

# Simulation numérique de l'ablation liquide

Manuel Latige

▶ **To cite this version:**

Manuel Latige. Simulation numérique de l'ablation liquide. Mathématiques générales [math.GM]. Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, 2013. Français. NNT : 2013BOR14842 . tel-00858600

**HAL Id: tel-00858600**

**https://theses.hal.science/tel-00858600**

Submitted on 5 Sep 2013

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

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

N° d'ordre : 4842

# THÈSE

PRÈSENTÉE À

## L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

ÉCOLE DOCTORALE DE MATHÉMATIQUES ET INFORMATIQUE

Par Manuel LATIGE

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : Mathématiques appliquées et calcul scientifique



# SIMULATION NUMÉRIQUE DE L'ABLATION LIQUIDE



Soutenue le : 04 Septembre 2013

Après avis de:

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| M. | **Cédric GALUSINSKI**, | Professeur, | Université Sud Toulon, | *Rapporteur* |
| M. | **Bertrand MAURY**, | Professeur, | Université Paris Sud, | *Rapporteur* |

Devant le jury formé de:

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| M. | **Bertrand MAURY**, | Professeur, | Université Sud Toulon, | *Rapporteur* |
| M. | **Cedric GALUSINSKI**, | Professeur, | Université Paris Sud, | *Rapporteur* |
| M. | **Angelo IOLLO** , | Professeur, | Université Bordeaux 1, | *Examinateur* |
| M. | **Gérard GALLICE**, | Ingénieur, | CEA-CESTA, | *Examinateur* |
| M. | **Thierry COLIN**, | Professeur, | Université Bordeaux 1, | *Directeur* |

**-2013-**

*Confitebor Domino in toto corde meo ...*

# Remerciements

Trois ans déjà!!!

Les années passent vite, mais tout a une fin. Durant ces trois années riches en rencontres, en évènements joyeux pour certains et difficiles pour d'autres, beaucoup de personnes ont contribué de près ou de loin afin que cette thèse aboutisse. L'épreuve s'achève! L'heure des remerciements est donc venue.

Mes remerciements s'adressent en premier lieu à Gérard Gallice et à Thierry Colin. Je les remercie infiniment de m'avoir accordé leur confiance et pour avoir dirigé les travaux depuis mon stage de PFE jusqu'à l'aboutissement de cette thèse. Avec une infinie patience et avec pédagogie, Gérard a su me faire partager sa grande expérience dans le domaine de l'analyse numérique, ainsi que son amour des mathématiques. Thierry, par nos nombreuses réunions de travail, m'a appris que tout problème a une solution. Il suffit juste de chercher au bon endroit avec un peu d'ingéniosité. Ils ont tous deux rendu cette thèse très enrichissante.

Je voudrais remercier chaleureusement Bertrand Maury et Cedric Galusinski pour avoir accepté de rapporter mes travaux. Je suis d'autant plus reconnaissant car ils ont accepté d'effectuer ce travail pendant l'été. Sans eux, la soutenance n'aurait pas pu avoir lieu dans des délais aussi courts.

Je remercie Angelo Iollo d'avoir participer à l'élabobartion de mon sujet de thèse et d'avoir accepter de faire partie de mon jury. Par la même occasion, je remercie Yannick Gorse, son thèsard maintenant diplomé, pour son aide apportée au début de ma thèse.

Je tiens également à remercier Jean Claudel et David Hébert pour toute l'aide qu'ils m'ont apportée. Ils ont fait preuve d'une grande patience et d'une grande disponibilité. Leur aide au sujet de l'implémentation pour l'un et de la physique pour l'autre (notamment au sujet de la loi d'état) ont été très bénéfiques à l'avancement de mes travaux.

Que serait une thèse en numérique sans les problèmes informatiques (configurations, Makefile, mise à jour, installations, etc)! Je souhaite donc remercier les informaticiens (ou "Geeks" dans le bon sens du mot, c'est à dire "passionnés") qui ont volé à mon secours à chaque fois avec une énorme disponibilité Cyril, Mathieu, Olivier, Cedric, ... Je n'ai jamais trop compris tout

ce qu'ils faisaient, mais ils l'ont fait. L'essentiel c'est que ça marche et que ça marche bien ! Alors merci beaucoup.

Un grand merci à l'équipe de l'IMB, particulièrement à Oliver Saut, qui m'a aidé à comprendre la Level Set, et l'équipe PLAFRIM.

Sans l'environnement propice, une thèse ne peut pas aboutir. Merci donc à Xavier et Pierre-Henri pour leur accueil au sein du labo. Je souhaiterais exprimer ma gratitude envers tous les membres de mon service au CEA-CESTA. Je ne pourrai pas tous vous citer mais j'ai pris plaisir à discuter et à manger le midi avec vous. Vous avez fait que ces années soient agréables et conviviales.

Je souhaite également remercier mes collègues doctorants qui ont partagé Sebastien, Thibaut, Mathieu, François et François, et qui pour certains partagent encore ces intenses moments qui font la thèse Gabriel, Mathieu, Nicolas, Pascal. Je souhaite à ces derniers un bon courage par la suite.

Je remercie également les deux stagiaires Guillaume et Guillaume.

Il me tient à coeur de remercier celles que l'on oublie trop souvent : les secrétaires Anne-Pascale et Martine. Je remercie particulièrement Anne-Pascale pour son efficacité, sa bonne humeur et sa disponibilité pendant ces trois années.

Enfin, il est grand temps de remercier tous ceux qui m'ont soutenu inconditionnellement sans parfois comprendre ce que je faisais. Mes parents et mon grand frère, qui malgré la distance (8000 km), s'évertuaient à me transmettre la chaleur de la Martinique. Je leur dédie cette thèse car ils m'ont toujours aidé, encouragé et soutenu même dans mes projets les plus fous. A tous les membres de ma grande famille, ceux restés au pays et ceux qui vivent ici, je ne vous oublie pas, vous êtes cher à mon coeur.

Je veux également remercier ceux qui ont fait de ma vie à Bordeaux un moment agréable : le groupe "Vie et Partage", le groupe de Gospel, mes frères dominicains, les choristes de Ste Eulalie, etc. A tous mes amis : **un grand MERCI !**

Dans ma langue maternelle qu'est le créole, je vous dis :

**Mwen ka di zot an bel mèsi pou tout' sa zot fè ba mwen ! Tan fè tan, tan kité tan ! Mè zot ka rété an tchè mwen ...**

# Table des matières


**I Introduction** **11**

**1 Introduction Générale** **12**
1.1 Contexte scientifique . . . . . 12
1.2 Présentation des différents types d'interactions en présence . . 14
1.3 Objectifs de la thèse . . . . . 18
1.4 Stratégie et revue des approches existantes . . . . . 18
1.4.1 Modélisation de la thermique multimatériaux dans le domaine solide . . . . . 19
1.4.2 Modélisation de l'écoulement diphasique . . . . . 20
1.4.3 Modélisation de différents couplages . . . . . 21
1.5 Descriptif des travaux . . . . . 22

**II Résolution numérique de la thermique multi-matériaux dans le solide** **27**

**2 Problèmes de thermique multi-matériaux sur maillage cartésien** **28**
2.1 Problématique . . . . . 28
2.1.1 Formulation du problème de thermique multi-matériaux 28
2.1.2 Formulation du problème elliptique . . . . . 30
2.2 Construction de la discrétisation spatiale en 1D . . . . . 31
2.2.1 Construction des représentations polynomiales dans les mailles duales . . . . . 33
2.2.2 Calcul des flux numériques et assemblage de la matrice 35
2.2.3 Extension de la méthode pour imposer des conditions de Dirichlet et de Neumann au bord . . . . . 39
2.3 Construction de la discrétisation spatiale en 2D . . . . . 44
2.3.1 Généralités sur la construction du schéma Volumes Finis 2D . . . . . 44
2.3.2 Construction de la représentation dans les mailles duales 46

2.3.3 Continuité de la méthode au passage d'une configuration de type **I** à **II**, ou inversement . . . . . 50
2.3.4 Assemblage de la matrice en 2D . . . . . 52
2.4 Extensions de la méthode à l'instationnaire . . . . . 56
2.5 Résultats numériques . . . . . 58
2.6 Conclusion . . . . . 63

**3 Résolution du problème de Stefan sans convection 65**
3.1 Problème de Stefan . . . . . 65
3.2 Algorithmes de résolution du problème de Stefan . . . . . 68
3.2.1 Synthèses des méthodes numériques existantes . . . . . 68
3.2.2 Algorithme de résolution du problème de Stefan . . . . 70
3.3 Principe de la Méthode Level Set . . . . . 71
3.3.1 Méthodes numériques pour le suivi d'interface . . . . . 71
3.3.2 Généralités sur la méthode Level-Set . . . . . 73
3.3.3 Déplacement d'interfaces . . . . . 75
3.3.4 Réinitialisation . . . . . 78
3.3.5 Extension de champ . . . . . 80
3.4 Résolution de l'équation de la chaleur dans chaque sous-domaine 82
3.5 Calcul de la vitesse à l'interface . . . . . 83
3.6 Résultats numériques . . . . . 85
3.6.1 Problème de Stefan 1D . . . . . 85
3.6.2 Problème de Stefan 2D . . . . . 88
3.7 Conclusion . . . . . 89

**III Résolution numérique de l'écoulement diphasique 94**

**4 Présentation du modèle diphasique 95**
4.1 Modélisation des écoulements multiphasiques . . . . . 95
4.2 Modèle à 7 équations . . . . . 98
4.3 Modèles diphasiques réduit à 5 équations . . . . . 100
4.3.1 Modèles diphasiques à 5 équations . . . . . 100
4.3.2 Modèle diphasique à 4 équations . . . . . 102
4.3.3 Modèle diphasique à 5 équations avec effets dissipatifs . 103
4.4 Lois d'état et fermeture du modèle diphasique . . . . . 104
4.4.1 Quelques rappels sur les relations thermodynamiques . 104
4.4.2 Limite incompressible . . . . . 108
4.4.3 Lois d'état . . . . . 109
4.4.4 Fermeture du modèle diphasique . . . . . 113

4.4.5 Modélisation de la phase gazeuse multi-espèces . . . . . 114
4.5 Conclusion . . . . . 119

**5 Propriétés mathématiques du modèle diphasique 120**
5.1 Hyperbolicité . . . . . 120
5.1.1 Vitesse du son de mélange . . . . . 121
5.1.2 Positivité de la vitesse du son de mélange . . . . . 124
5.1.3 Hyperbolicité du système . . . . . 124
5.2 Entropie mathématique . . . . . 124
5.2.1 Forme générale de l'entropie mathématique . . . . . 124
5.2.2 Température de mélange . . . . . 128
5.2.3 Expression de l'entropie mathématique de mélange pour les lois d'état de notre étude . . . . . 128
5.3 Le problème de Riemann . . . . . 129
5.3.1 Invariants de Riemann . . . . . 129
5.3.2 Problème de Riemann . . . . . 130
5.4 Domaines de convexité . . . . . 131
5.4.1 Convexité de l'ensemble des états à énergie et masse volumique positives . . . . . 131
5.4.2 Autres domaines convexes . . . . . 132
5.5 Conclusion . . . . . 133

**6 Résolution numérique du système diphasique 134**
6.1 Quelques rappels sur les solveurs de Riemann approchés . . . 135
6.1.1 Rappels sur les solveurs simples pour le cas conservatif 135
6.1.2 Rappels sur les solveurs simples pour le cas non-conservatif 138
6.1.3 Liens entre solveurs eulériens et solveurs lagrangiens . . 139
6.2 Construction via les états intermédiaires d'un solveur lagrangien-eulérien pour le système diphasique . . . . . 141
6.2.1 Construction d'un solveur de Godunov pour le modèle diphasique . . . . . 142
6.2.2 Conditions de positivité et d'entropie du solveur de Riemann (6.35) . . . . . 144
6.2.3 Choix du coefficient $r = \dfrac{\mathcal{C}^+}{\mathcal{C}^-}$ 149
6.3 Second ordre en espace et en temps . . . . . 149
6.4 Corrections du solveur de Riemann pour traiter les écoulements à bas nombre de Mach . . . . . 150
6.4.1 Correction Low-Mach proposée par Rieper [Rie11] . . . 152
6.4.2 Correction Low Mach proposée par [TMD+08] . . . . . 156

6.5 Résultats numériques . . . . . 156
6.5.1 Résultats numériques mono-dimensionnels . . . . . 156
6.5.2 Résultats numériques bi-dimensionnel . . . . . 158
6.5.3 Correction Low Mach . . . . . 160
6.6 Conclusion . . . . . 162

**IV Etude de couplages fluide-solide 169**

**7 Etude numérique de différents couplages fluide-solide pour la rentrée atmosphérique 170**
7.1 Couplage gaz-solide . . . . . 170
7.1.1 Description des réactions d'ablation pour un bouclier thermique en composite Carbone/Carbone . . . . . 170
7.1.2 Conditions à la paroi du matériau . . . . . 175
7.1.3 Algorithme de couplage . . . . . 177
7.1.4 Approche numérique . . . . . 180
7.2 Couplage liquide-solide . . . . . 183
7.2.1 Problème de Stefan avec convection . . . . . 183
7.2.2 Condition à la paroi . . . . . 184
7.2.3 Algorithme de couplage . . . . . 185
7.3 Résultats numériques . . . . . 186
7.3.1 Simulation de l'ablation d'une sphère de carbone . . . 186
7.3.2 Simulation de la fusion dans une cavité entrainée de liquide . . . . . 189
7.4 Conclusion . . . . . 190

**V Conclusion et perspectives 193**

**VI Annexes 208**

**A 209**

# Première partie

# Introduction

# Chapitre 1

# Introduction Générale

## 1.1 Contexte scientifique

L'exploration spatiale, du fait de l'avancée de la technologie, repousse les limites des distances parcourables. Les modules d'exploration, après un long trajet, effectuent des photographies ainsi que des analyses de la surface de la planète sur laquelle ils sont envoyés. Ces informations sont ensuite envoyées sur la Terre pour être analysées pour les scientifiques.

Du fait des longs trajets à parcourir, les boucliers thermiques de ces modules font l'objet d'études de plus en plus approfondies afin de les dimensionner et de les optimiser pour les alléger tout en garantissant leur capacité à rentrer dans l'atmosphère. Avec des vitesses pouvant être supérieures à $5km.s^{-1}$ lors de la rentrée atmosphérique, les boucliers subissent une augmentation brutale de la température atteignant environ $4000K$ à cause de la friction sur l'atmosphère. A ces températures, les parois des engins sont le siège de phénomènes physico-chimiques complexes tels que la sublimation, l'oxydation, la nitridation, la fusion, .... Suivant la composition du bouclier, matériaux thermostructuraux Carbone/Carbone ou matériaux composites avec fibres de Carbone et matrices (Titane, ...), ces phénomènes sont plus ou moins accentués. Les réactions chimiques entraînent la récession de la paroi du bouclier thermique au cours de la trajectoire de rentrée. Ce phénomène de recul est usuellement appelé ablation. L'une des rentrées atmosphériques les plus sollicitantes a été celle de la sonde Galileo dans l'atmosphère de Jupiter le 19 octobre 1989. La figure 1.1 représente le bouclier de la sonde Galileo avant et après sa rentrée. La sonde est entrée dans l'atmosphère de Jupiter à une vitesse de $47.4km.s^{-1}$. La température derrière le choc a atteint $16000K$ et le flux thermique a dépassé $150MW.m^{-2}$. Durant sa rentrée, 26% de sa masse initiale a été vaporisée en approximativement $70s$. L'étude et

le dimensionnement du bouclier thermique s'avèrent vitaux pour les engins spatiaux.

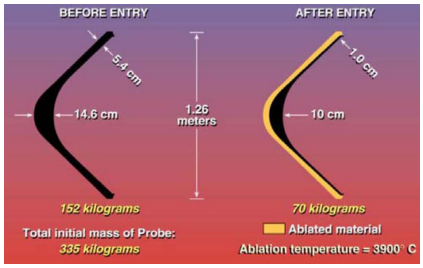



FIGURE 1.1 – Bouclier thermique de la sonde Galiléo. [LV03]

Plusieurs conséquences découlent de l'ablation du bouclier. La première est la modification du comportement du fluide autour du corps. En effet, une ablation différentielle par exemple favorise la transition laminaire/turbulent et induit des recirculations au voisinage de la paroi. La deuxième conséquence est la modification des flux pariétaux, c'est-à-dire du flux thermique et du flux de masse. Les expérimentations de laboratoire, par exemple les expériences avec jet de plasma sur une éprouvette (voir figure Fig. 1.2), ne reproduisent que partiellement les conditions de rentrée atmosphérique. Il est donc nécessaire d'appuyer ces études expérimentales à l'aide de la simulation numérique.

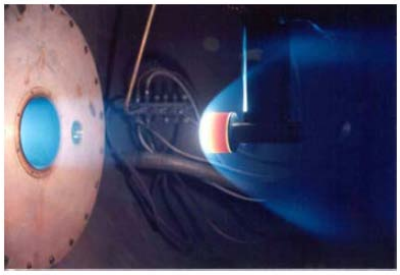


FIGURE 1.2 – Expérience de jet de plasma au Von Karman Institute.

La simulation permet d'approcher le comportement thermomécanique du matériau ainsi que les interactions de celui-ci avec l'écoulement à différentes échelles :

- au niveau de l'écoulement pouvant comporter de très petites échelles (jusqu'à 10 $\mu m$) en turbulent,
- au niveau de la fibre et de ce qui entoure celle-ci (microrugosité),
- au niveau du tissu (macrorugosité),

- au niveau de l'objet en lui même.

Dans cette étude, nous nous intéressons aux trois derniers niveaux d'interactions particulièrement.

## 1.2 Présentation des différents types d'interactions en présence

Lors de la rentrée atmosphérique, l'écoulement du fluide autour de l'objet spatial se situe dans le régime hypersonique et une onde de choc détachée se crée devant le bouclier thermique. Dans la zone située derrière ce choc, les températures et le flux de chaleur que reçoit la protection thermique sont à leur maximum. Notamment les transferts au sein de la couche limite (d'une taille de quelques $\mu m$ à quelques $mm$) sont importants car l'énergie cinétique est transformée en énergie thermique par friction. Pour contenir cet échauffement, le bouclier thermique est réalisé en matériaux composites thermostructuraux.

Un composite est un assemblage de deux matériaux dont l'un assure la tenue mécanique, les fibres, de carbone et l'autre la cohésion de la structure, la résine. Sous l'effet de l'échauffement la résine se liquéfie et la structure en carbone s'ablate. On peut ainsi observer à la surface du bouclier la formation de rugosités dans lesquelles s'écoulent la résine liquide ainsi que les gaz atmosphériques. La dynamique de ces écoulements de type diphasique peut être complexe. En effet, de nombreux phénomènes entrent en jeu, dont le changement de phase, la turbulence (ou non) de l'écoulement, l'apparition de points triples (interfaces solide-gaz-liquide) ou encore les effets de tension de surface par exemple. Il s'agit dans cette thèse de contribuer au développement d'outils de simulation numérique permettant aux ingénieurs d'étudier et de comprendre les différents mécanismes présents dans de tels écoulements.

La figure Fig. 1.3 montre les différentes interfaces présentes à la paroi d'un matériau composite lors du processus d'ablation. Ces interactions sont de quatre types :

1. couplage thermique entre matériaux du composite résine-fibres,
2. réactions d'ablation à l'interface entre la fibre de carbone et l'écoulement gazeux,
3. changement de phase de la résine (réaction de fusion),

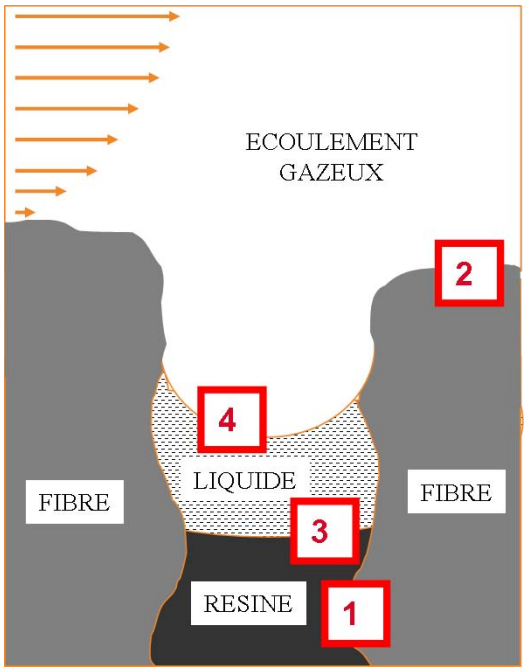



FIGURE 1.3 – Configuration des différentes interactions à la paroi d'un matériau composite lors du processus d'ablation.

4. interactions entre la phase liquide (issue de la fusion de la résine) et l'écoulement gazeux.

Chacune de ces interfaces est extrêmement complexe du point de vue de la modélisation.

**Couplage thermique entre matériaux du composite résine-fibres**

Le matériau composite du bouclier thermique est l'assemblage d'un tissage 3D de fibres de carbone et d'une résine. Comme le montre la figure Fig. 1.4, les fibres de carbone sont entrelacées et immergées dans la résine. Des poches de vide peuvent également être présentes dans ce type de matériau. Le bouclier thermique lors de la rentrée atmosphérique reçoit un important flux thermique sur la paroi. Celui-ci va se propager dans le composite à travers les surfaces de contact entre les différents constituants (fibres et résine). Chaque constituant possède des propriétés physiques différentes. La difficulté de la modélisation de ce couplage thermique réside dans la complexité géométrique des configurations de ce tissage. De plus, le matériau peut pyrolyser sous l'effet de ce flux thermique important, ce qui va dégrader ses propriétés physiques en profondeur.



FIGURE 1.4 – Structure d'un matériau composite C/C d'un bouclier thermique [YZX+08].

**Réactions d'ablations à l'interface entre la fibre de carbone et l'écoulement gazeux**

La paroi est une zone d'activité chimique intense. Au cours du temps, le carbone constitutif de la protection thermique réagit avec les molécules du milieu gazeux, ce qui dégrade le matériau. Suivant le régime des réactions et de la diffusion des espèces chimiques au travers de la couche limite visqueuse, le flux thermique reçu par le bouclier est nettement différent. Pour le carbone les principales réactions d'ablation sont l'oxydation et la sublimation. En dessous de $1900K$, l'oxydation est la réaction dominante de l'ablation. Entre $1900K$ et $3000K$, le flux de masse induit par l'oxydation est quasiment constant car il est limité par la présence de l'oxygène dans la couche limite (l'intégralité de l'oxygène dans la couche limite est consommée). Au delà de $3000K$, la réaction de sublimation est largement prépondérante. Par ailleurs, s'ajoute aux réactions chimiques l'érosion mécanique.

**Changement de phase de la résine (réaction de fusion)** La résine assure la cohésion du composite, elle lie les fibres de carbone entre elles. La résine est souvent un alliage de métaux ou un matériau contenant du verre (Silice). En général, l'ablation conduit à la fusion de la résine avant celle des fibres, laissant à nu les fibres, voir figure Fig. 1.5. La phase liquide issue de la fusion va dans un premier temps couler sous l'effet du cisaillement de la couche limite. Elle peut également s'accumuler dans les creux de la paroi. Ceci peut avoir des effets notables sur l'aérodynamique du corps. Les coulures sur la paroi modifient la répartition du flux thermique et peuvent protéger les fibres des réactions chimiques comme l'oxydation (la couche de liquide empêche l'oxygène d'atteindre la paroi).

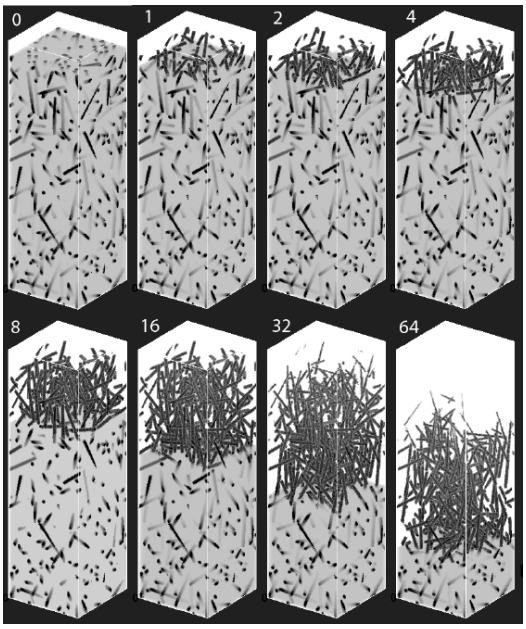



FIGURE 1.5 – Exemple d'ablation d'un matériau composite de type PICA [LCM]. L'ablation de la résine avant celle des fibres laisse à nu celles-ci.

**Interactions entre la phase liquide (issue de la fusion de la résine) et l'écoulement gazeux**

Les propriétés physiques telles que la densité, la viscosité, la capacité calorifique,..., sont très différentes entre les deux phases. La phase liquide est dense et extrêmement visqueuse. Il s'agit d'un écoulement dit "rampant". Les effets de tension de surface au sein des coulées de liquide entraînent la formation de gouttes. Celles-ci vont être emportées par l'écoulement gazeux. On a également la présence de points triples (gaz-solide-liquide). Il y a donc de nombreux changements de topologie de l'interface entre la phase gazeuse et la phase liquide.

Comme nous venons de le voir, le comportement physique de ces quatre interfaces sont interdépendantes. Du point de vue de la modélisation numérique, ce problème est complexe car il s'agit de réaliser des couplages entre plusieurs phases dans des conditions sévères : échanges de flux thermique importants, présence d'une phase liquide dans un écoulement gazeux dans des régimes allant de l'hypersonique au subsonique, réactions chimiques d'ablation des fibres avec injection d'espèces et changement de phase de la résine.

## 1.3 Objectifs de la thèse

Les travaux effectués dans cette thèse correspondent au développement de méthodes numériques capables de modéliser les différentes interfaces en présence ainsi que l'évolution des fluides ou des matériaux séparés par celle-ci. Chacune des interactions $\{1, 2, 3, 4\}$ sera étudiée. L'enjeu principal de la thèse est de proposer des méthodes et des algorithmes de couplage pour l'écoulement diphasique, la thermique multimatériaux et les changements de phase (fusion et sublimation). Dans le cadre de cette thèse, nous nous contenterons de mener l'analyse en 2D.

## 1.4 Stratégie et revue des approches existantes

La simulation numérique du problème précédemment décrit est d'autant plus délicate qu'on souhaite prendre en compte l'ensemble des phénomènes physiques mis en jeu. Les modèles d'ablation pour matériaux composites basés sur des tables thermodynamiques sont recalés sur des expériences de laboratoire. Cependant, l'impact de la phase liquide dans l'écoulement n'est pas modélisé.

Dans le cadre de cette thèse, nous avons fait le choix de traiter la phase solide composée de plusieurs constituants par une approche globale. De même, la phase fluide regroupant l'écoulement gazeux multi-espèces et la phase liquide sont également traitées par une approche globale également. On a donc un domaine solide couplé à sa paroi avec un domaine fluide.

Pour la phase solide, il est nécessaire d'élaborer une méthode prenant en compte la thermique des différents constituants du solide de façon globale.

Dans le domaine fluide, les deux phases liquide et gazeuse sont régies par le modèle de Navier-Stokes. Cependant, la phase liquide est faiblement compressible mais dilatable thermiquement, tandis que la phase gazeuse est fortement compressible.

Cette thèse se divise en trois parties. La première concerne la modélisation de la thermique multimatériaux dans le domaine solide. La seconde partie traite de la modélisation des écoulements diphasiques. Enfin dans la dernière partie, on aborde deux types de couplages présents à la paroi : la sublimation et le problème de Stefan pour la fusion.

### 1.4.1 Modélisation de la thermique multimatériaux dans le domaine solide

Le tissage du matériau composite peut s'avérer extrêmement complexe. En outre, au cours du processus d'ablation l'interface entre les fibres et l'écoulement gazeux, ainsi que celle entre la phase liquide et la résine, évolueront au cours du temps. Ceci peut entraîner des changements de topologie, voire la disparition du constituant solide. Le nombre d'interfaces à suivre peut être important. Pour cette raison, nous avons fait le choix de capturer les interfaces pour la résolution de la thermique multimatériaux. En effet, les méthodes lagrangiennes ou ALE (Arbitrary-Eulerian Method) ne permettent pas de gérer les changements de topologies ou la disparition d'un constituant solide.

La thermique solide est résolue sur un maillage cartésien. Pour simplifier celui-ci est uniforme dans cette étude. Nous souhaitions résoudre à l'ordre deux en espace ce modèle de thermique multimatériaux. La présence de plusieurs interfaces contraint à avoir une méthode numérique très locale pour la prise en compte des interfaces entre plusieurs composants. A ces interfaces, dans les cas simples (contact parfait entre deux solides), il y a continuité des flux et de la température à travers l'interface. Dans les cas compliqués, il peut y avoir une discontinuité de la température modélisant une fine couche d'air entre les matériaux. La discrétisation spatiale doit être capable d'imposer des conditions de saut tout en ayant un stencil compact.

L'opérateur spatial pour la thermique multimatériaux correspond à une équation elliptique à coefficients variables ("embedded elliptic equation"). Les méthodes élément finis ("finite element method") XFEM, par exemple [HLL11], enrichissent les fonctions de base classiques afin de prendre en compte la condition de saut de flux. Cependant, ces méthodes n'admettent pas de discontinuités de la solution. D'autres méthodes de types volumes finis ("finites volumes method") [SVAC11, CW11, JC98, PPH01, SBCL06, CCG11] ou de type différences finies [CW11] ont des stencils variables et étendus. La méthode de [OK06] a retenu notre attention puisqu'il s'agit d'une méthode de volumes finis à stencil compact de neuf points. Nous lui avons apporté quelques modifications.

En ce qui concerne la représentation et le suivi des interfaces, deux méthodes sont envisageables : la méthode des marqueurs ("front tracking") et la méthode Level Set ("front capturing"). Du fait des possibles changements de topologie des interfaces et du nombre d'interfaces dans le domaine solide, nous

mettons en oeuvre la méthode de type Level Set qui permet de repérer simplement et précisément ces interfaces. Il s'agit d'une caractérisation implicite de l'interface puisque l'interface correspond à une isovaleur d'une fonction régulière (au moins lipchitzienne). De plus, elle fournit des informations utiles à l'aide de ses dérivées comme la normale à l'interface. La fonction Level Set est initialisée par la fonction distance signée qui lui confère des propriétés intéressantes.

### 1.4.2 Modélisation de l'écoulement diphasique

La simulation numérique d'écoulements diphasiques suscite depuis deux décennies énormément d'intérêt dans la communauté scientifique en mécanique des fluides numériques. Les avancées théoriques, concernant les méthodes numériques et la modélisation, aussi bien que les progrès technologiques permettent à l'heure actuelle de simuler un vaste champ d'écoulements comportant une variété de phénomènes physiques à différentes échelles.

Dans notre cas, comme nous l'avons mentionné précédemment la phase gazeuse est fortement compressible. Dans les conditions de rentrée, l'écoulement de l'air est hypersonique. La phase gazeuse subit un choc détaché en amont du corps. Proche paroi dans la couche limite, l'écoulement est à haute température, visqueux et lent. La phase liquide injectée à la paroi est très visqueuse et faiblement compressible. Les deux phases sont non miscibles. On omettra dans cette étude la tension de surface pour simplifier. Les deux fluides ont des ratios de densité de plus de 2000 (la densité de l'aluminium liquide est de $2368 kg.m^{-3}$ et celle du titane est d'environ $4500 kg.m^{-3}$ à leurs températures de fusion respectives et à la pression atmosphérique), de coefficients de compressibilité isotherme de $10^{10}$, de dilatation thermique allant jusqu'à $10^3$. On recherche donc une méthode capable de traiter des écoulements ayant des régimes très éloignés (écoulement monophasique hypersonique en amont et écoulement lent diphasique dans la couche limite).

Il existe une abondante littérature concernant le traitement d'interfaces entre deux fluides (voir Chapitre 4). On distingue essentiellement deux approches, d'une part les méthodes d'interface diffuse et d'autre part les méthodes à diffusion nulle ou quasi nulle (méthodes à interface ponctuelle).

Pour les méthodes à diffusion nulle ou quasi nulle, l'interface est représentée explicitement et chaque phase est résolue séparément. On distingue parmi ces méthodes les approches *lagrangienne* (i.e. le maillage suit explicitement l'interface) et celles *eulerienne* (i.e. interface représentée par une fonction im-

plicite définie sur un maillage fixé telles que les méthodes dites de *front tracking* ou celles dites de *front capturing*). Les méthodes lagrangienne traitent difficilement les changements de topologie (détachements de gouttes ou injections de liquide). Les méthodes eulerienne, telles que les méthodes utilisant les technologies *Volume of fluid* ou *Level Set*, ont l'avantage de prendre naturellement en compte les changements topologiques. Il est possible de coupler des modèles compressible-compressible, compressible-incompressible, incompressible-incompressible.

En ce qui concerne les méthodes à interface diffuse, un seul et unique modèle [BN86] prend en compte les deux phases ainsi que l'interface. Les deux phases sont alors décrites par un modèle compressible. Des corrections sont alors envisageables pour remédier à la perte de précision dans le régime de type Low Mach [Mur03, Bra07].

En prenant pour critère de choix le temps de calcul, la possibilité d'ajouter de nouvelles interfaces dans l'écoulement, d'avoir un écoulement gazeux supersonique voir hypersonique et la maniabilité, nous retenons ici les méthodes à interface diffuse. De plus, dans les couplages que nous avons à réaliser, les temps de simulation peuvent être longs face aux temps caractéristiques du fluide. Le critère de la possibilité d'optimisation du pas de temps de la partie fluide a également été déterminant dans le choix des méthodes à interface diffuse.

### 1.4.3 Modélisation de différents couplages

Le premier modèle de couplage que nous avons abordé est celui de la fusion d'un des matériaux solides. Ce processus est modélisé par le problème de Stefan, du nom du physicien slovène qui a caractérisé la solution du problème dans un cas simple à une dimension.

Dans les premiers travaux de la littérature sur le sujet, les phénomènes de convection ne sont pas pris en compte. Cette hypothèse implique que la densité du solide est égale à celui du liquide. Le problème de Stefan dans ce cas est un couplage thermique-thermique avec déplacement d'interface. Plusieurs méthodes et algorithmes sont envisageables. Il existe deux grandes familles de méthodes numériques : les méthodes à un domaine et les méthodes de suivi explicite de front. Dans la première catégorie de méthodes pour la résolution du problème de Stefan, on ne cherche pas directement la position de l'interface. Il s'agit de méthodes où l'interface est implicite (elle est déduite du champ de température ou d'enthalpie) [Vol87, CFC89, Dat92, MR02,

MD02, JVVVdZ06, ST09, OG] et la grille est fixe au cours du calcul. Dans la seconde catégorie, c'est à dire les méthodes de suivi de front, l'interface est explicitement repérée. Une approche est utilisée pour la déplacer : on peut citer les méthodes Level Set [GF04, OF03] ou des marqueurs ou ALE, etc. Nous avons retenue la méthode Level Set du fait des choix déjà effectués dans la section 1.4.1.

Dans un deuxième temps, les phénomènes de convection ont été pris en compte. Le fluide est incompressible avec une densité généralement égale à celle du solide. Ce choix du modèle incompressible se justifie car les écarts de température sont modérés, de l'ordre de la dizaine de degré au maximum. L'hypothèse de Boussinesq est alors utilisée dans les cas utilisant la gravité. Dans notre cas, les écarts de température peuvent atteindre $1000K$ du fait de l'échauffement du à la rentrée atmosphérique. Le liquide est alors quasi-incompressible, mais la dilatation thermique est suffisante pour être prise en compte. Un modèle compressible est alors envisageable. Ce choix est en accord avec celui effectué dans la section 1.4.2.

L'autre type de couplage abordé est celui de l'ablation caractérisée par la réaction de sublimation. Il s'agit dans ce cas d'un couplage solide-gaz. Des études ont été réalisées dans [Vel07, Mul10, CMRS03] par exemple. Nous nous sommes placés dans un cadre très simple : modèle simple de sublimation, sans chimie dans la phase gazeuse et sans turbulence. Alors que dans le cadre du problème de Stefan, le fluide est résolu en instationnaire, ici on choisit de résoudre l'écoulement gazeux en stationnaire en s'appuyant sur une analyse des temps caractéristiques du couplage.

## 1.5 Descriptif des travaux

Dans un premier temps, nous avons cherché à résoudre la thermique multi-matériaux dans le domaine solide. Ce travail fait l'objet du Chapitre 2. Pour cela, nous avons fait le choix de capturer l'ensemble des interfaces sur une grille cartésienne. L'opérateur spatial de cette thermique est représenté par une équation elliptique à coefficients variables et avec des conditions de saut de flux et de la solution à l'interface. L'objectif était d'obtenir une discrétisation spatiale d'ordre deux. Nous cherchions une méthode de préférence de type volumes finis possédant un stencil relativement compact. Du fait de la complexité et du nombre d'interfaces à prendre en compte, il est nécessaire que la méthode à retenir possède un stencil compact. [OK06] a mis au point une méthode hybride entre les éléments finis et les volumes

finis. Il s'agit en effet de représenter la solution dans les mailles duales par des polynômes $Q_1$ et d'utiliser ces représentations pour calculer analytiquement les flux sur les volumes de contrôle. Les conditions de saut à l'interface sont imposées grâce aux polynômes qui sont judicieusement choisis. Cette méthode est d'ordre 2 avec un stencil constant à 9 points en 2D. Néanmoins, [OK06] fait une distinction entre les différentes configurations géométriques possibles en fonction de la position de l'interface. Nous proposons donc une amélioration de cette méthode.

L'interface est discrétisée par une succession de segments. Dans chaque rectangle formé par les noeuds du maillage, deux configurations sont possibles : soit elle intersecte deux côtés adjacents ou soit deux côtés opposés de ce rectangle. Dans la méthode de [OK06], la prise en compte des conditions de saut diffère selon le type de configuration. Cette méthode utilise les conditions de saut en s'appuyant sur des points géométriques particuliers de l'interface. Dans ce cas, pour pallier des positions dégénérées de l'interface, un traitement particulier est nécessaire pour prendre en compte les conditions de saut et ainsi déduire les polynômes de représentation. Nous proposons une méthode où la détermination des polynômes est identique quelque soit la configuration de l'interface. Notre première tentative dans ce sens s'appuyait sur des polynômes de type $Q_1$. Cependant le traitement des conditions de saut conduisait à des singularités dans des cas particuliers. Nous avons finalement opté pour une représentation de type $P_2$. L'utilisation d'une paramétrisation de l'interface associée à un processus de minimisation sur les coefficients des polynômes permet d'éviter les singularités lors de la détermination des coefficients des polynômes. Cette méthode d'ordre 2 a pour avantage d'avoir un stencil constant à trois-points en 1D et de neuf-points en 2D. Il y a également continuité entre le traitement des différentes configurations géométriques de l'interface.

Les couplages entre le domaine solide et le domaine fluide utilisent des conditions de bord de type Neumann ou de Dirichlet (problème de Stefan) sur la paroi. Nous avons souhaité conserver la propriété de continuité entre les configurations géométriques. En se basant sur une analyse asymptotique, une extension de cette méthode permet de traiter des conditions de Dirichlet et Neumann sur un bord quelconque capturé sur une grille cartésienne sans trop de modifications. L'extension s'apparente à la méthode de pénalisation.

L'ensemble du travail, présenté dans le Chapitre 2, a été valorisé par une publication [LCG13] et a donné lieu à trois présentations orales lors des conférences suivantes : CANUM-2011 (Lorient, France), MULTIMAT-2011 (Arcachon, France) et ECCOMAS-2012 (Vienne, Autriche).

Dans le chapitre 3, la résolution numérique du problème de Stefan sur grille cartésienne a été abordée. Ce traitement numérique repose sur la technique developpée pour le problème de thermique multimatériaux au Chapitre 2. Afin de suivre l'interface, la méthode Level Set a semblé la mieux adaptée à cette étude. La fonction distance signée est le choix le plus indiqué pour la fonction Level Set. Cependant, l'équation d'avection ne conserve pas les propriétés de distance. Un algorithme de redistanciation est alors nécessaire. De plus, le bilan d'énergie (appelé également condition de Stefan) qui définit la vitesse de l'interface n'est valable que sur l'interface. Nous avons donc mis en place un algorithme d'extension du champ de vitesse dans une zone proche de l'interface. La problème de Stefan sans convection a donc pu être résolu à partir de la thermique multimatériaux.

La seconde partie de notre étude a porté sur la modélisation des écoulements diphasiques. Comme il a été justifié dans la section 1.4.2, nous avons fait le choix des méthodes à interface diffuse. En effet, on peut à la fois traiter l'écoulement gazeux hypersonique amont et l'écoulement diphasique dans la couche limite. De plus, la gestion de nouvelles interfaces est naturelle (injection de liquide dans la phase gazeuse à la paroi). Les deux phases en présence sont non-miscibles. Elles sont également considérées en équilibre de vitesse et de pression. Le coût de calcul étant un critère important afin de réaliser un couplage efficace, nous avons opté pour le modèle à 5 équations proposé par [ACK00, ACK02, MSNA01]. Ce modèle est complété avec les effets visqueux et la phase gazeuse est décrite par un mélange multi-espèces sans chimie pour permettre le couplage par la réaction de sublimation. Les effets de tension de surfaces ne sont pas pris en compte

Pour le modèle à 5 équations, la phase liquide est couramment modélisée à l'aide de l'équation d'état stiffened gas ("gaz raide"). Les paramètres de cette loi sont obtenus à partir des courbes d'Hugoniot (comportement mécanique en tenue sous choc) du liquide considéré. Cependant, cette loi amplifie les effets thermiques. Nous avons donc dû mettre au point une loi d'état de type Mie-Gruneisen permettant de prendre en compte les deux paramètres physiques qui caractérisent l'incompressibilité : la dilatation thermique isobare et la compressibilité isotherme. Ce travail est décrit dans le Chapitre 4.

