

Cette équation d'Helmholtz pour  $p^{n+1}$  est résolue à l'aide d'un solveur direct. L'algorithme général de résolution pour une itération en temps est ainsi le suivant :

- calcul de  $T_{\text{sat}}(p)$  par (4) ;
- calcul de la densité de flux de chaleur de part et d'autre de l'interface et du terme de flux de masse  $\dot{m} \cdot \nabla H$  ;
- calcul de  $H^{n+1}$  à l'aide de la méthode de suivi d'interface ;
- calcul de la température ;
- calcul de la pression par (7) et de la masse volumique par la loi d'état ;
- calcul de la vitesse par (6).

Bien que l'acoustique soit prise en compte dans le gaz, la résolution implicite de la pression permet de s'affranchir de la condition de stabilité explicite liée à la vitesse du son, qui serait extrêmement restrictive sur le pas de temps d'intégration. De plus, la diffusion numérique induite par l'implicitation a pour effet bénéfique de filtrer très rapidement les ondes acoustiques sans intérêt pour cette étude. Enfin, le liquide peut être traité comme un fluide strictement incompressible grâce à cette implicitation.

## 2.2. Modèle faible Mach

Ce modèle dissocie le traitement des deux phases dont l'interface est fixe, ce qui est légitime du fait des faibles variations de volume pour les cas traités dans la suite. Il y a donc deux domaines avec des conditions de raccord portant sur la température et les flux. On élimine ainsi toute source d'erreur liée à l'étalement artificiel de l'interface induit par le front-tracking. Dans le domaine liquide une équation de diffusion sur  $T$  est employée avec comme condition sur l'interface  $T_l = T_{\text{sat}}(P)$ . Dans le domaine vapeur, le nombre de Mach est petit et une approximation de type « faible Mach » (voir par exemple [6,7]) est employée. Dans cette approximation la pression est séparée en deux composantes, la pression thermodynamique  $P(t)$  uniforme en espace et la pression dynamique  $p_d(x, t)$  ; la seconde étant d'ordre  $M^2$  relativement à la première. Les équations dans la phase vapeur s'écrivent ainsi :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_v}{\partial t} + \text{div}(\rho_v \mathbf{v}_v) = 0 \\ \frac{\partial \rho_v \mathbf{v}_v}{\partial t} + \text{div}(\rho_v \mathbf{v}_v \otimes \mathbf{v}_v) + \nabla p_d = \text{div}(\bar{\boldsymbol{\tau}}_v) \\ \rho_v c_{p_v} \frac{\partial T_v}{\partial t} + \rho_v c_{p_v} \mathbf{v}_v \cdot \nabla T_v = \text{div}(k_v \nabla T_v) + \frac{dP}{dt} \end{cases} \quad (8)$$

complétées de la loi d'état  $P = r \rho_v T_v$ . En dérivant en temps l'équation d'état et en combinant avec les équations précédentes, il est possible d'obtenir une nouvelle expression de la conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial t} = \frac{1}{T_v} \left[ -\frac{\gamma - 1}{\gamma r} \text{div}(k_v \nabla T_v) + \rho_v \mathbf{v}_v \cdot \nabla T_v + \frac{1}{\gamma r} \frac{dP}{dt} \right] \quad (9)$$

Tableau 1

Comparaison des états d'équilibre théoriques et calculés (modèle à pression unique)

Table 1

Comparison of the theoretical and computed (one-field formulation) equilibrium states

$x_{s0}$ ( $\mu\text{m}$ )	$x_{sf}$ ( $\mu\text{m}$ )		$Q$ ( $\text{J/m}^2$ )	
	Théorie	Sim. Num.	Théorie	Sim. Num.
10	9,953708	9,953699	895,7	894,7
50	49,97430	49,97426	4071,5	4070,8
90	89,99486	89,99482	7247,3	7246,9