Nous avons poursuivi notre étude, au chapitre 5, en donnant les propriétés mathématiques du modèle à 5 équations. Ce travail porte essentiellement sur la caractérisation de toutes les entropies mathématiques de ce modèle dans le cas de mélange de phase ayant des lois d'états de type Mie-Gruneisen. Il s'agit là d'une généralisation des travaux de [Pé03] qui a effectué ce calcul

dans le cadre de l'équation d'état de type stiffened gas pour les deux phases. Une étude des propriétés mathématiques du modèle, nous a également permis d'identifier les matériaux envisageables dans notre étude. Il s'agit des matériaux ne présentant pas d'anomalies de dilatométrie (coefficient de dilatation thermique négatif).

Dans nos applications, les deux phases ont des propriétés physiques complètement différentes avec des ratios de densité de l'ordre de 2000 à 10000 (selon le métal liquide considéré), de coefficients de compressibilité isotherme d'environ $10^{10}$, et de coefficients dilatation thermique allant jusqu'à $10^3$. Ceci pose des problèmes de robustesse du schéma numérique. Nous souhaitions avoir un schéma numérique robuste pour mener à bien les couplages. Pour simplifier, nous n'avons pas considéré les termes visqueux. [KL10] propose un schéma numérique robuste. Cependant, ce schéma Lagrange-Projection décompose la résolution en deux étapes : une phase lagrangienne d'advection et une phase de projection sur maillage eulérien. Nous proposons un schéma numérique positif et entropique pour le système diphasique à 5 équations au Chapitre 6. Ce schéma, inspiré des travaux de [Gal02], est robuste et a l'avantage d'être à une seule étape. L'équation d'advection de la fraction volumique du modèle à 5 équations doit être résolue sous une forme non-conservative [Abg96] afin de préserver les discontinuités de contact. On s'appuie sur une corrélation entre les schémas de type Godunov positif et entropique non-conservatif en coordonnées lagrangiennes pour obtenir un schéma entropique et positif non-conservatif en coordonnées eulériennes. De plus, on propose deux corrections Low Mach inspirées de la littérature [Rie11, TMD$^+$08] et adaptées à ce solveur.

La dernière partie, Chapitre IV, de cette étude a porté sur le traitement numérique de deux types de couplage fluide-solide. Le premier couplage traite du cas où la réaction de sublimation est dominante (température de paroi supérieure à $3000K$) avec un solide mono-matériau. Le domaine fluide a été discrétisé sur une grille curviligne. Ce type de grille est couramment utilisé dans les codes d'aérothermique. Elle permet d'imposer facilement les conditions de bord sur la paroi, l'advection de la grille est relativement simple et l'implicitation des schémas numériques est possible (afin de prendre des pas de temps les plus grands possibles).

Dans un premier temps, pour réaliser ce couplage, nous avons associé à cette grille curviligne du domaine fluide une grille cartésienne pour le domaine solide. Dans ce cas-là, le maillage curviligne s'appuie sur l'interface repérée par la fonction Level Set. Cependant, pour étudier les couplages de façon simple, un modèle de thermique mono-matériau a été implémenté sur un

maillage curviligne mobile, les maillages des domaines fluide et solide étant alors en vis-à-vis. Après avoir défini les conditions de couplage des deux domaines, une étude des temps caractéristiques montre que l'on peut résoudre le fluide en stationnaire et la partie solide en instationnaire. Ceci permet d'utiliser des pas de temps dans le fluide très élevés. La résolution de chacun des domaines a fait l'objet d'une parallélisation avec la librairie MPI.

Le second couplage étudié est celui du problème de Stefan avec convection. Comme le couplage précédent, on utilise deux grilles curvilignes en vis-à-vis. Après avoir décrit les conditions de paroi, l'analyse des temps caractéristiques montre que le domaine fluide doit être traité cette fois-ci en instationnaire. Les exemples traités constituent une préétude permettant d'appréhender de façon préliminaire la phénoménologie numérique des différents couplages.

# Deuxième partie

# Résolution numérique de la thermique multi-matériaux dans le solide

# Chapitre 2

# Problèmes de thermique multi-matériaux sur maillage cartésien

La seconde partie de cette thèse traite de la simulation numérique de changement de phase solide-liquide, caractérisé par le problème de Stefan. Dans cette partie, la partie fluide sera considérée sans convection. Il s'agira d'un couplage thermique-thermique. L'objet de ce chapitre est de présenter la méthode numérique pour la résolution de problèmes de thermique multi-matériaux. Le domaine solide pouvant être composé de plusieurs matériaux, nous proposons une méthode numérique basée sur la capture d'interfaces sur grille cartésienne. La méthode sera présentée ici en considérant deux solides en contact, mais celle-ci peut être naturellement étendue pour un nombre plus important de matériaux.

Pour commencer, nous décrirons le problème étudié. Nous expliciterons la discrétisation spatiale de la méthode en 1D puis en 2D. Nous conclurons ce chapitre par quelques résultats numériques.

## 2.1 Problématique

### 2.1.1 Formulation du problème de thermique multi-matériaux

Le domaine solide $\Omega$ est divisé par l'interface $\Gamma$ en deux sous-domaines disjoints $\Omega_1$ and $\Omega_2$, chacun correspondant à un matériau (voir figure 2.1). Les solides sont supposés en contact parfait, c'est à dire qu'il y a continuité du champ de température $T$ et des flux à travers $\Gamma$. Le système vérifié par la

température est formulé comme suit

$$\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (K \nabla T) = 0, \quad \text{dans} \quad \Omega = (\Omega_1 \cup \Omega_2) \setminus \Gamma \ , \tag{2.1}$$

$$[T]_\Gamma = T|_{\Gamma,1} - T|_{\Gamma,2} = 0, \tag{2.2}$$

$$[K \partial_n T]_\Gamma = K_1 \partial_n T|_{\Gamma,1} - K_2 \partial_n T|_{\Gamma,2} = 0. \tag{2.3}$$

Les quantités $\rho$, $C_v$ et $K$ sont respectivement la masse volumique, la capacité calorifique et la conductivité thermique. Elles sont supposées constantes dans chaque solide, avec la notation $\{\rho, C_v, K\} = \{\rho_i, C_{vi}, K_i\}$ dans $\Omega_i$, $i \in \{1, 2\}$. $\Upsilon|_{\Gamma,i}$ représente la trace de la fonction $\Upsilon$ sur $\Gamma$ dans le domaine $\Omega_i$, $i \in \{1, 2\}$. $[\Upsilon]_\Gamma = \Upsilon|_{\Gamma,1} - \Upsilon|_{\Gamma,2}$ traduit le saut de la fonction $\Upsilon$ à travers l'interface $\Gamma$. La notation $\partial_n \Upsilon = \nabla \Upsilon \cdot \vec{n}$ est adoptée pour exprimer le gradient dans la direction normale, où $\vec{n}$ est le vecteur normal unitaire à $\Gamma$ dans le sens $\Omega_1$ vers $\Omega_2$. La notation suivante est utilisée $\vec{.}$ (respectivement $\underline{.}$) pour tous les vecteurs géométriques (respectivement pour les autres types de vecteurs). Les conditions sur le bord $\partial\Omega \backslash \Gamma$ peuvent être indifféremment des conditions de type Neumann

$$-K \nabla T = \overline{q}, \text{ sur } \Gamma_{Neumann},$$

et/ou Dirichlet

$$T = \overline{T}, \text{ sur } \Gamma_{Dirichlet},$$

où $\overline{q}$ et $\overline{T}$ sont des fonctions définie pour $t \geq 0$ sur $\Gamma_{Neumann}$ et $\Gamma_{Dirichlet}$ respectivement avec $\Gamma_{Neumann} \cup \Gamma_{Dirichlet} = \partial\Omega \backslash \Gamma$ et $\Gamma_{Neumann} \cap \Gamma_{Dirichlet} = \varnothing$.

La méthode élaborée dans cette thèse s'appuie sur la discrétisation spatiale d'ordre 2 obtenue pour des problèmes elliptiques à frontière immergée sur grille cartésienne.

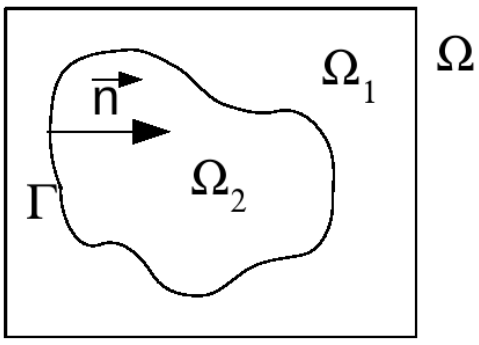



FIGURE 2.1 – Définition du domaine $\Omega$, des sous-domaines $\Omega_1$, $\Omega_2$, et de l'interface $\Gamma$

### 2.1.2 Formulation du problème elliptique

Considérons le problème elliptique bi-matériaux suivant, correspondant à une version stationnaire du problème (2.1.1) avec des conditions de saut généralisées :

$$-\nabla \cdot (K\nabla u) = f, \quad \text{dans} \quad \Omega = (\Omega_1 \cup \Omega_2) \setminus \Gamma \ , \tag{2.4}$$

$$[u]_\Gamma = h, \tag{2.5}$$

$$[K\partial_n u]_\Gamma = g, \tag{2.6}$$

où $h$ et $g$ sont des fonctions définies sur l'interface $\Gamma$. Les conditions sur le bord $\partial\Omega\backslash\Gamma$ peuvent être indifféremment des conditions de type Neumann

$$-K\nabla u = \overline{q}, \text{ sur } \Gamma_{Neumann},$$

et/ou Dirichlet

$$u = \overline{u}, \text{ sur } \Gamma_{Dirichlet},$$

où $\overline{q}$ et $\overline{u}$ sont des fonctions définie sur $\Gamma_{Neumann}$ et $\Gamma_{Dirichlet}$ respectivement avec $\Gamma_{Neumann} \cup \Gamma_{Dirichlet} = \partial\Omega \setminus \Gamma$ et $\Gamma_{Neumann} \cap \Gamma_{Dirichlet} = \varnothing$.

[LFK00] propose une méthode numérique pour résoudre (2.4)-(2.5)-(2.6) basée sur une approche 1D dans chacune de directions de l'espace. Il s'agit d'une méthode de différences finies utilisant les stencils standards, c'est à dire un stencil à 5 points en 2D et 9 points en 3D. Elle pour avantage d'être robuste et simple. Cependant, elle n'est que d'ordre 1 en norme $L^\infty$. Parmi les méthodes basées sur les méthodes aux différences finies, on peut citer [CW11] qui introduit des inconnues sur l'interface afin d'y imposer les conditions de saut. Cette méthode d'ordre 2 modifie ainsi la taille de la matrice en reliant les inconnues situées sur l'interface aux points de chacun de sous-domaines grâce à des interpolations linéaires. [GF04] utilise une méthode d'ordre 4 de différences finies s'appuyant sur un stencil large pour résoudre l'équation de la chaleur notamment. Plus le stencil est large et plus la prise en compte des conditions limites peut être compliquée si on souhaite conserver l'ordre numérique.

Les méthodes XFEM (finite element method) d'ordre 2, par exemple [HLL11], enrichissent les fonctions de base classiques afin de prendre en compte la condition de saut (2.6). Cependant, ces méthodes n'admettent pas de discontinuités de la solution ($h = 0$).

La méthode de volumes finis du second ordre de [SVAC11], comme celle de [CW11], ajoutent des inconnues sur l'interface et procèdent à des interpolations en s'appuyant sur les points voisins. Cette méthode n'a pas de stencil prédéfini au voisinage de l'interface et augmente la taille de la matrice en

fonction du nombre de points sur l'interface. Elle peut s'avérer coûteuse lors de la phase de résolution du système linéaire.

Colella et al. propose une méthode hybride entre les volumes-finis et les différences-finies dans [JC98, PPH01, SBCL06, CCG11]. Cette méthode d'ordre 2 à stencil variable utilise une résolution multigrille.

Du fait de la complexité et du nombre possible d'interfaces à prendre en compte, il est nécessaire que la méthode à retenir possède un stencil compact. [OK06] a mis au point une méthode hybride entre éléments finis et volumes finis. Il s'agit en effet de représenter la solution dans les mailles duales par des polynômes $Q_1$ et d'utiliser ces représentations pour calculer analytiquement les flux sur les volumes de contrôle. Les conditions de saut à l'interface sont imposées grâce aux polynômes qui sont judicieusement choisis. Cette méthode est d'ordre 2 avec un stencil constant à 9 points en 2D. Néanmoins, [OK06] fait une distinction entre les différentes configurations géométriques possibles en fonction de la position de l'interface. Nous proposons donc une amélioration de cette méthode.

L'interface est discrétisée par une succession de segments. Dans chaque rectangle formé par les noeuds du maillage (que nous appellerons dans la suite maille duale), deux configurations sont possibles : soit elle intersecte deux cotés adjacents ou soit deux cotés opposés de ce rectangle. Dans la méthode de [OK06], la prise en compte des conditions de saut diffère selon le type de configuration. Leur méthode emploie les conditions de saut en s'appuyant sur des points géométriques particulier de l'interface. Dans ce cas, pour pallier des positions dégénérées de l'interface, un traitement particulier est nécessaire pour prendre en compte les conditions de sauts et ainsi déduire les polynômes de représentation. Nous proposons une méthode où la détermination des polynômes est identique quelque soit la configuration de l'interface. Notre méthode repose sur l'utilisation d'une paramétrisation de l'interface, ainsi que sur un processus de minimisation. Dans notre cas, les polynômes sont de type $P_2$. Une extension de cette méthode permet de traiter des conditions de Dirichlet et Neumann sur un bord quelconque capturé sur une grille cartésienne sans trop de modifications. Dans un but pédagogique, nous présentons cette méthode en dimension un tout d'abord.

## 2.2 Construction de la discrétisation spatiale en 1D

Soit $\Omega$ le domaine $[0, L_x]$ discrétisé par une grille régulière. Les noeuds du maillages $P_i$ ont pour abcisse $x_i = (i-1)\triangle x$, $i = 1$ à $Nx+1$ avec $\triangle x = \frac{L_x}{Nx}$.

On définit $\omega_i = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \subset \Omega$, avec $x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$, le volume de contrôle, de longueur $\triangle x$, associé au noeud $P_i$, voir Fig. 2.2. La solution discrète a ses valeurs définies en chaque noeud du maillage.

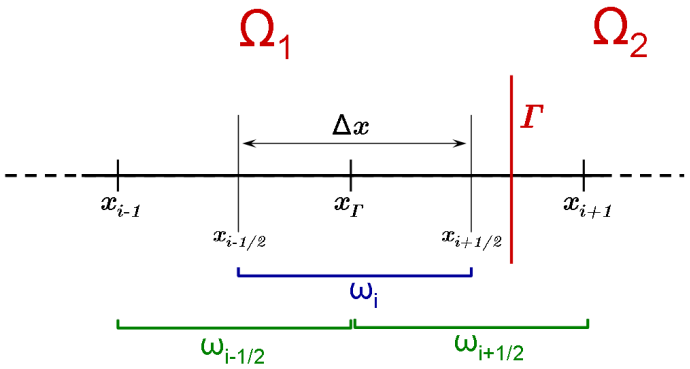



FIGURE 2.2 – Configuration géométrique en 1D : $\omega_i$ le volume de contrôle associé au noeud $P_i$, la maille duale $\omega_{i+1/2}$ (respectivement $\omega_{i-1/2}$) est dite irrégulière (respectivement régulière).

Par intégration du problème (2.4)-(2.5)-(2.6) sur le volume de contrôle $\omega_i$, on obtient

$$-\int_{\partial\omega_i} K\,\nabla u\cdot\vec{n}\,dl = \int_{\omega_i} f\,dS + \int_{\Gamma_{\omega_i}} g\,dl\,, \tag{2.7a}$$

$$[u]_\Gamma = u|_{\omega_{1i}} - u|_{\omega_{2i}} = h, \tag{2.7b}$$

où $\Gamma_{\omega_i} = \Gamma \cap \omega_i$ et $\partial\omega_i = (\partial\omega_{1i} \cup \partial\omega_{2i}) \setminus \Gamma_{\omega_i}$, où $\omega_{1i} = \omega_i \cap \Omega_1$ et $\omega_{2i} = \omega_i \cap \Omega_2$. Dans le cas où le volume de contrôle n'est pas intersecté par l'interface, la dernière intégrale du membre de droite de l'équation (2.59a) est nulle et $\omega_i = \omega_{1i}$ ou $\omega_i = \omega_{2i}$.

On appelle mailles duales les domaines $\omega_{i+\frac{1}{2}} = [x_i, x_{i+1}]$. La méthode proposée ici est une méthode hybride entre la méthode des volumes finis et celle des éléments finis. Afin d'évaluer l'intégrale du membre de gauche de (2.7a), une représentation polynomiale de la solution numérique est utilisée dans chaque maille duale. Les coefficients du polynôme sont évalués grâce aux valeurs de la solution aux noeuds du maillage et en fonction des conditions de sauts à l'interface (dans le cas où la maille duale est intersectée par l'interface) L'intégrale $\int_{\partial\omega_i} K\,\nabla u\cdot\vec{n}\,dl$ est alors calculée analytiquement à partir de cette représentation.

### 2.2.1 Construction des représentations polynomiales dans les mailles duales

**Traitement d'une maille duale sans interface** Le premier cas est celui d'une maille duale $\omega_{i+\frac{1}{2}}$ non-intersectée par l'interface, que nous qualifions de *régulière*. Le polynôme choisi pour la représentation est linéaire

$$u(x) = \gamma_0 + \gamma_1 x.$$

Les deux coefficients $\gamma_l$, $l \in \{0, 1\}$, sont obtenus simplement en résolvant le système

$$u(x_k) = \gamma_0 + \gamma_1 X_k = u_k, \quad k = i, i+1,$$

où $u_k$ est la valeur de la solution numérique au noeud $P_k$ d'abcisse $x_k$ et $X_k = x_k - x_0$ avec $x_0 = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$. On peut écrire

$$\underline{\gamma} = \underline{\underline{M_r}}\ \underline{u}, \tag{2.8}$$

avec

$$\underline{\gamma} = [\gamma_0, \gamma_1]^T\ ,\ \underline{u} = [u_i, u_{i+1}]^T\ , \tag{2.9}$$

$$\underline{\underline{M_r}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{-1}{\triangle x} & \frac{1}{\triangle x} \end{pmatrix}. \tag{2.10}$$

**Traitement d'une maille duale avec interface** Le second cas correspond à celui d'une maille duale $\omega_{i+\frac{1}{2}}$ qui cette fois est intersectée par l'interface $\Gamma$. Cette maille duale sera qualifiée d'*irrégulière*. L'interface est repérée par le point d'abcisse $x_\Gamma$. A gauche de l'interface (respectivement à droite) est associé l'exposant $A$ (respectivement $B$) dans la suite. On note donc $\omega^A_{i+\frac{1}{2}} = [x_i, x_\Gamma[$ et $\omega^B_{i+\frac{1}{2}} = ]x_\Gamma, x_{i+1}]$ (voir Fig. 2.3). Pour simplifier les notations, les indices $._{i+\frac{1}{2}}$ sont omis.

A la différence du cas précédent, une représentation polynomiale est utilisée de part et d'autre de l'interface

$$u^A(X) = \alpha_0 + \alpha_1 X, \quad X \in \omega^A, \tag{2.11a}$$

$$u^B(X) = \beta_0 + \beta_1 X, \quad X \in \omega^B, \tag{2.11b}$$

avec $X = x - x_\Gamma$, $\alpha_l$ et $\beta_l$, $l \in \{0, 1\}$, les coefficients des deux polynômes, qui sont à déterminer. Comme pour la maille duale régulière, les valeurs de la solution aux noeuds fournissent 2 relations

$$u(X_k) = u^A(X_k)\chi_{\omega^A} + u^B(X_k)\chi_{\omega^B} = u_k, \quad k \in \{i, i+1\} \tag{2.12}$$

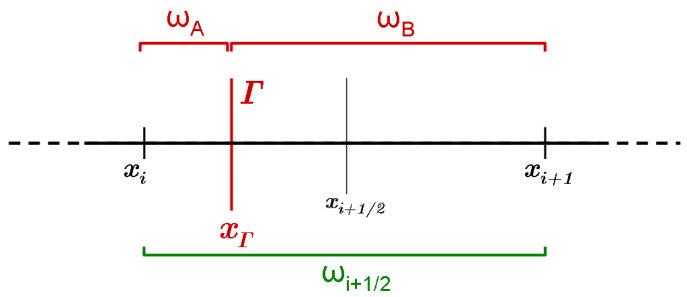



FIGURE 2.3 – Configuration géométrique dans une maille duale irrégulière. Le domaine $\omega_{i+1/2}$ est divisé en deux sous-domaines $\omega^A$ et $\omega^B$ par l'interface $\Gamma$.

où $\chi_{\omega^A}$ (respectivement $\chi_{\omega^B}$) est l'indicatrice du domaine $\omega^A$ (respectivement du domaine $\omega^B$). Il faut maintenant prendre en compte les conditions de saut à l'interface. Les conditions de saut (2.5) et (2.6) en 1D permettent d'obtenir deux relations

$$\alpha_0 - \beta_0 = h, \tag{2.13a}$$

$$K^A\alpha_1 - K^B\beta_1 = g, \tag{2.13b}$$

en se rappelant que l'interface $\Gamma$ est en $X = 0$. Ici, il est supposé que $\omega^A \subset \Omega_1$ et que $\omega^B \subset \Omega_2$. On en déduit l'écriture du système

$$\underline{\xi} = \underline{\underline{M_{ir}}}\ \underline{\lambda}, \tag{2.14}$$

avec

$$\underline{\xi} = \left[\underline{\alpha}^T, \underline{\beta}^T\right]^T \text{ où } \underline{\alpha} = [\alpha_0, \alpha_1]^T \text{ et } \underline{\beta} = [\beta_0, \beta_1]^T, \tag{2.15}$$

$$\underline{\lambda} = \left[\underline{u}^T, \underline{\pi}^T\right]^T \text{ où } \underline{\pi} = [h, g]^T, \tag{2.16}$$

$$\underline{\underline{M_{ir}}} = \frac{1}{D}\begin{pmatrix} -K^AX_{i+1} & K^BX_i & K^BX_i & X_iX_{i+1} \\ K^B & -K^B & -K^B & -X_{i+1} \\ -K^AX_{i+1} & K^BX_i & K^AX_{i+1} & X_iX_{i+1} \\ K^A & -K^A & -K^A & -X_{i+1} \end{pmatrix}. \tag{2.17}$$

Le terme $D = K^BX_i - K^AX_{i+1}$ est strictement négatif car on a par construction $X_i \leq 0$, $X_{i+1} \geq 0$ et $X_{i+1} - X_i = \triangle x$. Les coefficients peuvent être réécrits sous la forme

$$\underline{\alpha} = \underbrace{\frac{1}{D}\begin{pmatrix} -K^AX_{i+1} & K^BX_i \\ K^B & -K^B \end{pmatrix}}_{\underline{\underline{M^A_{ir}}}}\underline{u} + \underbrace{\frac{1}{D}\begin{pmatrix} K^BX_i & X_iX_{i+1} \\ -K^B & -X_{i+1} \end{pmatrix}}_{\underline{\underline{M^A_s}}}\underline{\pi}, \tag{2.18}$$

$$\underline{\beta} = \underbrace{\frac{1}{D}\begin{pmatrix} -K^A X_{i+1} & K^B X_i \\ K^A & -K^A \end{pmatrix}}_{\underline{\underline{M_{ir}^B}}} \underline{u} + \underbrace{\frac{1}{D}\begin{pmatrix} K^A X_{i+1} & X_i X_{i+1} \\ -K^A & -X_{i+1} \end{pmatrix}}_{\underline{\underline{M_s^B}}} \underline{\pi}, \qquad (2.19)$$

où $\underline{\underline{M_{ir}^A}}$, $\underline{\underline{M_s^A}}$, $\underline{\underline{M_{ir}^B}}$ et $\underline{\underline{M_s^B}}$ sont des sous-matrices de $\underline{\underline{M_{ir}}}$.

Les coefficients des représentations polynomiales ont ainsi été obtenus dans les cas d'une maille avec et sans interface. Ils tiennent compte des valeurs de la solution numérique aux noeuds, ainsi que des conditions de saut dans le cas où l'interface est présente dans la maille duale.

**Remarque :** Il est à noter que dans le cas d'une maille duale irrégulière, les polynômes dégénèrent vers celui d'une maille duale régulière dans deux cas particuliers. On se place ici dans l'hypothèse où les sauts sont nuls donc $h = 0$ et $g = 0$ ($\underline{\pi} = 0$).

Le premier cas est celui où le matériau du domaine $\Omega_1$ est le même que celui du domaine $\Omega_2$, c'est à dire que $K^A = K^B$. Dans ce cas, on obtient simplement $\alpha_0 = \beta_0$ et $\alpha_1 = \beta_1$. De plus, les coefficients de ce polynôme de cette maille irrégulière sont ceux de la maille régulière par unicité. Dans le calcul du polynôme de la maille régulière présenté précédemment, il suffit de considérer $x_0 = x_\Gamma$.

Le second cas dégénéré est le cas d'une interface qui tend à quitter la maille duale irrégulière. Dans la première situation, $X_i$ (respectivement $X_{i+1}$) tend vers 0 (respectivement vers $\triangle x$). Le domaine $\omega^B$ tend à devenir le domaine $\omega_{i+\frac{1}{2}}$. Les coefficients de $u^B$ tendent vers une limite indépendante des conductivités thermiques $K^A$ et $K^B$ puisque la limite du terme $D$ est $-K^B \triangle x$. On retrouve le polynôme d'une maille régulière exprimé avec $x_0 = x_\Gamma = x_i$. L'analyse est similaire dans la situation où $X_{i+1}$ (respectivement $X_i$) tend vers 0 (respectivement vers $-\triangle x$).

### 2.2.2 Calcul des flux numériques et assemblage de la matrice

A partir de ces représentations polynomiales dans chaque maille duale, il est alors possible de calculer analytiquement les flux sur le contour du volume de contrôle définis par le membre de gauche de l'équation (2.7a)

$$-\int_{\partial\omega_i} K\ \nabla u \cdot \vec{n}\ dl\ = -\left(\Im_{i+\frac{1}{2}} - \Im_{i-\frac{1}{2}}\right), \qquad (2.20)$$

où

$$\Im_{i+\frac{1}{2}} = \int_{\partial\omega_i \cap \omega_{i+\frac{1}{2}}} K\ \nabla u \cdot \vec{n}\ dl,\ \vec{n} = 1 \text{ en 1D.} \tag{2.21}$$

$\Im_{i+\frac{1}{2}}$ est le flux conservatif qui permet la construction du schéma numérique en fonction des $u_i$, $i \in \{0, ..., Nx\}$, des conditions de saut et du second membre $f$.

Dans le cas où $\omega_{i+\frac{1}{2}}$ est une maille duale régulière, on a

$$\Im_{i+\frac{1}{2}} = K_{i+\frac{1}{2}}\ \gamma_1 = K_{i+\frac{1}{2}} \frac{u_{i+1} - u_i}{\triangle x}, \tag{2.22}$$

avec $K_{i+\frac{1}{2}} = K_1$ (respectivement $K_{i+\frac{1}{2}} = K_2$) si $\omega_{i+\frac{1}{2}} \subset \Omega_1$ (respectivement $\omega_{i+\frac{1}{2}} \subset \Omega_2$).

Dans le cas d'une maille duale irrégulière $\omega_{i+\frac{1}{2}}$, deux situations sont à envisager : soit l'interface se trouve dans le volume de contrôle de la maille $i$ ($\Gamma \subset \omega_i$), ou soit l'interface se trouve dans le volume de contrôle de la maille $i+1$ ($\Gamma \subset \omega_{i+1}$), comme on peut le voir sur la figure Fig. 2.4.

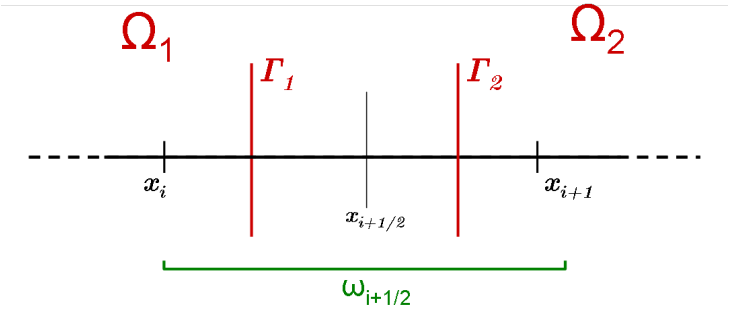



FIGURE 2.4 – Deux positions possibles $\Gamma_1$ et $\Gamma_2$ pour une interface dans la maille duale $\omega_{i+1/2}$ : $\Gamma_1$ (respectivement $\Gamma_2$) correspond à une interface dans le volume de contrôle de la maille $i$ (respectivement $i+1$).

De façon générale, le flux s'écrit

$$\begin{aligned}\Im_{i+\frac{1}{2}} = &\int_{\partial\omega_i \cap \omega_{i+\frac{1}{2}} \cap \omega^A} K^A\ \nabla u^A \cdot \vec{n}\ dl \\ &+ \int_{\partial\omega_i \cap \omega_{i+\frac{1}{2}} \cap \omega^B} K^B\ \nabla u^B \cdot \vec{n}\ dl.\end{aligned} \tag{2.23}$$

Grâce aux expressions (2.18) et (2.19), dans la première situation, on a donc

$$\begin{aligned} \Im_{i+\frac{1}{2}} = \quad & K^B\ \beta_1 = \frac{K^B K^A}{D}\,(u_i - u_{i+1}) - \frac{K^B K^A}{D} h - \frac{K^B X_i}{D} g, \\ = \quad & K^B\ \beta_1 = \frac{K^B K^A}{D}\,(u_i - u_{i+1}) - \frac{K^B K^A}{D} h + \frac{K^B \ell}{D} g, \end{aligned} \tag{2.24}$$

tandis que dans le seconde situation, on a

$$\begin{aligned} \Im_{i+\frac{1}{2}} = \quad & K^A\ \alpha_1 = \frac{K^B K^A}{D}\,(u_i - u_{i+1}) - \frac{K^B K^A}{D} h - \frac{K^A X_{i+1}}{D} g, \\ = \quad & K^A\ \alpha_1 = \frac{K^B K^A}{D}\,(u_i - u_{i+1}) - \frac{K^B K^A}{D} h - \frac{K^A\,(\triangle x - \ell)}{D} g, \end{aligned} \tag{2.25}$$

en posant $\ell = x_\Gamma - x_i$, voir Fig. 2.5 . Dans les deux situations, on identifie une conductivité équivalente $K_{i+\frac{1}{2}} = \dfrac{-K^B K^A \triangle x}{D} = \dfrac{K^B K^A \triangle x}{K^A(\triangle x - \ell) + K^B \ell}$. Il s'agit de la **moyenne harmonique** des conductivités pondérée par la distance des noeuds à l'interface.

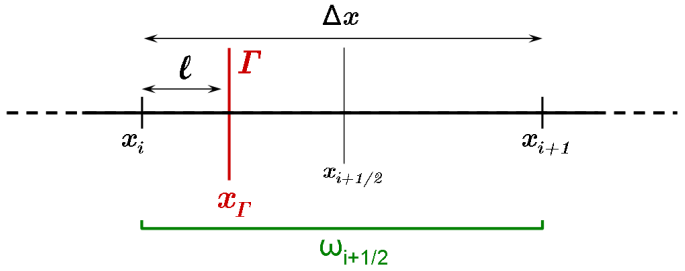



FIGURE 2.5 – Configuration géométrique d'une maille duale avec interface : on introduit la distance $\ell = x_\Gamma - x_i$ pour montrer la continuité du schéma numérique en fontion de $\ell$.

**Remarque :** Notons que dans le cas où $g = 0$, que le flux est continue en fonction de la position $\ell$ de l'interface, c'est à dire que pour $\ell = X_{i+1} = -X_i = \frac{\triangle x}{2}$ le flux peut être calculé avec l'un ou l'autre des polynômes de la maille irrégulière.

En ce qui concerne le membre de droite de (2.7a), les intégrales sont approchées comme suit

$$f_i = \int_{\omega_i} f \, dS = \begin{cases} \triangle x \; f(x_i), \text{ si } \Gamma \nsubseteq \omega_i, \\ |\omega_{1i}| \; f(x_i^1) + |\omega_{2i}| \; f(x_i^2), \text{ si } \Gamma \subset \omega_i, \end{cases} \tag{2.26}$$

$$\int_{\Gamma_{\omega_i}} g \, dl = \begin{cases} 0, \text{ si } \Gamma \nsubseteq \omega_i, \\ g, \text{ si } \Gamma \subset \omega_i, \end{cases} \tag{2.27}$$

où $|.|$ signifie la mesure du domaine et $x_i^1$ (respectivement $x_i^2$) est l'abcisse du barycentre du domaine $\omega_{1i}$ (respectivement $\omega_{2i}$).

Il est possible de construire le schéma numérique vérifié par les noeuds $i$ et $i+1$. Dans la situation n°1 de la figure Fig. 2.4, c'est à dire quand $\Gamma \subset \omega_i \cap \omega_{i+\frac{1}{2}}$, on obtient pour le noeud $i$

$$\begin{aligned} &\underbrace{\frac{K_1 K_2 \triangle x}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell}}_{K^*} \frac{u_i - u_{i+1}}{\triangle x} + K_1 \frac{u_i - u_{i-1}}{\triangle x} \\ &= f_i + \frac{K_1 K_2}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} h - \frac{K_2 \ell}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} g + g, \\ &= f_i + \frac{K_1 K_2}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} h + \frac{K_1(\triangle x - \ell)}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} g, \end{aligned} \tag{2.28}$$

et pour le noeud $i+1$

$$\begin{aligned} &K_2 \frac{u_{i+1} - u_{i+2}}{\triangle x} + \underbrace{\frac{K_1 K_2 \triangle x}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell}}_{K^*} \frac{u_{i+1} - u_i}{\triangle x} \\ &= f_{i+1} - \frac{K_1 K_2}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} h + \frac{K_2 \ell}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} g. \end{aligned} \tag{2.29}$$

Dans la situation de l'interface n°2, les schémas sont identiques à ceux présentés ci-dessus. En effet, dans cette situation seul le membre de droite semble différent du fait de la présence des termes dus au saut de flux (terme en $g$). Pour la maille $i$, il vaut

$$S_i = f_i + \frac{K_1 K_2}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} h + \frac{K_1(\triangle x - \ell)}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} g, \tag{2.30}$$

et pour la maille $i+1$

$$\begin{aligned} S_{i+1} \; &= f_{i+1} - \frac{K_1 K_2}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} h - \frac{K_1(\triangle x - \ell)}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} g + g, \\ &= f_{i+1} - \frac{K_1 K_2}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} h + \frac{K_2 \ell}{K_1(\triangle x - \ell) + K_2 \ell} g. \end{aligned} \tag{2.31}$$

Ainsi, on constate que le schéma numérique est continu en fonction de $\ell$.

La solution numérique du problème (2.4)-(2.5)-(2.6) est issue de la résolution du système linéaire suivant

$$\underline{\underline{M}}\ \underline{U} = \underline{F} \tag{2.32}$$

où $\underline{\underline{M}}$ la matrice tridiagonale, $\underline{U}$ le vecteur des inconnues tel que $U_k = u_k$ pour $0 \leq k \leq Nx$, $\underline{S}$ le vecteur du second membre. Les coefficients de la matrice $\underline{\underline{M}}$ sont issus d'un assemblage des sous-matrices $\underline{\underline{M_r}}$, $\underline{\underline{M_{ir}^A}}$ ou $\underline{\underline{M_{ir}^B}}$ selon les cas. Tandis que dans le second membre, on retrouve les termes associés aux intégrales de $f$ et aux conditions de saut par l'intermédiaire des coefficients des sous-matrices $\underline{\underline{M_s^A}}$ et $\underline{\underline{M_s^B}}$

Ce schéma a été obtenu par [LFK00] par une approche différences finies. La matrice $\underline{\underline{M}}$ est symétrique et toujours inversible. Il montre que ce schéma est d'ordre 2 sur quelques cas tests numériques.

Une étude analytique a été réalisée pour ce schema dans le cas $h = g = 0$ par [REH97]. Il démontre la consistance du schéma numérique ainsi que l'ordre 2 en norme $L^\infty$.

### 2.2.3 Extension de la méthode pour imposer des conditions de Dirichlet et de Neumann au bord

**Traitement d'une condition de Dirichlet sur $\Gamma$.** La méthode présentée précédemment a l'avantage majeur d'être continue par rapport à la position de l'interface. Nous souhaitons l'étendre pour le traitement des conditions de bord de type Dirichlet sur un bord capturé. Le problème se formule comme suit

$$-\partial_x\left(K\partial_x u\right) = f, \quad \text{dans} \quad \Omega_1 \setminus \Gamma\ , \tag{2.33}$$

$$u|_\Gamma = h \text{ sur } \Gamma, \tag{2.34}$$

voir Fig. 2.6. Les conditions sur le bord $\partial\Omega\backslash\Gamma$ peuvent être indifféremment des conditions de type Neumann

$$-K_1\nabla u = \overline{q}, \text{ sur } \Gamma_{Neumann},$$

et/ou Dirichlet

$$u = \overline{u}, \text{ sur } \Gamma_{Dirichlet},$$

où $\overline{q}$ et $\overline{u}$ sont des fonctions définies sur $\Gamma_{Neumann}$ et $\Gamma_{Dirichlet}$ respectivement avec $\Gamma_{Neumann} \cup \Gamma_{Dirichlet} = \partial\Omega_1 \setminus \Gamma$ et $\Gamma_{Neumann} \cap \Gamma_{Dirichlet} = \varnothing$.

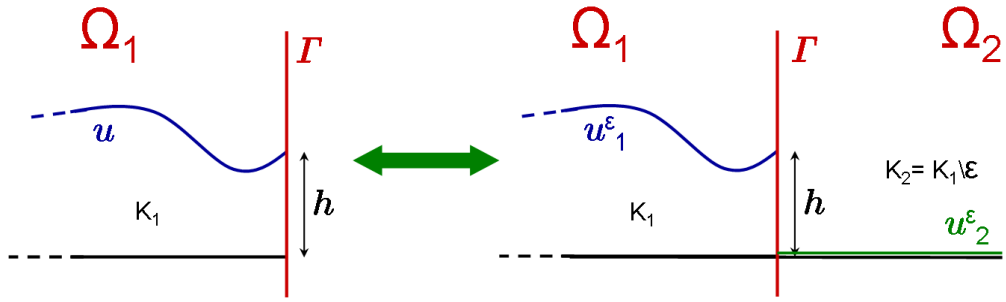



FIGURE 2.6 – Principe du traitement d'une condition de Dirichlet sur $\Gamma$ : On utilise la solution d'un problème global avec des conditions particulières sur le domaine $\Omega_2$ (à droite) pour approcher la solution du problème (2.33)-(2.34) (à gauche).

La difficulté principale est d'imposer la condition (2.34) sur $\Gamma$, sur une grille cartésienne avec une méthode volumes finis d'ordre 2. Il est possible de résoudre le problème (2.33)-(2.34) en s'appuyant sur l'analyse asymptotique suivante.

Soit $u^\varepsilon$ la solution du système (2.4)-(2.5)-(2.6) avec $g = 0$ et $K_2 = \dfrac{K_1}{\varepsilon}$ sur $\Omega_2$ où $\varepsilon$ est un paramètre réel non nul de petite valeur. $u^\varepsilon$ est utilisé pour approcher la solution du problème (2.33)-(2.34) (voir 2.6). Les conditions suivantes sont ajoutés pour les conditions de bord sur le domaine $\Omega_2$, ainsi que sur la définition du second membre sur ce même domaine

$$u^\varepsilon = 0, \text{ sur } \partial\Omega_2 \backslash \Gamma, \tag{2.35}$$

$$f = 0 \text{ sur } \Omega_2. \tag{2.36}$$

On procède à une analyse asymptotique de la solution $u^\varepsilon$ quand $\varepsilon$ tend vers 0. On définit ci-dessous le developpement asymptotique de $u^\varepsilon$

$$u^\varepsilon = u_1^\varepsilon = u_1^{\varepsilon,0} + \varepsilon u_1^{\varepsilon,1} \text{ sur } \Omega_1, \tag{2.37}$$

$$u^\varepsilon = u_2^\varepsilon = u_2^{\varepsilon,0} + \varepsilon u_2^{\varepsilon,1} \text{ sur } \Omega_2, \tag{2.38}$$

où $u_j^{\varepsilon,k}$ est l'approximation de $u^\varepsilon$ à l'ordre $k$ sur le domaine $\Omega_j$. Grâce à (2.38), (2.36) et (2.4), on obtient à l'ordre 0

$$\partial_x u_2^{\varepsilon,0} = 0, \text{ sur } \Omega_2. \tag{2.39}$$

De plus, (2.6) fournit

$$\partial_x u_2^{\varepsilon,0} = 0, \text{ sur } \Gamma. \tag{2.40}$$

car $K_2 = \dfrac{K_1}{\varepsilon}$. Les relations (2.40), (2.39) et (2.35) permettent de conclure

$$u_2^{\varepsilon,0} = 0, \text{ sur } \Omega_2. \tag{2.41}$$

Finalement, grâce (2.41) et (2.5), on a

$$u_1^{\varepsilon,0} = h, \text{ sur } \Gamma. \tag{2.42}$$

La résolution de l'équation (2.4) implique

$$-\partial_x \cdot \left(K \partial_x u_1^{\varepsilon,0}\right) = f, \quad \text{dans} \quad \Omega_1 \setminus \Gamma. \tag{2.43}$$

On en conclut qu'il est possible de résoudre le système (2.33)-(2.34) par la méthode mise au point pour le système (2.4)-(2.5)-(2.6) avec les hypothèses suivantes $g = 0$, $K_2 = \dfrac{K_1}{\varepsilon}$ sur $\Omega_2$, $u^\varepsilon = 0$ sur $\partial\Omega_2 \backslash \Gamma$ et $f = 0$ sur $\Omega_2$.

Afin de résoudre numériquement le problème (2.33)-(2.34), il reste à définir le paramètre $\varepsilon$. Pour approcher la solution à l'ordre 2 il est judicieux de prendre

$$\varepsilon = \bigcirc\left(\frac{1}{{N_x}^2}\right).$$

En introduisant le paramètre $\varepsilon$ dans le schéma numérique, dans le cas d'une interface dans la maille duale $i + \frac{1}{2}$, on a pour expression du flux

$$\Im_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{K_1 \triangle x}{\varepsilon \triangle x + (1-\varepsilon)\ell} \frac{u_i - u_{i+1}}{\triangle x} + \frac{K_1}{\varepsilon \triangle x + (1-\varepsilon)\ell} h, \tag{2.44}$$

où $\ell = x_\Gamma - x_i$ est la distance entre le noeud $P_i$ et l'interface (voir Fig. 2.5). On choisit d'imposer directement $u_{i+1} = 0$, c'est à dire que l'on rapproche de l'interface la condition (2.35). Il s'agit d'une modification locale du stencil de la maille $i$. En effet, il suffit d'annuler lors de l'assemblage de la matrice le coefficient liant $i$ à $i + 1$. On choisit le domaine $\Omega_2$ le plus minimal possible, qui correspond à la maille duale irrégulière, pour faire le développement asymptotique. De cette façon le conditionnement de la matrice globale est améliorée. En effet, au delà des mailles duales irrégulières, on peut prendre un coefficient $K_2$ de l'ordre de $K_1$ car du fait de la modification la solution dans le domaine $\Omega_1$ perçoit celle du domaine $\Omega_2$ comme étant strictement nulle. Avec ou sans cette modification, la méthode reste d'ordre 2.

Le flux dans la maille duale $i + \frac{1}{2}$ reçu par la maille $i$ devient donc

$$\Im_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{K_1 \triangle x}{\varepsilon \triangle x + (1-\varepsilon)\ell} \frac{u_i - h}{\triangle x}. \tag{2.45}$$

Dans le cas d'une méthode de type cut cell ou différences finies comme celle proposée dans [CFGK00] le flux pour imposer $u = h$ sur $\Gamma$ en tenant compte de la distance par rapport à l'interface est

$$\Im^*_{i+\frac{1}{2}} = -K_1 \frac{u_i - h}{\ell}. \tag{2.46}$$

On constate que la limite du flux $\Im_{i+\frac{1}{2}}$ est $\Im^*_{i+\frac{1}{2}}$ quand $\varepsilon$ tend vers 0. Cependant, il a une singularité quand $\ell \longrightarrow 0$. Le flux de notre méthode (2.45) a pour avantage d'être continue en $\ell$ pour $\ell \in [0, \triangle x]$.

**Traitement de la condition de Neumann sur $\Gamma$.** Par une analyse asymptotique similaire à celle effectuée précédemment, il est possible de traiter le problème suivant

$$-\partial_x \cdot (K \partial_x u) = f, \quad \text{dans} \quad \Omega_1 \setminus \Gamma \ , \tag{2.47}$$

$$K_1 \, \partial_n u|_{\Omega_1} = g \quad \text{sur } \Gamma. \tag{2.48}$$

La figure Fig. 2.7 montre schématiquement la démarche suivie pour résoudre le problème précédent. Les conditions sur le bord $\partial\Omega\backslash\Gamma$ peuvent être indifféremment des conditions de type Neumann

$$-K_1 \nabla u = \overline{q}, \text{ sur } \Gamma_{Neumann},$$

et/ou Dirichlet

$$u = \overline{u}, \text{ sur } \Gamma_{Dirichlet},$$

où $\overline{q}$ et $\overline{u}$ sont des fonctions définie sur $\Gamma_{Neumann}$ et $\Gamma_{Dirichlet}$ respectivement avec $\Gamma_{Neumann} \cup \Gamma_{Dirichlet} = \partial\Omega_1 \setminus \Gamma$, $\Gamma_{Neumann} \cap \Gamma_{Dirichlet} = \varnothing$. Dans le cas où l'on souhaite imposer une condition de Neumann sur le bord $\Gamma$, il est nécessaire que $\Gamma_{Dirichlet} \neq \varnothing$ pour que le problème soit solvable.

De façon similaire au cas de la condition de Dirichlet, soit $u^\varepsilon$ la solution du système (2.4)-(2.5)-(2.6) avec $h = 0$ et $K_2 = \varepsilon K_1$ sur $\Omega_2$ où $\varepsilon$ est un paramètre réel non nul de petite valeur. La solution $u^\varepsilon$ est utilisée pour approcher la solution du problème (2.47)-(2.48).

Les conditions suivantes sont ajoutées pour les conditions de bord sur le domaine $\Omega_2$, ainsi que pour la définition du second membre sur ce même domaine

$$\partial_x u^\varepsilon = 0, \text{ sur } \partial\Omega_2\backslash\Gamma, \tag{2.49}$$

$$f = 0 \text{ sur } \Omega_2. \tag{2.50}$$

On procède à une analyse asymptotique de la solution $u^\varepsilon$ quand $\varepsilon$ tend vers 0 comme pour le cas Dirichlet.

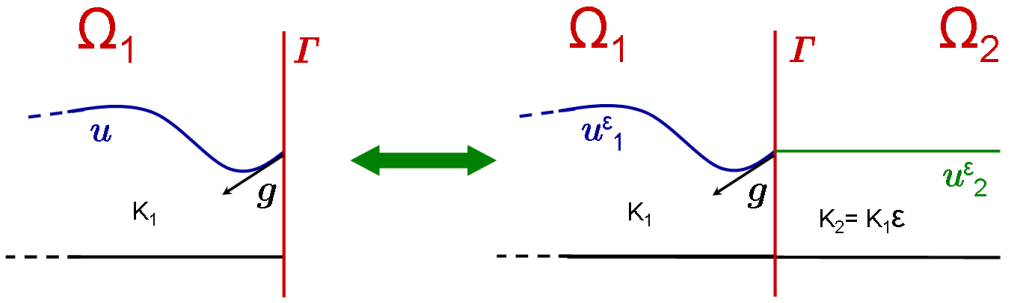



FIGURE 2.7 – Principe du traitement d'une condition de Neumann sur $\Gamma$ : On utilise la solution d'un problème global avec des conditions particulières sur le domaine $\Omega_2$ (à droite) pour approcher la solution du problème (2.47)-(2.48) (à gauche).

Grâce à (2.38), (2.50) et (2.4), on obtient à l'ordre 0

$$\triangle\, u_2^{\varepsilon,0} = 0, \text{ sur } \Omega_2. \tag{2.51}$$

La relation (2.6) fournit

$$K_1 \partial_x u_1^{\varepsilon,0} = g \text{ sur } \Gamma, \tag{2.52}$$
$$\partial_x u_1^{\varepsilon,1} = \partial_x u_2^{\varepsilon,0} \text{ sur } \Gamma. \tag{2.53}$$

car $K_2 = \varepsilon K_1$. A partir de (2.5), (2.37) et (2.38) on a

$$u_1^{\varepsilon,0} = u_2^{\varepsilon,0} \text{ sur } \Gamma, \tag{2.54}$$
$$u_1^{\varepsilon,1} = u_2^{\varepsilon,1} \text{ sur } \Gamma. \tag{2.55}$$

Ainsi la solution dans le domaine $\Omega_2$ ne dépend que de celle du domaine $\Omega_1$ puisque l'on a (2.51), (2.49), (2.50), (2.54) et (2.53). La résolution de l'équation (2.4) implique

$$-\,\partial_x \cdot \left(K \partial_x u_1^{\varepsilon,0}\right) = f, \quad \text{dans} \quad \Omega_1 \setminus \Gamma. \tag{2.56}$$

On en conclut que le système (2.47)-(2.48) peut être résolu par la méthode mise au point pour le système (2.4)-(2.5)-(2.6) avec les hypothèses suivantes : $h = 0$, $K_2 = \varepsilon K_1$ sur $\Omega_2$, $\partial u^\varepsilon = 0$ sur $\partial\Omega_2 \backslash \Gamma$ et $f = 0$ sur $\Omega_2$.

De la même façon que pour le cas Dirichlet, le paramètre $\varepsilon$ sera pris comme suit

$$\varepsilon = \bigcirc\left(\frac{1}{{N_x}^2}\right).$$

Du point de vue du schéma numérique, le schéma numérique associé à la maille $i$ pour une interface dans la maille duale $i+\frac{1}{2}$ donne

$$\begin{aligned} &\frac{K_1 \varepsilon \triangle x}{(\triangle x - \ell) + \varepsilon \ell} \frac{u_i - u_{i+1}}{\triangle x} + K_1 \frac{u_i - u_{i-1}}{\triangle x} \\ &= f_i + \frac{(\triangle x - \ell)}{(\triangle x - \ell) + \varepsilon \ell} g, \end{aligned} \tag{2.57}$$

Lorsque $\varepsilon$ est très petit, ce schéma a pour limite le schéma que l'on obtient en considérant directement $\Im^*_{i+\frac{1}{2}} = g$

$$K_1 \frac{u_i - u_{i-1}}{\triangle x} = f_i + g. \tag{2.58}$$

Comme pour le cas Dirichlet, les conditions appliquées sur le bord du domaine $\Omega_2$ (2.49) sont rapprochées de l'interface en imposant dans le cas d'une interface dans la maille duale $i+\frac{1}{2}$ directement lors de l'assemblage de la matrice $u_{i+1} = u_{i+2}$. Ainsi le domaine $\Omega_1$ se dissocie du domaine $\Omega_2$ tout en concervant la même méthode partout. Ceci permettra d'améliorer l'implémentation de cette méthode en 2D.

En conclusion, la discrétisation spatiale que nous avons developpée permet de résoudre des problèmes elliptiques avec des conditions de saut sur la solution et son flux au travers d'une interface. Cette méthode est d'ordre 2, des résultats numériques seront présentés dans la suite. Elle est continue par rapport à la position de l'interface.

Grâce à des modifications légères, cette méthode permet également de résoudre des problèmes à frontières immergées à l'ordre 2. Nous proposons dans la suite l'extension de cette méthode hybride éléments finis - volumes finis en 2D.

## 2.3 Construction de la discrétisation spatiale en 2D

### 2.3.1 Généralités sur la construction du schéma Volumes Finis 2D

Soit $\Omega$ le rectangle $[0, L_x] \times [0, L_y]$ discrétisé par une grille cartésienne régulière. Les noeuds du maillage ont pour coordonnées $P_{i,j} = ((i-1)\triangle x, (j-1)\triangle y)$, $i = 1$ à $Nx+1$, $j = 1$ à $Ny+1$ avec $\triangle x = \frac{L_x}{Nx}$ et $\triangle y = \frac{L_y}{Ny}$. Soit $\omega_{i,j} \subset \Omega$ le

volume de contrôle, de cotés de longueur $\triangle x$ et $\triangle y$, centré autour du noeuds $i, j$, voir Fig. 2.8. La solution discrète a ses valeurs définies en chaque noeud du maillage.

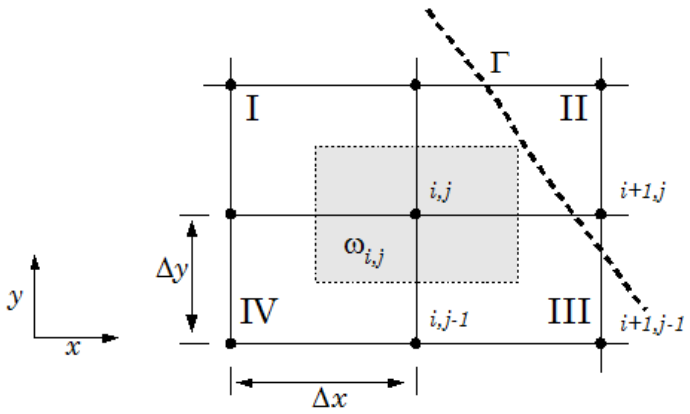



FIGURE 2.8 – Le volume de contrôle $\omega_{i,j}$ centré autour du noeud $i, j$. Deux types de mailles duales : les mailles duales régulières $I$, $IV$ et les irrégulières $II$, $III$.

Par intégration du problème (2.4)-(2.5)-(2.6) sur le domaine $\omega_{i,j}$

$$-\int_{\partial\omega_{i,j}} K\ \nabla u\cdot\vec{n}\ dl\ =\ \int_{\omega_{i,j}} f\ dS\ +\ \int_{\Gamma_{\omega_{i,j}}} g\ dl\ , \tag{2.59a}$$

$$[u]_\Gamma = u|_{\omega_{1\,i,j}} - u|_{\omega_{2\,i,j}} = h, \tag{2.59b}$$

où $\Gamma_{\omega_{i,j}} = \Gamma \cap \omega_{i,j}$ et $\partial\omega_{i,j} = \left(\partial\omega_{1i,j} \cup \partial\omega_{2i,j}\right) \setminus \Gamma_{\omega_{i,j}}$, où $\omega_{1i,j} = \omega_{i,j} \cap \Omega_1$ et $\omega_{2i,j} = \omega_{i,j} \cap \Omega_2$. Dans le cas où le volume de contrôle n'est pas intersecté par l'interface, la dernière intégrale du membre de droite de l'équation (2.59a) est nulle et $\omega_{i,j} = \omega_{1i,j}$ or $\omega_{i,j} = \omega_{2i,j}$.

Soit $\Sigma_{i,j}$ l'ensemble des rectangles, appelés ici mailles duales, adjacents au noeud $i, j$ (I-IV sur la Figure Fig. 2.8). Les sommets de la maille duale sont des noeuds où sont évaluées les valeurs de la solution discrète.

Le membre de droite de l'équation (2.59a) s'écrit sous forme discrète comme suit

$$-\sum_{M\in\Sigma_{i,j}}\sum_{s=1}^{2}\int_{e_s^M} K\ \nabla u\cdot\vec{n}_s\ dl\ =\ \int_{\omega_{i,j}} f\ dS\ +\ \int_{\Gamma_{\omega_{i,j}}} g\ dl\ , \tag{2.60}$$

où $e_s^M$, $s = 1, 2$ sont les cotés, avec les vecteurs normaux sortant $\vec{n}_1$ et $\vec{n}_2$, de $\partial\omega_{i,j}$ dans la maille duale $M$.

Par définition, une maille duale est dite irrégulière comme en 1D si elle est intersectée par l'interface $\Gamma$, sinon elle est dite régulière (voir Fig. 2.8). Une maille duale irrégulière est qualifiée de type **I** si l'interface intersecte deux cotés adjacents de celle-ci, sinon elle est de type **II** (voir Fig. 2.9).

Afin d'évaluer l'intégrale du membre de gauche de (2.60), une représentation polynomiale de la solution numérique est utilisée dans chaque maille duale. [OK06] reconstruit la solution numérique à l'aide de fonctions bilinéaires (polynômes de type $P_1$). Pour une maille duale régulière, les quatre coefficients inconnus du polynôme sont déterminés grâce à une combinaison linéaire des valeurs de la solution discrète $u$ aux quatre coins de la maille duale. Dans une maille irrégulière, deux polynômes sont utilisés, un par sous domaine de la maille duale. Les huit coefficients polynomiaux sont alors déterminés grâce aux quatre valeurs de coin auxquelles s'ajoutent quatre relations issues des conditions de saut. Cependant, les quatre relations issues des conditions de saut, dans le cas de [OK06], sont différentes entre les configurations géométriques de type **I** et **II**. Pour éviter des singularités dans les configurations géométriques dégénérées, une approche asymptotique à deux étapes est effectuée par [OK06].

Nous proposons une amélioration pour la détermination des représentations polynomiales. Dans les mailles duales régulières, la représentation bilinéaire est conservée. Cependant dans les mailles duales irrégulières, des polynômes $P_2$ permettent de traiter toutes les configurations géométriques sous le même formalisme. L'emploi d'une paramétrisation permet de d'imposer les conditions de saut en tout point pour la conditions de discontinuité de la solution et en moyenne pour la condition de saut de flux. A la différence de [OK06], la prise en compte de l'interface et des conditions de saut est identique quelque soit la configuration de l'interface : type **I** ou type **II**. De plus, un processus de minimisation sur les coefficients des polynômes conduit à un traitement continu de l'interface, en particulier lors du passage de la configuration de type **I** à celle de type **II** et inversement.

### 2.3.2 Construction de la représentation dans les mailles duales

**Traitement des mailles duales régulières.** Comme mentionné précédement, dans le cas d'une maille régulière, les quatre coefficients $\gamma_k$, $0 \leqslant k \leqslant 3$, de la réprésentation $Q_1$ (bilinéaire)

$$u(x, y) = \gamma_0 + \gamma_1 x + \gamma_2 y + \gamma_3 xy,$$

sont déterminés en fonction des valeurs de la solution discrète aux quatre coins. Dans le repère local $(x, y)$ qui a pour origine $O$ $(x_O, y_O)$ le centre de la

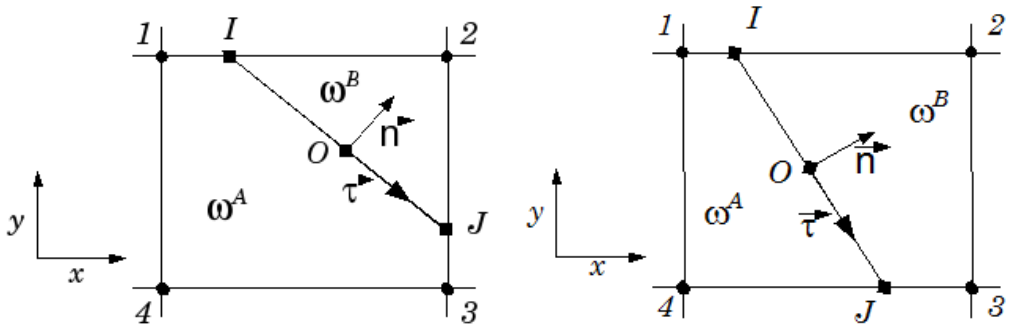



FIGURE 2.9 – Configuration des mailles duales irrégulières : type **I** (gauche) et type **II** (droite).

maille duale, les coefficients s'écrivent

$$\underline{\gamma} = \underline{\underline{M_r}}\ \underline{u}, \tag{2.61}$$

avec

$$\underline{\gamma} = [\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3]^T\ ,\ \underline{u} = [u_{c_1}, u_{c_2}, u_{c_3}, u_{c_4}]^T\ , \tag{2.62}$$

et

$$\underline{\underline{M_r}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2\triangle x} & -\frac{1}{2\triangle x} & -\frac{1}{2\triangle x} & \frac{1}{2\triangle x} \\ -\frac{1}{2\triangle y} & -\frac{1}{2\triangle y} & \frac{1}{2\triangle y} & \frac{1}{2\triangle y} \\ -\frac{1}{\triangle x\triangle y} & \frac{1}{\triangle x\triangle y} & -\frac{1}{\triangle x\triangle y} & \frac{1}{\triangle x\triangle y} \end{pmatrix}. \tag{2.63}$$

**Traitement des mailles duales irrégulières.** En ce qui concerne les mailles duales irrégulières, les deux types de configurations **I** et **II** sont traités indifféremment. En pratique, l'interface est matérialisée par un segment dans chaque maille duale. Soit $[IJ]$ ce segment et son milieu $O$, voir Fig. 2.9. L'interface sépare la maille duale en deux sous domaines disjoints $\omega^A$ et $\omega^B$ (voir 2.9). Une représentation polynomiale de type $P_2$ est utilisée de part et d'autre de l'interface

$$u^A(X,Y) = \alpha_0 + \alpha_1 X + \alpha_2 Y + \alpha_3 XY + \alpha_4 X^2 + \alpha_5 Y^2,\ \ X, Y \text{ dans } \omega^A, \tag{2.64a}$$

$$u^B(X,Y) = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 Y + \beta_3 XY + \beta_4 X^2 + \beta_5 Y^2,\ \ X, Y \text{ dans } \omega^B. \tag{2.64b}$$

avec $X = \frac{x-x_O}{\triangle x}$, $Y = \frac{y-y_O}{\triangle x}$. Le point $O\,(x_O, y_O)$ est l'origine du système de coordonnées $(X, Y)$ dans le système de coordonnées globales $(x, y)$.

Il faut donc déterminer les douze coefficients des polynômes $\{\alpha_k, \beta_k,\ k = 0...5\}$ en fonction des quatre valeurs de la solution numérique aux sommets de la maille duale $u_{c_k}$, $k = 1...4$ et en fonction également des conditions de saut. Les relations aux sommets de la maille duale fournissent quatre relations

$$u^A\,(X_{c_k}, Y_{c_k})\,\chi_{\omega^A} + u^B\,(X_{c_k}, Y_{c_k})\,\chi_{\omega^B} = u_{c_k},\quad k = 1...4, \tag{2.65}$$

où $\chi_{\omega^A}$ (respectivement $\chi_{\omega^B}$) est la fonction caractéristique du domaine $\omega^A$ (respectivement $\omega^B$), $(X_{c_k}, Y_{c_k})$, $k = 1...4$ les coordonnées des sommets dans le système de coordonnées locales (X,Y).

L'originalité de notre méthode repose sur la paramétrisation de l'interface qui est introduite maintenant afin de formuler les relations induites par les conditions de saut sur l'interface $\Gamma_\omega$ dans la maille duale, soit

$$\vec{OP} = t\vec{\tau},\ \forall\ P \in \Gamma_\omega, \tag{2.66}$$

où le paramètre $t$ est un réel et $\vec{\tau}\,(\tau_x, \tau_y)$ le vecteur tangent unitaire à l'interface $\Gamma_\omega$. En prenant en compte la paramétrisation, on exprime les deux polynômes $u^A$ et $u^B$ sur l'interface

$$u^A(t) = \alpha_0 + (\alpha_1, \alpha_2)\cdot\vec{\tau}t + \left(\alpha_3\tau_x\tau_y + \alpha_4\tau_x^2 + \alpha_5\tau_y^2\right)t^2, \tag{2.67a}$$
$$u^B(t) = \beta_0 + (\beta_1, \beta_2)\cdot\vec{\tau}t + \left(\beta_3\tau_x\tau_y + \beta_4\tau_x^2 + \beta_5\tau_y^2\right)t^2, \tag{2.67b}$$

et les valeurs de leurs gradients sont données par

$$\nabla u^A(t) = \begin{pmatrix} \alpha_1 + (\alpha_3\ \tau_y + 2\ \alpha_4\ \tau_x)\ t \\ \alpha_2 + (\alpha_3\ \tau_x + 2\ \alpha_5\ \tau_y)\ t \end{pmatrix}, \tag{2.68a}$$
$$\nabla u^B(t) = \begin{pmatrix} \beta_1 + (\beta_3\ \tau_y + 2\ \beta_4\ \tau_x)\ t \\ \beta_2 + (\beta_3\ \tau_x + 2\ \beta_5\ \tau_y)\ t \end{pmatrix}. \tag{2.68b}$$

La fonction $h$ caractérisant la discontinuité de la solution à l'interface est approchée dans chaque maille duale irrégulière sur l'interface $\Gamma_\omega$ par un polynôme $P_2$ telle que $h \simeq h_0 + h_1 t + h_2 t^2$, où $h_k$, $k = \{0, 1, 2\}$, sont les coefficients réels de cette approximation. Ceci conduit en utilisant (2.67) à :

$$\alpha_0 - \beta_0 = h_0, \tag{2.69a}$$
$$(\alpha_1, \alpha_2)\cdot\vec{\tau} - (\beta_1, \beta_2)\cdot\vec{\tau} = h_1, \tag{2.69b}$$
$$\left(\alpha_3\tau_x\tau_y + \alpha_4\tau_x^2 + \alpha_5\tau_y^2\right) - \left(\beta_3\tau_x\tau_y + \beta_4\tau_x^2 + \beta_5\tau_y^2\right) = h_2. \tag{2.69c}$$

Le saut de flux $g$ pour sa part est approché grâce à sa valeur moyenne le long de l'interface dans la maille duale notée $g_0$. La condition de saut des

flux normaux (2.6) conduit à considérer dans la maille duale $[K\partial_n u]_{\Gamma_\omega} \simeq g_0$. En imposant quelque soit le réel $t$ la condition précédente, il en résulte grâce à (2.68) que :

$$K^A(\alpha_1, \alpha_2) \cdot \vec{n} - K^B(\beta_1, \beta_2) \cdot \vec{n} = g_0, \quad (2.70a)$$

$$K^A \begin{pmatrix} \alpha_3\ \tau_y + 2\ \alpha_4\ \tau_x \\ \alpha_3\ \tau_x + 2\ \alpha_5\ \tau_y \end{pmatrix}^T \cdot \vec{n} - K^B \begin{pmatrix} \beta_3\ \tau_y + 2\ \beta_4\ \tau_x \\ \beta_3\ \tau_x + 2\ \beta_5\ \tau_y \end{pmatrix}^T \cdot \vec{n} = 0, \quad (2.70b)$$

où les coefficients $K^A$ et $K^B$ correspondent aux valeurs moyenne du coefficient $K$ dans les sous-domaines $\omega^A$ et $\omega^B$. C'est la même approche que [OK06]. La condition de saut sur les flux a été imposée en moyenne uniquement afin de permettre de traiter les configurations de type **I** et **II** avec le même formalisme.

Deux contraintes supplémentaires pour les coefficients des polynômes sont ajoutées, soient

$$\alpha_4 = \alpha_5, \quad (2.71a)$$

$$\beta_4 = \beta_5. \quad (2.71b)$$

Ces contraintes (2.71) assurent que si $K^A$ tend vers $K^B$ et que les conditions de saut sont nulles (i.e. pas des discontinuités entres les deux sous-domaines), alors les deux polynômes (2.64) seront identiques. En effet, dans le cas particulier où $K^A = K^B$, $[u]_{\Gamma_\omega} = 0$ et $[K\partial_n u]_{\Gamma_\omega} = 0$, les conditions (2.70) et (2.69) et (2.71) garantissent que $\alpha_k = \beta_k,\ k = 0...5$.

A ce niveau, il y a douze coefficients et onze relations. La dernière contrainte qui est introduite ici garantit l'unicité de la solution ainsi que d'autres propriétés qui sont détaillées dans la suite. La solution retenue sera celle qui minimise $\mid \omega^A \mid \alpha_4^2 + \mid \omega^B \mid \beta_4^2$, c'est à dire

$$\text{Trouver } \underline{\xi} \text{ qui minimise } \mid \omega^A \mid \alpha_4^2 + \mid \omega^B \mid \beta_4^2, \quad (2.72)$$

où $\underline{\xi} = [\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4]^T$ et $\mid \omega^A \mid$, $\mid \omega^B \mid$ sont les aires respectives de $\omega^A$ et $\omega^B$.

**Remarque :** Considérons par exemple le cas où $\mid \omega^A \mid \longrightarrow 0$ (i.e. la maille duale tend vers une maille duale régulière), la minimisation assure que $\beta_4 \longrightarrow 0$ et que la représentation $Q_1$ ainsi obtenue sur le domaine $\omega^B$ tende vers celle d'une maille régulière si $K^A$ tend vers $K^B$ et que les sauts sont nuls.

Les douze relations (2.65), (2.69), (2.70), (2.71) et (2.72) définissent un système linéaire dont la matrice $\underline{\underline{A}}$ est détaillée dans l'Annexe A. Après le

calcul de l'inverse de $\underline{\underline{A}}$, les douze coefficients des polynômes sont des combinaisons linéaires des valeurs de la solution numérique aux sommets de la maille duale $\underline{u}$ et des approximations des conditions de sauts dans celle-ci

$$\underline{\xi} = \underline{\underline{M_{ir}}}\ \underline{\lambda}, \tag{2.73}$$

avec

$$\underline{\lambda} = \left[\underline{u}^T, \underline{\pi}^T\right]^T,\ \underline{\pi} = [\ h_0, h_1, h_2, g_0]^T, \tag{2.74a}$$

où $\underline{\underline{M_{ir}}}$ est une matrice issue des coefficients de l'inverse de la matrice $\underline{\underline{A}}$, voir l'Annexe A. Toutes les configurations géométriques, types **I** et types **II**, sont traitées de la même façon. En effet, la paramétrisation permet d'imposer en tout point de l'interface une approximation des conditions de saut. Ces conditions d'interface ne sont pas imposés en des points particuliers qui pourraient mal dégénérer comme pour [OK06].

Comme en 1D, les coefficients des polynômes (2.73) peuvent être mis sous la forme suivante

$$\underline{\alpha} = \underline{\underline{M_{ir}^A}}\ \underline{u} + \underline{\underline{M_s^A}}\ \underline{\pi}, \tag{2.75a}$$

$$\underline{\beta} = \underline{\underline{M_{ir}^B}}\ \underline{u} + \underline{\underline{M_s^B}}\ \underline{\pi}, \tag{2.75b}$$

où $\underline{\underline{M_{ir}^A}}$, $\underline{\underline{M_s^A}}$, $\underline{\underline{M_{ir}^B}}$ et $\underline{\underline{M_s^B}}$ sont des sous-matrices de $\underline{\underline{M_{ir}}}$.

### 2.3.3 Continuité de la méthode au passage d'une configuration de type I à II, ou inversement

Une propriété interessante de notre méthode est de garantir la continuité de la solution numérique quand l'interface passe d'une configuration de type **I** à **II**, ou inversement. Nous nous plaçons dans la suite de ce paragraphe dans le cas où la solution est continue, c'est à dire $[u]_\Gamma = 0$.

Afin de vérifier cette propriété, considerons une maille duale avec trois configurations de l'interface (voir Fig. 2.10). La configuration $\Gamma_{\mathbf{I}}$ (respectivement $\Gamma_{\mathbf{II}}$) se refère à une configuration géometique où la maille duale est traitée avec une configuration de type **I** (respectivement **II**). La configuration $\Gamma_{\mathbf{0}}$ est position limite de l'interface que la maille duale passe du type **I** au type **II**, ou inversement. Il est à noter que les propriétés géométriques de l'interface, tels que les vecteurs normal et tangent, les coordonnées du milieu ainsi que la longueur sont continus par définition.

Les relations (2.69), (2.70) et (2.72) sont valides quelques soient les configurations de l'interface grâce à la paramétrisation et au fait que l'origine du

repère $(X, Y)$ est le milieu de l'interface. Les différences entre les types **I** et **II** se trouvent au niveau des relations aux sommets de la maille duale (2.65). En effet, pour $\Gamma_{\mathbf{I}}$, on a

$$u^A\left(X_{c_1}, Y_{c_1}\right) = u_{c_1}, \tag{2.76a}$$
$$u^B\left(X_{c_2}, Y_{c_2}\right) = u_{c_2}, \tag{2.76b}$$
$$u^A\left(X_{c_3}, Y_{c_3}\right) = u_{c_3}, \tag{2.76c}$$
$$u^A\left(X_{c_4}, Y_{c_4}\right) = u_{c_4}, \tag{2.76d}$$

tandis que pour la position de l'interface $\Gamma_{\mathbf{II}}$, on a

$$u^A\left(X_{c_1}, Y_{c_1}\right) = u_{c_1}, \tag{2.77a}$$
$$u^B\left(X_{c_2}, Y_{c_2}\right) = u_{c_2}, \tag{2.77b}$$
$$u^B\left(X_{c_3}, Y_{c_3}\right) = u_{c_3}, \tag{2.77c}$$
$$u^A\left(X_{c_4}, Y_{c_4}\right) = u_{c_4}. \tag{2.77d}$$

Les systèmes associés à l'interface en position de **I** et **II** quand celles-ci tendent vers $\Gamma_{\mathbf{0}}$ sont a priori différents du fait des relations (2.76c) et (2.77c). Soient $S_{\mathbf{I}}$ et $S_{\mathbf{II}}$ ces deux systèmes limites.

La relation (2.69), rappelée ici

$$u^A(t) = u^B(t), \forall\ P \text{ tel que } \vec{OP} = t\vec{\tau},$$

impose la continuite de la solution en tout point $P$ de l'interface. Le sommet n°3 est un point de l'interface $\Gamma_{\mathbf{0}}$. Ainsi lorsque l'interface $\Gamma_{\mathbf{I}}$ atteind la position limite $\Gamma_{\mathbf{0}}$, le système $S_{\mathbf{I}}$ impose les relations (2.76c) et (2.69), soient

$$\begin{cases} (2.76\text{c}) & \Rightarrow u^A\left(X_{c_3}, Y_{c_3}\right) = u^A\left(t_{c_3}\right) = u_{c_3} \\ (2.69) & \Rightarrow u^A\left(t_{c_3}\right) = u^B\left(t_{c_3}\right), \end{cases} \tag{2.78}$$

De même, lorsque l'interface $\Gamma_{\mathbf{II}}$ atteind la position limite $\Gamma_{\mathbf{0}}$, le système $S_{\mathbf{II}}$ impose les relations (2.77c) et (2.69), soient

$$\begin{cases} (2.77\text{c}) & \Rightarrow u^B\left(X_{c_3}, Y_{c_3}\right) = u^B\left(t_{c_3}\right) = u_{c_3} \\ (2.69) & \Rightarrow u^A\left(t_{c_3}\right) = u^B\left(t_{c_3}\right). \end{cases} \tag{2.79}$$

On constate que les contraintes (2.78) et (2.79) sont équivalentes à

$$u^A\left(X_{c_3}, Y_{c_3}\right) = u_{c_3} = u^B\left(X_{c_3}, Y_{c_3}\right).$$

Les autres relations des systèmes $S_{\mathbf{I}}$ et $S_{\mathbf{II}}$ sont identiques. Donc ceux-ci imposent à leurs solutions respectives les mêmes contraintes formulées différemment. Par unicité, les deux solutions sont identiques.

Ainsi, la relation (2.69) assure la continuité entre les deux configurations. La solution numérique qui découle de l'utilisation de l'un ou l'autre de ces deux systèmes est donc la même malgré la différence d'écriture entre ces systèmes. Il y a donc continuité de la méthode en fonction de la position de l'interface.

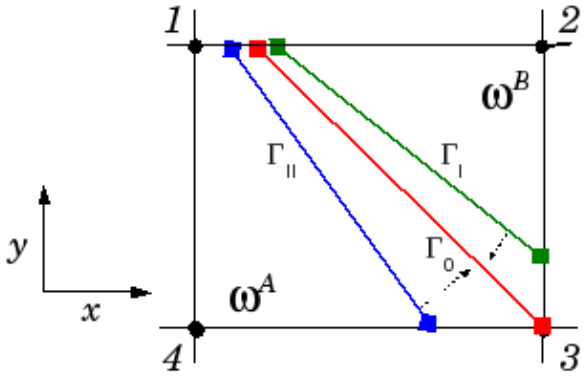



FIGURE 2.10 – Maille duale irrégulière avec trois configurations de l'interface $\Gamma_{\mathbf{I}}$ (ligne verte), $\Gamma_{\mathbf{II}}$ (ligne bleue) et $\Gamma_{\mathbf{0}}$ (ligne rouge). $\Gamma_{\mathbf{0}}$ est l'une position limite de l'interface quand l'interface passe de la configuration de type **I** à celle de type **II**, ou inversement.

### 2.3.4 Assemblage de la matrice en 2D

A l'aide des représentations polynomiales obtenues précédemment, comme dans l'approche en 1D, on calcule analytiquement les gradients de $u^A$ et $u^B$ :

$$\nabla u^A(X,Y) = \begin{pmatrix} \alpha_1 + \alpha_3 Y + 2\alpha_4 X \\ \alpha_2 + \alpha_3 X + 2\alpha_4 Y \end{pmatrix}, \tag{2.80a}$$

$$\nabla u^B(X,Y) = \begin{pmatrix} \beta_1 + \beta_3 Y + 2\beta_4 X \\ \beta_2 + \beta_3 Y + 2\beta_4 Y \end{pmatrix}. \tag{2.80b}$$

L'intégrale du membre de droite de l'équation (2.60) est alors évaluée avec (2.80a) et (2.80b) dans chaque maille duale

$$\int_{e_s^M} K\nabla u \cdot \vec{n}_s \; dl = \int_{e_s^M \cap \omega_{1\,i,j}} K^A \nabla u^A \cdot \vec{n}_s \; dl \tag{2.81}$$

$$+ \int_{e_s^M \cap \omega_{2\,i,j}} K^B \nabla u^B \cdot \vec{n}_s \; dl \tag{2.82}$$

$$= \underline{\underline{M_1}}\,\underline{u} + \underline{\underline{M_2}}\,\underline{\pi}. \tag{2.83}$$

Dans le cas d'une maille dualle irrégulière, la matrice $\underline{\underline{M_1}}$ est analytiquement déduite de $\underline{\underline{M_{ir}^A}}$ et de $\underline{\underline{M_{ir}^B}}$. Il en est de même pour la matrice $\underline{\underline{M_2}}$ issue de $\underline{\underline{M_s^A}}$ et de $\underline{\underline{M_s^B}}$. Pour une maille duale régulière, $\underline{\underline{M_1}}$ est calculée à partir de $\underline{\underline{M_r}}$ et la matrice $\underline{\underline{M_2}}$ est nulle. La matrice $\underline{\underline{M_1}}$ détermine le stencil du schéma numérique pour la discrétisation de l'équation elliptique, tandis que $\underline{\underline{M_2}}$ contribue au second membre du schéma numérique.

Pour garantir une résolution numérique à l'ordre 2 de (2.60), les intégrales du membre de droite sont évaluées comme suit

$$\int_{\omega_{i,j}} f \; dS = \left|\omega_{1i,j}\right| f(x_1) + \left|\omega_{2i,j}\right| f(x_2), \tag{2.84a}$$

$$\int_{\Gamma_{\omega_{i,j}}} g \; dl = \sum_{M \in \Sigma_{i,j}} g_0^M l_{\Gamma_{\omega_{i,j}^M}}, \tag{2.84b}$$

où $x_1$ (respectivement $x_2$) est le barycentre de $\omega_{1i,j}$ (respectivement $\omega_{2i,j}$) et $l_{\Gamma_{\omega_{i,j}^M}}$ la longueur du segment dans le volume de contrôle $\omega_{i,j}$ associé à l'interface de la maille duale $M$. Le nombre réel $g_0^M$, introduit en (2.84b), est égal à la moyenne de saut de flux le long de l'interface dans la maille duale $M$.

Les flux associés à chaque maille duale s'appuient que sur les quatre sommets de celle-ci. Ainsi la méthode ici présentée possède un stencil constant de neuf-points.

Dans le cas particulier où le coefficient $K$ est constant et égal à 1 dans tout le domaine, qu'il n'y a pas d'interface et que le maillage est uniforme, $\triangle x = \triangle y$, nous obtenons le schéma à neuf-points suivant pour la discrétisation de l'opérateur laplacien

$$\begin{array}{rlll} -\int_{\omega_{i,j}} \Delta u \; dS = & -\frac{1}{4}u_{i-1,j+1} & -\frac{1}{2}u_{i,j+1} & -\frac{1}{4}u_{i+1,j+1} \\ & -\frac{1}{2}u_{i-1,j} & +3u_{i,j} & -\frac{1}{2}u_{i+1,j} \\ & -\frac{1}{4}u_{i-1,j-1} & -\frac{1}{2}u_{i,j-1} & -\frac{1}{4}u_{i+1,j-1}. \end{array} \tag{2.85}$$

On observe que la discrétisation (2.85) est la combinaison de la discrétisation standard à cinq-points de l'opérateur laplacien par une approche volumes-finis et du schéma à cinq-points suivant :

$$\begin{array}{lll} -\frac{1}{4}u_{i-1,j+1} & & -\frac{1}{4}u_{i+1,j+1} \\ & +u_{i,j} & \\ -\frac{1}{4}u_{i-1,j-1} & & -\frac{1}{4}u_{i+1,j-1}. \end{array}$$

L'équation équivalente associée au schéma à cinq points standard est

$$-\Delta u \;=\; \frac{\triangle x^2}{12}\;\left(\partial^4_{x^4}u + \partial^4_{y^4}u\right) \;+\; O\left(\triangle x^4\right), \tag{2.86}$$

tandis que pour notre schéma à neuf-points (2.85), on a

$$-\Delta u \;=\; \frac{\triangle x^2}{12}\;\left(\partial^4_{x^4}u + \partial^4_{y^4}u + 3\;\partial^4_{x^2y^2}u\right) \;+\; O\left(\triangle x^4\right). \tag{2.87}$$

La différence se résume dans le terme $\dfrac{\triangle x^2}{4}\;\partial^4_{x^2y^2}u$ qui est un terme de diffusion, ce qui ne détériore pas la stabilité du schéma. La matrice associée est symétrique à diagonale dominante ce qui préserve la positivité du schéma. Notons que [Sü03] a prouvé la stabilité ainsi que la convergence numérique au second ordre pour ce schéma sur une grille avec un ratio d'aspect fixé $\delta = \triangle x \diagup \triangle y$ quand le coefficient $K$ est constant.