Par intégration de cette dernière équation sur le volume de vapeur  $\Omega_v$ , on obtient une expression reliant le taux instantané de variation de  $P$  à celui de la masse de vapeur  $\dot{m}$  :

$$\dot{m} = \int_{\Omega_v} \frac{1}{T_v} \left[ -\frac{\gamma-1}{\gamma r} \text{div}(k_v \nabla T_v) + \rho_v \mathbf{v}_v \cdot \nabla T_v \right] dv + \frac{1}{\gamma r} \frac{dP}{dt} \int_{\Omega_v} dv \quad (10)$$

Les conditions aux limites sur l'interface sont  $T_v = T_{\text{sat}}(P)$  et les relations approchées de saut :  $\dot{m} = \rho_v \mathbf{v}_v \cdot \mathbf{n}$  et  $\dot{m} L_v(T) = (\mathbf{q}_l - \mathbf{q}_v) \cdot \mathbf{n}$ . Connaissant la solution au temps  $t_n$ , le flux  $\dot{m}$  est calculé par la relation de saut.  $\dot{m}$  est alors utilisé pour calculer  $dP/dt$  par Eq. (10). On procède ensuite à une intégration explicite jusque  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$  (schéma d'Adams–Bashforth d'ordre 2 en temps) de la pression  $P$  et de  $\rho_v$  selon Eq. (9).  $T_v$  est actualisée dans  $\Omega_v$  en utilisant la relation d'état, sauf sur l'interface où la condition  $T_v = T_{\text{sat}}(P)$  est employée. L'équation de quantité de mouvement est alors intégrée, par une technique de prédiction-projection :  $p_d$  est déterminée par une équation elliptique pour satisfaire  $\text{div}(\rho_v \mathbf{v}_v) = -\partial_t \rho$ , la seconde relation approchée de saut  $\rho_v \mathbf{v}_v \cdot \mathbf{n}$  donnant la condition aux limites. Pour finir, la température dans le liquide est calculée, avec à l'interface  $T_l$  donnée par la nouvelle pression  $P$  au temps  $t_{n+1}$ .

### 3. Résultats et discussion

On présente les résultats obtenus dans le cas 1D cartésien suivant : une cavité linéique de longueur  $L$  contient une phase liquide ( $0 \leq x \leq x_s$ ) en équilibre avec sa vapeur ( $x_s \leq x \leq L$ ) ; la position de l'interface est repérée par la coordonnée  $x_s$ . Le système est initialement à la pression  $P_0$ , à la température de saturation  $T_0 = T_{\text{sat}}(P_0)$  et la position de l'interface est  $x_{s0}$ . La paroi en  $x = L$  est adiabatique tandis la paroi  $x = 0$  est brusquement portée à la température  $T_w$ . L'état stationnaire obtenu correspond à une température et à une pression uniformes dans la boîte, respectivement égales à  $T_f = T_w$  et à la pression de vapeur saturante  $P_f = P_{\text{sat}}(T_w)$ . Les calculs sont conduits dans une cavité de longueur  $L = 100 \mu\text{m}$ . Le fluide est de l'eau avec les propriétés thermophysiques suivantes :  $P_0 = 101\,325 \text{ Pa}$ ,  $L_v(T_0) = 2\,251\,200 \text{ J kg}^{-1}$ ,  $\rho_l = 958,8 \text{ kg/m}^3$ ,  $k_l = 0,68 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ,  $c_{pl} = c_{vl} = c_l = 4216 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ,  $\mu_l = 2,79 \times 10^{-4} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,  $r = 461,89 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ,  $k_v = 0,0248 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ,  $c_{pv} = 2034 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ,  $\mu_v = 1,21 \times 10^{-5} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . La température imposée en paroi vaut  $T_w = 393,15 \text{ K}$ . Certains résultats peuvent être comparés avec des valeurs théoriques issues de la thermodynamique classique. La position de l'interface dans l'état final est obtenue à partir de la relation suivante  $\rho = \alpha_f \rho_{vf} + (1 - \alpha_f) \rho_l$ , où  $\alpha_f$  est le taux de vide dans l'état final défini par  $\alpha_f = (L - x_{sf})/L$ . La masse volumique  $\rho$  reste constante tout au long de la transformation, ce qui permet d'écrire :

$$x_{sf} = L - \frac{\rho_l - \rho_{v0}}{\rho_l - \rho_{vf}} (L - x_{s0}) \quad (11)$$