Cependant dans notre cas général avec interface, nous ne sommes pas en mesure de donner une preuve mathématique de l'ordre et de la stabilité de la méthode. Comme le confirme [OK06], les configurations différentes de l'interface rendent difficiles les calculs. Dans le cas général, la matrice est non symétrique sauf dans le cas particulier ou $K$ est constant. Le defaut de symétrie est dû à la présence de l'interface dans le domaine. Le ratio du nombre de points concernés par l'interface $N_{interface}$ sur le nombre total de points du maillage $N_{total} = N_x \times N_y$ tend vers zero à mesure que $N_{total}$ augmente. La matrice tend donc vers une matrice symétrique.

Dans la section suivante, nous aborderons l'extension de la méthode pour imposer des conditions de Dirichlet et de Neumann au bord du domaine.

### Extension de la méthode pour imposer des conditions de Dirichlet et Neumann au bord du domaine

La méthode pour imposer une condition de Dirichlet et de Neumann sur l'interface est l'extension de celle developpée en 1D, voir section 2.2.3. Elle s'appuie sur une analyse asymptotique du problème elliptique général (2.4)-(2.5)-(2.6).

Comme pour la méthode explicitée en 1D, pour imposer la condition de Dirichlet on fait apparaître un paramètre $\varepsilon$ dans le domaine $\Omega_2$ associé à des conditions de bord particulières. Dans le cas 2D, ce paramètre est choisi tel que

$$\varepsilon = \bigcirc\left(\frac{1}{{N_x}^2}, \frac{1}{{N_y}^2}\right).$$

Il en est de même pour la condition de Neumann.

Dans nos applications, l'interface peut être relativement complexe (avec des changements de topologie par exemple). Il est pour cela nécessaire d'avoir le domaine $\Omega_2$ le plus minimal possible. Ainsi les conditions imposées sur les bords du domaine $\Omega_2$ seront mieux pris en compte. Comme dans l'analyse en 1D, le domaine $\Omega_2$ doit être nul. On propose donc de prendre en compte cela en modifiant le stencil des inconnues du domaine $\Omega_1$ dans une bande proche de l'interface (i.e. l'ensemble des points appartenant à une maille duale irrégulière, voir Fig. 2.11). Lors de l'assemblage de la matrice globale, pour tous les points du domaine $\Omega_1$ proches de l'interface (noeuds verts sur la figure Fig. 2.11), on annule dans leurs stencils les coefficients les liants aux noeuds du domaine $\Omega_2$ (noeuds bleus sur la figure Fig. 2.11). Ainsi, vu du domaine $\Omega_1$, les inconnues du domaine $\Omega_2$ sont perçus comme nuls. Les deux domaines sont alors disjoints. On peut donc prendre dans le reste du domaine $\Omega_2$ $K_2 = K_1$, ce qui aura pour avantage d'améliorer le conditionnement de la matrice globale du schéma numérique.

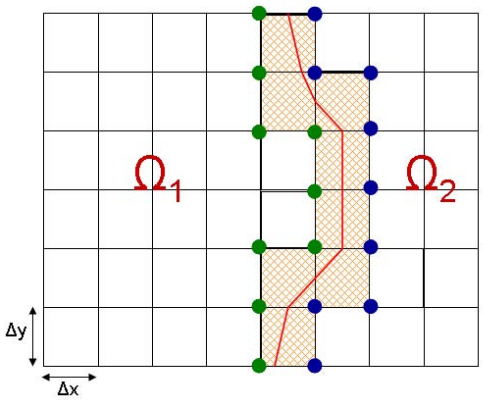



FIGURE 2.11 – Modification de stencil pour imposer une condition de Dirichlet en 2D. L'interface est matérialisée par le trait rouge, les mailles duales irrégulières par les rectangles de couleur. Uniquement les noeuds bleus du domaine $\Omega_2$ sont à retirer du stencil des noeuds verts du domaine $\Omega_1$ en les considérant comme nuls.

Une stratégie similaire est envisagée pour la condition Neumann. Cette fois ci il s'agit d'imposer une condition de flux nul provenant du reste du domaine $\Omega_2$ sur l'ensemble des inconnues du domaine $\Omega_2$ appartenant à une maille duale irrégulière. Il s'agit ici encore d'une modification locale de stencil. Les deux domaines sont alors disjoints à l'exception des inconnues de $\Omega_2$ dans la bande proche de l'interface (voir Fig. 2.12).

Nous avons obtenu la discrétisation spatiale à l'ordre deux pour des problèmes elliptiques à frontières immergées. Dans la section suivante, nous

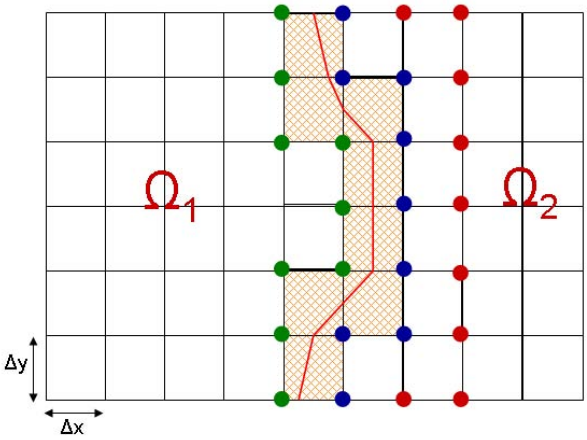



FIGURE 2.12 – Modification de stencil pour imposer une condition de Neumann en 2D. L'interface est matérialisée par le trait rouge, les mailles duales irrégulières par les rectangles de couleur. Seuls les noeuds rouges du domaine $\Omega_2$ sont à retirer du stencil des noeuds bleus de ce même domaine en considérant une condition de flux nul.

utiliserons la méthode décrite précédemment afin de résoudre des équations paraboliques à frontières immergées telle que les problèmes de thermique multi-matériaux.

## 2.4 Extensions de la méthode à l'instationnaire

Considérons le problème parabolique bi-matériaux suivant, qui correspond au problème (2.1.1) avec des conditions de saut généralisées :

$$\rho C_v \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (K \nabla u) = f, \quad \text{dans} \quad \Omega = (\Omega_1 \cup \Omega_2) \setminus \Gamma \ , \tag{2.88}$$

$$[u]_\Gamma = h, \tag{2.89}$$

$$[K \partial_n u]_\Gamma = g \ , \tag{2.90}$$

où $h$ et $g$ sont des fonctions définies sur l'interface $\Gamma$.

Dans la suite, nous utiliserons les notations prises dans le cas de la discrétisation spatiale de l'équation elliptique en 2D, voir 2.3. Pour obtenir le schéma numérique, il faut intégrer le système (2.88)-(2.89)-(2.90) sur

le volume de contrôle $\omega_{i,j}$ associé au noeud $P_{i,j}$

$$\int_{\omega_{i,j}} \rho C_v \frac{\partial u}{\partial t} - \int_{\partial\omega_{i,j}} K\ \nabla u \cdot \vec{n}\ dl\ =\ \int_{\omega_{i,j}} f\ dS\ +\ \int_{\Gamma_{\omega_{i,j}}} g\ dl\ , \quad (2.91a)$$

$$[u]_\Gamma = u|_{\omega_{1\,i,j}} - u|_{\omega_{2\,i,j}} = h. \quad (2.91b)$$

Les quantités $\rho$, $C_v$, $K$, $f$, $h$ et $g$ sont supposées constantes au cours du temps. On a ainsi

$$\int_{\omega_{i,j}} \rho C_v \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\omega_{i,j}} \rho C_v u\ dS, \quad (2.92)$$

avec $\{\rho, C_v\} = \{\rho_k, C_{v\,k}\}$, sur $\Omega_k$, $k = 1, 2$.

En reprenant la notation $\Sigma_{i,j}$ pour l'ensemble des mailles duales adjacentes aux noeuds $i, j$ (I-IV sur la Figure Fig. 2.8), le membre de droite de l'équation (2.91a) s'écrit sous forme discrète comme suit

$$\frac{1}{\triangle t} \sum_{M\in\Sigma_{i,j}} \left( \int_{\omega^M\cap\omega_{i,j}} \rho C_v u^{n+1} dS - \int_{\omega^M\cap\omega_{i,j}} \rho C_v u^n dS \right) - \sum_{M\in\Sigma_{i,j}} \sum_{s=1}^{2} \int_{e_s^M} K\ \nabla u^{n+1} \cdot \vec{n}_s\ dl \quad (2.93)$$

où $\omega^M$ est le domaine de la maille duale $M$. Il s'agit d'une discrétisation temporelle Euler implicite, où l'indice $.^n$ renvoie au temps $n\triangle t$ avec $\triangle t$ le pas de temps.

Les intégrales

$$\int_{\omega^M\cap\omega_{i,j}} \rho C_v u^{n+1} dS$$

et

$$\int_{\omega^M\cap\omega_{i,j}} \rho C_v u^n dS$$

sont calculées en utilisant les représentations polynomiales déterminées précédemment pour l'équation elliptique. Par exemple dans le cas d'une maille duale irrégulière 2D, on obtient en reprenant les notations de la section 2.3.2

$$\int_{\omega^M\cap\omega_{i,j}} \rho C_v u^{n+1} dS = \int_{\omega^A\cap\omega_{i,j}} \rho^A C_v^A u^{A,n+1} dS + \int_{\omega^B\cap\omega_{i,j}} \rho^B C_v^B u^{B,n+1} dS. \quad (2.94)$$

Les représentations polynomiales assurent la prise en compte des conditions (2.89) et (2.90).

Dans le cas où il n'y a pas d'interface proche du volume de contrôle (aucune maille duale adjacente est irrégulière), on a en 1D

$$\sum_{M\in\Sigma_i}\int_{\omega^M\cap\omega_i}\rho C_v u^n dS = \rho C_v\frac{\triangle x}{8}\left(u^n_{i-1}+6u^n_i+u^n_{i+1}\right), \tag{2.95}$$

et en 2D

$$\sum_{M\in\Sigma_{i,j}}\int_{\omega^M\cap\omega_{i,j}}\rho C_v u^n dS = \rho C_v\frac{\triangle x\triangle y}{64}\begin{pmatrix} +u^n_{i-1,j+1} & +6u^n_{i,j+1} & +u^n_{i+1,j+1}\\ +6u^n_{i-1,j} & +36u^n_{i,j} & +6u^n_{i+1,j}\\ +u^n_{i-1,j-1} & +6u^n_{i,j-1} & +u^n_{i+1,j-1}. \end{pmatrix} \tag{2.96}$$

Notons que ces intégrales ont un stencil à neuf points, alors que dans le cas du schéma volumes finis standard on a

$$\int_{\omega_{i,j}}\rho C_v\frac{\partial u}{\partial t}dS \simeq \rho C_v\frac{\triangle x\triangle y}{\triangle t}\left(u^{n+1}-u^n\right). \tag{2.97}$$

La résolution étant implicite en temps, la matrice globale prend en compte les termes liés à l'intégrale $\sum_{M\in\Sigma_i}\int_{\omega^M\cap\omega_i}\rho C_v u^{n+1}dS$ tandis que le second membre du système global reçoit les termes dus à l'intégrale

$$\sum_{M\in\Sigma_i}\int_{\omega^M\cap\omega_i}\rho C_v u^n dS$$

calculée avec la solution au temps $n$.

## 2.5 Résultats numériques

Quelque résultats de convergence sont présentés ici pour plusieurs cas tests à une puis à deux dimensions. Certains d'entre eux ont été étudiés par d'autres auteurs. Les systèmes linéaires sont résolus avec un solveur direct pour matrices creuses (Direct Sparse Solver DSS) de la bibliothèque Math Kernel Library (MKL) fournie avec le compilateur IFORT d'INTEL.

Dans tous les cas test qui suivent la solution exacte est imposée sur le bord du domaine $\Omega$ par une condition de Dirichlet. Le membre de droite $f$

de (2.4) est analytiquement calculé grâce à la solution exacte $u$ donnée pour chaque cas test.

Les erreurs relatives discrètes $L^2$ et $L^\infty$ sont utilisées pour montrer l'ordre de convergence de la méthode. L'ordre de convergence est calculé à partir de la pente des courbes du logarithme de l'erreur numérique en fonction du logarithme du pas d'espace.

Pour tous les cas test qui suivent le domaine $\Omega$ est un carré de coté 1, $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$.

**Exemple 1 :** Le premier exemple 2D est tiré de [GL09]. L'interface est un simple cercle de rayon 0.5 et de centre $(0, 0)$. On définit la fonction suivante

$$\phi(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2} - 0.5.$$

La solution du problème est donnée par

$$u(x, y) = \begin{cases} (\sin(3x))^2 \text{ sur } \Omega_1 \ (\phi(x, y) \leqslant 0), \\ 2y^2 - 2x^2 + 2 \text{ sur } \Omega_2 \ (\phi(x, y) > 0), \end{cases}$$

(voir Fig. 2.13). La solution ainsi que ses dérivées normales sont discontinues à travers l'interface. Le tableau Tab. 2.1 présente les résultats de convergence pour deux types de maillage $\triangle y = \triangle x$ et $\triangle x = 3\triangle y$ avec $K_1 = 10$ et $K_2 = 1$.

| Grille | $L^2$ | Ordre | $L^\infty$ | Ordre |
|---|---|---|---|---|
| $64 \times 64$ | 1.0772e-03 | | 4.6612e-04 | |
| $128 \times 128$ | 3.1098e-04 | 1.79 | 1.1993e-04 | 1.96 |
| $256 \times 256$ | 8.6661e-05 | 1.84 | 2.7800e-05 | 2.11 |
| $512 \times 512$ | 2.5887e-05 | 1.74 | 7.4453e-06 | 1.90 |
| $1024 \times 1024$ | 7.9134e-06 | 1.70 | 2.3704e-06 | 1.65 |
| $64 \times 192$ | 8.5133e-04 | | 5.0004e-04 | |
| $128 \times 384$ | 2.4627e-04 | 1.79 | 1.2730e-04 | 1.97 |
| $256 \times 768$ | 6.4761e-05 | 1.92 | 3.1171e-05 | 2.03 |
| $512 \times 1536$ | 1.7885e-05 | 1.85 | 8.5367e-06 | 1.87 |

TABLE 2.1 – Résultats de convergence pour la solution numérique en norme $L^2$ et $L^\infty$ pour l'exemple 1 en 2D sur deux maillages differents avec $K_1 = 10$ et $K_2 = 1$.

Les pentes des régressions linéaires sont de 1.8 et 1.9 en norme $L^2$ et $L^\infty$. Ainsi sur ce cas test, notre méthode est approximativement d'ordre 2.

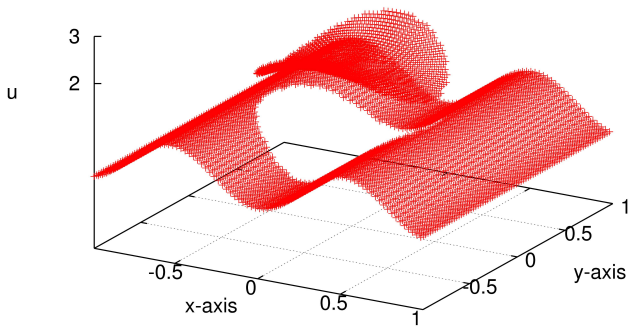



FIGURE 2.13 – Solution numérique de l'exemple 1 sur une grille $80 \times 80$ avec $K_1 = 10$ et $K_2 = 1$.

**Exemple 2 :** L'exemple 2 est issu de [OK06]. Ce cas test possède une interface plus complexe donnée par une équation paramétrique

$$\begin{aligned} X(\theta) &= r(\theta)\cos\theta + x_O, \\ Y(\theta) &= r(\theta)\sin\theta + y_O, \end{aligned} \tag{2.100a}$$

avec $r(\theta) = r_0 + r_1 sin(\omega\theta)$, $0 \leqslant \theta \leqslant 2\pi$. Les paramètres sont les suivants $r_0 = 0.5$, $r_1 = 0.2$, $\omega = 5$ et $x_O = y_O = 0.5/\sqrt{2}$. La solution analytique a pour expression

$$u(r) = \begin{cases} \dfrac{r^4 - 0.1\ \log(2r)}{K_1} \text{ sur } \Omega_1, \\ \dfrac{r^2}{K_2} \text{ sur } \Omega_2, \end{cases} \qquad \text{avec } r = \sqrt{(x-x_O)^2 + (y-y_O)^2}.$$

La figure Fig. 2.14 montre la solution numérique sur une grille de $80 \times 80$ points avec $K_1 = 10$ and $K_2 = 1$. Le tableau Tab. 2.2 donne les résultats de convergence pour deux ratios différents de $K_1/K_2$ en norme $L^2$.

Les résultats de convergence sont donnés dans le tableau Table 2.2 . Il confirme l'ordre 2 de la méthode pour $K_1/K_2 = 10^{-1}$. Néanmoins, pour $K_1/K_2 = 1000$, nous observons un comportement non-monotone de l'erreur en norme $L^2$ et $L^\infty$ même si malgré tout la pente moyenne est de 1.95. Ceci s'explique par le mauvais conditionnement de la matrice dans le cas des forts ratios entre $K_1$ et $K_2$. Un solveur itératif preconditionné pourrait donner de meilleurs taux de convergence comme pour [OK06].

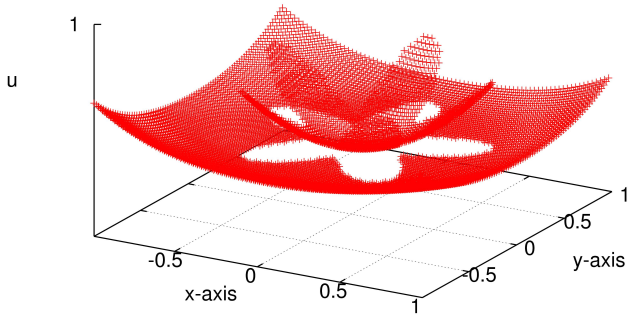



FIGURE 2.14 – Solution numérique de l'exemple 2 en 2D sur une grille $80 \times 80$ avec $K_1 = 10$ et $K_2 = 1$

| Grille | $K_1/K_2 = 10^{-1}$ | Ordre | $K_1/K_2 = 1000$ | Ordre |
|---|---|---|---|---|
| $64 \times 64$ | 7.4567e-04 | | 2.9247e-03 | |
| $128 \times 128$ | 1.7658e-04 | 2.07 | 9.5600e-04 | 1.61 |
| $256 \times 256$ | 4.1495e-05 | 2.09 | 2.6487e-04 | 1.85 |
| $512 \times 512$ | 1.0900e-05 | 1.93 | 3.1096e-05 | 3.09 |
| $1024 \times 1024$ | 2.7083e-06 | 2.01 | 1.1598e-05 | 1.42 |

TABLE 2.2 – Résultats de convergence de la solution numérique en norme $L^2$ pour l'exemple 2 en 2D avec des ratios différents de $K_1/K_2$, $K_1 = 1$.

**Exemple 3 :** Dans ce cas test, l'interface est donnée par (2.100) avec le jeu de paramètres suivant : $K_1 = 1$, $r_0 = 0.5$, $r_1 = 0.2$, $\omega = 4$ et $x_O = y_O = 0$. Il s'agit ici d'imposer sur cette interface une condition de Dirichlet. La solution exacte est

$$u(r) = \frac{r^4 - 0.1\ \log(2r)}{K_1} \text{ sur } \Omega_1, \quad \text{avec } r = \sqrt{(x - x_O)^2 + (y - y_O)^2}. \tag{2.102a}$$

La figure Fig. 2.15 montre la solution numérique obtenue pour une grille de $100 \times 100$ points. Les résultats de convergence sont présentés sur les courbes Fig. 2.16 avec 95 grilles différentes allant de $30 \times 30$ à $800 \times 800$ points.

Dans la section 2.3.4, nous avons présenté la méthode pour imposer un condition de Dirichlet en 2D. Nous considérons deux cas.

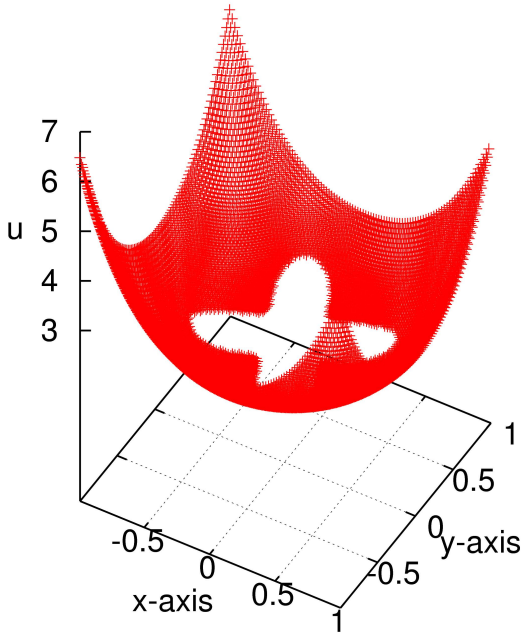



FIGURE 2.15 – Solution numérique de l'exemple 3 en 2D sur une grille de $100 \times 100$.

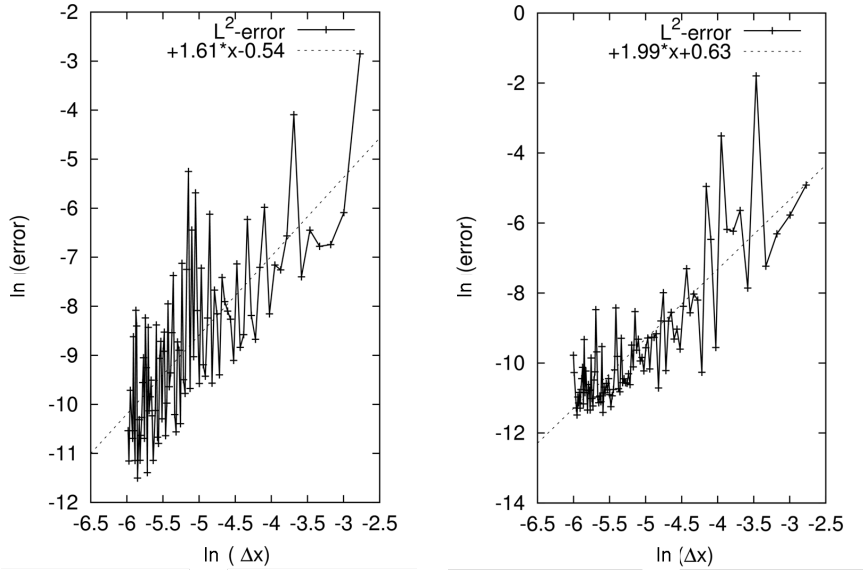
Dans le premier cas, associé à la courbe (a) de la figure Fig. 2.15, le domaine $\Omega_2$ est résolu avec les conditions

$$u = 0, \text{ sur } \partial\Omega_2 \backslash \Gamma,$$
$$f = 0 \text{ sur } \Omega_2,$$

et $K_2 = \dfrac{K_1}{\varepsilon}$. Le conditionnement de la matrice globale est fortement détérioré à cause de la présence du paramètre $\varepsilon$ dans tout le domaine $\Omega_2$.

Dans le deuxième cas, on modifie le stencil des noeuds proches de l'interface comme expliqué dans la section 2.3.4. Le paramètre de pénalisation $\varepsilon$ a un impact que sur les inconnues situées dans la bande de mailles duales irrégulières autour de l'interface. La courbe (b) montre les résultats obtenus dans ce cas.

Les pentes de la régression linéaire basée sur la méthode des moindre




(**a**) (**b**)

FIGURE 2.16 – Courbes de convergence de la méthode pour imposer une condition de Dirichlet. La courbe (a) correspond au cas où on utilise les conditions (2.103) pour le domaine $\Omega_2$ (l'ensemble du domaine $\Omega_2$ est pénalisé). Le deuxième cas, associé à la courbe (b), se réfère à la méthode de modification du stencil des points du domaine $\Omega_1$ proches de l'interface afin réduire l'impact de la pénalisation, comme décrit à la section 2.3.4.

carrés sont de 1.61 pour la courbe (a) et de 1.99 pour la courbe (b) pour des erreurs en norme $L^2$.

On observe un comportement non-monotone. Ce phénomène peut s'expliquer par le mauvais conditionnement de la matrice pour d'importants ratios $K_2/K_1 = \varepsilon = \bigcirc\left(\frac{1}{{N_x}^2}, \frac{1}{{N_y}^2}\right)$. Cette méthode utilise le principe de la pénalisation. La courbe (b) montre que la méthode avec la modification de stencil est plus précise (amplitude des oscillations moins importante). Pour nos applications nous adopterons cette méthode.

## 2.6 Conclusion

Nous avons présenté une methode volumes-finis pour résoudre des problèmes elliptiques à frontières immergées sur grilles cartésiennes. Cette méthode s'appuie sur des représentations polynomiales de la solution numérique dans les mailles duales de type $P_1$ en 1D et $P_2$ en 2D. Un traitement particulier a

été présenté dans l'extension au 2D pour permettre de traiter de la même façon toutes les configurations géométriques possibles de l'interface et ainsi d'être continu par rapport à la position de l'interface. En effet, l'utilisation d'une paramétrisation de l'interface associée à un processus de minimisation sur les coefficients des polynômes permet d'éviter les singularités lors de la détermination des coefficients des polynômes. Cette méthode d'ordre 2 à pour avantage d'avoir un stencil constant à trois-points en 1D et de neuf-points en 2D. Elle a été également étendue à la résolution de problèmes elliptiques avec conditions de Dirichlet ou de Neumann sur une interface quelconque en s'appuyant sur une analyse asymptotique.

Nous employons cette méthode comme discrétisation spatiale dans le cas de problème de thermique multi-matériaux sur grille cartésienne. Le stencil compact rend possible la prise en compte de nombreuses interfaces.

Dans le chapitre suivant, nous aborderons le cas des interfaces mobiles grâce à la technologie Level-Set.

# Chapitre 3

# Résolution du problème de Stefan sans convection

Dans le chapitre précédent, nous avons mis au point une méthode de résolution de problème de thermique multi-matériaux. Nous allons maintenant considérer le problème de changement de phase caractérisé par le modèle de Stefan. Il s'agit de modéliser la fusion d'un solide en négligeant les phénomènes de convection dans la phase liquide. Ce problème de couplage thermique-thermique sera abordé à l'aide de la méthode présentée dans le chapitre précédent.

Dans cette optique, il sera nécessaire de détailler le problème étudié, puis l'algorithme utilisé ainsi que la méthode de suivi d'interface retenue. Enfin nous présenterons des résultats numériques.

## 3.1 Problème de Stefan

Le physicien slovène Jožef Stefan étudie dans les années 1890 la fonte des glaciers. Il formalise le problème à frontière mobile classique. Le problème de Stefan caractérise le changement de phase solide-liquide, appelé dans un sens fusion et de l'autre solidification. Le domaine $\Omega$ est constitué de deux sous domaines comme le montre la figure Fig. 3.1.

Le premier sous domaine correspond à la phase solide, le second à la phase liquide issu du changement de phase de la partie solide. Le solide est considéré comme étant un corps pur. L'interface séparant les deux phases sera supposée d'épaisseur nulle. Les phénomènes de convection sont négligées. De plus les quantités physiques telles que la densité $\rho$, la conductivité thermique $K$, la capacité calorifique à volume constant $C_v$ sont supposées constantes dans chaque phase. Dans la suite de ce chapitre l'indice $._{sol}$ (respectivement

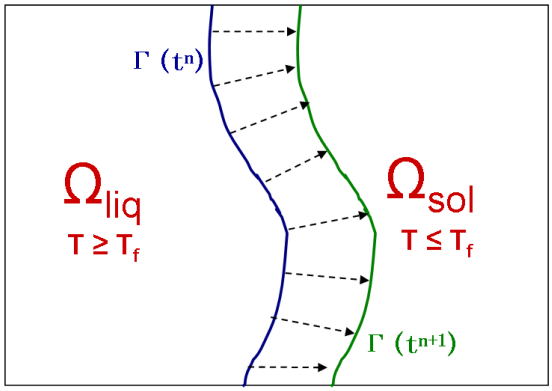



FIGURE 3.1 – Configuration géométrique du domaine $\Omega$ composé des sous domaine $\Omega_{sol}(t)$ et $\Omega_{liq}(t)$ et de l'interface $\Gamma(t)$ aux temps $t^n$ et $t^{n+1}$, avec $t^n < t^{n+1}$.

$._{liq}$) se réfère à la phase solide (respectivement à la phase liquide).

Le problème de Stefan est un problème non-linéaire à deux inconnues : le champs de température d'une part et la position de l'interface au cours du temps d'autre part.

Sous les hypothèses simplificatrices introduites précédemment, l'équation d'énergie se résume à une équation parabolique de conduction thermique dans chacune des phases

$$\rho_k C_{vk} \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (K_k \nabla T) = 0, \text{ dans } \Omega_k(t) \setminus \Gamma, \text{ avec } k = sol, liq. \qquad (3.1)$$

Les conditions à l'interface restent à définir. Pour simplifier, on supposera dans la suite que les variations de masse volumique sont négligés. On a donc $\rho_{liq} = \rho_{sol}$.

Comme on peut le constater sur l'exemple de diagramme de phase Fig. 3.2, la température de fusion $T_f$ pour des pressions proches de la pression atmosphérique peut être considérée comme constante. C'est le même constat pour la plupart des matériaux. Nous négligeons la dépendance de la température de fusion par rapport à la pression, à la courbure de l'interface et par rapport à la tension superficielle. La chaleur latente de changement de phase est également supposée constante.

Ainsi la phase solide correspond au sous domaine de $\Omega$ où la température est inférieure à la température de fusion

$$T(\overrightarrow{x}, t) < T_f, \ \forall \overrightarrow{x} \in \Omega_{sol}(t),$$

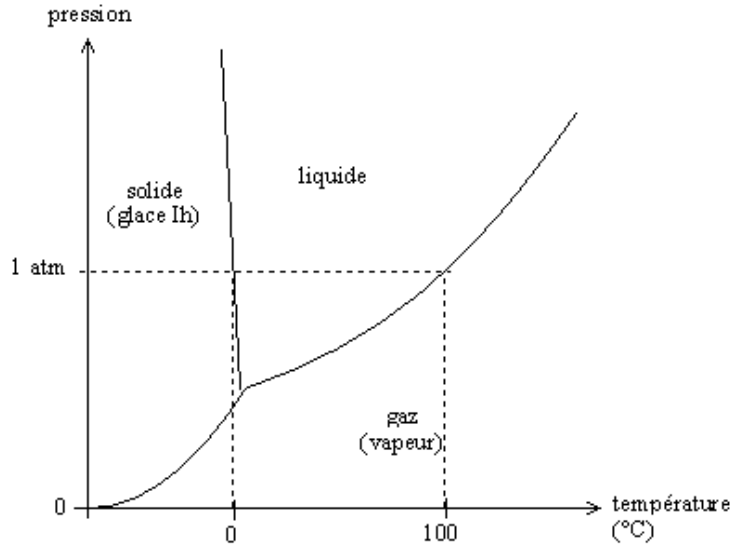



FIGURE 3.2 – Diagramme de phase température-pression pour l'eau. La température de fusion pour des pressions de l'ordre de la pression atmosphérique ($10^5 Pa$) est quasiment constante.

et inversement la phase liquide correspond au sous domaine où la température est supérieure à la température de fusion

$$T(\overrightarrow{x},t) > T_f,\ \forall \overrightarrow{x} \in \Omega_{liq}(t).$$

L'interface est définie par la température de fusion, c'est à dire par la condition

$$T(\overrightarrow{x},t) = T_f,\ \forall \overrightarrow{x} \in \Gamma(t). \tag{3.2}$$

Le champ de température est donc continu sur l'ensemble du domaine $\Omega$.

La dernière équation à l'interface provient du bilan d'énergie à l'interface. Le saut des flux à l'interface est égal à la quantité de chaleur instantanée libérée ou absorbée sous forme d'enthalpie de changement d'état par la progression du front. On en déduit l'équation connue sous le nom de *condition de Stefan*

$$[\mathbf{q}] = -\rho L \overrightarrow{v}(t) \cdot \overrightarrow{n}_{int},\ \text{sur } \Gamma(t), \tag{3.3}$$

avec $[\mathbf{q}]$ le saut de flux normal à l'interface $\Gamma(t)$

$$[\mathbf{q}] = \left(K_{liq} \nabla T(\overrightarrow{x},t)|_{\Gamma(t),liq} - K_{sol} \nabla T(\overrightarrow{x},t)|_{\Gamma(t),sol}\right) \cdot \overrightarrow{n}_{int} \tag{3.4}$$

où la notation $\Upsilon|_{\Gamma(t),k}$ renvoie, comme dans le chapitre précédent, à la trace de la fonction $\Upsilon$ sur l'interface $\Gamma(t)$ dans le domaine $\Omega_k$ et $\overrightarrow{n}_{int}$ la normale

sortante au sous-domaine de la phase solide $\Omega_{sol}$. Le terme $L$ est la chaleur latente massique de la transition de phase. Il s'agit de la différence des enthalpies de formation de chacune à la température $T_f$. Elle est considérée comme constante dans notre étude. L'équation (3.3) gouverne l'évolution de l'interface. Elle définit la vitesse normale de l'interface $\overrightarrow{v}(t) = v_n(t)\overrightarrow{n}_{int}$ (la composante tangentielle de la vitesse est nulle). Si $v_n(t)$ est négatif, on est dans le cas d'une fusion. Inversement si $v_n(t)$ est positif, il s'agit d'une solidification.

En ce qui concerne les conditions de bord sur $\partial\Omega\backslash\Gamma$ pour le domaine $\Omega$, elles peuvent être indifféremment des conditions de Dirichlet ou de Neumann dans la mesure où elles respectent la cohérence physique notamment pour la condition de Dirichlet. Par exemple, pour une condition de Dirichlet $T = T_{bord}$ sur le bord $\partial\Omega_{liq}\backslash\Gamma$ du domaine de la phase liquide, si la température $T_{bord}(\overrightarrow{x}, t)$ est inférieure à la température de fusion $T_f$ il y aura création d'un second front de fusion ce qui n'est pas souhaitable. Le même raisonnement peut être fait pour la condition de Dirichlet $T = T_{bord}$ sur le bord du domaine de la phase solide $\partial\Omega_{sol}\backslash\Gamma$ si $T_{bord}(\overrightarrow{x}, t)$ est supérieure à la température de fusion $T_f$, il y aura apparition d'un deuxième front de fusion, ce qui n'est pas non plus souhaitable.

L'initialisation du problème de Stefan requiert la connaissance d'un champ de température continu sur le domaine $\Omega$ au temps $t = 0$

$$T(\overrightarrow{x}, t = 0) = T_0(\overrightarrow{x}),$$

ainsi que la connaissance de la position de l'interface au temps $t = 0$

$$\Gamma(t = 0) = \Gamma_0.$$

Dans notre cas, on supposera que les deux phases sont présentes au temps $t = 0$.

La section suivante présente les principales méthodes numériques existantes pour la résolution du problème de Stefan avec les hypothèses introduites dans cette section.

## 3.2 Algorithmes de résolution du problème de Stefan

### 3.2.1 Synthèses des méthodes numériques existantes

La solution analytique de ce problème non-linéaire n'a été obtenue que dans des cas très particuliers. Les solutions analytiques s'appliquent lorsque le

milieu étudié est semi-infini. Le traitement des problèmes de changement de phase en domaine fini implique le recours au calcul numérique. Dans le problème de Stefan, les champs de température ainsi que la position de l'interface sont des inconnues. L'existence et l'unicité de la solution pour des problèmes de Stefan ont été réalisées dans [Eva51] et dans [Dou57]. Une grande variété de champs d'application explique l'élan des recherches poursuivies depuis de nombreuses années pour mieux modéliser la dynamique de ce processus par exemple dans les domaines de la métallurgie ou de la surveillance de la calotte glacière. Du fait de l'abondance des publications scientifiques sur l'approche numérique du sujet, une revue non-exhaustive de ces travaux est proposée dans la suite. Des synthèses beaucoup plus complètes des méthodes existantes sont fournies dans [ST09, VST90, DRBS$^+$11, Hu96, CK09].

En mécanique des fluides numérique, il existe deux types de méthode pour simuler des écoulements avec choc, d'une part les méthodes de shock-capturing qui ne nécessitent pas la connaissance explicite de la position de l'interface et les méthodes de shock-fitting où le choc est utilisé et calculé explicitement. Par analogie, nous avons ici pour le problème de Stefan des méthodes à un domaine n'utilisant pas explicitement l'interface, et les méthodes dites avec "suivi de front" qui ont besoin d'une représentation de l'interface.

Dans la première catégorie de méthodes pour la résolution du problème de Stefan, on ne cherche pas directement la position de l'interface. Il s'agit de méthodes où l'interface est implicite et la grille est fixe au cours du calcul. La position de l'interface est obtenue indirectement à partir de l'un des champs de variables du problème défini sur l'ensemble de domaine $\Omega$. Un exemple de ce type de méthode implicite est la *méthode enthalpique* utilisée dans [Vol87, CFC89, Dat92]. Dans cette méthode, le champ d'enthalpie est calculé sur l'ensemble du domaine $\Omega$ au lieu de celui de la température. Il permet de déduire la position de l'interface en repérant le saut induit par l'enthalpie de changement de phase (chaleur latente). L'interface dans ce cas est diffuse. D'autre méthodes peuvent être rangées dans cette catégorie des méthodes à interface implicite comme celle utilisées par exemple dans [MR02, MD02, JVVVdZ06, ST09, OG].

Dans la seconde catégorie, c'est à dire les méthodes de suivi de front, l'interface est explicitement repérée. Une approche est utilisée pour la déplacer. L'interface peut être repérée grâce à des marqueurs (points appartenant à l'interface qui se déplacent avec elle) sur une grille cartésienne fixe, ou grâce à une méthode de type Level Set sur une grille cartésienne fixe [GF04, OF03], ou grâce à des méthodes sur maillages mobiles. Les équations (3.1) sont résolues séparément dans la phase liquide et dans la phase solide avec la condition

$T = T_f$ sur $\Gamma(t)$. La position de l'interface est ensuite calculée en résolvant la condition de Stefan (3.3). Dans cette catégorie, on retrouve notamment les méthodes de type Landau, qui utilisent une tranformation de coordonnées entre chaque sous domaine physique mobile ($\Omega_{liq}$ et $\Omega_{sol}$) et un domaine de calcul fixe. Par exemple, les méthodes à maillages mobiles, où les maillages des sous domaines s'appuient sur l'interface, appartiennent aux méthodes de type Landau. Dans ce cas les équations (3.1) deviennent des équations de transport-diffusion après transformation de coordonnées.

La méthode que nous avons choisie appartient à la catégorie des méthodes de suivi de front explicite. En effet, ce choix nous permet de définir un algorithme de résolution commun entre la méthode sur grille cartésienne fixe que nous allons utilisée dans cette partie (l'interface est capturée par la méthode Level Set) et la méthode sur maillages mobiles qui sera présentée dans la dernière partie avec prise en compte de l'écoulement dans le fluide.

### 3.2.2 Algorithme de résolution du problème de Stefan

L'algorithme décrit dans la suite permet de résoudre le problème de Stefan à deux phases au premier ordre en temps. Il s'agit d'un algorithme qui décompose la résolution du problème de Stefan en trois grandes étapes pour chaque pas de temps.

Tout d'abord, les champs sont initialisés comme décrit dans la section 3.1. Le champ de température $T(\overrightarrow{x}, t)$ (respectivement l'interface $\Gamma(t)$) est donné par

$$T(\overrightarrow{x}, t = 0) = T_0(\overrightarrow{x}) \text{ sur } \Omega$$

(respectivement $\Gamma(t = 0) = \Gamma_0$) au temps $t = 0$. Soit $\triangle t$ le temps pas de temps de couplage. Le temps physique de couplage $t^n$ correspond à $n\triangle t$. L'exposant $.^n$ renvoie au temps $t^n$ dans la suite de ce chapitre.

La première étape de l'algorithme consiste à déterminer la vitesse de l'interface au temps $t^{n+1}$ à partir de sa position en $t^n$ et du champ de température pris également en $t^n$. Pour faire cela, on calcule la vitesse $\overrightarrow{v}^{n+1}$ de l'interface grâce à la condition de Stefan (3.3). On a donc

$$[\mathbf{q}^n] = -\rho L \overrightarrow{v}(t^{n+1}) \cdot \overrightarrow{n}_{int}, \text{ sur } \Gamma(t^n), \tag{3.5}$$

où $[\mathbf{q}^n]$ est calculé avec les champs au temps $t^n$ (voir relation (3.4).

La deuxième étape consiste à déplacer l'interface. Avec le champ de vitesse, l'interface peut être advectée de sa postion $\Gamma(t^n)$ à sa position $\Gamma(t^{n+1})$. On en déduit les sous domaines $\Omega_{liq}(t^{n+1})$ et $\Omega_{sol}(t^{n+1})$.

Dans la dernière étape, le champ de température au temps $t^{n+1}$ est calculé dans chaque sous domaine $\Omega_{liq}(t^{n+1})$ et $\Omega_{sol}(t^{n+1})$ avec la condition de

Dirichlet pour la température sur l'interface

$$T(\overrightarrow{x}, t) = T_f, \ \forall \overrightarrow{x} \in \Gamma(t^{n+1}). \tag{3.6}$$

Cette condition de Dirichlet découple les deux sous domaines qui sont résolus séparément. Pour la résolution dans chaque sous domaine de l'équation (3.1), on utilisera la méthode mise au point dans le chapitre précédent avec quelques aménagements qui seront détaillés dans la suite.

Avec ces nouveaux champs de températures au temps $t^{n+1}$ associés à la position de l'interface, on a complétement déterminé la solution du problème de Stefan au temps $t^{n+1}$. On passe à la résolution du pas de temps suivant $t^{n+2}$ en recommençant à la première étape et ainsi de suite. Cet algorithme, utilisé dans [CFGK00, OF03], est le plus simple envisageable. Il s'agit d'une résolution de problème non-linéaire par un algorithme explicite basé sur un couplage faible. En effet, il n'y a pas de rétroaction des champs de température au temps $t^{n+1}$ sur la vitesse de déplacement ainsi que sur la position de l'interface du temps $t^{n+1}$. Cet algorithme linéarise la résolution de problème de Stefan.

Dans la section suivante, la méthode retenue pour repérer et advecter l'interface sera présentée. La troisième étape du processus de résolution du problème de Stefan consiste à résoudre sur chaque sous domaine l'équation de la chaleur. Cependant, du fait du déplacement de l'interface entre les temps $t^n$ et $t^{n+1}$, il y a apparition de nouveaux noeuds dans les sous domaines. Il est nécessaire d'apporter une solution pour utiliser la méthode présentée dans le chapitre précédent pour la résolution de l'équation de la chaleur.

## 3.3 Principe de la Méthode Level Set

### 3.3.1 Méthodes numériques pour le suivi d'interface

Lors du changement de phase, l'interface entre le solide et son liquide représentant le front de fusion se déplace au cours du temps. Il est donc nécessaire de suivre cette interface le plus précisément possible. Il existe, dans la littérature, différentes méthodes numériques pour le suivi d'interface, qui peuvent être classées suivant les critères suivants :

1. les méthodes à maillage mobile ou celles sur un maillage fixe,
2. les méthodes qui suivent explicitement ou implicitement l'interface.

Nous ne retiendrons que les méthodes sur maillage fixe. Il en existe deux principales : La méthode des marqueurs et la méthode Level Set.

On a un champ de vitesse $\overrightarrow{v}(t, X)$ et une interface $\Gamma_0$ à $t = 0$. L'interface est propagée par ce champ de vitesse. On a donc

$$\begin{cases} \dfrac{dX(t, x_0)}{dt} = \overrightarrow{v}(t, X(t, x_0)), \\ X(t, x_0) = x_0, \ \ x_0 \in \Gamma_0. \end{cases} \tag{3.7}$$

L'interface $\Gamma$ à l'instant $t$ est définit par

$$\Gamma(t) = \{X(t, x_0) \text{ tel que } x_0 \in \Gamma_0\}. \tag{3.8}$$

La première méthode pour caractériser l'interface fait un échantillonnage de l'interface. Cette méthode de type *"front tracking"* est appelée méthode des marqueurs. Sur l'interface initiale, un certain nombre de points, appelés "marqueurs", sont positionnés le long de la courbe matérialisant l'interface, voir Fig. 3.3.

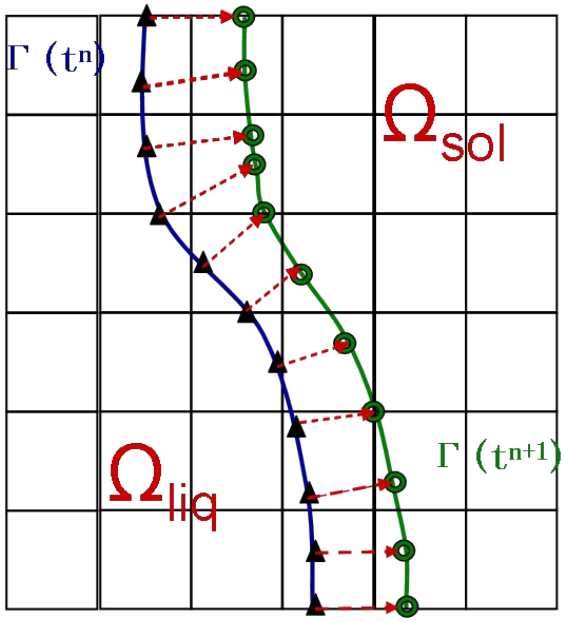



FIGURE 3.3 – Principe de la méthode de capture de l'interface par des marqueurs. Les marqueurs au temps $n$, ici les triangles noirs, sont advectés vers leurs positions au temps $t^{n+1}$, ici cercles verts. L'interface au temps $t^{n+1}$ est interpolée à partir des marqueurs au temps $t^{n+1}$. On voit que si les marqueurs au temps $t^n$ sont uniformément répartis, ce n'est pas forcément le cas au temps $t^{n+1}$.

Cette méthode a pour avantage d'être très précise puisqu'elle est basée sur un suivi lagrangien de chaque marqueur. Cependant, lorsque les marqueurs

sont trop espacés ils est nécessaire de la redistribuer le long de l'interface afin de ne pas perdre la précision numérique. En effet, l'advection de ces marqueurs modifie leur répartition le long de l'interface en faisant apparaitre des zones plus denses que d'autres (voir Fig. 3.3), ce qui implique que la reconstruction de l'interface par interpolation va varier en précision selon la zone dans laquelle on se trouve. L'autre inconvénient majeur réside dans la difficulté de prendre en compte les changements de topologie de l'interface qui sont possibles lors du changement de phase.

L'autre type de méthode envisageable basée sur une capture implicite de l'interface est la méthode Level Set. Elle a été introduite en 1988 par Osher et Sethian [OS88]. Cette méthode eulérienne est utilisée dans de nombreux domaines tels que la mécanique des fluides, le traitement d'image, la propagation de front, etc .... Comme son nom l'indique la méthode Level Set repère l'interface $\Gamma$ à partir d'une des courbes de niveau d'une fonction régulière $\Phi(\overrightarrow{x}, t)$ (au moins lipschitzienne) à valeurs dans $\mathbb{R}$. Généralement, l'isocontour 0 de la fonction $\Phi$ caractérise l'interface. Supposons qu'à l'instant $t = 0$, on ait :

$$\{\overrightarrow{x},\ \text{tels que } \Phi_0(\overrightarrow{x}) = 0\} = \Gamma_0, \tag{3.9}$$

où $\Phi_0$ est une fonction régulière.

On résout alors

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi}{\partial t} + \overrightarrow{v} \cdot \nabla \Phi = 0, \\ \Phi(t = 0, \overrightarrow{x}) = \Phi_0(\overrightarrow{x}). \end{cases} \tag{3.10}$$

**Proposition 1.** *On a l'égalité quelque soit t*

$$\Gamma(t) = \{\overrightarrow{x} \text{ tel que } \Phi(t, \overrightarrow{x}) = 0\}. \tag{3.11}$$

Cette fonction Level Set a de nombreux avantages. A partir des ses dérivées successives, on exprime la normale à l'interface ainsi que la courbure moyenne de celle-ci. La méthode Level Set gère de façon naturelle les changements de topologie, ce qui fait de cette méthode une méthode robuste.

Nous retiendrons la méthode Level Set pour nos applications car elle fournit des informations intéressantes sur l'interface comme sa normale.

### 3.3.2 Généralités sur la méthode Level-Set

Si l'interface est matérialisée par l'isocontour zero, il est naturel de définir les sous domaines $\Omega^-(t)$ et $\Omega^+(t)$ tels que $\Omega^-(t) = \{\overrightarrow{x},\ \Phi(\overrightarrow{x}, t) < 0\}$ et $\Omega^+(t) = \{\overrightarrow{x},\ \Phi(\overrightarrow{x}, t) > 0\}$. On en déduit les fonctions caractéristiques

relatives à ces sous-domaines

$$\chi^-(\overrightarrow{x},t) = \begin{cases} 1 \text{ si } \Phi(\overrightarrow{x},t) \leq 0, \\ 0 \text{ si } \Phi(\overrightarrow{x},t) > 0, \end{cases}$$

pour le domaine $\Omega^+(t)$ et

$$\chi^+(\overrightarrow{x},t) = \begin{cases} 1 \text{ si } \Phi(\overrightarrow{x},t) > 0, \\ 0 \text{ si } \Phi(\overrightarrow{x},t) \leq 0, \end{cases}$$

pour le domaine $\Omega^-(t)$. On associe très souvent à la fonction Level Set la fonction **Heavyside** $H$

$$H(\Phi) = \begin{cases} 1 \text{ si } \Phi > 0, \\ 0 \text{ si } \Phi \leq 0, \end{cases}$$

et l'on remarque donc que $\chi^+(\overrightarrow{x},t) = H(\Phi(\overrightarrow{x},t))$ et $\chi^-(\overrightarrow{x},t) = 1 - H(\Phi(\overrightarrow{x},t))$ pour tout $\overrightarrow{x}$. La figure Fig. 3.4 récapitule les propriétés des sous domaines en fonction de la Level Set. Dans la suite, le domaine $\Omega^-$ (respectivement le domaine $\Omega^+$) sera le domaine de la phase liquide (respectivement de la phase solide).

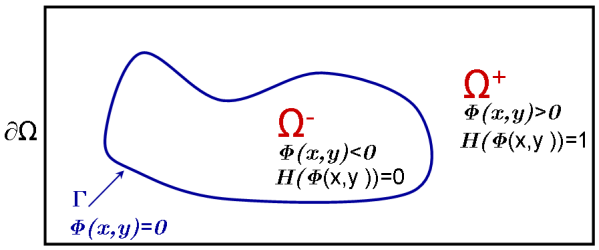



FIGURE 3.4 – Définitions des sous domaines en fonction de la fonction Level Set

A partir des dérivées de la fonction Level Set, on peut facilement définir les informations géométiques relatives à l'interface dont la normale à l'interface donnée par

$$\overrightarrow{n} = \frac{\nabla\Phi}{|\nabla\Phi|},$$

ainsi que la courbure moyenne à l'interface

$$\kappa = \nabla\cdot\left(\frac{\nabla\Phi}{|\nabla\Phi|}\right) = \nabla\cdot\overrightarrow{n}.$$

### 3.3.3 Déplacement d'interfaces

L'advection de l'interface est réalisée à l'aide de l'équation (3.10) rappelée ici

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi}{\partial t} + \overrightarrow{v}(\overrightarrow{x},t)\cdot \nabla \Phi = 0, \ \forall \overrightarrow{x} \in \Omega, \ t > 0, \\ \\ \Phi(\overrightarrow{x},0) = \Phi_0(\overrightarrow{x}), \ \forall \overrightarrow{x} \in \Omega. \end{cases}$$

Comme il a été mentionné auparavant, la fonction Level Set donne des informations telles que la normale et la courbure de l'interface. Il est donc important de résoudre l'équation d'advection (3.10) le plus précisément possible. Le domaine est muni d'une grille cartésienne comme celle décrite dans le chapitre précédent (voir section 2.3.1).

Supposons que le champ de vitesse variable $\overrightarrow{v}(\overrightarrow{x},t)$, à l'instant $t^n = n\triangle t$, est connu en chaque points $P_{i,j}$ du maillage par $\overrightarrow{v}(\overrightarrow{x}_{i,j},t^n) = \begin{pmatrix} u^n_{i,j} \\ v^n_{i,j} \end{pmatrix}$. Le champ de vitesse est supposé régulier. De même, les valeurs de la fonction Level Set sont données en chaque point de l'interface à l'instant $t^n$ par $\Phi(\overrightarrow{x}_{i,j},t^n) = \Phi^n_{i,j}$. En choisissant pour le moment une discrétisation Euler explicite pour le terme en temps, le schéma numérique par le méthode des différences finies pour résoudre l'équation (3.10) est

$$\frac{\Phi^{n+1}_{i,j} - \Phi^n_{i,j}}{\triangle t} + u^n_{i,j}\,(\Phi_x)^n_{i,j} + v^n_{i,j}\,(\Phi_y)^n_{i,j} = 0,$$

où $\nabla^n_{i,j} = \begin{pmatrix} (\Phi_x)^n_{i,j} \\ (\Phi_y)^n_{i,j} \end{pmatrix}$ représente le gradient discret de $\Phi$ à l'intant $t^n$ et au point $P_{i,j}$. L'expression des dérivées spatiales discrètes $(\Phi_x)^n_{i,j}$ et $(\Phi_y)^n_{i,j}$ sont à déterminer. Nous présenterons dans la suite le schéma numérique en 1D pour simplifier les notations et toutes les directions sont traitées de façon identique. Le schéma en 1D s'écrit

$$\frac{\Phi^{n+1}_i - \Phi^n_i}{\triangle t} + u^n_i\,(\Phi_x)^n_i = 0 \tag{3.12}$$

En s'appuyant sur la méthode des caractéristiques, l'expression du terme $(\Phi_x)^n_i$ dépend du signe de $u^n_i$ qui indique le sens de déplacement des informations. On a ainsi

$$(\Phi_x)^n_i = \begin{cases} (\Phi^-_x)^n_i & \text{si } u^n_i < 0 \\ (\Phi^+_x)^n_i & \text{si } u^n_i > 0 \end{cases}, \tag{3.13}$$

avec dans le cas du simple schéma Upwind classique

$$\left(\Phi_x^-\right)_i^n = \frac{\Phi_i^n - \Phi_{i-1}^n}{\triangle x} \text{ et } \left(\Phi_x^+\right)_i^n = \frac{\Phi_{i+1}^n - \Phi_i^n}{\triangle x}.$$

Le schéma Upwind est du premier ordre en espace. Le critère de stabilité de la condition Courant-Friedrichs-Lewy (condition CFL) impose

$$\triangle t = \alpha \left( \frac{\triangle x}{\max_{0 \leqslant i \leqslant N_x} |u_i^n|} \right), \tag{3.14}$$

où $\alpha$ est le nombre CFL choisi tel que $0 < \alpha < 1$. Ce schéma s'avère être stable mais très diffusif.

D'autres schémas pour l'équation d'advection existent : le schéma de Lax-Wendroff, ou le schéma de Beam-Warning ou celui de Fromm ou de Lax-Friedrich pour en citer que quelques un.

Dans les années 80, Harten, Engquist, Osher et Chakravarthy ont developpé les schémas ENO (pour Essentially Non Oscillatory, voir [SO88, SO89, OS91]). Cette méthode améliore le schéma Upwind présenté précédemment en utilisant une discrétisation spatiale d'ordre plus élevé pour les termes $(\Phi_x^-)_i^n$ et $(\Phi_x^+)_i^n$. Ce schéma approche $(\Phi_x^-)_i^n$ et $(\Phi_x^+)_i^n$ en utilisant différents stencils et choisit le meilleur en fonction de la régularité locale de la solution numérique. Il s'appuie sur les valeurs $\{\Phi_{i-3}^n, \Phi_{i-2}^n, \Phi_{i-1}^n, \Phi_i^n, \Phi_{i+1}^n, \Phi_{i+2}^n\}$ pour calculer $(\Phi_x^-)_i^n$ et sur $\{\Phi_{i-2}^n, \Phi_{i-1}^n, \Phi_i^n, \Phi_{i+1}^n, \Phi_{i+2}^n, \Phi_{i+3}^n, \}$ pour $(\Phi_x^+)_i^n$. Pour réaliser le calcul du terme $(\Phi_x^-)_i^n$ par exemple, on définit les dérivées discrètes suivantes

$$\upsilon_1 = \frac{\Phi_{i-2}^n - \Phi_{i-3}^n}{\triangle x},\ \upsilon_2 = \frac{\Phi_{i-1}^n - \Phi_{i-2}^n}{\triangle x},\ \upsilon_3 = \frac{\Phi_i^n - \Phi_{i-1}^n}{\triangle x},\ \upsilon_4 = \frac{\Phi_{i+1}^n - \Phi_i^n}{\triangle x},$$
$$\upsilon_5 = \frac{\Phi_{i+2}^n - \Phi_{i+1}^n}{\triangle x}.$$

Grâce aux termes précédemment introduits, on forme trois groupes consécutifs de ces valeurs : $(\upsilon_1, \upsilon_2, \upsilon_3)$, $(\upsilon_2, \upsilon_3, \upsilon_4)$ et $(\upsilon_3, \upsilon_4, \upsilon_5)$. A partir de chacun de ces groupes, on peut extraire une interpolation polynomiale à l'ordre 3 de $(\Phi_x^-)_i^n$, voir [OF03]. On obtient alors les trois approximations possibles suivantes :

$$\left(\Phi_x^-\right)_i^{n,I} = \frac{\upsilon_1}{3} - \frac{7\upsilon_2}{6} + \frac{11\upsilon_3}{6},\ \left(\Phi_x^-\right)_i^{n,II} = -\frac{\upsilon_2}{6} + \frac{5\upsilon_3}{6} + \frac{\upsilon_4}{3},$$
$$\left(\Phi_x^-\right)_i^{n,III} = \frac{\upsilon_3}{3} + \frac{5\upsilon_4}{6} - \frac{\upsilon_5}{6}. \tag{3.15}$$

Le schéma ENO choisit l'approximation issue de l'interpolation polynomiale de $\Phi^n$ qui minimise les oscillations. Il est d'ordre 3.

Le schéma WENO (pour Weighted Essentially Non Oscillatory, voir [LSS97, JP00, Shu03]) améliore le schéma ENO en proposant une combinaison convexe des différentes approximations possibles pour $(\Phi_x^-)_i^n$ et $(\Phi_x^+)_i^n$. En effet, il a été remarqué pour une solution suffisamment régulière qu'une combinaison convexe particulière des trois approximations (par exemple (3.15) pour $(\Phi_x^-)_i^n$) fournit une approximation d'ordre 5. En reprenant le cas de l'approximation de $(\Phi_x^-)_i^n$, [JP00] définit les indicateurs de régularité suivants :

$$\begin{aligned}
S_1 &= \frac{13}{12}(v_1 - 2v_2 + v_3)^2 + \frac{1}{4}(v_1 - 4v_2 + 3v_3)^2, \\
S_2 &= \frac{13}{12}(v_2 - 2v_3 + v_3)^2 + \frac{1}{4}(v_2 - v_4)^2, \\
S_3 &= \frac{13}{12}(v_3 - 2v_4 + v_5)^2 + \frac{1}{4}(3v_3 - 4v_4 + v_5)^2,
\end{aligned}$$

associés aux coefficients

$$\alpha_1 = \frac{0.1}{(S_1 + \varepsilon)^2},\ \alpha_2 = \frac{0.6}{(S_2 + \varepsilon)^2},\ \alpha_3 = \frac{0.3}{(S_3 + \varepsilon)^2}, \tag{3.16}$$

où $\varepsilon > 0$ est un terme très petit (par exemple $\varepsilon = 10^{-6}\max\{v_k^2 + 10^{-99}\}$). Les poids de la combinaison convexe sont donnés par :

$$\omega_k = \frac{\alpha_k}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3},\ k = 1, 2, 3, \tag{3.17}$$

ce qui permet de reconstruire $(\Phi_x^-)_i^n$ :

$$\left(\Phi_x^-\right)_i^n \approx \omega_1 \left(\Phi_x^-\right)_i^{n,I} + \omega_2 \left(\Phi_x^-\right)_i^{n,II} + \omega_3 \left(\Phi_x^-\right)_i^{n,III}. \tag{3.18}$$

Cette combinaison convexe permet d'obtenir un schéma d'ordre 5 pour les solutions régulières et d'ordre 3 sinon.

En ce qui concerne la discrétisation en temps, il est courant d'utiliser des schémas de type TVD-Runge Kutta (RK). Cette approche a été utilisée dans [Den12, Tan07, Vig07] par exemple.

[Den12] compare numériquement les différents schémas pour l'équation d'advection sur deux cas tests. Le schéma WENO est extrêmement précis comme attendu.

Nous avons donc retenu le schéma WENO pour notre application. Un choix judicieux pour la fonction Level Set est la fonction distance signée. On a donc dans ce cas

$$\Phi(\overrightarrow{x}, t) = \begin{cases} -\ \min_{\overrightarrow{x}_\Gamma \in \Gamma(t)} |\overrightarrow{x} - \overrightarrow{x}_\Gamma|, & \text{si } \overrightarrow{x} \in \Omega^-, \\ \\ \quad \min_{\overrightarrow{x}_\Gamma \in \Gamma(t)} |\overrightarrow{x} - \overrightarrow{x}_\Gamma|, & \text{si } \overrightarrow{x} \in \Omega^+. \end{cases}$$

Une propriété intéressante de ce choix est que la fonction Level Set vérifie l'équation eikonale suivante

$$|\nabla\Phi| = 1.$$

malheureusement, la fonction Level Set ne conserve pas sa propriété de fonction distance signée. Pour calculer les grandeurs géométriques, il est nécessaire d'être proche de la fonction distance. Pour cela, nous avons besoin d'un algorithme de réinitialisation.

### 3.3.4 Réinitialisation

Il existe différentes approches qui permettent de réinitialiser la fonction $\Phi$ sous forme d'une fonction distance. La première méthode, présentée dans [Set96, Set99] par Sethian, est la méthode Fast Marching (FMM). Il s'agit de propager de proche en proche à partir d'une bande initiale autour de l'interface la fonction distance signée. Cette méthode est rapide et d'ordre 1 pour la reconstruction de la fonction distance signée dans sa forme la plus simple.

Une alternative est de redistancier la fonction Level Set, comme proposé par [SSO94], en résolvant l'équation suivante :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\Phi}{\partial\tau} + sgn(\Phi_0(\overrightarrow{x}))(|\nabla\Phi| - 1) = 0,\ \forall\overrightarrow{x} \in \Omega,\ \tau > 0. \\ \\ \Phi(\overrightarrow{x}, 0) = \Phi_0(\overrightarrow{x}),\ \forall\overrightarrow{x} \in \Omega, \end{cases} \tag{3.19}$$

où $\Phi_0$ est la condition initiale, $\tau$ un temps (fictif) et la fonction signe lissée :

$$sgn(\Phi_0(\overrightarrow{x})) = \frac{\Phi_0}{\sqrt{\Phi_0^2 + \alpha}}. \tag{3.20}$$

Le coefficient $\alpha$ est proportionnel à la taille des mailles. L'équation précédente peut être reformulée sous la forme d'une équation d'advection non-homogène :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\Phi}{\partial\tau} + \left( sgn(\Phi_0(\overrightarrow{x}))\dfrac{\nabla\Phi}{|\nabla\Phi|} \right) \cdot \nabla\Phi = sgn(\Phi_0(\overrightarrow{x})),\ \forall\overrightarrow{x} \in \Omega,\ \tau > 0. \\ \\ \Phi(\overrightarrow{x}, 0) = \Phi_0(\overrightarrow{x}),\ \forall\overrightarrow{x} \in \Omega, \end{cases}$$

le terme $sgn(\Phi_0(\overrightarrow{x}))\dfrac{\nabla\Phi}{|\nabla\Phi|}$ joue le rôle dans ce cas d'une vitesse. La résolution de cette équation de type Hamilton-Jacobi peut être résolue en utilisant le schéma WENO pour la partie transport et le schéma TVD-Runge Kutta

pour l'intégration en temps $\tau$. Cependant, cette discrétisation peut entrainer au cours des itérations un décalage du niveau zero de la fonction Level Set.

Pour pallier à ce problème, il existe des algorithmes de réinitialisation développés par Sussmann et Fatemi [SF99] ou encore Russo et Smerka [SSO94]. Des améliorations de l'algorithme de [SSO94] ont été proposées dans [Cho10].

Il s'agit de résoudre l'équation (3.19) spatialement en utilisant la discrétisation en différences finies du second ordre ENO comme arguments d'un opérateur Hamiltonien de type Godunov. En ce qui concerne la discrétisation spatiale, une méthode TVD Runge Kutta d'ordre 2 est utilisée. Pour conserver le niveau zero de la fonction Level Set, un traitement particulier est effectué pour les points proches de l'interface. Pour garantir la convergence de la méthode suivante le temps fictif $\tau$, il faut itérer. [Cho10] recommande d'effectuer $2 \times \max(N_x, N_y)$ itérations pour une grille de $N_x \times N_y$ noeuds.

La figure Fig.3.5 issue de [Cho10] montre l'évolution de la redistanciation au cours des itérations sur un cas test proposé par l'auteur.

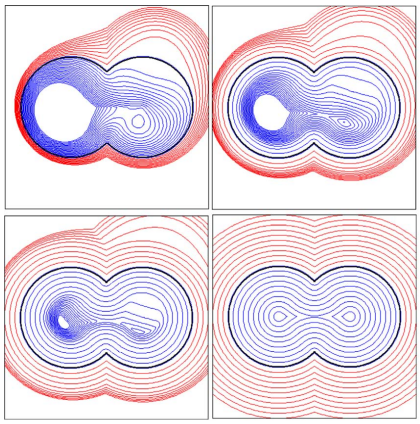


FIGURE 3.5 – Evolution au cours des itérations des isocontours de la fonction Level Set sur une grille $128^2$ pour un exemple tiré de [Cho10]. Les nombres d'itération sont 0 (en haut à gauche), 20 (en haut à droite), 40 (en bas à gauche) et 80 (en bas à droite). La courbe noire matérialise l'isocontour zéro.

La redistanciation n'est pas effectuée à chaque pas de temps $t$ pour réduire le coût de calcul. Cet algorithme est utilisée si le critère

$$|\nabla\Phi - 1| < 10^{-3}$$

n'est pas respecté finalement.

Nous avons choisi l'algorithme de [Cho10] pour la redistanciation pour sa précision. Le dernier point à aborder en ce qui concerne la Level Set est la possibilité d'étendre un champ scalaire défini sur l'interface suivant les directions normales à l'interface.

### 3.3.5 Extension de champ

Le modèle de Stefan fournit le champ de vecteurs vitesse sur l'interface. En effet, le bilan d'énergie s'effectue sur celle-ci. Cependant, la résolution de l'équation d'advection nécessite un champ de vitesse défini sur le domaine $\Omega$. Pour cela, il faut étendre le champ de vecteurs vitesse de l'interface à l'ensemble du domaine. Le bilan d'énergie procure la norme des vecteurs vitesse dans la direction normale à l'interface. La Level Set permet de prolonger cette quantité le long en partant de l'interface suivant les normales à celle-ci.

Sethian et Adalsteinsson propose dans [AS99] une méthode inspirée de la méthode de redistanciation Fast Marching pour extrapoler à l'ensemble du domaine une variable scalaire $f$ donnée sur l'interface. Ils résolvent l'équation

$$\nabla f \cdot \nabla \Phi = 0.$$

sur l'ensemble du domaine $\Omega$. La variable $f$ n'étant pas au départ fournie en tout noeud du domaine $\Omega$ mais en tout point de l'interface, il faut initialiser les noeuds proches de l'interface. A partir des valeurs en ces noeuds initialisés, l'algorithme est appliqué sur l'ensemble du domaine. En 2009, David Chopp propose une amélioration de la méthode Fast Marching dans [Cho09].

La méthode utilisée dans cette thèse est celle de proposée dans [ZCMO96]. Il s'agit de résoudre l'équation d'Hamilton-Jacobi suivante pour extrapoler la fonction $f$ :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial \tau} + sgn(\Phi(\overrightarrow{x}))\,\overrightarrow{n} \cdot \nabla f = 0, \ \forall \overrightarrow{x} \in \Omega, \ \tau > 0. \\ \\ f(\overrightarrow{x}, 0) = f_0(\overrightarrow{x}), \ \forall \overrightarrow{x} \in \Omega, \end{cases} \tag{3.21}$$

où $\tau$ est un temps fictif, $\overrightarrow{n} = \dfrac{\nabla \Phi}{|\nabla \Phi|}$ le vecteur normal et $f_0$ le champ initial de $f$ qui doit être extrapolé. La fonction signe lissée est définie précédemment par (3.20). L'équation 3.21 est une équation d'advection de la variable $f$ avec un champ de vitesse donné par $sgn(\Phi(\overrightarrow{x}))\,\overrightarrow{n}$. Pour la résoudre, une méthode similaire à celle mise au point pour l'équation d'advection de la Level Set. Il s'agit d'un schéma numérique différences finies-éléments finis de type WENO en ce qui concerne la discrétisation spatiale et d'un schéma TVD Runge Kutta pour la discrétisation temporelle. Dans notre cas, la quantité scalaire $f$ sera chaque composante du champ de vitesse, i. e. $f = u$ et $f = v$. L'algorithme d'extrapolation sera itéré jusqu'à atteindre un pseudo-temps $\tau$ qui permet d'étendre $f$ dans un voisinage de l'interface. Ce champ de vitesse extrapolé composante par composante a l'avantage d'améliorer la préservation de la propriété de fonction distance signée pour la Level Set qui sera advectée avec

ce champ (voir [ZCMO96]). Ceci diminuera le nombre d'appels à l'algorithme de redistanciation. Comme mentionné précédemment le champ de vitesse est fourni sur l'interface et non aux noeuds du maillage. Il faut donc initialiser l'algorithme en procurant un champ de vitesse pour les noeuds proches de l'interface.

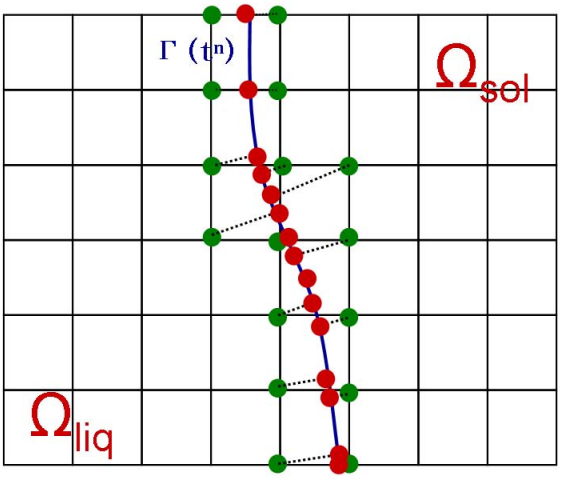



FIGURE 3.6 – L'initialisation du processus d'extension de champ de vitesse requiert de définir les vecteurs vitesse pour tous les noeuds proches (points verts) de l'interface (trait bleu) (Un noeud est dit "proche" de l'interface si au moins un des ses voisins appartient à l'autre domaine) Comme le champ de vitesse est choisi constant le long des normales à l'interface, le vecteur vitesse en chacun de ces noeuds est égal à celui de leurs projetés sur l'interface (points rouges).

La méthode d'initialisation est la suivante (voir Fig. 3.6). On dit qu'un noeud est *proche* de l'interface si l'un au moins de ses noeuds voisins appartient au domaine différent du sien. Ainsi, les noeuds proches de l'interface appartiennent à une bande située de part et d'autre de l'interface comme le montre la figure Fig.3.6 . Pour ces noeuds, on détermine leurs projetés sur l'interface grâce à la normale et la distance signée fournis par la Level Set. Le point projeté $P_{i,j}^{projete}$ du point $P_{i,j}$ de coordonnées $\overrightarrow{x}_{i,j}$ est donnée par

$$\overrightarrow{x}_{i,j}^{projete} = \overrightarrow{x}_{i,j} - \Phi_{i,j}\,\overrightarrow{n}_{i,j}.$$

En ce point $P_{i,j}^{projete}$, le bilan de Stefan donne un vecteur vitesse de déplacement de l'interface $\overrightarrow{v}_{i,j}^{projete}$. Comme l'extrapolation désirée doit conserver les quantités le long des normales, on pose naturellement que $\overrightarrow{v}_{i,j} = \overrightarrow{v}_{i,j}^{projete}$. L'algorithme d'extrapolation est ainsi initialisé.

## 3.4 Résolution de l'équation de la chaleur dans chaque sous-domaine

Dans la troisième étape de l'algorithme choisi pour résoudre le problème de Stefan, l'équation de la chaleur est résolue sur chacun des deux sous domaines $\Omega_{liq}(t^{n+1})$ et $\Omega_{sol}(t^{n+1})$. La condition de Dirichlet qui caractérise l'interface est imposée sur celle-ci, soit

$$T(\overrightarrow{x}, t) = T_f, \ \forall \overrightarrow{x} \in \Gamma(t^{n+1}).$$

Nous utiliserons la méthode mise au point dans le chapitre précédent pour résoudre l'équation de la chaleur avec une condition de Dirichlet sur $\Gamma(t^{n+1})$.

Cependant lors du déplacement de l'interface entre le temps $t^n$ et $t^{n+1}$ de nouveaux noeuds de maillage sont passés de l'un des sous domaines vers l'autre selon le sens de déplacement de l'interface. Ces nouveaux noeuds ne possèdent pas d'histoire dans le sous-domaine auquel ils appartiennent au temps $t^{n+1}$. Il est nécéssaire de leurs donner une valeur au temps $t^n$. Le champ de température du temps $t^n$ respecte la condition $T(\overrightarrow{x}, t^n) = T_f$ sur $\Gamma(t^n)$. Il faut extrapoler, suivant la normale à l'interface $\Gamma(t^n)$, le champ de température du domaine $\Omega_k(t^n)$ à ce point en tenant compte du fait que $T(\overrightarrow{x}, t^n) = T_f$ sur $\Gamma(t^n)$.

Par exemple, soit $P_\alpha$, de coordonnées $\overrightarrow{x}_\alpha$, un nouveau noeud du domaine de la phase liquide au temps $t^{n+1}$ comme le montre la figure Fig. 3.7.

On a donc

$$P_\alpha \in \Omega_{sol}(t^n) \text{ et } P_\alpha \in \Omega_{liq}(t^{n+1}).$$

En utilisant, la fonction distance signée de la Level Set, les coordonnées du projeté $P_\alpha^{projete}$ de $P_\alpha$ sur $\Gamma(t^n)$ sont données par

$$\overrightarrow{x}_\alpha^{projete} = \overrightarrow{x}_\alpha - \Phi_\alpha^n \ \overrightarrow{n}_\alpha^n,$$

où $\Phi_\alpha^n$ et $\overrightarrow{n}_\alpha^n = \dfrac{\nabla\Phi_\alpha^n}{|\nabla\Phi_\alpha^n|}$ sont respectivement la valeur de la fonction Level Set et le vecteur normal au point $P_\alpha$. En ce point $P_\alpha^{projete}$, la température au temps $t^n$ vaut $T_f$. Un second point $P_\alpha^{projete,1}$ est choisi dans le domaine $\Omega_{liq}(t^n)$ avec

$$\overrightarrow{x}_\alpha^{projete,1} = \overrightarrow{x}_\alpha - signe(\Phi_\alpha^n)\,(|\Phi_\alpha^n| + \ell) \ \overrightarrow{n}_\alpha^n,$$

où $signe(\Phi) = \dfrac{\Phi}{|\Phi|}$ est la fonction signe et $\ell = \dfrac{2\triangle x \triangle y}{\triangle x + \triangle y}$ une longueur caractéristique de la maille. En ce point $P_\alpha^{projete,1}$, on interpole la valeur de la

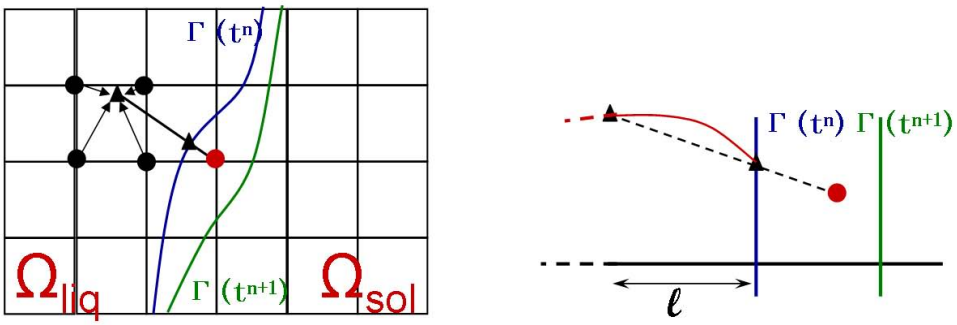



FIGURE 3.7 – Lorsqu'un nouveau point $P_\alpha$ (point rouge) apparait dans la domaine $\Omega_{liq}$ au temps $t^{n+1}$, il faut lui construire une histoire, c'est à dire lui donner un valeur au temps $t^n$. On extrapole le champs de température du domaine $\Omega_{liq}(t^n)$ de façon linéaire. On utilise pour cela deux points de $\Omega_{liq}(t^n)$ dans la direction normale à $\Gamma(t^n)$ (matérialisé par des triangles noirs), dont l'un est sur l'interface $\Gamma(t^n)$ (trait bleu).

température $T_\alpha^{projete,1}$ grâce au champ de température $T(\overrightarrow{x}, t^n)$. On obtient alors le gradient dans la direction normale

$$(\partial_n T)_\alpha = \frac{T_\alpha^{projete,1} - T_f}{\ell}.$$

Par une extrapolation linéaire, on détermine la valeur de la température au point $P_\alpha$ à l'instant. On a ainsi $t^n$

$$T_\alpha^n = T_f + \Phi_\alpha^n \, (\partial_n T)_\alpha.$$

Cette méthode est utilisée pour tous les nouveaux noeuds qui apparaissent dans l'un ou l'autre des sous-domaines.

Dans la section suivante, nous aborderons le calcul de la vitesse sur un point de l'interface.

## 3.5 Calcul de la vitesse à l'interface

La première étape de l'algorithme consiste à déterminer le champ de vitesse de l'interface grâce à la relation de Stefan (3.5), rappelée ici

$$[\mathbf{q}^n] = -\rho L \overrightarrow{v}(t^{n+1}) \cdot \overrightarrow{n}_{int}, \text{ sur } \Gamma(t^n).$$

Comme expliqué dans la section 3.3.5, pour initialiser l'algorithme d'extension du champ de vitesse, il est nécessaire de pouvoir calculer le vecteur vitesse de l'interface en tout point de celle-ci à partir du champ de température. En effet, la vitesse en chaque noeud $P_\alpha$ (de coordonnées $\overrightarrow{x}_\alpha$) proche de l'interface (noeud ayant au moins un de ses voisins dans l'autre sous-domaine) est choisie égale à celle de son projeté sur l'interface $P_\alpha^{projete}$ de coordonnées $\overrightarrow{x}_\alpha^{projete}$ tel que

$$\overrightarrow{x}_\alpha^{projete} = \overrightarrow{x}_\alpha - \Phi_\alpha^n \overrightarrow{n}_\alpha^n,$$

avec $\overrightarrow{n}_\alpha^n$ la normale à l'interface donnée par la Level Set. Il faut donc calculer le flux thermique normal de part et d'autre de l'interface $\Gamma(t^n)$ en ce point $P_\alpha^{projete}$. On utilise la méthode de [UMS53] pour exprimer ces flux au second ordre spatialement. A partir du point $P_\alpha^{projete}$, on détermine deux autres points dans chaque sous-domaine suivant la direction normale. Soient $\overrightarrow{x}_{alpha}^{\Lambda}$, $\Lambda = \{-2, -1, 1, 2\}$, les coordonnées des ces quatres points données par

$$\overrightarrow{x}_{alpha}^{\Lambda} = \overrightarrow{x}_\alpha^{projete} + \Lambda\ h\ \overrightarrow{n}_\alpha^n,\ \Lambda = \{-2, -1, 1, 2\},$$

où $h = \dfrac{2\triangle x \triangle y}{\triangle x + \triangle y}$ est une longueur caractéristique de la maille.

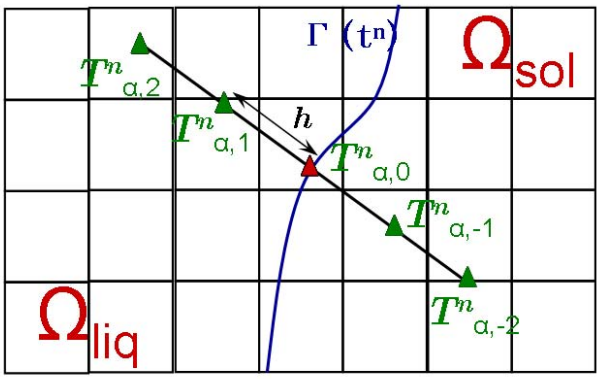



FIGURE 3.8 – Pour le calcul du gradient de température de part et d'autre de l'interface au point rouge, on utilise la valeur du champ de température en deux points intérieurs à chaque domaine.

Une interpolation biinéaire avec la valeur de la température sur les noeuds voisins est utilisée pour évaluer la température en chacun de ces points (en prenant en compte le fait que sur l'interface la température vaut $T_f$). On obtient les valeurs notées $T_{alpha,\Lambda}$, $\Lambda = \{-2, -1, 1, 2\}$, respectives à ces quatres

points. On a en particulier $T_{alpha,0} = T_f$ puisque $\overrightarrow{x}^0_{alpha} = \overrightarrow{x}^{projete}_{\alpha}$. La figure Fig. 3.8 montre la position des cinq points nécessaires pour calculer le gradient de part et d'autre de l'interface.

Les expressions du second ordre du gradient de la température dans la direction normale dans chaque sous-domaine à l'instant $t^n$ sont données par

$$\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)^n_{alpha,+} = \frac{4T^n_{alpha,1} - T^n_{alpha,2} - 3T_f}{2h}, \text{ dans } \Omega_+, \tag{3.22a}$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)^n_{alpha,-} = -\frac{4T^n_{alpha,-1} - T^n_{alpha,-2} - 3T_f}{2h}, \text{ dans } \Omega_-. \tag{3.22b}$$

$\Omega_+$ (respectivement $\Omega_-$) est le domaine d'appartenance des points d'indice $\Lambda = 1, 2$ (respectivement $\Lambda = -1, -2$). Le terme $[\mathbf{q}^n]$ est alors déduit et par conséquent la vitesse $\overrightarrow{v}(t^{n+1})$ aussi. L'algorithme d'extension du champ de vitesse pour la Level Set est ainsi initialisé en effectuant ces calculs pour chaque noeud de maillage $P_\alpha$ proche de l'interface.