La quantité de chaleur consommée au cours de la transformation,  $Q$ , est calculée en utilisant le premier principe appliqué à une évolution isochore :  $Q = U_f - U_0$ , où  $U$  désigne l'énergie interne du fluide contenu dans la cavité. La détermination de  $Q$ , indépendante du chemin suivi, est réalisée en considérant dans un premier temps la condensation complète de la vapeur sur le palier de liquéfaction  $P = P_0$ , suivie d'un chauffage isochore du liquide saturant jusqu'à la température de saturation  $T_f$  et enfin de la vaporisation sur le palier de liquéfaction  $P = P_f$  d'une masse de vapeur égale à  $m_{vf}$ . La quantité  $m_{vf}$  représente la masse de vapeur présente à l'état final, égale à  $m_{vf} = \rho_{vf}(L - x_{sf})$ . On obtient finalement pour  $Q$  :

$$Q = (L - x_{s0}) \left[ \rho_{v0} F(T_0) - \rho_{vf} \frac{\rho_l - \rho_{v0}}{\rho_l - \rho_{vf}} F(T_f) \right] + [(\rho_l x_{s0} + \rho_v (L - x_{s0})) c_l (T_f - T_0)] \quad (12)$$

où

$$F(T_k) = p_k \left( \frac{1}{\rho_{vk}} - \frac{1}{\rho_l} \right) - L_v(T_k), \quad k = 0, f \quad (13)$$

Les résultats obtenus pour trois valeurs de la position initiale de l'interface,  $x_{s0} = 0,1L, 0,5L$  et  $0,9L$ , sont présentés dans le Tableau 1. L'accord entre les simulations et les valeurs théoriques prédites par la thermodynamique est très satisfaisant. Dans les deux cas, le déplacement de l'interface est infime, justifiant ainsi l'hypothèse d'interface immobile retenue pour le modèle faible Mach. Avant d'examiner l'évolution instationnaire du système, commençons par mettre en évidence les paramètres sans dimension caractérisant son comportement dans la phase vapeur. Un adimensionnement convenable est obtenu en choisissant pour temps de référence le temps caractéristique de diffusion thermique dans le liquide, soit  $t_{\text{ref}} = L_{\text{liq}}^2 / \kappa_l$ , avec  $\kappa_l = k_l / (\rho_l c_l)$  et  $L_{\text{liq}}$  la longueur de liquide. En effet, c'est bien la diffusion dans le liquide qui est à l'origine de la vaporisation sur l'interface et par suite de l'augmentation de la pression. La vitesse dans la vapeur est une vitesse de transport convectif. Nous poserons donc  $v_{\text{ref}} = (L_{\text{vap}}) / t_{\text{ref}}$  avec  $L_{\text{vap}}$  la longueur de vapeur, soit encore  $v_{\text{ref}} = \kappa_l (L_{\text{vap}}) / L_{\text{liq}}^2$ . Les autres grandeurs de référence sont fixées aux valeurs initiales ( $P_0, T_0$ ) exception faite de la chaleur latente dont la valeur de référence est prise égale à  $c_{v0} T_0$ . L'équation de l'énergie sans dimension s'écrit ainsi dans la phase vapeur :

$$\bar{\rho} \left( \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{t}} + \bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla \bar{T} \right) = \gamma Di_{lv} \cdot \text{div}(\nabla \bar{T}) - (\gamma - 1) \bar{p} \cdot \text{div}(\bar{\mathbf{v}}) + \bar{m} \bar{L}_v \cdot \nabla H \quad (14)$$

avec

$$Di_{lv} = \left( \frac{L_{\text{liq}}}{L_{\text{vap}}} \right)^2 \frac{k_v}{k_l} \frac{c_l}{c_{p_v}} \frac{\rho_l}{\rho_{v0}}, \quad \rho_{v0} = \frac{P_0}{r T_0}$$