Dans les sections précédentes, nous avons présenté les méthodes utilisées dans cette thèse pour effectuer chacune des étapes de l'algorithme de résolution du problème de Stefan. Nous donnerons dans la suite quelques résultats numériques en 1D puis en 2D.

## 3.6 Résultats numériques

### 3.6.1 Problème de Stefan 1D

Le premier problème traité est celui de la progression d'un front de fusion en 1D illustré par la figure Fig. 3.9.

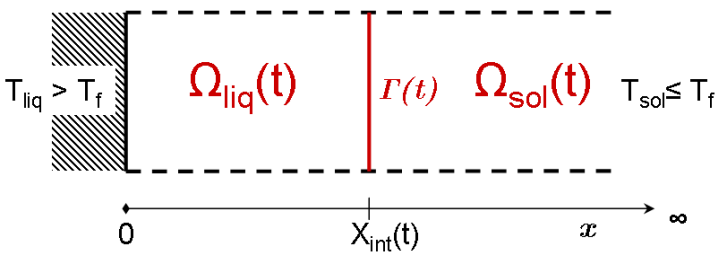



FIGURE 3.9 – Problème de Stefan de fusion dans un domaine 1D semi-infini.

Il n'existe pas de solution analytique lorsque le domaine $\Omega$ est un domaine fini. Dans le cas d'un domaine $\Omega$ semi-infini, il est possible d'expliciter la

solution exacte dans certaines conditions. Ici, les propriétés thermophysiques sont considérées constantes (température de fusion, conductivités thermiques, masse volumique, ...).

Soit $X_{int}(t)$ la position $\Gamma$ de l'interface au temps $t$. Le domaine de la phase liquide est

$$\Omega_{liq}(t) = ]0, X_{int}(t)],$$

et celui de la phase solide correspond à

$$\Omega_{sol}(t) = [X_{int}(t), \infty[.$$

On rappelle que le champ de température dans chaque sous domaine répond à

$$\rho_k C_{vk} \frac{\partial T}{\partial t} - \partial_x \left(K_k \partial_x T\right) = 0, \text{ dans } \Omega_k(t) \setminus \Gamma(t), \text{ avec } k = sol, liq.$$

Les conditions de bord sur $\partial\Omega$ pour la température sont

$$T(0,t) = T_{liq}, \ t > 0, \text{ tel que } T_{liq} > T_f, \tag{3.23a}$$

$$\lim_{x\to\infty} T(x,t) = T_{sol}, \ t > 0, \text{ tel que } T_{sol} \leq T_f. \tag{3.23b}$$

L'interface entre les deux phases vérifie les deux relations introduites à la section 3.2.2, que nous rapellons ici

$$T(x,t) = T_f, \ x = X_{int}(t), \ t > 0 \tag{3.24a}$$

$$K_{liq} \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{\Gamma(t),liq} - K_{sol} \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{\Gamma(t),sol} = -\rho L \frac{dX_{int}}{dt}, \text{ sur } \Gamma(t). \tag{3.24b}$$

La condition initiale du problème est donnée par les relations :

$$X_{int}(0) = 0, \tag{3.25a}$$

$$T(x,0) = T_{sol}, \ \forall x > 0. \tag{3.25b}$$

Le problème mathématique est alors fermé. En 1891, Stefan donne la solution de ce problème dans le cas particulier où $T_{sol} = T_f$ [Ste91]. Dans la littérature, ce problème est appelé problème de Stefan à une phase puisque la phase solide est à température constante. Le cas où $T_{sol} < T_f$ a été résolu par Neumann en 1912 dans [Neu12]. Des solutions approchées ont été proposées par Goodman, Karman et Polhausen (une revue des solutions est faite dans [GB01]).

Pour résoudre ce problème de Stefan, Neumann utilise la variable autosemblable

$$\eta = \frac{x}{\sqrt{t}}.$$

On cherche donc le champ de température sous la forme $T(x,t) = \overline{T}_{sol}(\eta)$ sur $\Omega_{sol}(t)$ et $T(x,t) = \overline{T}_{liq}(\eta)$ sur $\Omega_{liq}(t)$, avec $\overline{T}_{sol}$ et $\overline{T}_{liq}$ des fonctions. On cherche la position de l'interface sous la forme

$$X_{int}(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha_{liq}t}, \tag{3.26}$$

où $\alpha_k = \dfrac{K_k}{\rho_k C_{vk}}$, $k = sol, liq$, et $\lambda$ un paramètre. Tous calculs faits (voir [Pou94] pour les détails de calculs), on obtient pour $t > 0$

$$T(x,t) = T_{liq} - (T_{liq} - T_f)\frac{erf\left(\dfrac{x}{2\sqrt{\alpha_{liq}t}}\right)}{erf(\lambda)},\ x \in \Omega_{liq}(t) = ]0, X_{int}(t)], \tag{3.27a}$$

$$T(x,t) = T_{sol} + (T_f - T_{sol})\frac{erfc\left(\dfrac{x}{2\sqrt{\alpha_{sol}t}}\right)}{erfc\ \left(\lambda\sqrt{\alpha_{liq}/\alpha_{sol}}\right)},\ x \in \Omega_{sol}(t) = [X_{int}(t), \infty[. \tag{3.27b}$$

Les fonctions *erf* et *erfc* sont les fonctions d'erreurs de Gauss définies par

$$erf(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^y e^{-\xi^2}d\xi$$

et

$$erfc(y) = 1 - erf(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_y^\infty e^{-\xi^2}d\xi.$$

Dans le cas d'un problème à deux phases (la solution du problème à une phase s'obtient simplement en prenant $T_{sol} = T_f$), en utilisant (3.27a), (3.27b) et (3.26) dans la condition de Stefan (3.24b), on aboutit à l'équation en $\lambda$ suivante

$$\frac{St_{liq}}{\exp(\lambda^2)erf(\lambda)} - \frac{St_{sol}}{\nu\exp(\nu^2\lambda^2)erfc(\nu\lambda)} = \lambda\sqrt{\pi}, \tag{3.28}$$

où $St_{liq} = \dfrac{C_{vliq}(T_{liq} - T_f)}{L}$ et $St_{sol} = \dfrac{C_{vsol}(T_f - T_{sol})}{L}$ sont les nombres sans dimension de Stefan et $\nu = \dfrac{\alpha_{liq}}{\alpha_{sol}}$ un paramètre.

Les coefficients $St_{liq} > 0$, $St_{sol} > 0$ et $\nu > 0$ sont constants et donnés. L'équation non-linéaire en $\lambda$ (3.28) peut être résolue numériquement en utilisant par exemple un algorithme de Newton pour trouver l'unique racine.

Pour nos applications numériques, nous prenons le cas de la fusion de la glace. Les données physiques de l'eau et de la glace sont fournies dans le tableau Tab. 3.1.

| données | valeurs | unités |
|---|---|---|
| $K_{glace}$ | 2.18 | $W/m/K$ |
| $K_{eau}$ | 0.6 | $W/m/K$ |
| $C_{vglace}$ | 2260 | $J/kg/K$ |
| $C_{veau}$ | 4186 | $J/kg/K$ |
| $\rho_{eau} = \rho_{glace}$ | 1000 | $kg/m^3$ |
| $L$ | 335000 | $J/kg$ |
| $T_f$ | 273 | $K$ |
| $T_{liq}$ | 283 | $K$ |

TABLE 3.1 – Propriétés physiques de l'eau et de la glace utilisées pour les cas tests numériques [ST09].

La température de la phase solide est supposée constante et on a $T_{sol} = T_f$. Dans ce cas, le paramètre $\lambda$ vaut 0.2449848054. Nous initialisons le domaine $\Omega$ avec la solution correspondant à une interface $X_{int}(t_0) = 0.4m$, ce qui correspond à un temps $t_0 \approx 4649751s$. La figure Fig. 3.10 montre la position de l'interface au cours du temps $\widetilde{t} = t - t_0$ pour trois maillages différents.

Les figures (3.10) et (3.11) permettent de constater la bonne convergence de la méthode. L'algorithme linéarisé utilisé permet de résoudre à l'ordre un le problème de Stefan, résultat en accord avec [ST09]. D'autre part, la discrétisation temporelle servant à la résolution des équations de thermique dans les sous-domaines est un Euler implicite d'ordre un. Le champ de vitesse, obtenu grâce à l'équation (3.5), est calculé à l'ordre un en temps par une discrétisation Euler explicite. Le champ de température est donné dans la figure Fig. 3.12 pour trois positions d'interface sur une grille de 100 noeuds.

### 3.6.2 Problème de Stefan 2D

Le cas test 2D est un problème de fusion d'un coin carré $[0, 5] \times [0, 5]$ initialement composé uniquement de la phase solide à la température $T_{sol}$ inférieure ou égale à la température de fusion $T_f$. Comme le présente la figure Fig. 3.13, on impose aux bords gauche et bas du domaine carré une température $T_{liq}$ supérieure à la température de fusion tandis que les bords droit et haut sont supposés infinis (conditions de flux nul). Le solide subit alors une fusion symétrique par rapport à la diagonale du carré. Les propriétés physiques sont les mêmes que le cas test 1D.

Ce problème a été résolu analytiquement par Rathjen et Jiji en 1971 [RJ71] dans le cas particulier où les coefficients $\alpha_{liq}$ et $\alpha_{sol}$ sont égaux. Comme pour le cas test 1D, la solution se formule à l'aide des variables de similitude

$$\eta_x = \frac{x}{\sqrt{2\alpha_{liq}t}} \text{ et } \eta_y = \frac{y}{\sqrt{2\alpha_{liq}t}}.$$

La figure Fig. 3.14 montre la position de l'interface pour six temps différents pour une grille de $35 \times 35$ noeuds. En utilisant les variables $(\eta_x, \eta_y)$, la figure Fig. 3.15 montre la position des points l'interface pour les mêmes temps que la figure Fig. 3.14. On constate la superposition des points signifiants que l'interface est fixe en variable de similitude. Ce resultat est en accord avec la solution théorique.

Dans la section 3.3.5, nous avons abordé la nécessité d'utiliser un algorithme d'extension de champs basé sur la Level Set pour le champ de vitesse. La figure Fig. 3.16 montre le champ de vitesse après extension, ainsi que l'interface où se trouvait les valeurs du champ de vitesse initialement. Nous nous sommes contenter d'étendre le champ de vitesse dans un voisinage de l'interface avec 6 itérations de pseudo temps $\tau$. Enfin la figure Fig. 3.17 présente le champs de température au au même temps.

## 3.7 Conclusion

Nous avons dans ce chapitre résolu le problème de Stefan modélisant le processus de fusion. Les effets de convection étaient négligés dans cette approche. Ce problème de couplage thermique-thermique a été réalisé à l'aide de la méthode élaborée pour l'équation de la chaleur présentée dans le chapitre précédent. Nous avons utilisé la méthode Level Set pour suivre l'interface sur la grille cartésienne. La fonction Level Set fournit les caractéristiques de l'interface telles que la normale à celle-ci. La méthode d'extension de champs, basée sur la Level Set, permet d'étendre le champ de vitesse de l'interface vers le reste du domaine dans la direction normale. L'algorithme choisi est d'ordre 1 de précision en temps comme le montrent les résultats numériques.

En pénétrant dans l'atmosphère, la paroi de l'engin subit un échauffement considérable provoqué par la conversion de l'énergie cinétique en énergie thermique. Certains matériaux composant la paroi de l'engin peuvent fondre. La phase liquide est alors injectée dans l'écoulement gazeux. La partie suivante portera sur la résolution numérique d'écoulements diphasiques. Il s'agira de définir le modèle ainsi que le schéma numérique de sa résolution.

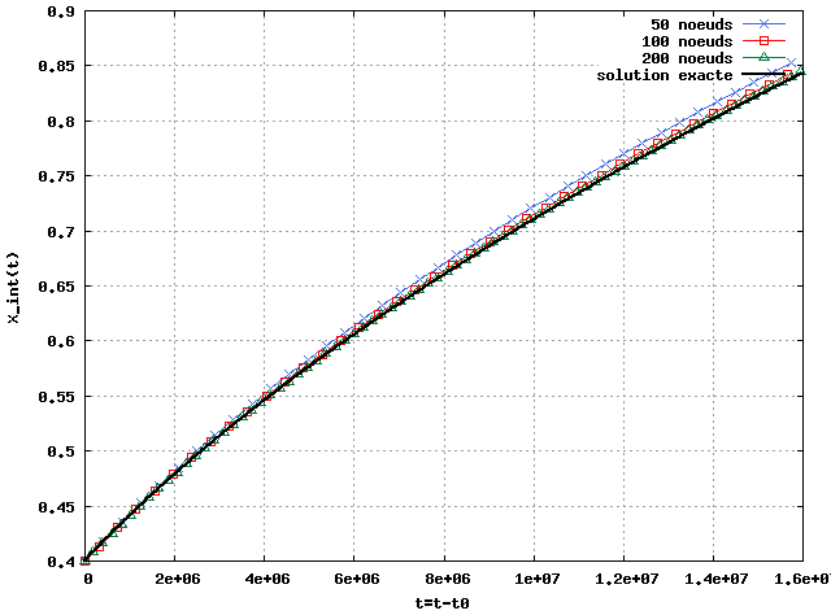



FIGURE 3.10 – Positions de l'interface en fonction du temps pour le cas du problème de Stefan 1D avec trois nombres de noeuds différents : 50, 100 et 200 noeuds. L'algorithme est d'ordre un de convergence.

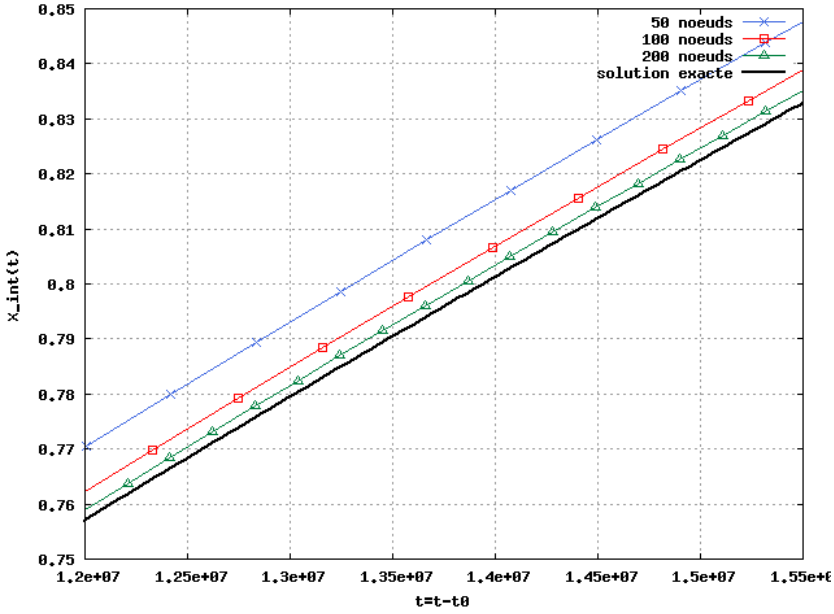



FIGURE 3.11 – Positions de l'interface en fonction du temps pour le cas du problème de Stefan 1D avec trois nombres de noeuds différents : 50, 100 et 200 noeuds. L'algorithme est d'ordre un de convergence. Il s'agit d'un zoom de la figure 3.10.

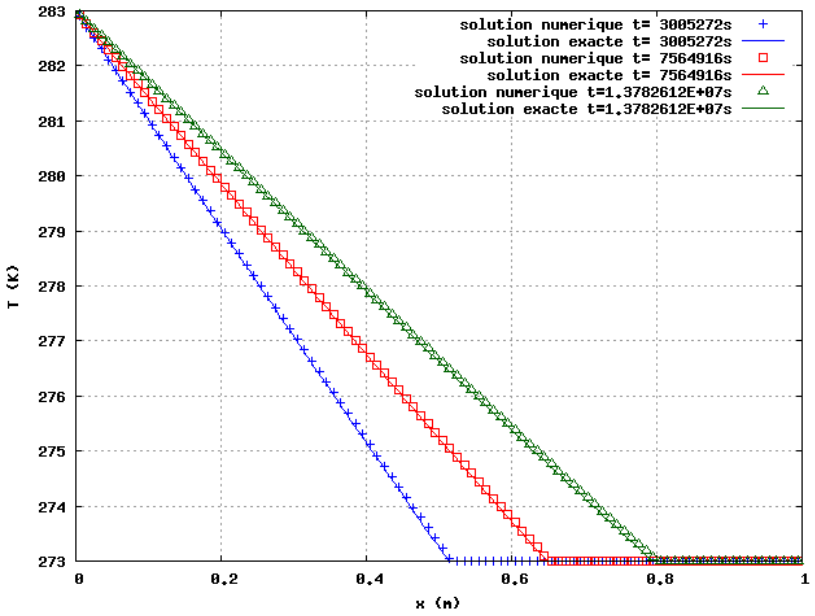



FIGURE 3.12 – Champ de température pour trois positions de l'interface pour le problème de Stefan en 1D.

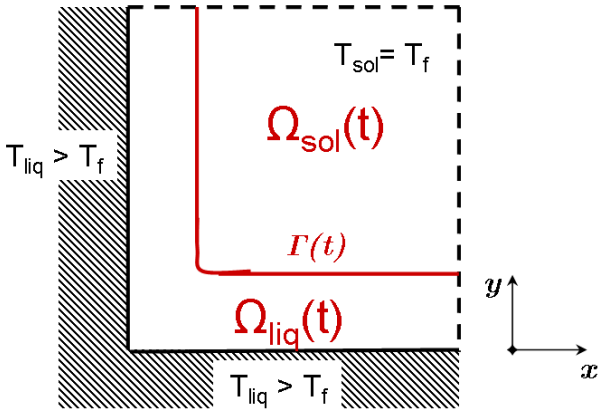



FIGURE 3.13 – Problème de Stefan 2D de fusion d'un coin semi-infini.

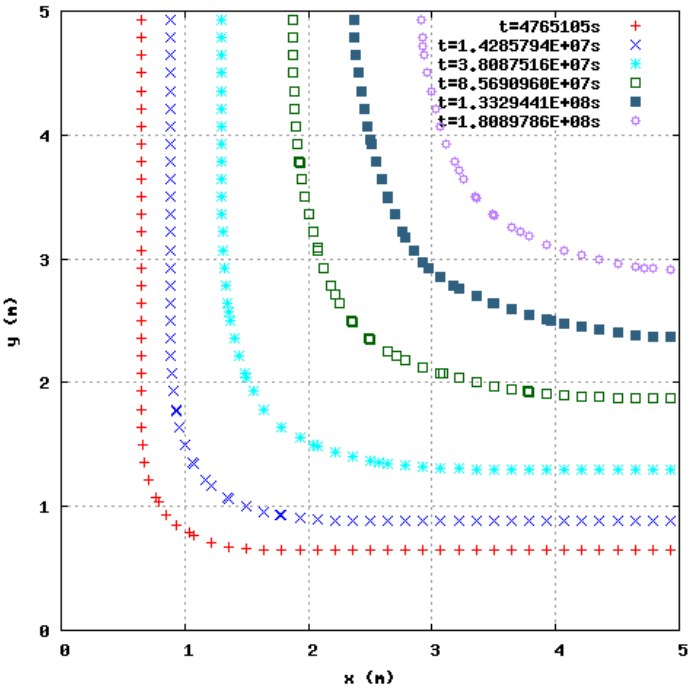



FIGURE 3.14 – Position de l'interface pour six temps différents pour le problème de Stefan 2D avec une grille de $35 \times 35$ noeuds.

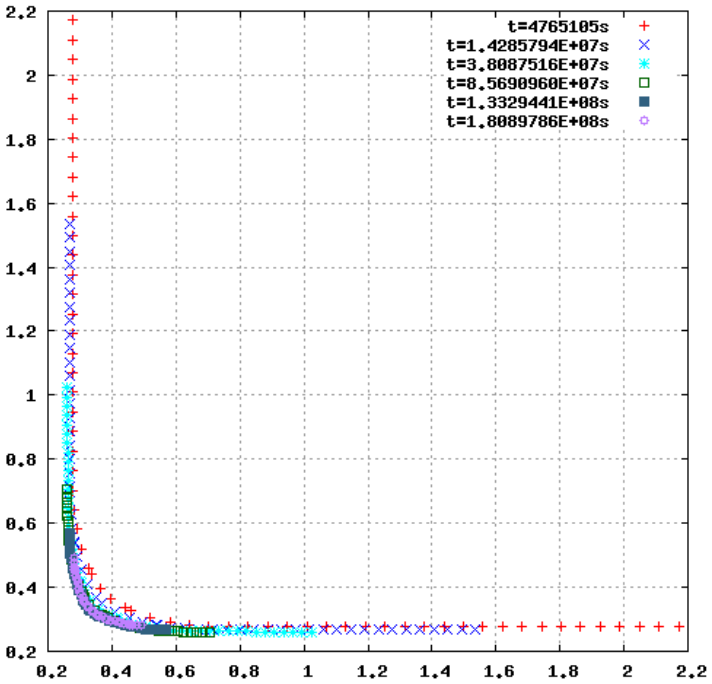



FIGURE 3.15 – Position de l'interface pour six temps différents pour le problème de Stefan 2D en variable de similitude.

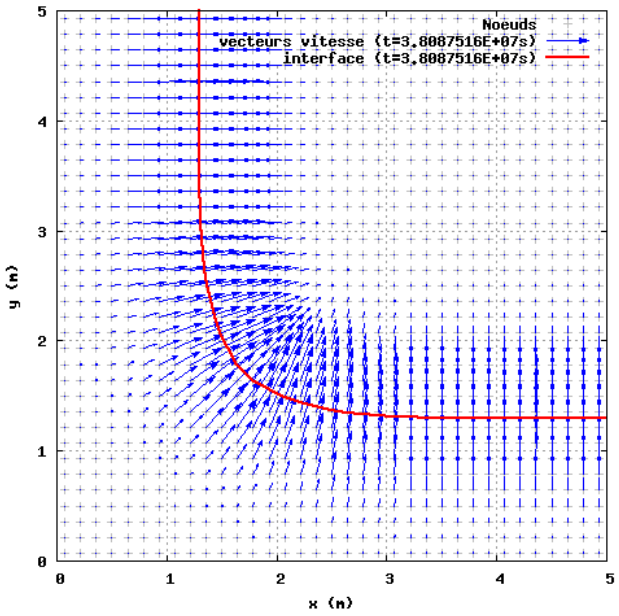



FIGURE 3.16 – Champ de vecteurs vitesse après extension et position de l'interface au temps $t = 3.8087516 \times 10^7$.

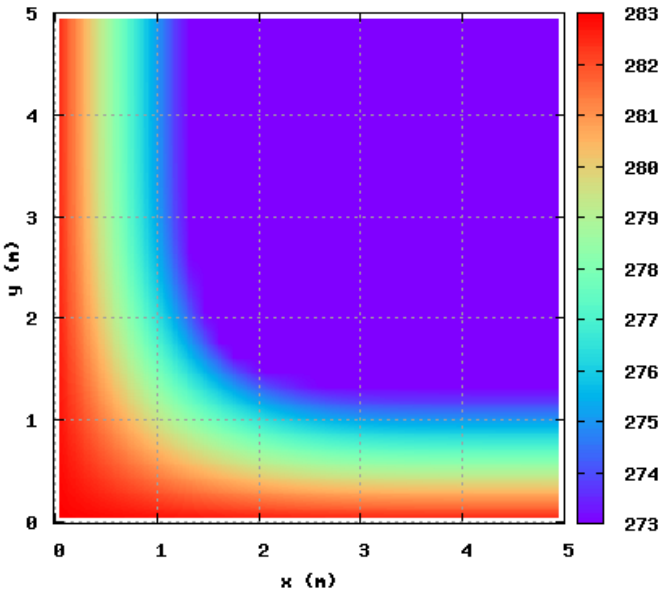



FIGURE 3.17 – Champ de température pour le problème de stefan 2D à $t = 3.8087516 \times 10^7$.

# Troisième partie

# Résolution numérique de l'écoulement diphasique

# Chapitre 4

# Présentation du modèle diphasique

Pour poursuivre notre étude sur les différents couplages nous aborderons dans cette partie le cas des écoulements multiphasiques. La phase liquide issue de la fusion du solide composant le corps est injectée dans un écoulement gazeux. Ces phases étant non-miscibles, il est donc nécessaire de résoudre numériquement des problèmes à interfaces entre ces deux fluides. Ce chapitre est dédié à la modélisation numérique des écoulements multiphasiques. Ce type d'écoulement a fait l'objet de nombreuses études depuis de deux décennies. Deux grandes approches de méthode pour la prise en compte d'interfaces existent : celles dites à **diffusion nulle** (ou quasi nulle) et celles autorisant la diffusion numérique de l'interface.

Le but de ce chapitre est de proposer un système diphasique avec une phase gazeuse multi-espèces. Nous présenterons les modèles numériques ainsi que les équations d'état retenues dans notre étude. Le point clé est la construction d'une loi d'état prenant en compte convenablement les effets de dilatation thermique pour la phase liquide.

## 4.1 Modélisation des écoulements multiphasiques

Lors de la rentrée atmosphérique d'un objet, par exemple d'un satellite ou météorite, celui-ci subira un échauffement considérable. Ce solide va donc fondre sous l'effet d'un écoulement gazeux. La phase liquide issue de ce changement de phase est injectée dans la phase gazeuse. Il faut donc modéliser un écoulement diphasique constitué d'une phase gazeuse compressible et d'une phase liquide quasi-incompressible non-miscibles séparées par une interface

mobile. En effet, la phase gazeuse est compressible car sa masse dépend fortement de la pression et de la température, alors que la masse volumique de la phase liquide varie peu. Ceci se traduit par le fait que les coefficients de dilatation thermique et de compressibilité sont petits. Il s'agit donc de coupler un modèle de Navier-Stokes compressible avec un modèle de Navier-Stokes incompressible.

Il existe actuellement une importante littérature pour la modélisation d'écoulements diphasiques. On distingue deux approches : les méthodes à interface diffuse et celles à diffusion nulle.

**Méthodes à diffusion nulle ou quasi nulle.** Pour les méthodes à diffusion nulle, l'interface est explicitement représentée. On y retrouve les méthodes lagrangiennes, ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian), eulériennes dites avec *front tracking* et celles dites avec *front capturing*. Les méthodes lagrangiennes et ALE (description lagrangienne au niveau de l'interface et eulérienne loin de celle-ci) ont un maillage qui s'appuie sur l'interface (l'interface est une ligne du maillage). Le maillage se déforme donc pour suivre l'interface. Elles sont très précises. Cependant la déformation du maillage interdit les distorsions et les changements de topologie de l'interface. Des techniques de remaillage de "rezoning" avec "remapping" permettent de mieux gérer les déformations. Cependant, l'introduction de nouvelles interfaces dans l'écoulement s'avère complexe.

Les méthodes eulériennes, où l'on retrouve les méthodes de *front tracking* et celles dites avec *front capturing*, ont un maillage fixe. Les méthodes de *front capturing* reconstruisent l'interface à partir d'un champ implicite comme la fraction volumique des différents fluides pour la méthode VOF (Volume Of Fluid) introduite par [HN81] ou une fonction signée pour la méthode Level Set [OS88] (présentée dans la partie précédente). Elles gèrent naturellement les changements de topologie. Cependant, ces méthodes sont non-conservatives. Elles donnent des résultats satisfaisants pour les écoulements incompressibles, mais le caractère non-conservatif est un inconvénient majeur pour le traitement des écoulements compressibles. Parmi ces méthodes eulériennes avec *front capturing*, on peut citer les méthodes GFM (*Ghost Fluid Method*) [FABO99] qui utilisent des cellules fantômes pour la transmission au travers de l' interface. Enfin, les méthodes eulériennes avec *front tracking* utilisent une interface explicite. Elles nécessitent des schémas spécifiques au niveau de l'interface tandis que loin de celle-ci des solveurs eulériens classiques sont utilisés. Par exemple, la méthode avec marqueurs repère l'interface entre les fluides à l'aide de points advectés de façon lagrangienne. Cette méthode est plus courante pour les écoulements incompressibles. Ces

méthodes de *front tracking* sont assez délicates en plusieurs dimensions.

**Méthodes à interface diffuse.** La seconde approche pour calculer des écoulements multiphasiques fait appel aux méthodes à interface diffuse. Basée sur un maillage fixe, ces méthodes autorisent la diffusion numérique. Les zones dites de "mélange", qui correspondent à un étalement numérique de l'interface sur quelques mailles, nécessitent un traitement particulier pour retrouver les propriétés physiques. Ces méthodes ont fait l'objet d'un développement considérable dans les dernières années. Elles furent initiées par les travaux de Baer et Nunziato en 1986 [BN86], puis par Karni (1994), Abgrall (1996), Kapila et al. (1997), Shyue (1998), Saurel et Abgrall (1999), Saurel et LeMetayer (2001), Allaire et al. (2001), Kapila et al. (2001), Massoni et al. (2002), Saurel et Abgrall (2003), Chinnayya et al. (2004) et LeMetayer et al. (2005). Ces méthodes ont fait l'objet de nombreux travaux de thèse [Mur03, Pé03, Fra06, Bra07]. Elles ont de grands avantages :

- les mêmes équations sont résolues sur l'ensemble du domaine quelque-soit la phase,
- les interfaces ne nécessitent aucun traitement spécifique,
- l'introduction de nouvelles interfaces au cours du calcul est possible, ainsi que la prise en compte des changements de topologie,
- les grandeurs thermodynamiques de chaque phase et du mélange peuvent être connues.

Néanmoins malgré tous ces avantages, ces méthodes ont en général pour inconvénient d'être basées sur la résolution numérique d'un système hyperbolique non conservatif, c'est à dire que les opérateurs différentiels d'espace du système ne s'écrivent pas sous la forme d'une divergence de flux. De plus, ces méthodes sont généralement utilisées quand les deux phases sont compressibles. Si l'une des phases est liquide, elle est donc nécessairement modélisée par un modèle compressible qui est utilisé à faible Mach. Il est alors nécessaire d'apporter une correction pour ce type d'écoulement. En effet, la solution discrète d'un modèle compressible ne tend pas vers celle d'un modèle incompressible lorsque le nombre de Mach tend vers zéro.

L'ensemble des méthodes précédentes peuvent être regroupées en trois catégories selon la nature des modèles qui sont couplés : les méthodes pour le couplage compressible-compressible, compressible-incompressible et incompressible-incompressible. Comme il a été dit antérieurement, la phase gazeuse dans le cas de la rentrée est fortement compressible du fait du fait

de l'échauffement et des variations de pression. De plus, l'écoulement gazeux est également le siège d'un choc détaché car l'écoulement amont est supersonique. Les méthodes de couplage incompressible-incompressible ne sont pas retenues. Les méthodes à diffusion nulle sont intéressantes pour la précision au niveau l'interface. Cependant elles ont toutes pour inconvénient de nécessiter des développements informatiques relativement plus importants que celles à interface diffuse.

En prenant pour critère de choix le temps de calcul, la possibilité d'ajouter de nouvelles interfaces dans l'écoulement, d'avoir un écoulement gazeux supersonique et la maniabilité, nous retenons ici les méthodes à interface diffuse. Ce choix suppose de modéliser un écoulement incompressible par un modèle compressible. Nous verrons dans la suite qu'il est nécessaire de choisir une loi d'état adaptée au phénomène que nous considérons et d'apporter une correction pour les bas nombres de Mach dans la phase liquide proche paroi. Cependant, l'avantage majeur est de résoudre les mêmes équations dans l'ensemble du domaine et la simplicité de mise en oeuvre. Dans la cas où une seule des phases est présente dans le domaine, le modèle dégénère correctement vers le modèle monophasique habituel.

Dans la suite de ce chapitre, nous présenterons deux modèles appartenant à la classe des méthodes à interface diffuse, ainsi que les lois d'état pour chaque phase.

## 4.2 Modèle à 7 équations

Dans la suite, afin de simplifier la présentation des modèles, les termes visqueux ne sont pas pris en compte dans un premier temps. Seuls les termes correspondant à la partie Euler des équations sont explicités.

La premier modèle à interface diffuse présenté ici est un modèle général du type Baer-Nunziato [BN86]. Il s'agit d'un modèle hors équilibre en pression et en vitesse. L'originalité du modèle de Baer-Nunziato était d'avoir une équation pour l'évolution de la fraction volumique. Chaque phase a une équation de bilan de masse, de quantité de mouvement et d'énergie, auquel s'ajoute l'équation d'évolution de la fraction volumique. En omettant les termes de transfert de masse, les modèles de ce type s'écrivent (en se

restreignant au cas diphasique)

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \vec{u}_I \cdot \nabla \alpha_k = \varpi(P_k - P_{k'}), \\ \dfrac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}_k) = 0, \\ \dfrac{\partial \alpha_k \rho_k \vec{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k) + \nabla(\alpha_k P_k) = P_I \nabla \alpha_k + \lambda(\vec{u}_{k'} - \vec{u}_k), \\ \dfrac{\partial \alpha_k \rho_k E_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k (E_k + \dfrac{P_k}{\rho_k}) \vec{u}_k) = P_I \vec{u}_I \cdot \nabla \alpha_k + \lambda \vec{u}_I \cdot (\vec{u}_{k'} - \vec{u}_k) - \varpi(P_k - P_{k'}), \end{cases}$$

où $\alpha_k$, $\rho_k$, $P_k$, $\vec{u}_k$ et $E_k$ sont respectivement la fraction volumique, la masse volumique, la pression, le vecteur vitesse et l'énergie totale de la phase $k$. Le système a huit équations pour deux fluides. Il peut se réduire en un système équivalent à sept équations en utilisant la relation de saturation

$$\sum_k \alpha_k = 1,$$

d'où son nom de modèle à sept équations.

L'énergie totale a pour expression $E_k = \varepsilon_k + \dfrac{\vec{u}_k \cdot \vec{u}_k}{2}$, avec $\varepsilon_k$ l'énergie interne. Pour chaque phase, la pression thermodynamique est donnée par l'équation d'état $P_k = P_k(\rho_k, \varepsilon_k)$. Les coefficients $\varpi$ et $\lambda$ sont des paramètres positifs de relaxation en pression et en vitesse. Les quantités $P_I$ et $\vec{u}_I$ sont respectivement les valeurs de la pression et de la vitesse aux interfaces entre les deux phases. Dans le modèle original de Baer-Nunziato [BN86], $P_I$ est la pression de la phase la plus compressible et $\vec{u}_I$ la vitesse de la phase la moins compressible. Ce choix n'est pas symétrique. D'autres choix sont possibles, notamment celui proposé par Saurel et Abgrall dans [SA99] où les vitesses et les pressions aux interfaces sont données par les formues suivantes :

$$\vec{u}_I = \sum_{k=1}^{2} \alpha_k \rho_k \vec{u}_k / \sum_{k=1}^{2} \alpha_k \rho_k \text{ et } P_I = \sum_{k=1}^{2} \alpha_k P_k.$$

Ce modèle est inconditionnellement hyperbolique. Le système possède sept valeurs propres réelles : $u_I$, les vitesses de chaque phase $u_k$, les vitesses des ondes acoustiques de chaque phase $u_k \pm a_k$, où $a_k$ est la vitesse du son de la phase $k$ (sa définition sera donnée dans la suite). Les termes de relaxation permettent le retour à l'équilibre mécanique.

Dans le cas de l'étude qui nous intéresse, on peut supposer l'égalité des pressions et des vitesses à l'interface pour un problème diphasique. Il est alors possible de déterminer un modèle moins général à partir d'une analyse asymptotique du modèle présenté ci-dessus en supposant la relaxation infinie des vitesses et des pressions [KBRS01].

## 4.3 Modèles diphasiques réduit à 5 équations

### 4.3.1 Modèles diphasiques à 5 équations

Lorsque les paramètres de relaxation du modèle à sept équations tendent vers l'infini ($\varpi \to \infty$ et $\lambda \to \infty$), c'est à dire que le temps de relaxation tend vers zéro, on peut asymptotiquement obtenir un modèle réduit qui ne fait intervenir qu'une pression $P$ et qu'une vitesse $\vec{u}$. On a donc une seule équation de quantité de mouvement, une équation de conservation de la masse pour chaque phase, une équation d'énergie ainsi que l'équation d'évolution de la fraction volumique. Le modèle diphasique réduit, obtenu par [KBRS01], se formule comme suit :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \alpha_1 = \Xi(P, \rho_1, \rho_2, \alpha_1, \alpha_2) \nabla \cdot \vec{u}, \\ \dfrac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}_k) = 0, \\ \dfrac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla P = 0, \\ \dfrac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P) \vec{u}) = 0, \end{cases} \tag{4.1}$$

où $\Xi(P, \rho_1, \rho_2, \alpha_1, \alpha_2)$ est un terme lié a la compressibilité du mélange. La masse volumique et l'énergie totale de mélange sont définies par

$$\rho = \sum_{k=1}^{2} \alpha_k \rho_k, \tag{4.2}$$

$$\rho E = \sum_{k=1}^{2} \alpha_k \rho_k E_k. \tag{4.3}$$

Pour une étude détaillée de ce modèle et de l'analyse asymptotique, on peut se référer à [GM03, Pé03].

Le terme $\Xi(P, \rho_1, \rho_2, \alpha_1, \alpha_2)$ s'écrit :

$$\Xi(P, \rho_1, \rho_2, \alpha_1, \alpha_2) = \alpha_1\alpha_2 \frac{\rho_2 a_2^2 - \rho_1 a_1^2}{\alpha_1\rho_2 a_2^2 + \alpha_2\rho_1 a_1^2}, \tag{4.4}$$

avec $a_k$ la vitesse du son thermodynamique définie par la formule

$$a_k = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho_k}\right)_{s_k}, \tag{4.5}$$

où $s_k$ désigne l'entropie par unité de masse de la phase $k$. Franquet [Fra06] explique à l'aide d'une analyse simple comment ce terme entraîne des modifications de la fraction volumique au passage des ondes de détente ou de compression. Au niveau des discontinuités de contact où $\nabla \cdot \vec{u} = 0$, ce terme est tout simplement nul. Il traduit les effets de compression/expansion au travers des ondes acoustiques pour un mélange. Comme le montre [Pé03], si on considère des problèmes d'interface entre des fluides purs, le terme est nul hors des zones de mélange et dans les zones de mélange il peut être considéré comme faible.

Dans le cadre de cette thèse, on se place dans ce dernier cas. En effet, on ne considère ici que des problèmes à interface entre fluides purs et le terme $\Xi(P, \rho_1, \rho_2, \alpha_1, \alpha_2)$ est donc nul.

En négligeant le terme non conservatif en divergence de vitesse dans l'équation sur la fraction volumique, on aboutit dans ce cas au modèle bi-fluide suivant appelé dans la littérature **modèle de transport à 5 équations**

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \alpha_1 = 0, \\ \dfrac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}) = 0, \\ \dfrac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla P = 0, \\ \dfrac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P)\vec{u}) = 0. \end{cases} \tag{4.6}$$

Ce modèle, proposé dans [ACK00, ACK02, MSNA01], est hyperbolique et conservatif. Ce modèle conserve les masses de chacune des phases. La fermeture du système (4.6) est réalisée par une équation d'état de mélange compatible avec la fermeture isobare

$$P_1 = P_2 = P.$$

Chaque phase est régie par l'équation d'état qui relie la pression à sa masse volumique et son énergie interne

$$P_k = P_k(\rho_k, \rho_k\varepsilon_k).$$

Etant donnés $\rho\varepsilon$, $\rho_1$, $\rho_2$ et $\alpha \in [0,1]$, l'expression de la pression $P$ de mélange est donnée par le système

$$\begin{cases} P_1(\rho_1, \rho_1\varepsilon_1) - P_2(\rho_2, \rho_2\varepsilon_2) = 0, \\ \\ \alpha\rho_1\varepsilon_1 + (1-\alpha)\rho_2\varepsilon_2 = \rho\varepsilon. \end{cases} \tag{4.7}$$

Pour ce modèle de fermeture, il est nécessaire et suffisant que $\xi_k = \left(\dfrac{\partial \rho_k\varepsilon_k}{\partial P_k}\right)_{\rho_k} > 0$, $k = 1, 2$ [ACK02]. Il permet de définir une loi d'état de mélange avec des équations d'état diverses. Dans la suite, nous parlerons du choix des lois d'état.

Les deux modèles présentés précédemment sont des modèles dits à une vitesse, une pression et plusieurs températures. D'autres modèles reposant sur des fermetures différentes ont été envisagés dans la littérature mais ils n'ont pas été retenus à cause de certains inconvénients d'ordre mathématique (hyperbolicité défaillante) ou numérique comme les modèles à une vitesse, une pression et à une température.

### 4.3.2 Modèle diphasique à 4 équations

Dans le cas particulier où les équations d'état de chacune des phases sont de type *Stiffened Gas* ("gaz raide")

$$P_k(\rho_k, \rho_k\varepsilon_k) = (\gamma_k - 1)\rho_k\varepsilon_k - \gamma_k P_{\infty k},$$

l'équation d'état de mélange fermant le système est donnée par

$$P(\alpha, \rho\varepsilon) = (\gamma - 1)\rho\varepsilon - \gamma P_\infty,$$

avec

$$\gamma = 1 + \frac{1}{\sum_1^2 \dfrac{\alpha_k}{\gamma_k - 1}} \text{ et } P_\infty = \frac{\gamma - 1}{\gamma} \sum_1^2 \frac{\alpha_k \gamma_k P_{\infty k}}{\gamma_k - 1}.$$

La signification des coefficients $\varepsilon_k$ et $P_{\infty k}$ sera donnée dans la section suivante portant sur les lois d'états.

Il n'est donc pas nécessaire de garder les deux équations sur les masses volumiques. En sommant les deux équations sur les masses volumiques, on obtient dans ce cas le modèle à 4 équations suivant

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \alpha_1 = 0, \\ \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \\ \dfrac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla P = 0, \\ \dfrac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P)\vec{u}) = 0. \end{cases} \tag{4.8}$$

Ce modèle est intéressant s'il n'est pas nécessaire de connaître les masses volumiques de chaque fluide. Ceci n'est pas le cas dans cette étude car les effets thermiques sont significatifs, ce qui nécessite de connaître la température de chaque fluide et donc sa masse volumique.

Dans le paragraphe suivant, nous décrivons comment prendre en compte les effets dissipatifs.

### 4.3.3 Modèle diphasique à 5 équations avec effets dissipatifs

Dans le cadre mono-fluide, les équations de Navier-Stokes sont données par

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \\ \dfrac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla P = \rho \vec{f} + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}, \\ \dfrac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P)\vec{u}) = \rho \vec{f} \cdot \vec{u} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\tau}} \cdot \vec{u}) - \nabla \cdot \vec{q}, \end{cases} \tag{4.9}$$

où $\underline{\underline{\tau}} = -\dfrac{2}{3}\mu \nabla \cdot \vec{u}\, \underline{\underline{I}} + 2\mu \underline{\underline{D}}$ est le tenseur symétrique des contraintes visqueuses avec $\underline{\underline{D}} = \dfrac{1}{2}(\nabla \vec{u} + \nabla^t \vec{u})$ le tenseur des taux de déformation, $\mu$ la viscosité dynamique du fluide exprimée en $(kg.m^{-1}.s^{-1})$ et $\vec{q} = -K \nabla T$ le flux thermique défini à l'aide de la loi de Fourier avec $K$ la conductivité thermique exprimée en $(W.m^{-1}.K^{-1})$ et $T$ la température. $\vec{f}$ est le vecteur des forces

volumiques, ici celle la pesanteur est considérée et donc $\vec{f} = \vec{g}$, avec $\vec{g}$ le vecteur de gravité.

En partant du fait que chaque phase vérifie les équations de Navier-Stokes, avec une analyse similaire à celle de Baer-Nunziato comme le montre [Pé03] (sans diffusion de la chaleur) et [Bra07], on obtient un modèle réduit à 5 équations dans le cadre bi-fluide avec une seule pression, une seul vitesse et deux températures

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \alpha_1 = \Xi(P, \rho_1, \rho_2, \alpha_1, \alpha_2) \nabla \cdot \vec{u}, \\ \dfrac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}) = 0, \\ \dfrac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla P = \rho \vec{g} + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}, \\ \dfrac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P) \vec{u}) = \rho \vec{g} \cdot \vec{u} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\tau}} \cdot \vec{u}) - \nabla \cdot \vec{q}. \end{cases} \tag{4.10}$$

Dans le modèle obtenu dans [BN09] le flux de chaleur est défini par $\vec{q} = \sum_{k=1}^{2} \alpha_k \vec{q}_k = \sum_{k=1}^{2} \alpha_k K_k \nabla T_k$ et $\underline{\underline{\tau}} = -\frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \vec{u}\, \overline{\overline{I}} + 2\mu \overline{\overline{D}}$ où $\mu = \sum_{k=1}^{2} \alpha_k \mu_k$.

Nous retenons ici ce modèle. En outre, nous négligerons les termes de tension de surface entre les fluides introduits par [Bra07, Pé03]. Comme dans la section précédente, le terme $\Xi(P, \rho_1, \rho_2, \alpha_1, \alpha_2) \nabla \cdot \vec{u}$ est nul. Ce terme, comme nous le verrons dans la partie de l'étude mathématique du modèle, a une grande influence sur la forme de la vitesse de son du mélange.

Dans la section suivante, on abordera le problème du choix de l'équation d'état pour chacune des phases en présence.

## 4.4 Lois d'état et fermeture du modèle diphasique

### 4.4.1 Quelques rappels sur les relations thermodynamiques

En thermodynamique, une **équation d'état fondamentale** d'un système à l'équilibre thermodynamique est une relation entre différents paramètres physiques (appelés variables d'état) qui déterminent son état. Parmi ces variables d'état, on retrouve par exemple la température, la pression, le volume spécifique, l'énergie interne. À partir de l'équation d'état fondamentale d'un

système physique, il est possible de déterminer la totalité des quantités thermodynamiques décrivant ce système et par suite de prédire ses propriétés.

Dans la suite, nous rappelons les principales relations et définitions pour les quantités thermodynamiques pour un système composé d'une seule phase à l'équilibre. Les relations ainsi que leurs démonstrations sont données dans [Fer65, Pol05].

L'une des variables d'état fondamentales est l'entropie par unité de masse

$$s = s(\varepsilon, \upsilon), \tag{4.11}$$

exprimée en fonction des deux variables d'état indépendantes $\varepsilon$ et $\upsilon = \dfrac{1}{\rho}$ qui sont respectivement l'énergie interne et le volume spécifique. Si la fonction d'entropie est connue, toutes les variables thermodynamiques peuvent être déterminées en fonction des variables indépendantes $\varepsilon$ et $\upsilon$. A chaque couple de variables indépendantes est associée une équation d'état fondamentale. Ainsi la **relation fondamentale de Gibbs**

$$ds = \frac{1}{T} d\varepsilon + \frac{P}{T} d\upsilon, \tag{4.12}$$

définit la température $T = T(\varepsilon, \upsilon)$ telle que $T = \left(\dfrac{\partial s}{\partial e}\right)_{\upsilon}$ et la pression $P = P(\varepsilon, \upsilon)$ telle que $\dfrac{P}{T} = \left(\dfrac{\partial s}{\partial e}\right)_{\upsilon}$.

En considérant $P$ et $T$ comme des variables indépendantes, afin de quantifier le caractère incompressible d'une phase, on définit le **coefficient de dilatation isobare**

$$\alpha_P = \frac{1}{\upsilon} \left(\frac{\partial \upsilon}{\partial T}\right)_P, \tag{4.13}$$

ainsi que le coefficient de **compressibilité isotherme**

$$\beta_T = -\frac{1}{\upsilon} \left(\frac{\partial \upsilon}{\partial P}\right)_T. \tag{4.14}$$

La différentielle du volume spécifique s'exprime par

$$d\upsilon = \alpha_P \upsilon dT - \beta_T \upsilon dP. \tag{4.15}$$

En choisissant le couple $(v, T)$ comme variables indépendantes, la différentielle de l'énergie interne $\varepsilon = \varepsilon(v, T)$ donne

$$d\varepsilon = C_v(v,T)dT + \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial v}\right)_T dv, \tag{4.16}$$

avec $C_v(v,T) = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_v$ la capacité thermique à volume constant. Il en découle que

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v = \frac{1}{T}\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_v = \frac{C_v(v,T)}{T}. \tag{4.17}$$

L'introduction de l'énergie libre d'Helmholtz $f(v,T) = \varepsilon - Ts$ permet d'obtenir tous calculs faits

$$\left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v, P = -\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T. \tag{4.18}$$

Après quelques manipulations, on a également

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v = \left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T = \frac{\alpha_P}{\beta_T}, \tag{4.19}$$

d'où la relation

$$ds = \frac{C_v(v,T)}{T}dT + \frac{\alpha_P}{\beta_T}dv. \tag{4.20}$$

Grâce à la différentielle de l'énergie libre de Helmholtz, on peut exprimer

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial v}\right)_T = \left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T + T\left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T = -P + T\frac{\alpha_P}{\beta_T}, \tag{4.21}$$

d'où

$$d\varepsilon = C_v(v,T)dT + \left(-P + \frac{\alpha_P}{\beta_T}\right)dv. \tag{4.22}$$

L'enthalpie par unité de masse $h$ d'un système a pour expression

$$h = \varepsilon + Pv. \tag{4.23}$$

Avec cette définition et la formule de Gibbs (4.12), la différentielle de l'enthalpie donne

$$dh = d\varepsilon + Pdv + vdP = Tds + vdP. \tag{4.24}$$

La capacité thermique à pression constante est définie par

$$C_P(P,T) = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P, \tag{4.25}$$

ce qui conduit également à

$$C_P(P,T) = T\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_P. \tag{4.26}$$

On va maintenant définir le lien entre $C_P$ et $C_\upsilon$ car il permettra de caractériser le comportement incompressible d'un système. La relation (4.24) induit que

$$C_P = C_\upsilon + \left(\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \upsilon}\right)_T + P\right)\left(\frac{\partial \upsilon}{\partial T}\right)_P,$$

qui en combinant avec la définition de $\alpha_P$ et $\beta_T$ donne

$$C_P - C_\upsilon = \frac{\alpha_P^2 \upsilon T}{\beta_T}. \tag{4.27}$$

Une dernière quantité permet de caractériser un fluide, il s'agit de sa vitesse du son. Rappelons la définition de la vitesse du son d'un fluide introduite dans la section précédente

$$a^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_s = -\upsilon^2\left(\frac{\partial P}{\partial \upsilon}\right)_s, \tag{4.28}$$

où $\rho = \dfrac{1}{\upsilon}$ est la masse volumique. A l'aide de la relation cyclique des dérivées partielles

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z\left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = -1,$$

on peut relier la vitesse du son au coefficient de compressibilité isotherme par la relation

$$a^2 = \frac{\gamma \upsilon}{\beta_T} = \frac{\gamma}{\rho \beta_T}, \tag{4.29}$$

où $\gamma = \dfrac{C_P}{C_\upsilon}$ est un nombre sans dimension (le detail des calculs est donné dans [Pol05]). D'autres relations peuvent être trouvées pour exprimer la vitesse du son en combinant les relations précédemment introduites et en choisissant des couples différents de variables indépendantes

$$a^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_\varepsilon + \frac{P}{\rho^2}\left(\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}\right)_\rho = -\upsilon^2\left(\frac{\partial P}{\partial \upsilon}\right)_\varepsilon + P\upsilon^2\left(\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}\right)_\upsilon, \tag{4.30}$$

$$a^2 = \chi + \kappa h, \tag{4.31}$$

$$a^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T + \frac{T}{\rho^2 C_\upsilon}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho. \tag{4.32}$$

Les termes $\chi$ et $\kappa$ proviennent de la différentielle de $P = P(\rho, \rho\varepsilon)$. On a ainsi

$$\chi = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{\rho\varepsilon}, \tag{4.33}$$

$$\kappa = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho\varepsilon}\right)_{\rho}. \tag{4.34}$$

L'équation d'état fondamentale étant parfois difficile à déterminer, on peut se contenter de lois d'état partielles. Par exemple dans le cadre des équations d'Euler pour le fluide, seule la loi reliant les trois quantités $P$, $\rho$ (ou $\upsilon$) et $\varepsilon$ est utile. De même, dans le cadre des équations de Navier-Stokes, il faut relier quatre quantités $P$, $\rho$ (ou $\upsilon$), $\varepsilon$ et $T$. Pour ce dernier cas, deux lois d'état partielles à deux variables sont nécessaires. Dans la suite, nous aborderons le choix et la construction des équations d'état partielles pour chacune phase de notre problème.

### 4.4.2 Limite incompressible

Un fluide incompressible se caractérise par des coefficients $\alpha_P$ et $\beta_T$ petits. Prenons le cas limite où ils sont nuls. On a immédiatement que $\upsilon$ est constant grâce à la relation (4.15). Fixons cette constante à $\upsilon_0$. On en déduit de (4.16) et (4.12) que $\varepsilon$ et $s$ ne dépendent que de la température $T$,

$$d\varepsilon = C_\upsilon(\upsilon_0, T)dT, \tag{4.35}$$

$$ds = \frac{1}{T}d\varepsilon = \frac{C_\upsilon(\upsilon_0, T)}{T}dT. \tag{4.36}$$

De cela, on en déduit que

$$C_P = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P = \frac{\partial(\varepsilon + P\upsilon)}{\partial T} = \frac{\partial(\varepsilon + P\upsilon_0)}{\partial T} = \frac{d\varepsilon}{dT} = C_\upsilon. \tag{4.37}$$

Ainsi pour la limite incompressible, il n'y a qu'une capacité calorifique. Dans ce cas, on a $\gamma = 1$.

La vitesse du son étant exprimée par la relation (4.29) rappelée ici

$$a^2 = \frac{\gamma\upsilon_0}{\beta_T}, \tag{4.38}$$

on obtient que la vitesse du son tend vers l'infini puisque $\beta_T$ est nul.

Les modèles utilisés ici sont compressibles. On ne peut donc pas considérer que la masse volumique est constante. Il est donc nécessaire de restituer au mieux les coefficients $\alpha_P$, $\beta_T$ et $C_v$. En effet, ils caractérisent l'incompressibilité. Nous considérerons donc des lois d'état les plus adaptées possibles au comportement incompressible pour la phase liquide.

### 4.4.3 Lois d'état

Avant d'effectuer la fermeture du modèle en définissant une loi d'état de mélange, nous présentons ici le choix et la construction des lois d'état de chacune des phases. On supposera ici que chaque phase est régie par une loi d'état de type **Mie-Gruneisen**. Dans ce cadre là, on considère que la pression et l'énergie interne de chaque fluide sont reliées à la température et au volume spécifique par

$$\varepsilon(v,T) = \varepsilon_{ref}(v) + \varepsilon_{th}(v,T), \tag{4.39}$$

$$P(v,T) = P_{ref}(v) + \frac{\Gamma(v)}{v}\varepsilon_{th}(v,T), \tag{4.40}$$

où $\varepsilon_{ref}$, $P_{ref}$, $\varepsilon_{th}$ et $\Gamma$ sont des fonctions. On en déduit la relation suivante

$$P(v,T) = P_{ref}(v) + \frac{\Gamma(v)}{v}(\varepsilon(v,T) - \varepsilon_{ref}(v)). \tag{4.41}$$

On considérera dans cette étude des lois d'état vérifiant $\varepsilon_{th}(v,T) = \varepsilon_{th}(T)$. Dans la suite, on se limitera aux lois d'état pour lesquelles $C_v(v,T)$ est constant.

**Gaz parfait et Stiffened gas ("gaz raide").** Les lois d'état de gaz parfait et de Stiffened Gases ("gaz raide") imposent que $\varepsilon_{th}(T) = C_v T$. La fonction $\Gamma(v)$ est également constante. La relation de Gibbs induit une relation de compatibilité entre les fonctions $P_{ref}$ et $\varepsilon_{ref}$ par l'égalité des dérivées croisées de $s$

$$P_{ref} = -\frac{\partial \varepsilon_{ref}}{\partial v}. \tag{4.42}$$

Pour un gaz parfait, on a simplement $\varepsilon_{ref} = 0$ ( donc $P_{ref} = 0$) et $\Gamma = \gamma - 1$. $\gamma$ est le coefficient polytropique du gaz. La constante des gaz parfaits $R$ est telle que $R = C_v(\gamma - 1)$, d'où la forme explicite bien connue

$$P(v,T) = \frac{R}{v}T. \tag{4.43}$$

En ce qui concerne l'équation d'état pour un Stiffened gas, on a $\varepsilon_{ref} = P_\infty v + \varepsilon_\infty$ ($\varepsilon_\infty$ une constante), d'où $P_{ref} = -P_\infty$ et $\Gamma = \gamma - 1$. Ceci conduit à

$$P(v,\varepsilon) = \frac{(\gamma-1)}{v}(\varepsilon - \varepsilon_\infty) - \gamma P_\infty. \tag{4.44}$$

Les paramètres $\gamma$, $\varepsilon_\infty$ et $P_\infty$ sont fixés pour chaque matériau (voir Tab. 4.1). $\gamma$ et $P_\infty$ sont respectivement le coefficient polytropique et le coefficient de raideur du matériau. La vitesse du son dans le matériau pur est donc

$$a^2 = \gamma(P + P_\infty)v. \tag{4.45}$$

On constate qu'un gaz parfait est un stiffened gas pour lequel $P_\infty = 0$. Les coefficients $\gamma$ et $P_\infty$ sont déterminés en ajustant les courbes d'Hugoniot expérimentales et théoriques. Les détails de cette procédure sont donnés dans [LMMS04].

L'équation d'état stiffened gas permet de traiter les solides dans le domaine des grandes pressions, les liquides et aussi les gaz sous le même formalisme. Dans notre étude, nous cherchons à restituer au mieux les coefficients physiques de compressibilité isotherme et de dilatation isobare pour la phase liquide. Cependant le calcul des coefficients $\beta_T = -\frac{1}{\upsilon}\left(\frac{\partial \upsilon}{\partial P}\right)_T$ et $\alpha_P = \frac{1}{\upsilon}\left(\frac{\partial \upsilon}{\partial T}\right)_P$ à partir de cette loi d'état donne

$$\alpha_P = \frac{1}{T}, \tag{4.46}$$

$$\beta_T = \frac{1}{P + P_\infty}. \tag{4.47}$$

Le coefficient $\alpha_P$, evalué à partir de cette loi d'état (4.46), n'a aucun paramètre permettant de prendre en compte le coefficient physique de dilatation isobare. Par conséquent, cette loi d'état ne peut pas reproduire les variations de $\upsilon$ en fonction de la température $T$ à pression constante. En effet, pour un liquide, le coefficient de dilatation isobare est de l'ordre de $10^{-4}$ à $10^{-6}K$. La dilatation thermique de la phase liquide, modélisée par cette loi d'état, sera exagérément amplifiée.

| | $\gamma$ | $P_\infty$ $(Pa)$ | Vitesse du son $(m.s^{-1})$ |
|---|---|---|---|
| Air | 1.4 | 0 | 374 |
| Eau (pression atmosphérique) | 4.1 | $4.6 \times 10^8$ | 1647 |
| Eau (Haute pression) | 4.4 | $6.0 \times 10^8$ | 1820 |

TABLE 4.1 – Valeurs des constantes de la loi de stiffened gas et de la vitesse du son pour l'eau et l'air [Pé03].

Cette loi d'état restitue le comportement mécanique grâce au paramètre $P_\infty$, mais pas le comportement thermique. On propose de construire une loi d'état pour la phase liquide.

**Construction d'une loi d'état de type Mie-Gruneisen pour la phase liquide.** On choisit de nouveau de prendre $C_v$ et $\Gamma$ constants. On suppose $\varepsilon_{th}(T) = C_v(T - T_0)$, où $T_0$ est la température d'un état de référence associé

à la pression $P_0$, le volume spécifique $\upsilon_0$ et l'énergie interne $\varepsilon_0$. On a donc $\varepsilon_{ref}(\upsilon) = f(\upsilon) + \varepsilon_0$ où $f$ est une fonction à déterminer telle que $f(\upsilon_0) = 0$. On choisit l'expression de $P(\upsilon, \varepsilon)$ de façon à obtenir une forme similaire à celle d'un stiffened gas

$$P(\upsilon, \varepsilon) = \frac{\Gamma}{\upsilon}(\varepsilon - \varepsilon_0) + \Pi\left(\frac{\upsilon_0}{\upsilon} - 1\right) + P_0, \tag{4.48}$$

$$= \frac{\gamma_\infty - 1}{\upsilon}(\varepsilon - \varepsilon_\infty) - \gamma_\infty P_\infty, \tag{4.49}$$

$$\varepsilon(\upsilon, T) = \varepsilon_0 + f(\upsilon) + C_\upsilon(T - T_0), \tag{4.50}$$

avec $\varepsilon_\infty = \varepsilon_0 - \dfrac{\Pi\upsilon_0}{\gamma_\infty - 1}$ et $P_\infty = -\dfrac{P_0 - \Pi}{\gamma_\infty}$ où $\Gamma = \gamma_\infty - 1$. Le coefficient $\Pi$ est un terme constant. Comme pour la loi d'état de type stiffened gas la vitesse du son a donc pour expression

$$a^2 = \gamma_\infty(P + P_\infty)\upsilon. \tag{4.51}$$

En écrivant (4.48) de sorte à exprimer $\upsilon$, il vient naturellement

$$\upsilon(P, \varepsilon) = \upsilon_0 \left( \frac{\dfrac{\Gamma}{\upsilon_0}(\varepsilon - \varepsilon_0) + \Pi}{P - P_0 + \Pi} \right). \tag{4.52}$$

Si le terme $\Pi$ est grand devant $\varepsilon - \varepsilon_0$ et $P - P_0$, on constate que $\upsilon$ sera quasi constant.

Il faut maintenant déterminer l'expression de la fonction $f$. Pour cela, en partant de

$$P(\upsilon, T) = \frac{\Gamma}{\upsilon}C_\upsilon(T - T_0) + \frac{\Gamma}{\upsilon}f(\upsilon) + \Pi\left(\frac{\upsilon_0}{\upsilon} - 1\right) + P_0, \tag{4.53}$$

on se sert des relations thermodynamiques introduites dans la section précédente. En combinant la relation (4.12) et (4.20), on a

$$d\varepsilon = \left(T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\upsilon - P\right)d\upsilon + C_\upsilon dT. \tag{4.54}$$

Ceci fournit une équation que doit vérifier la fonction $f$

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \upsilon}\right)_T = \frac{df(\upsilon)}{d\upsilon} = T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\upsilon - P, \tag{4.55}$$

d'où

$$\frac{df(\upsilon)}{d\upsilon} + \frac{\Gamma}{\upsilon}f(\upsilon) = \frac{\Gamma}{\upsilon}C_\upsilon T_0 - \Pi\left(\frac{\upsilon_0}{\upsilon} - 1\right) - P_0. \tag{4.56}$$

Tous calculs effectués, en n'oubliant pas que $f(\upsilon_0) = 0$, la fonction $f$ a finalement pour expression

$$f(\upsilon) = \left(C_\upsilon T_0 - \frac{\Pi \upsilon_0}{\Gamma}\right)\left(1 - \left(\frac{\upsilon_0}{\upsilon}\right)^\Gamma\right) + \frac{\upsilon}{\Gamma+1}(\Pi - P_0)\left(1 - \left(\frac{\upsilon_0}{\upsilon}\right)^{\Gamma+1}\right). \tag{4.57}$$

Cette fonction $f$ est compatible avec l'égalité des dérivées croisées de la relation de Gibbs (4.12).

Maintenant, il faut déterminer les constantes $\Pi$, $\Gamma$ de préférence en fonction de $\beta_T$ et $\alpha_P$. On va se servir des relations thermodynamiques suivantes, issues de (4.15)

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \upsilon}\right)_T = -\frac{1}{\beta_T \upsilon},$$

et

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\upsilon = \frac{\alpha_P}{\beta_T}.$$

Les coefficients $\beta_T$ et $\alpha_P$ sont donnés par $\beta_{T,0}$ et $\alpha_{P,0}$ pour l'état de référence $(P_0, T_0, \upsilon_0, \varepsilon_0)$ ce qui donne

$$\Gamma = \frac{\upsilon \alpha_{P,0}}{C_\upsilon \beta_{T,0}}, \tag{4.58}$$

$$\Pi = \frac{1}{\beta_{T,0}} - \Gamma P_0 + \frac{\Gamma^2 C_\upsilon T_0}{\upsilon}. \tag{4.59}$$

La forme particulière de $\Gamma$ est celle du paramètre de Mie-Gruneisen [Lem99] qui est quasi-constant physiquement. Le tableau Tab. 4.3 donne les valeurs des différentes constantes pour l'aluminium liquide, en choisissant son point de fusion à la pression atmosphérique comme état de référence (Tab. 4.2). On a $\varepsilon_0 = h_0 - P_0\upsilon_0$, où $h_0$ est l'enthalpie de formation à la température $T_0$.

En résumé les lois d'état que nous retiendrons pour la phase liquide sont données par les relations (4.48) et (4.50), avec $f$ d'expression (4.57), où les paramètres $\Gamma$ et $\Pi$ sont obtenus à partir des coefficients physiques $C_\upsilon$, $\alpha_{P,0}$ et $\beta_{T,0}$ grâce à (4.58) et (4.59).

Du fait de la complexité de la fonction $f$, il est difficile d'expliciter $\upsilon(P,T)$ pour $T = T_0$. On peut cependant effectuer un développement de Taylor au premier ordre de la fonction $P(\upsilon, T)$ (voir (4.53)) autour de $(\upsilon_0, T_0)$. On obtient tous calculs faits l'approximation

$$\upsilon(P,T) \approx \upsilon_0 \left(1 - \beta_{T,0}(P - P_0) + \alpha_{P,0}(T - T_0)\right). \tag{4.60}$$

| Coefficients | valeurs | unités |
|---|---|---|
| $P_0$ | $10^5$ | $Pa$ |
| $\upsilon_0$ ($\rho_0$) | $4.223 \times 10^{-4}$ (2368) | $m^3/kg$ ($kg/m^3$) |
| $C_\upsilon$ | 970 | $J/kg/K$ |
| $\beta_{T,0}$ | $2.38 \times 10^{-11}$ | $Pa^{-1}$ |
| $\alpha_{P,0}$ | $1.17 \times 10^{-4}$ | $K^{-1}$ |
| $h_0$ | 397000 | $J/kg$ |
| $T_0$ | 933 | $K$ |

TABLE 4.2 – Propriétés physiques de l'aluminium liquide près de son point de fusion à la pression atmosphérique [AH75] .

| Coefficients | valeurs | unités |
|---|---|---|
| $\Gamma$ ($\gamma_\infty$) | 2.16 (3.16) | – |
| $\Pi$ | 51998461905.408005 | $Pa$ |

TABLE 4.3 – Constantes de la loi de type Mie-Gruneisen pour l'aluminium liquide .

On voit donc apparaître le coefficient de dilatation thermique isobare $\alpha_{P,0}$ non nul mais petit, ce qui n'est pas le cas pour la loi d'état Stiffened gas.

### 4.4.4 Fermeture du modèle diphasique

Les lois d'états utilisées précédemment sont du type Mie-Gruneisen. Elles se mettent toutes sous la forme

$$P(\upsilon, \varepsilon) = \frac{\gamma_\infty - 1}{\upsilon}(\varepsilon - \varepsilon_\infty) - \gamma P_\infty. \tag{4.61}$$

Ainsi la loi d'état de la phase $k$ peut s'écrire avec le formalisme général

$$\rho_k \varepsilon_k(\rho_k, P_k) = A_k(\rho_k) P_k + B_k(\rho_k), \tag{4.62}$$

où dans notre cas $A_k(\rho_k) = \dfrac{1}{\gamma_{\infty,k} - 1}$ et $B_k(\rho_k) = \rho_k \varepsilon_{\infty,k} + \dfrac{\gamma_{\infty,k} P_{\infty,k}}{\gamma_{\infty,k} - 1}$.

Dans la suite les indices $g$ (respectivement $l$) se réfèrent à la phase gazeuse (respectivement à la phase liquide). En se servant des relations de fermeture isobare (4.7) du modèle de [ACK02], rappelées ci-dessus

$$\begin{cases} P_g(\rho_g, \rho_g \varepsilon_g) - P_l(\rho_l, \rho_l \varepsilon_l) = 0, \\ \\ \rho\varepsilon = \sum_k \alpha_k \rho_k \varepsilon_k, \end{cases} \tag{4.63}$$

on aboutit à la loi de mélange

$$\rho\varepsilon = \underbrace{\left(\sum_k \alpha_k A_k(\rho_k)\right)}_{A(\rho_g,\rho_l,\alpha)} P + \underbrace{\sum_k \alpha_k B_k(\rho_k)}_{B(\rho_g,\rho_l,\alpha)}. \tag{4.64}$$

Dans notre cas, on pose $A(\rho_g, \rho_l, \alpha) = \sum_k \alpha_k A_k(\rho_k) = \dfrac{1}{\gamma_{\infty,eq} - 1}$. On a donc $\dfrac{1}{\gamma_{\infty,eq} - 1} = \sum_k \dfrac{\alpha_k}{\gamma_k - 1}$, d'où

$$\gamma_{\infty,eq} = 1 + \frac{1}{\sum_k \dfrac{\alpha_k}{\gamma_k - 1}}. \tag{4.65}$$

De même, en posant $B(\rho_g, \rho_l, \alpha) = \sum_k \alpha_k B_k(\rho_k) = \rho\varepsilon_{\infty,eq} + \dfrac{\gamma_{\infty,eq} P_{\infty,eq}}{\gamma_{\infty,eq} - 1}$, on a donc

$$\varepsilon_{\infty,eq} = \sum_k y_k \varepsilon_{\infty,k}, \tag{4.66}$$

et

$$P_{\infty,eq} = \frac{\gamma_{\infty,eq} - 1}{\gamma_{\infty,eq}} \sum_k \frac{\alpha_k \gamma_k P_{\infty,k}}{\gamma_k - 1}, \tag{4.67}$$

en définissant $y_k = \dfrac{\rho_k \alpha_k}{\rho}$ la fraction massique de la phase $k$.

Finalement, on a défini les paramètres de mélange $\gamma_{\infty,eq}$, $\varepsilon_{\infty,eq}$ et $P_{\infty,eq}$ de façon à avoir la loi d'état de mélange suivante

$$P(\rho, \rho\varepsilon, \alpha_g) = (\gamma_{\infty,eq} - 1)(\rho\varepsilon - \rho\varepsilon_{\infty,eq}) - \gamma_{\infty,eq} P_{\infty,eq}, \tag{4.68}$$

pour laquelle on rappelle que $\rho = \alpha_g\rho_g + \alpha_l\rho_l$, $\rho\varepsilon = \alpha_g\rho_g\varepsilon_g + \alpha_l\rho_l\varepsilon_l$ et $\alpha_g + \alpha_l = 1$.

### 4.4.5 Modélisation de la phase gazeuse multi-espèces

L'atmosphère est composée de plusieurs espèces chimiques. Au fur et à mesure de la rentrée atmosphérique, un engin traverse des couches atmosphériques aux propriétés et de compositions chimiques différentes. Pour le modèle le plus simple l'atmosphère terrestre est composée de deux éléments $(N, O)$, respectivement l'atome d'azote et d'oxygène, formant cinq espèces majoritaires $N_2$, $O_2$, $NO$, $O$ et $N$. Un modèle d'atmosphère plus ou moins sophistiqué

existe pour chaque planète explorée. Aux espèces déjà présentes dans l'atmosphère, il faut ajouter les espèces issues des réactions associées à l'ablation du bouclier thermique de l'objet qui subit un échauffement considérable. Par exemple dans le cas d'un bouclier thermique réalisé en composites thermostructuraux de type Carbone/Carbone, dans la couche limite sont injectés des gaz chauds composés essentiellement de résidus carbonés provenant de l'oxydation, de la sublimation et de la pyrolyse [Vel07, Mul10]. L'aspect multi-espèces de la phase gazeuse est donc important dans notre étude.

On définit en premier lieu la fraction massique (ou titre massique) de l'espèce $i$ par

$$c_{g,i} = \frac{\rho_{g,i}}{\rho_g}, \tag{4.69}$$

avec $i = 1, \cdots, n_e$, où $n_e$ le nombre total d'espèces chimiques considérées dans la phase gazeuse et $\rho_{g,i}$ la masse volumique de l'espèce $i$. On a donc $\sum_i^{n_e} c_{g,i} = 1$. La fraction molaire (ou titre molaire) $x_i$ est le rapport entre le nombre de moles $N_i$ de l'espèce $i$ et le nombre total de moles $N$

$$x_i = \frac{N_i}{N}. \tag{4.70}$$

On a donc $\sum_i^{n_e} N_i = 1$. La masse molaire de chaque espèce $i$ est notée $M_{mol,i}$ et celle de la phase gazeuse $M_{mol}$. La constante spécifique de la phase gazeuse $R$ composée de plusieurs espèces est

$$R = \frac{R_u}{M_{mol}} = \sum_{i=1}^{n_e} C_i R_i, \tag{4.71}$$

où $R_u = 8314 Jkg^{-1}mol^{-1}K^{-1}$ la constante universelle des gaz parfaits et $R_i = \dfrac{R_u}{M_{mol,i}}$.

Ceci conduit aux relations

$$x_i = c_{g,i}\frac{M}{M_i}, \tag{4.72}$$

$$M_i = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n_e} \frac{c_{g,i}}{M_{mol,i}}}. \tag{4.73}$$

Chacune des espèces composant la phase gazeuse est régie par une loi de type gaz parfait. Cette hypothèse est raisonnable compte tenu des pressions et des températures de nos applications. La pression totale de la phase gazeuse est alors donnée par la **loi de Dalton** stipulant que celle-ci est égale à la

somme des pressions partielles de ses constituants

$$P(\rho_g, T_g) = \sum_{i=1}^{n_e} P_{g,i}(\rho_{g,i}, T_g), \tag{4.74}$$

$$= \sum_{i=1}^{n_e} \rho_{g,i} R_i T_g = \sum_{i=1}^{n_e} \rho_g \frac{R_u}{M_{mol}} T_g, \tag{4.75}$$

et également la masse volumique

$$\rho_g = \sum_{i=1}^{n_e} \rho_{g,i}, \tag{4.76}$$

où $T_g$ est la température de la phase gazeuse. Cette loi est une conséquence de la théorie des gaz parfaits. Elle suppose que chacune des molécules qui constituent le gaz parfait n'interagit pas avec les autres molécules de celui-ci. $P_{g,i}$ est la pression partielle de l'espèce gazeuse $i$, c'est à dire la pression qu'aurait cette espèce si elle occupait seule tout le volume.

L'énergie interne par unité de masse s'exprime sous la forme

$$\varepsilon_g(T_g) = \sum_{i=1}^{n_e} c_{g,i} \varepsilon_{g,i}(T_g), \tag{4.77}$$

où $\varepsilon_{g,i}$ est l'énergie interne par unité de masse de l'espèce $i$

$$\varepsilon_{g,i}(T_g) = \int_{T_{g,ref}}^{T_g} C_{v,g,i}(T_g) dT + \varepsilon^0_{g,i}, \tag{4.78}$$

avec $C_{v,g,i}(T_g)$ la capacité thermique à volume constant de l'espèce $i$ que l'on choisit constante dans notre étude, $T_{g,ref}$ une température de référence et $\varepsilon^0_{g,i}$ l'énergie de formation de l'espèce $i$ à $T_{g,ref}$.

On définit de la même manière l'enthalpie par unité de masse

$$h_g(T_g) = \sum_{i=1}^{n_e} c_{g,i} h_{g,i}(T_g) = \varepsilon_g(T_g) + \frac{P(\rho_g, T_g)}{\rho_g}, \tag{4.79}$$

avec l'enthalpie spécifique par unité de masse de l'espèce $i$

$$h_{g,i}(T_g) = \varepsilon_{g,i}(T_g) + \frac{P_i(T_g)}{\rho_{g,i}} = \int_{T_{g,ref}}^{T_g} C_{P,g,i}(T_g) dT + h^0_{g,i}, \tag{4.80}$$

où la capacité calorifique à pression constante $C_{P,g,i}(T_g)$, est supposée constante. L'enthalpie de formation $h^0_{g,i}$ de l'espèce $i$ est reliée à son énergie interne de formation par

$$\varepsilon^0_{g,i} = h^0_{g,i} - R_i T_{g,ref}. \tag{4.81}$$

On définit la capacité calorifique à volume constant *figée*, notée $C^f_{v,g}$, par

$$C^f_{v,g} = \sum_{i=1}^{n_e} c_{g,i} C_{v,g,i}, \tag{4.82}$$

ainsi que la capacité calorifique à pression constante *figée*

$$C^f_{P,g} = \sum_{i=1}^{n_e} c_{g,i} C_{P,g,i}. \tag{4.83}$$

On en déduit les relations

$$C^f_{P,g} - C^f_{v,g} = R\gamma^f_g = \frac{C^f_{P,g}}{C^f_{v,g}}. \tag{4.84}$$

A partir de la différenciation de la pression $P = P(\rho_{g,i}, \rho_g \varepsilon)$ on obtient la vitesse du son *figée*

$$a^2 = \gamma^f_g R T_g = \gamma^f_g \frac{P}{\rho_g}. \tag{4.85}$$

La loi d'état de la phase gazeuse en multi-espèces entre dans le cadre des lois d'état compatibles avec la loi de mélange présentée dans la section précédente.

Le modèle complet diphasique Navier-Stokes avec une phase gazeuse multi-espèces se formule comme suit

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \alpha_g = 0, \\ \dfrac{\partial \alpha_g \rho_g c_{g,1}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g c_{g,1} \vec{u}) = -\nabla \cdot (\alpha_g \vec{J}_{g,1}) + \dot{\omega}_1, \\ \dots \\ \dfrac{\partial \alpha_g \rho_g c_{g,n_e}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g c_{g,n_e} \vec{u}) = -\nabla \cdot (\alpha_g \vec{J}_{g,n_e}) + \dot{\omega}_{n_e}, \\ \dfrac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{u}) = 0, \\ \dfrac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla P = \rho \vec{g} + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}, \\ \dfrac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P) \vec{u}) = \rho \vec{g} \cdot \vec{u} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\tau}} \cdot \vec{u}) - \nabla \cdot \vec{q}, \end{cases} \tag{4.86}$$

avec $\vec{q} = \sum_{k=1}^{2} \alpha_k \vec{q}_k$. Le flux de diffusion de la quantité de chaleur pour une phase gazeuse multi-espèces est

$$\vec{q}_g = -K_g \nabla T_g + \sum_{i=1}^{n_e} \rho_g D_i h_{g,i} \nabla c_{g,i}. \tag{4.87}$$

Le terme $\vec{J}_{g,i} = -\rho_g D_g \nabla c_{g,i}$, $i = 1, ..., n_e$, est le flux de diffusion de l'espèce $i$ dans la phase gazeuse en utilisant l'approximation la plus simple. Il s'agit de la **loi de Fick** ou le paramètre de diffusion est obtenue en supposant le nombre sans dimension de Lewis **Le** constant. Dans le contexte physique considéré, il est usuel de considérer le nombre de Lewis constant égal à 1 [Bia07], soit :

$$\mathbf{Le} = \frac{\rho_g C_{P,g}^f D_g}{K_g} = 1. \tag{4.88}$$

Il existe d'autres modèles plus généraux pour le flux de diffusion où le terme de diffusion $D$ est donnée pour chaque couple d'espèces en présence.

Le terme $\dot{\omega}_i$ de production ou de destruction de l'espèce $i$, $i = 1, ..., n_e$, est associé aux réactions chimiques qui ont lieu dans la phase gazeuse. La conservation de la masse et des éléments conduit à $\sum_{i=1}^{n_e} \dot{\omega}_i = 0$. Dans, notre cas, pour simplifier le problème on néglige les réactions chimiques au sein de la phase gazeuse.

Le coefficient de viscosité est régi par la formule de Wilke

$$\mu_g = \sum_{i=1}^{n_e} \frac{x_i \mu_{g,i}}{\phi_i}, \tag{4.89}$$

avec

$$\phi_i = \sum_{j=1}^{n_e} x_j \left[1 + (\mu_{g,i}/\mu_{g,j})^{\frac{1}{2}} (M_{mol,j}/M_{mol,i})^{\frac{1}{4}}\right]^2 / \left[8(1 + (M_{mol,i}/M_{mol,j})\right]^{\frac{1}{2}}.$$

La viscosité $\mu_{g,i}$ de chaque espèce $i$ est prise constante.

Enfin, l'estimation de la conductivité thermique pour la phase gazeuse repose sur l'hypothèse du nombre sans dimension de Prandtl **Pr** constant

$$K_g = \frac{\mu_g C_{P,g}^f}{\mathbf{Pr}}. \tag{4.90}$$

Ce nombre de Prandtl a une valeur de 0.72.

Le modèle complet (4.86) dégénère vers le modèle diphasique de Navier-Stokes (4.10) si il n'y a qu'une seule espèce, i.e. $n_e = 1$. De même, s'il n'y a que la phase gazeuse , i.e. $\alpha_g = 1$, le modèle correspond au modèle de Navier-Stokes multi-espèces.

## 4.5 Conclusion

Dans cette partie, nous avons justifié le choix du modèle diphasique pour notre étude. Ce modèle à interface diffuse a été complété de sorte à pouvoir traiter une phase gazeuse multi-espèces. Il est défini par le système (4.86). Enfin, nous avons construit une équation d'état pour chacune des phases, notamment pour la phase liquide afin de bien prendre en compte les effets de dilatation thermique dans celle-ci.

Dans le chapitre suivant, on réalisera une étude mathématique du modèle diphasique. Notamment on discutera de l'hyperbolicité, la définition de la vitesse du son de mélange et aussi de l'entropie mathématique.

# Chapitre 5

# Propriétés mathématiques du modèle diphasique

Dans le chapitre précédent, le modèle diphasique pour les équations de Navier-Stokes a été présenté (section 4.4.5), ainsi que les lois d'état thermodynamiques pour chacune des phases.

Nous précisons dans ce chapitre quelques propriétés mathématiques de ce modèle diphasique. Pour simplifier l'étude, nous considérerons le modèle diphasique sous sa forme la plus simple, c'est à dire sans les termes dissipatifs.

## 5.1 Hyperbolicité

Dans un premier temps, la phase gazeuse est supposée mono-espèce. Rappelons le modèle diphasique à 5 équations

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \alpha = 0, \tag{5.1a}$$

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}) = 0, \ k = g, l, \tag{5.1b}$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla P = 0, \tag{5.1c}$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P)\vec{u}) = 0, \tag{5.1d}$$

où $\alpha_g = \alpha$ (réciproquement $\alpha_l = 1 - \alpha$) et $\rho = \alpha_g \rho_g + \alpha_l \rho_l$. Ce modèle a été étudié dans [ACK00, ACK02, MSNA01, Pé03]. La fermeture isobare de ce modèle a été présentée au chapitre précédent dans la section 4.4.4. La pression de mélange est une fonction de $\rho_g$, $\rho_l$, $\varepsilon$ et $\alpha$.