$Di_{lv}$ , seul paramètre sans dimension caractérisant le problème, représente le rapport des temps caractéristiques de diffusion thermique respectivement dans la lame liquide et dans la lame de vapeur. Ainsi, quelle que soit la position initiale de l'interface, les termes d'advection, de compressibilité et de changement de phase sont du même ordre de grandeur. Le facteur  $Di_{lv}$  devant le terme  $\text{div}(\nabla \bar{T})$  est égal à  $1,29 \times 10^4$  pour  $x_{s0} = 0,9L$ , et à  $1,97$  pour  $x_{s0} = 0,1L$ . La diffusion thermique est donc l'effet dominant dans la vapeur lorsque  $x_{s0} = 0,9L$ , tandis qu'elle est du même ordre de grandeur que les autres termes lorsque  $x_{s0} = 0,1L$ .

On présente Figs. 1 à 4, l'évolution instationnaire pour le cas  $x_{s0} = 0,9L$ . Les résultats obtenus sur le champ de température avec les deux modèles sont superposés sur la Fig. 1 et montrent un excellent accord. Il en est de même pour la pression thermodynamique (Fig. 2). Dans le cas du modèle à pression unique, il s'agit d'une pression moyenne en espace (toutefois la pression est quasiment uniforme). La pression commence à croître lorsque la vaporisation démarre, soit lorsque le flux de chaleur sur l'interface devient significatif. La vitesse de l'interface, de l'ordre de  $10^{-7}$  m/s, montre une phase d'accélération suivie d'une phase de décélération plus lente (Fig. 3). La vitesse, rigoureusement nulle dans le liquide, est à chaque instant pratiquement linéaire dans la vapeur (Fig. 4). Dans ce cas ( $x_{s0} = 0,9L$ ), le profil de température présente une évolution monotone (Fig. 1), la température étant quasiment uniforme dans la vapeur. Ceci est une conséquence du fait que, comme nous l'avons montré précédemment, la convection et la compressibilité ont peu d'effet sur la dynamique dans la vapeur, essentiellement dominée par la diffusion thermique. Comme par ailleurs sur l'interface la température est fixée égale à  $T_{\text{sat}}(p)$ , le profil de température dans la vapeur est un profil de conduction thermique pure avec une condition aux limites de Dirichlet à gauche et de Neumann à droite, donc constant en espace et égal à  $T_{\text{sat}}(p)$ .

Dans le deuxième cas pour lequel  $x_{s0} = 0,1L$ , présenté dans la Fig. 5 l'épaisseur du domaine liquide plus faible conduit à des phénomènes différents du cas précédent. Le flux de chaleur sur l'interface, plus élevé dans ce cas, engendre un flux de vaporisation bien supérieur. L'augmentation de pression qui en résulte conduit à un chauffage plus rapide dans la vapeur. La température de l'interface, contrainte par la courbe de saturation, croît en revanche moins vite. Il s'établit ainsi un gradient de température dans la vapeur, le maximum de température, obtenu en  $x = L$ ; la température de vapeur pouvant même temporairement dépasser la température de chauffage  $T_w$ . En conséquence, les flux de chaleur à l'interface provenant du liquide et de la vapeur renforcent le taux de vaporisation du liquide. Cet exemple illustre le rôle favorable des effets de compressibilité sur la vaporisation. La comparaison des résultats

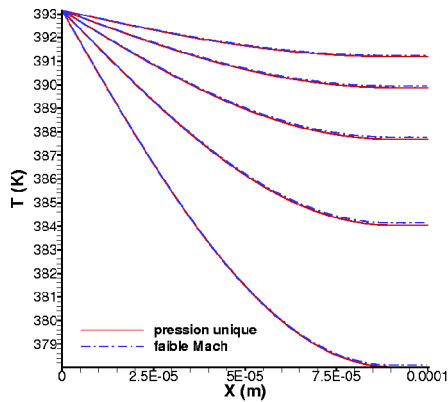


Fig. 1. Champs de température à différents instants : comparaison des deux modèles et  $x_{s0} = 0,9L$  (intervalle de temps 10 ms entre chaque courbe).

Fig. 1. Temperature fields at different times for the two models and  $x_{s0} = 0,9L$  (time interval between curve is 10 ms).

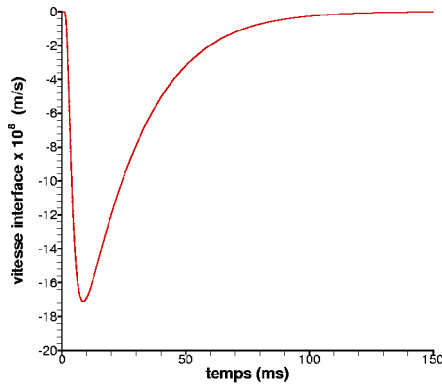


Fig. 3. Evolution temporelle de la vitesse de l'interface pour  $x_{s0} = 0,9L$  (modèle à pression unique).

Fig. 3. Time evolution of the interfacial velocity for  $x_{s0} = 0,9L$  (one-field formulation).

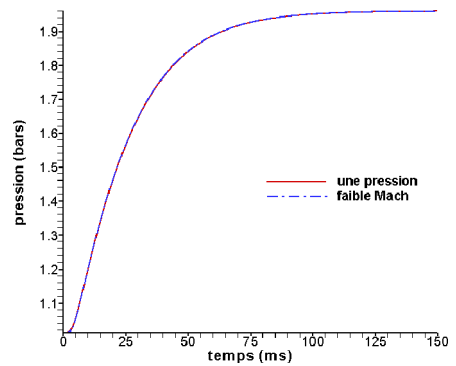


Fig. 2. Evolution de la pression thermodynamique en fonction du temps pour les deux modèles et  $x_{s0} = 0,9L$ .

Fig. 2. Time evolutions of the thermodynamic pressure for the two models and  $x_{s0} = 0,9L$ .

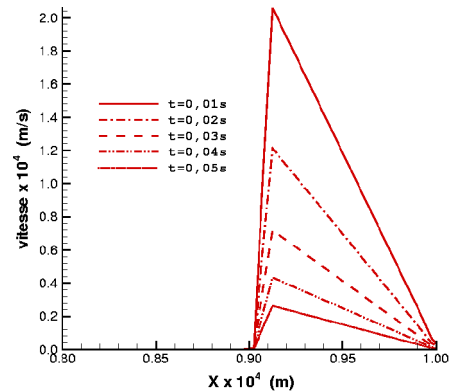


Fig. 4. Champs de vitesse à différents instants pour  $x_{s0} = 0,9L$  (modèle à pression unique).

Fig. 4. Velocity fields at different times for  $x_{s0} = 0,9L$  (one-field formulation).

obtenus par les deux modèles fait apparaître de légères différences sur les champs de température. Un raffinement du maillage pour le modèle à pression unique (Fig. 6) permet d'atténuer ces différences, notamment près de l'interface. L'écart résiduel découle de la représentation de l'interface en front tracking sur une zone de largeur contrôlée de quelques mailles. Cette zone est ainsi une zone de raccord des modèles correspondant à chacune des phases (i.e. pour  $H = 1$  – vapeur – ou  $H = 0$  – liquide). Ce raccord, actuellement effectué par simple interpolation, devra faire l'objet d'améliorations. Enfin, puisque la configuration  $x_{s0} = 0,1L$  est celle qui engendre les plus grandes valeurs de vitesse dans la vapeur, le nombre de Mach le plus élevé peut être estimé à partir des résultats de cette simulation. Sa valeur n'exécède jamais  $10^{-3}$ . Il est ainsi pertinent de considérer la vapeur comme faiblement compressible et a fortiori d'utiliser un modèle faible Mach pour la décrire.

#### 4. Conclusions

Le modèle présenté ici, destiné à la simulation numérique d'écoulements avec changement de phase liquide–vapeur a pour double objectif de rendre compte d'écoulements réels à grand rapport de densité en cavité fermée et de satisfaire la courbe de saturation. Les résultats obtenus sur un cas-test 1D cartésien assimilable à un autocuiseur, attestent de la capacité du modèle à atteindre ce double objectif, du moins dans des conditions où la dynamique de l'interface reste



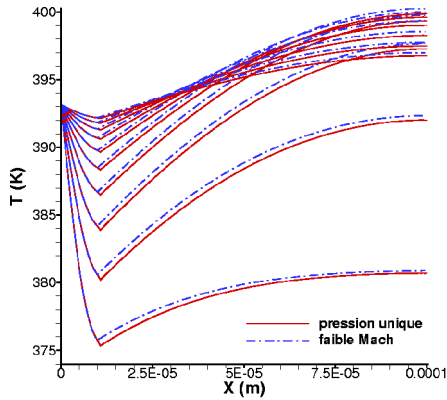


Fig. 5. Champs de température pour  $x_{s0} = 0,1L$  : modèle à pression unique (maillage 200 points) et approximation faible Mach.

Fig. 5. Temperature field for  $x_{s0} = 0,1L$ : one-field formulation (pression unique) using 200 mesh points and low-Mach approximation (faible Mach).

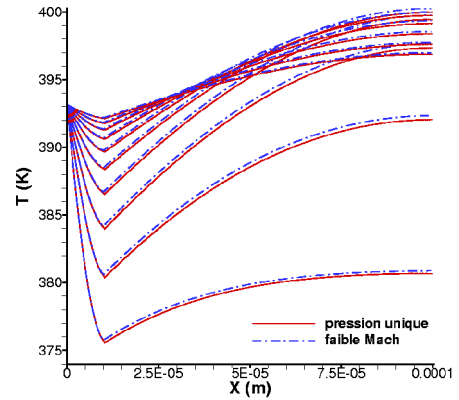


Fig. 6. Champs de température pour  $x_{s0} = 0,1L$  : modèle à pression unique (maillage 500 points) et approximation faible Mach.

Fig. 6. Temperature field for  $x_{s0} = 0,1L$ : one-field formulation (pression unique) using 500 mesh points and low-Mach approximation (faible Mach).

lente. La comparaison avec une solution approchée, obtenue à partir d'un code utilisant une approche faible Mach montre un excellent accord et révèle que le traitement de l'interface doit être amélioré. Les résultats obtenus dans le cas  $x_{s0} = 0,1L$  montrent que la description spatiale de la phase vapeur est indispensable pour rendre compte de l'intégralité des phénomènes. Le travail en cours porte sur l'implantation de la tension superficielle (1D sphérique) ainsi que sur l'extension à un code 2D. Des simulations avec une dynamique d'interface plus rapide vont également être développées.

## Références

- [1] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, Y.-J. Jan, A front-tracking method for the computation of multiphase flows, *J. Comput. Phys.* 169 (2001) 708–759.
- [2] S. Shin, D. Juric, Modeling three-dimensional multiphase flow using a level contour reconstruction method for front tracking without connectivity, *J. Comput. Phys.* 180 (2002) 427–470.
- [3] D. Juric, G. Tryggvason, Computations of boiling flows, *Int. J. Multiphase Flow* 24 (1998) 387–410.
- [4] D. Juric, V. Daru, M.C. Duluc, Simulation d'écoulements liquide–gaz à l'intérieur d'une cavité chauffée, in: *Congrès Français de Thermique, SFT, 2004*, pp. 95–100.
- [5] J.M. Delhaye, Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation, *Int. J. Multiphase Flow* 1 (1974) 395–409.
- [6] D.R. Chenoweth, S. Paolucci, Natural convection in an enclosed vertical layer with large horizontal temperature differences, *J. Fluid Mech.* 169 (1986) 173–210.
- [7] A. Majda, J. Sethian, The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion, *Combust. Sci. Technol.* 42 (1985) 185–205.