### 5.1.1 Vitesse du son de mélange

On introduit la notation de la dérivée particulaire d'une quantité $f$ par

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla f. \tag{5.2}$$

On a donc directement $\dfrac{D\alpha}{Dt} = 0$.

Les équations (5.1b) sont reformulées comme suit

$$\frac{D\alpha_k \rho_k}{Dt} = -\alpha_k \rho_k \nabla \cdot \vec{u},\ k = g, l.$$

Combinées avec $\dfrac{D\alpha}{Dt} = 0$, elles donnent

$$\frac{D\rho_k}{Dt} = -\rho_k \nabla \cdot \vec{u},\ k = g, l.$$

On a également

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \vec{u}.$$

De façon classique, en décomposant $\dfrac{D\rho\vec{u}}{Dt} = \rho\dfrac{D\vec{u}}{Dt} + \vec{u}\dfrac{D\rho}{Dt}$, on obtient

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = \frac{1}{\rho}\nabla P.$$

Avec $\rho E = \rho\varepsilon + \dfrac{\vec{u}\cdot\vec{u}}{2}$ et $h = \varepsilon + \dfrac{P}{\rho}$ l'enthalpie spécifique, on a

$$\frac{D\rho\varepsilon}{Dt} = -\rho h \nabla \cdot \vec{u}.$$

La différentielle de la pression en variables $(\rho_g\alpha_g, \rho_l\alpha_l, \rho\varepsilon, \alpha)$ est

$$\begin{aligned} dP = &\sum_k \left(\frac{\partial P}{\partial \rho_k \alpha_k}\right)_{\rho_{k'}\alpha_{k'},\rho\varepsilon,\alpha} d\rho_k\alpha_k + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho\varepsilon}\right)_{\rho_g\alpha_g,\rho_l\alpha_l,\alpha} d\rho\varepsilon \\ &+ \left(\frac{\partial P}{\partial \alpha}\right)_{\rho_g\alpha_g,\rho_l\alpha_l,\rho\varepsilon} d\alpha. \end{aligned} \tag{5.3}$$

En utilisant la relation $\dfrac{D\alpha}{Dt} = 0$, on a

$$\frac{DP}{Dt} = -\left(\sum_k \rho_k\alpha_k \left(\frac{\partial P}{\partial \rho_k\alpha_k}\right)_{\rho_{k'}\alpha_{k'},\rho\varepsilon,\alpha} + \rho h \left(\frac{\partial P}{\partial \rho\varepsilon}\right)_{\rho_g\alpha_g,\rho_l\alpha_l,\alpha}\right) \nabla \cdot \vec{u}. \tag{5.4}$$

En partant de l'expression de l'énergie interne de mélange $\rho\varepsilon = \rho_g\alpha_g\varepsilon_g + \rho_l\alpha_l\varepsilon_l$, on calcule sa différentielle

$$d(\rho\varepsilon) = (\rho_g\varepsilon_g - \rho_l\varepsilon_l)d\alpha + \sum_k \alpha_k d(\rho_k\varepsilon_k), \tag{5.5}$$

$$= (\rho_g\varepsilon_g - \rho_l\varepsilon_l)d\alpha + \sum_k \alpha_k \left(\frac{\partial\rho_k\varepsilon_k}{\partial P}\right)_{\rho_k} dP + \sum_k \alpha_k \left(\frac{\partial\rho_k\varepsilon_k}{\partial\rho_k}\right)_P d\rho_k, \tag{5.6}$$

avec pour chacune des phases $\rho_k\varepsilon_k = \rho_k\varepsilon_k(P,\rho_k)$. On introduit les notations $\xi_k = \left(\frac{\partial\rho_k\varepsilon_k}{\partial P}\right)_{\rho_k}$ et $\delta_k = \left(\frac{\partial\rho_k\varepsilon_k}{\partial\rho_k}\right)_P$. Ceci permet d'exprimer les dérivées de la pression de mélange $P$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial\rho_k\alpha_k}\right)_{\rho_{k'}\alpha_{k'},\rho\varepsilon,\alpha} = \frac{1}{\xi}, \tag{5.7}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial\rho_k}\right)_{\rho_{k'},\rho\varepsilon,\alpha} = -\frac{\alpha_k\delta_k}{\xi}, \tag{5.8}$$

où

$$\xi = \alpha_g\xi_g + \alpha_l\xi_l. \tag{5.9}$$

En utilisant $\alpha_k d\rho_k = d(\alpha_k\rho_k) - \rho_k d\alpha_k$, on obtient

$$\left(\frac{\partial P}{\partial\rho_k\alpha_k}\right)_{\rho_{k'}\alpha_{k'},\rho\varepsilon,\alpha} = -\frac{\delta_k}{\xi}, \text{ pour } k = g,l. \tag{5.10}$$

On a donc

$$\sum_k \rho_k\alpha_k \left(\frac{\partial P}{\partial\rho_k\alpha_k}\right)_{\rho_{k'}\alpha_{k'},\rho\varepsilon,\alpha} + \rho h \left(\frac{\partial P}{\partial\rho\varepsilon}\right)_{\rho_g\alpha_g,\rho_l\alpha_l,\alpha}$$
$$= \frac{\rho h}{\xi} - \frac{\sum_k \rho_k\alpha_k\delta_k}{\xi},$$
$$= \frac{1}{\xi}\sum_k \rho_k\alpha_k(h_k - \delta_k), \tag{5.11}$$

puisque $\rho h = \rho_g\alpha_g h_g + \rho_l\alpha_l h_l$. Par analogie avec les équations d'Euler monofluide, on définit alors la vitesse du son de mélange $a_{eq}$ par

$$\rho a_{eq}^2 = \frac{1}{\xi}\sum_k \rho_k\alpha_k(h_k - \delta_k). \tag{5.12}$$

Or la vitesse du son de la phase $k$ donnée par les relations thermodynamiques usuelles a l'expression

$$a_k^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho_k}\right)_{s_k} = \frac{h_k - \delta_k}{\xi_k}.$$

La vitesse du son de mélange est donc définie par

$$\rho a_{eq}^2 = \frac{1}{\xi}\sum_k \rho_k \alpha_k \xi_k a_k^2. \tag{5.13}$$

Les lois d'état dans notre étude (voir section 4.4.4) ont la forme

$$P(\upsilon, \varepsilon) = \frac{\gamma_\infty - 1}{\upsilon}(\varepsilon - \varepsilon_\infty) - \gamma P_\infty.$$

Dans ce cas la vitesse du son de mélange devient

$$a_{eq}^2 = \gamma_{\infty,eq}\frac{P + P_{\infty,eq}}{\rho}, \tag{5.14}$$

avec $\varepsilon_{\infty,eq}$ et $P_{\infty,eq}$ les quantités de mélange introduites dans la section 4.4.4.

Cette forme de vitesse du son de mélange est appelée **vitesse du son de Wood**.

Dans le cas où le terme $\Xi(P, \rho_1, \rho_2, \alpha_1, \alpha_2)$ n'est pas négligé, c'est-à-dire que l'équation de la fraction volumique est donnée par

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \vec{u}\cdot\nabla\alpha_1 = \Xi(P, \rho_1, \rho_2, \alpha_1, \alpha_2), \tag{5.15}$$

la vitesse du son de mélange est tout autre. Elle est donnée par la **vitesse du son de Wallis** définie par

$$\frac{1}{\rho a_{eq}^2} = \frac{\alpha_g}{\rho_g a_g^2} + \frac{\alpha_l}{\rho_l a_l^2}. \tag{5.16}$$

Une étude comparative de ces deux modèles, avec ou sans terme $\Xi(P, \rho_1, \rho_2, \alpha_1, \alpha_2)$, est faite dans [GM03].

Dans le cas où la phase gazeuse est multi-espèces, les calculs précédents sont quasi-identiques. Il suffit pour cela de sommer les $n_e$ équations en $\rho_g \alpha_g c_{g,i}$, $i = 1, ..., n_e$. Nous avons défini la vitesse du son de mélange du système. Il reste à évaluer dans quelle condition elle est bien définie, c'est-à-dire positive.

### 5.1.2 Positivité de la vitesse du son de mélange

Il est évident à partir de l'expression (5.13) que la positivité de la vitesse du son de mélange est conditionnée par le signe des $\xi_k$ puisque les autres termes sont positifs. Du point de vue thermodynamique, le terme $\xi_k$ est du même signe que le coefficient de dilatation thermique isobare $\alpha_P$ défini au chapitre précédent.

Si les $\xi_k$ sont du même signe alors la vitesse du son $a_{eq}^2$ est toujours positive. Dans le cas contraire, par une simple analyse du signe de la fonction $a_{eq}^2(\alpha)$, il est possible de trouver une plage de valeurs de $\alpha$ pour laquelle la vitesse du son de mélange est négative.

Nous nous restreignons donc aux matériaux dont les coefficients $\xi_k$ sont positifs pour que la vitesse du son de mélange soit positive.

Ce choix exclut par exemple l'eau liquide qui possède une anomalie dilatométrique (son coefficient $\alpha_P$ devient négatif) sur l'intervalle de température $[273K, 277K]$.

### 5.1.3 Hyperbolicité du système

Dans les conditions où les coefficients $\xi_k$ sont positifs (vitesse du son positive), le système est hyperbolique. Les valeurs propres sont $\vec{u}\cdot\vec{n}$, $\vec{u}\cdot\vec{n} - a_{eq}$ et $\vec{u}\cdot\vec{n} + a_{eq}$. [Pé03] fournit pour le système diphasique à 5 équations les valeurs propres, les vecteurs propres associés, l'expression des matrices jacobiennes en variables conservatives et primitives, ainsi que les invariants de Riemann.

## 5.2 Entropie mathématique

### 5.2.1 Forme générale de l'entropie mathématique

Afin de simplifier les calculs, on supposera ici que la phase gazeuse ne contient qu'une espèce. Pour déterminer les entropies du système, nous utilisons la forme générale des lois d'état présentée au chapitre précédent

$$\rho_k \varepsilon_k(\rho_k, P_k) = A_k(\rho_k) P_k + B_k(\rho_k),\ k = g, l. \tag{5.17}$$

La loi d'état de mélange est alors donnée par

$$\rho\varepsilon = \underbrace{\left(\sum_k \alpha_k A_k(\rho_k)\right)}_{A(\rho_g,\rho_l,\alpha)} P + \underbrace{\sum_k \alpha_k B_k(\rho_k)}_{B(\rho_g,\rho_l,\alpha)}. \tag{5.18}$$

La pression est donc une fonction des variables $(\upsilon, \varepsilon, \alpha, y)$, où $y = y_g = \dfrac{\rho_g \alpha}{\rho}$ et $\alpha = \alpha_g$. Les masses volumiques sont pour leur part des fonctions de $(\upsilon, \alpha, y)$ puisque $\rho_g = \dfrac{\rho_g \alpha \rho}{\alpha \rho} = \dfrac{y}{\upsilon \alpha}$ et de même $\rho_l = \dfrac{(1-y)}{\upsilon(1-\alpha)}$. On note alors $a(\upsilon, \alpha, y) = A(\rho_g, \rho_l, \alpha)$ et $b(\upsilon, \alpha, y) = -B(\rho_g, \rho_l, \alpha)$ de sorte que la pression de mélange s'exprime par

$$P(\upsilon, \varepsilon, \alpha, y) = \frac{1}{a}(\frac{\varepsilon}{\upsilon} + b). \tag{5.19}$$

Par commodité, on utilisera le système diphasique à 5 équations sous sa forme lagrangienne 1D, soit

$$\partial_\tau \alpha = 0, \tag{5.20a}$$
$$\partial_\tau y = 0, \tag{5.20b}$$
$$\partial_\tau \upsilon - \partial_m u = 0, \tag{5.20c}$$
$$\partial_\tau \vec{u} + \partial_m P = 0, \tag{5.20d}$$
$$\partial_\tau E + \partial_m (Pu) = 0, \tag{5.20e}$$

où $\tau = t$ et $m = \int \rho dx$. Soit encore sous la forme

$$\partial_\tau \underline{V} + \partial_m G(\underline{V}) = 0, \tag{5.21}$$

avec $\underline{V} = (\alpha, y, \upsilon, u, E)^t$ le vecteur des inconnues et $G(\underline{V}) = (0, 0, \upsilon, P, Pu)^t$ le vecteur de flux.

Par une simple combinaison des deux dernières équations du système précédent, on obtient le système suivant

$$\partial_\tau \alpha = 0, \tag{5.22a}$$
$$\partial_\tau y = 0, \tag{5.22b}$$
$$\partial_\tau \upsilon - \partial_m u = 0, \tag{5.22c}$$
$$\partial_\tau u + \partial_m P = 0, \tag{5.22d}$$
$$\partial_\tau \varepsilon + P \partial_m (u) = 0, \tag{5.22e}$$

d'où

$$\partial_\tau \tilde{\underline{V}} + \underline{\underline{M}} \partial_m \tilde{\underline{V}}, \tag{5.23}$$

avec $\tilde{\underline{V}} = (\alpha, y, \upsilon, u, \varepsilon)^t$. La matrice $\underline{\underline{M}} = \tilde{\underline{V}}_{\underline{V}} G_{\underline{V}} \underline{V}_{\tilde{\underline{V}}}$ s'exprime par

$$\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ P_\alpha & P_y & P_\upsilon & 0 & P_\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & P & 0 \end{pmatrix}, \tag{5.24}$$

en utilisant les notations $P_\varsigma = \left(\dfrac{\partial P}{\partial \varsigma}\right)_{\varsigma' \neq \varsigma}$, $\varsigma = \alpha, y, \upsilon, \varepsilon$.

On cherche l'entropie lagrangienne $s$ à flux nul vérifiant la relation

$$s_{\underline{V}}\, G_{\underline{V}} = 0 \Leftrightarrow s_{\underline{V}}\, \underline{V}_{\tilde{V}}\, \tilde{\underline{V}}_{\underline{V}}\, \underline{\underline{M}}\, \underline{V}_{\tilde{V}} = 0 \tag{5.25}$$

$$\Leftrightarrow s_{\underline{V}}\, \underline{\underline{M}} = 0, \tag{5.26}$$

avec $s_{\underline{V}} = (s_\alpha, s_y, s_\upsilon, s_u, s_\varepsilon)$.

On obtient à partir de (5.26)

$$s_u P_\alpha = s_u P_y = s_u P_\upsilon = s_u P_\varepsilon = 0, \tag{5.27a}$$

$$-s_\upsilon + P s_\varepsilon = 0. \tag{5.27b}$$

La première relation (5.27a) implique que $s_u$ est nul et donc que l'entropie est une fonction de quatre variables, soit $s = s(\alpha, y, \upsilon, \varepsilon)$. De plus, l'entropie $s$ est solution de l'équation (5.27b).

**Résolution de l'équation (5.27b)** L'entropie est solution de l'équation de transport (5.27b). Pour fixer les idées, on pose $t = \upsilon$, $x_1 = \varepsilon$, $x_2 = \alpha$, $x_3 = y$. L'équation (5.27b) devient donc

$$s_t - P s_{x_1} = 0, \tag{5.28}$$

qui est une équation de transport par rapport à $t$. Soit $\underline{x} = (x_1, x_2, x_3)^t(t)$ la solution de l'équation caractéristique

$$\frac{d\underline{x}}{dt} = \begin{pmatrix} -P \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{5.29a}$$

$$\underline{x}(t_0) = \underline{x_0}. \tag{5.29b}$$

L'entropie a alors pour expression $s(t, \underline{x}) = s_0(\underline{x_0}(t, \underline{x}))$, où $\underline{x_0}(t, \underline{x})$ est le point dont est issu la caractéristique en $t_0$ passant par $(t, \underline{x})$.

Il faut déterminer l'inconnue $\underline{x}$. On obtient à partir de l'équation caractéristique les conditions suivantes

$$x_2(t) = x_{2,0}, \tag{5.30}$$

$$x_3(t) = x_{3,0}, \tag{5.31}$$

$$\frac{dx_1}{dt} = -P. \tag{5.32}$$

En reprenant la loi d'état (5.19), on a

$$P = \bar{a}(x_1 + \bar{b}), \tag{5.33}$$

avec $\bar{a} = \dfrac{1}{a\upsilon}$ et $\bar{b} = b\upsilon$. L'inconnue $x_1$ est solution d'une équation différentielle ordinaire et s'exprime par

$$x_1(t, \underline{x_0}) = x_{1,0} e^{-\ddot{a}(t))} - \int_{t_0}^{t} \bar{b}(\tau)\bar{a}(\tau) e^{(\ddot{a}(\tau)-\ddot{a}(t))} d\tau, \tag{5.34}$$

$$= e^{-\ddot{a}(t))} \left[ x_{1,0} - \int_{t_0}^{t} \bar{b}(\tau)\bar{a}(\tau) e^{\ddot{a}(\tau)} d\tau \right], \tag{5.35}$$

où

$$\ddot{a}(t) = \int_{t_0}^{t} \bar{a}(\tau) d\tau.$$

Etant donné $(t, x)$ avec $x = (x_1, x_2, x_3)^t$, alors $\underline{x_0}(t, x)$ est donné par

$$x_{2,0} = x_2, \tag{5.36}$$

$$x_{3,0} = x_3, \tag{5.37}$$

$$x_{1,0} = e^{\ddot{a}(t)} \left[ x_1 + \int_{t_0}^{t} \bar{b}(\tau)\bar{a}(\tau) e^{\ddot{a}(\tau)-\ddot{a}(t)} d\tau \right]. \tag{5.38}$$

On en déduit que

$$s(t, \underline{x}) = s_0(x_0(t, \underline{x})) \tag{5.39}$$

$$= s_0 \left( e^{\ddot{a}(t)} \left[ x_1 + \int_{t_0}^{t} \bar{b}(\tau)\bar{a}(\tau) e^{\ddot{a}(\tau)-\ddot{a}(t)} d\tau \right], x_2, x_3 \right). \tag{5.40}$$

On peut donc énoncer le résultat suivant

**Proposition 2.** *Les entropies mathématiques du système diphasique à 5 équations sont les fonctions convexes de la forme*

$$s(\upsilon, \varepsilon, \alpha, y) = s_0 \left( e^{\ddot{a}(\upsilon)} \left[ \varepsilon + \int_{\upsilon_0}^{\upsilon} \bar{b}(\tau)\bar{a}(\tau) e^{\ddot{a}(\tau)-\ddot{a}(\upsilon)} d\tau \right], \alpha, y \right). \tag{5.41}$$

Les fonctions $\ddot{a}$, $\bar{b}$ et $\bar{a}$ dépendent de $\alpha$ et $y$.

### 5.2.2 Température de mélange

On cherche la température $T$ associée à cette entropie mathématique $s(\upsilon, \varepsilon, \alpha, y)$ telle que

$$Tds = d\varepsilon + Pd\upsilon + fd\alpha + gdy. \tag{5.42}$$

La différentielle d'une entropie $s(\upsilon, \varepsilon, \alpha, y)$ donne

$$ds = s_\varepsilon d\varepsilon + s_\upsilon d\upsilon + s_\alpha d\alpha + s_y dy. \tag{5.43}$$

On en déduit que $s_\varepsilon = \dfrac{1}{T}$. Toutes les entropies mathématiques, telles que $s_\upsilon = Ps_\varepsilon$ ayant été caractérisées par la proposition précédente, on a donc

$$T = \frac{1}{e^{\ddot{a}(\upsilon)}\partial_1 s_0\left(e^{\ddot{a}(\upsilon)}\left[\varepsilon + \int_{\upsilon_0}^{\upsilon} \bar{b}(\tau)\bar{a}(\tau)e^{\ddot{a}(\tau)-\ddot{a}(\upsilon)}d\tau\right], \alpha, y\right)}, \tag{5.44}$$

où $\partial_1 s_0$ correspond à la dérivée de la fonction $s_0$ par rapport à sa première variable.

**Remarque 1.** Si on souhaite déterminer une température de mélange au sens thermodynamique, il faut choisir le couple $(-s, T)$ car l'entropie physique est concave.

### 5.2.3 Expression de l'entropie mathématique de mélange pour les lois d'état de notre étude

En reprenant le calcul précédent, mais en considérant cette fois une loi d'état de mélange donnée par

$$P(\rho, \rho\varepsilon, \alpha) = (\gamma_{\infty,eq} - 1)(\rho\varepsilon - \rho\varepsilon_{\infty,eq}) - \gamma_{\infty,eq}P_{\infty,eq},$$

($\gamma_{\infty,eq}$, $\varepsilon_{\infty,eq}$ et $P_{\infty,eq}$ sont définis dans la section 4.4.4), l'entropie mathématique de mélange est alors donnée par

$$s(\upsilon, \varepsilon, \alpha, y) = s_0\Big((P + P_{\infty,eq})\upsilon^{\gamma_{\infty,eq}}, \alpha, y\Big) \tag{5.45}$$

$$= \bar{s}_0\Big(\ln\big((P + P_{\infty,eq})\upsilon^{\gamma_{\infty,eq}}\big), \alpha, y\Big) \tag{5.46}$$

La relation (5.46) exige que $P + P_{\infty,eq}$ soit strictement positif ce qui est vrai dans le domaine d'hyperbolicité.

Les entropies (5.45) et (5.46) sont en accord avec celles trouvées dans [Pé03] dans le cas de lois d'état de type stiffened gas.

Parmi les entropies caractérisées dans cette section, on retient l'entropie de mélange suivante pour définir les invariants de Riemann

$$s = \frac{P + P_{\infty,eq}}{\rho^{\gamma_{\infty,eq}}}. \tag{5.47}$$

## 5.3 Le problème de Riemann

### 5.3.1 Invariants de Riemann

On définit le vecteur des variables primitives

$$\underline{U} = \begin{pmatrix} \rho_g \\ \rho_l \\ \vec{u} \\ P \\ \alpha \end{pmatrix}. \tag{5.48}$$

A partir des relations évaluées dans la section 5.1.1, le système en variables primitives est donné par

$$\begin{cases} \dfrac{D\rho_g}{Dt} + \rho_g \nabla \cdot \vec{u} = 0, \\ \dfrac{D\rho_l}{Dt} + \rho_l \nabla \cdot \vec{u} = 0, \\ \dfrac{D\vec{u}}{Dt} + \dfrac{1}{\rho}\nabla P = 0, \\ \dfrac{DP}{Dt} + \rho a_{eq}^2 \nabla \cdot \vec{u} = 0, \\ \dfrac{D\alpha}{Dt} = 0. \end{cases} \tag{5.49}$$

Les invariants de Riemann, notés $\Phi$, sont définis par la relation

$$\nabla_{\underline{U}} \Phi \cdot \underline{r_k} = 0, \tag{5.50}$$

où $\underline{r_k}$ sont les vecteurs propres à droite du système diphasique à 5 équations. Les calculs détaillés des vecteurs propres à gauche et à droite, des valeurs propres et des invariants de Riemann sont réalisés en détails dans [Pé03] dans le cas de lois d'état de type stiffened gas. Ils ne sont pas repris ici.

Les invariants de Riemann associés à l'onde $u$ sont

$$\Phi = \{u, P\}, \tag{5.51}$$

tandis que ceux associés aux ondes $u + \varsigma a$, $\varsigma = -1, 1$, sont définis par

$$\Phi = \left\{\alpha, u - \varsigma \frac{2a}{\gamma_{\infty,eq} - 1}, s_g, s_l\right\}. \tag{5.52}$$

où $s_k = \dfrac{P + P_{\infty,eq}}{\rho_k^{\gamma_{\infty,eq}}}$ est l'entropie de la phase $k$. Ces invariants de Riemann sont utilisés notamment pour définir la solution exacte d'un problème de Riemann.

### 5.3.2 Problème de Riemann

Le système diphasique à 5 équations en 1D peut être formulé sous la forme

$$\frac{\partial \underline{W}}{\partial t} + \underline{\underline{A}}(\underline{W}) \frac{\partial \underline{W}}{\partial x} = 0, \tag{5.53}$$

où le vecteur des variables conservatives $\underline{W}$ vaut

$$\underline{W} = \begin{pmatrix} \rho_g \alpha_g \\ \rho_l \alpha_l \\ \rho u \\ \rho E \\ \alpha \end{pmatrix}, \tag{5.54}$$

et la matrice jacobienne de flux $\underline{\underline{A}}$ en variables conservatives est donnée par

$$\underline{\underline{A}}(\underline{W}) = \begin{pmatrix} u y_l & -u y_g & y_g & 0 & 0 \\ -u y_l & u y_g & y_l & 0 & 0 \\ (\beta_g - u^2) & (\beta_l - u^2) & (2 - \frac{1}{\xi})u & \frac{1}{\xi} & M \\ (\beta_g - H)u & (\beta_l - H)u & (H - \dfrac{u^2}{\xi}) & (1 + \frac{1}{\xi})u & uM \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}, \tag{5.55}$$

avec $\beta_k = \dfrac{\dfrac{u^2}{2} - \delta_k}{\xi}$, $k = g, l$ et $M = \dfrac{1}{\xi}(\rho_g \delta_g - \rho_g \varepsilon_g - \rho_l \delta_l + \rho_l \varepsilon_l)$.

On appelle problème de Riemann le problème de Cauchy suivant

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \underline{W}}{\partial t} + \dfrac{\partial \underline{F}(\underline{W})}{\partial x} = 0, \\ \\ \underline{W}(x, t=0) = \begin{cases} \underline{W}_l, \text{ si } x < 0, \\ \\ \underline{W}_r, \text{ si } x > 0. \end{cases} \end{cases} \tag{5.56}$$

Les données initiales sont deux états constants séparés par une discontinuité en $x = 0$. Pour un système de lois de conservation hyperbolique, le problème de Riemann possède une unique solution qui se présente sous la forme d'une succession d'états constants $\underline{W}_l = \underline{W}_0, \underline{W}_1, \cdots, \underline{W}_n = \underline{W}_r$ séparés par une onde émanant de l'origine.

Dans le cas du système 5.56 la solution se décompose en 4 régions (n=4) dans l'espace $(x, t)$. Les états $\underline{W}_l$ et $\underline{W}_l^*$, respectivement pour les états $\underline{W}_r$ et $\underline{W}_r^*$, sont séparés par une onde non linéaire (choc ou détente). Tandis que les états $\underline{W}_l^*$ et $\underline{W}_r^*$ sont séparés une onde linéairement dégénérée (discontinuité de contact). La solution a un caractère autosemblable, elle varie selon le paramètre $x/t$.

La résolution du problème de Riemann pour le système diphasique est faite en détails dans [Pé03] dans le cas de lois d'état de type stiffened gas. Nous donnerons dans la suite un solveur de Riemann approché pour la résolution numérique du système.

## 5.4 Domaines de convexité

### 5.4.1 Convexité de l'ensemble des états à énergie et masse volumique positives

**Proposition 3.** *Le domaine*

$$\boldsymbol{D}_{\rho,\varepsilon} = \{\underline{W}, \text{ tel que } y_k > 0, \alpha \in [0,1], \rho > 0, \varepsilon > 0\}$$

*est convexe.*

*Démonstration.* Pour cela, soit $\underline{W}_A$ et $\underline{W}_B$ deux vecteurs de variables conservatives appartenant à $\mathbf{D}_{\rho,\varepsilon}$. On montre que pour tout $a$ et $b$ tel que $a+b=1$, on a $a\underline{W}_A + b\underline{W}_B \in \mathbf{D}_{\rho,\varepsilon}$.

Soit

$$\underline{W} = a\underline{W}_A + b\underline{W}_B. \tag{5.57}$$

Dans la suite les indices $._A$ (respectivement $._B$) se réfèrent à $\underline{W}_A$ (respectivement $\underline{W}_B$)

**Positivité de $\rho$** On sait que $\rho_A = \sum_k (\rho_k \alpha_k)_A$ et que $\rho_B = \sum_k (\rho_k \alpha_k)_B$. De plus par définition de $\underline{W}$ (5.57), on a

$$\rho_k \alpha_k = a(\rho_k \alpha_k)_A + b(\rho_k \alpha_k)_B, \ k = g, l.$$

d'où le résultat $\rho = a\rho_A + b\rho_B$. Comme $\rho_A$ et $\rho_B$ sont positifs, on a $\rho$ positif.

**Positivité de $\varepsilon$** On a

$$\rho E = a(\rho E)_A + b(\rho E)_B = a(\rho\varepsilon)_A + b(\rho\varepsilon)_B + \frac{1}{2}\big(a(\rho u^2)_A + b(\rho u^2)_B\big). \quad (5.58)$$

Or nous avons $\rho E = \rho\varepsilon + \frac{1}{2}\rho u^2$, ainsi on a

$$\rho\varepsilon = a(\rho\varepsilon)_A + b(\rho\varepsilon)_B + \frac{1}{2}L, \quad (5.59)$$

où $L = \big(a(\rho u^2)_A + b(\rho u^2)_B - \rho u^2\big)$.

Or on a

$$\rho u = a(\rho u)_A + b(\rho u)_B \Rightarrow u = x u_A + y u_B, \quad (5.60)$$

avec $x = \dfrac{a\rho_A}{\rho}$, $b = \dfrac{b\rho_B}{\rho}$ et $x + y = 1$. Donc en développant puis en factorisant $L$, on a

$$\frac{L}{\rho} = x u_A^2 + y u_B^2 - (x u_A + y u_B)^2, \quad (5.61)$$

$$= (x - x^2) u_A^2 + (y - y^2) u_B^2 - 2xy u_A u_B, \quad (5.62)$$

$$= xy(u_A - u_B)^2. \quad (5.63)$$

Donc $L$ est positif et puisque $(\rho\varepsilon)_A$ et $(\rho\varepsilon)_B$ sont positifs, on en conclut que $\varepsilon$ est positif.

Ainsi le domaine $\mathbf{D}_{\rho,\varepsilon}$ est convexe. □

### 5.4.2 Autres domaines convexes

**Proposition 4.** *On peut montrer par des calculs similaires que l'ensemble des états à masse volumique et pression positives*

$$\boldsymbol{D}_{\rho,P} = \{\underline{W}, \ \textit{tel que } \rho > 0, P > 0\} \quad (5.64)$$

*et l'ensemble des états à masse volumique et $P + P_{\infty,eq}$ positifs (c'est à dire que le carré de la vitesse du son positif)*

$$\boldsymbol{D}_{\rho,a^2} = \{\underline{W}, \ \textit{tel que } \rho > 0, P + P_{\infty,eq} > 0\} \quad (5.65)$$

*sont convexes pour une loi de la forme*

$$P(\rho, \rho\varepsilon, \alpha) = (\gamma_{\infty,eq} - 1)(\rho\varepsilon - \rho\varepsilon_{\infty,eq}) - \gamma_{\infty,eq} P_{\infty,eq}.$$

## 5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons détaillé les propriétés mathématiques du système diphasique. Nous avons aussi caractérisé les matériaux envisageables dans notre étude (uniquement les matériaux ayant un coefficient $\xi_k$ positif). De plus, nous avons également caractérisé toutes les entropies mathématiques du système diphasique à 5 équations pour des mélanges de fluides régies par une loi de type Mie-Gruneisen.

Dans le chapitre suivant, la résolution numérique du système sera abordée.

# Chapitre 6

# Résolution numérique du système diphasique

Après avoir défini le modèle de Navier-stokes diphasique et donné quelques propriétés mathématiques de celui-ci, nous aborderons dans ce chapitre son traitement numérique. Nous utilisons la méthode des volumes-finis sur grilles curvilignes. Les variables sont colocalisées au centre des cellules (cell-centered).

Dans nos applications, les deux phases ont des propriétés physiques complètement différentes. En effet, on a des ratios de densité de l'ordre de 2000 à 10000 (selon le métal liquide considéré), de coefficients de compressibilité isotherme d'environ $10^{10}$, et de coefficients dilatation thermique allant jusqu'à $10^3$. Ceci pose des problèmes de robustesse du schéma numérique. [KL10] propose d'un schéma numérique robuste. Cependant, ce schéma Lagrange-Remap décompose la résolution en deux étapes : une phase lagrangienne d'advection et une phase de projection sur maillage Euler. Nous proposons un schéma numérique positif et entropique pour le système diphasique. Ce schéma robuste a l'avantage d'être à une seule étape.

Dans un premier temps, nous présenterons le solveur de Riemann approché utilisé dans notre étude ainsi que les propriétés qu'il confère au schéma numérique. Nous proposerons des modifications de ce solveur de Riemann pour le traitement des écoulements à bas nombre de Mach. D'autres outils de discrétisation seront également évoqués.

Le traitement des effets de la gravité et les effets dissipatifs est classique et ne sera pas détaillé dans ce document.

## 6.1 Quelques rappels sur les solveurs de Riemann approchés

On considère le système (4.86) en 1D sans les termes dissipatifs. Il s'agit d'un système hyperbolique conservatif. En effet, l'équation d'advection sur $\alpha$ peut être mise sous la forme conservative en la combinant avec celle de la conservation de la masse. Cependant pour des raisons de précision du schéma numérique (préservation des discontinuités de contact en particulier), il convient de résoudre l'équation sur $\alpha$ sous la forme d'une équation d'advection non-conservative [Abg96].

Le but de cette section est de présenter le **schéma de type Godunov** utilisé pour résoudre le système (4.86). [Gal02] montre qu'il est possible d'établir une correspondance biunivoque entre solveurs simples eulériens et solveurs simples lagrangiens pour des systèmes physiques. En effet, les solutions des problèmes de Riemann lagrangiens et eulériens sont reliées par une transformation canonique entre les états intermédiaires des deux formes. Les conditions de positivité et d'entropie sont strictement identiques pour l'une ou l'autre forme. Cette équivalence permet de se concentrer essentiellement sur la formulation lagrangienne qui est toujours algébriquement plus simple. Nous appliquerons cette méthode de construction de solveurs simples entropiques pour des systèmes hyperboliques non-conservatifs mis au point dans [Gal02] à notre système.

### 6.1.1 Rappels sur les solveurs simples pour le cas conservatif

On introduit tout d'abord une notation. Pour tout couple $(X_g, X_d)$, on notera $\triangle X = X_d - X_g$. Considérons le système hyperbolique conservatif suivant :

$$\partial_t \underline{U} + \partial_x \underline{F}(\underline{U}) = 0, \tag{6.1}$$

avec $\underline{U}$ et $\underline{F}$ des vecteurs de $\mathbb{R}^N$. Habituellement, la première composante de $\underline{U}$ est la densité $\rho$ qui est positive. Le flux s'exprime sous la forme $\underline{F} = u\underline{U} + \underline{G}^0$ où $\underline{G}^0$ a sa première composante nulle et $u$ est la vitesse positive. Afin de résoudre numériquement (6.1), on introduit usuellement la notion de schéma de type Godunov. Soit $\underline{\mathbf{W}}(x/t, \underline{U}_g, \underline{U}_d)$ une approximation du problème de

Riemann suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \underline{U} + \partial_x \underline{F}(\underline{U}) = 0, \\ \\ \underline{U}(x, t=0) = \begin{cases} \underline{U}_g, \text{ si } x \leq 0, \\ \\ \underline{U}_d, \text{ si } x > 0. \end{cases} \end{cases}$$

On supposera que le système possède un couple entropie-flux $(s, q)$, ce qui signifie qu'il existe une fonction strictement convexe $s(\underline{U})$ et un flux d'entropie $\underline{q}(\underline{U})$ vérifiant la relation $\nabla q = \nabla s \nabla \underline{F}$. On dira qu'une solution $\underline{U}$ est entropique si elle vérifie au sens de distributions l'inégalité d'entropie suivante :

$$\partial_t s + \partial_x q \leq 0. \tag{6.2}$$

**Définition 1.** On dit que $\underline{\mathbf{W}}(x/t; \underline{U}_g, \underline{U}_d)$ est consistant avec la forme intégrale de la loi de conservation (6.1) si et seulement si l'égalité suivante est vérifiée pour $\tau$ suffisamment petit :

$$\int_{-\triangle x/2}^{\triangle x/2} \underline{\mathbf{W}}(x/\tau; \underline{U}_g, \underline{U}_d) dx = \frac{\triangle x}{2}(\underline{U}_g + \underline{U}_d) - \tau \triangle \underline{F}. \tag{6.3}$$

On dit que $\underline{\mathbf{W}}(x/t; \underline{U}_g, \underline{U}_d)$ est consistant avec la forme intégrale de l'inégalité d'entropie (6.2) si et seulement si l'inégalité suivante est vérifiée pour $\tau$ suffisamment petit :

$$\int_{-\triangle x/2}^{\triangle x/2} \underline{\mathbf{W}}(x/t, \underline{U}_g, \underline{U}_d) dx = \frac{\triangle x}{2}(s(\underline{U}_g) + s(\underline{U}_d)) - \tau \triangle q. \tag{6.4}$$

Etant donné un pas d'espace $\triangle x$, on considère une approximation $(\underline{U}_i^n)_{i,n}$ de (6.1) constante à chaque instant $t^n$ dans chaque intervalle $](i-1/2)\triangle x, (i+1/2)\triangle x]$. A l'aide du solveur de Riemann $\underline{\mathbf{W}}$, on peut alors construire la solution à l'instant $t^{n+1}$ en utilisant la relation suivante :

$$\underline{U}_i^{n+1} = \frac{1}{\triangle x}\left( \int_0^{\triangle x/2} \underline{\mathbf{W}}(x/\triangle t; \underline{U}_{i-1}^n, \underline{U}_i^n) dx + \int_{-\triangle x/2}^{0} \underline{\mathbf{W}}(x/\triangle t; \underline{U}_i^n, \underline{U}_{i+1}^n) dx \right), \tag{6.5}$$

et on sait que si $\underline{\mathbf{W}}$ est consistant avec la forme intégrale de la loi de conservation (6.1), alors le schéma (6.5) est conservatif, i.e., il existe un flux numérique $\underline{\mathbf{H}}$ tel que

$$\underline{U}_i^{n+1} = \underline{U}_i^n - \frac{\triangle t}{\triangle x}\left( \underline{\mathbf{H}}_{i+1/2} - \underline{\mathbf{H}}_{i-1/2} \right). \tag{6.6}$$

De même, si $\underline{\mathbf{W}}$ est consistant avec l'inégalité d'entropie, alors il existe un flux d'entropie numérique $\underline{\mathbf{Q}}$ tel que

$$s_i^{n+1} \leq s_i^n - \frac{\triangle t}{\triangle x}\left(\underline{\mathbf{Q}}_{i+1/2} - \underline{\mathbf{Q}}_{i-1/2}\right). \tag{6.7}$$

Ceci nous conduit à la définition suivante :

**Définition 2.** Si le solveur de Riemann $\underline{\mathbf{W}}$ est consistant avec la forme intégrale de la loi de conservation, alors le schéma (6.5) est appelé **schéma de type Godunov**. On dira alors que $\underline{\mathbf{W}}$ est un **solveur de type Godunov**.

Si le solveur de Riemann $\underline{\mathbf{W}}$ est de plus consistant avec l'inégalité d'entropie, alors le schéma (6.5) est appelé **schéma de type Godunov entropique**. On dira alors que $\underline{\mathbf{W}}$ est un **solveur de type Godunov entropique**.

Dans [Gal00] est introduite la notion de solveur de Riemann simple.

**Définition 3.** On dira que le solveur de Riemann $\underline{\mathbf{W}}$ est **simple** si et seulement si $\underline{\mathbf{W}}(x/t)$ a la structure de la solution d'un problème de Riemann linéaire ; i.e $\underline{\mathbf{W}}(x/t)$ est constitué de $(m+1)$ états constants $(\underline{\mathbf{W}}_k)_{k=1,m+1}$, séparés par des discontinuités, avec $\underline{\mathbf{W}}_1 = \underline{U}_g$ et $\underline{\mathbf{W}}_{m+1} = \underline{U}_d$. Il existe donc des réels $(\lambda_k)_{k=1,m}$ tels que :

$$\underline{\mathbf{W}}(x/t) = \begin{cases} \underline{U}_g \text{ si } x/t < \lambda_1, \\ \underline{U}_k \text{ si } \lambda_{k-1} \leq x/t < \lambda_k \text{ pour } k = 2, m, \\ \underline{U}_d \text{ si } \lambda_m \leq x/t. \end{cases} \tag{6.8}$$

Le solveur de Riemann simple est donc caractérisé par l'application :

$$(\underline{U}_g, \underline{U}_d) \to (\mathcal{W}, \lambda) = ((\underline{\mathbf{W}}_k)_{k=1,m+1}, (\lambda_k)_{k=1,m}). \tag{6.9}$$

On le notera alors simplement $(\mathcal{W}, \lambda)$.

**Remarque 2.** On remarquera que $m$ n'est pas nécessairement l'ordre du système.

**Remarque 3.** Les schémas de Roe, HLL, HLLC fournissent des exemples connus de solveurs simples [Tor97].

Le principal intérêt de cette notion est qu'il est extrêmement facile de caractériser un solveur simple. En effet, notons pour toute suite $(X_k)_k$, $\delta X_k = X_{k+1} - X_k$. On a le résultat suivant :

**Proposition 5** ([Gal00])**.** *Un solveur de Riemann simple est de type Godunov si et seulement si :*

$$\triangle \underline{F} = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \delta \underline{U}_k. \tag{6.10}$$

*Un solveur de Riemann simple est de type Godunov entropique si et seulement si :*

$$\triangle q \leq \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \delta s_k. \tag{6.11}$$

Dans ce cas, le flux est donné par :

$$\underline{\mathbf{H}}_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\underline{F}_i + \underline{F}_{i+1} - \sum_{k=1}^{m} |\lambda_k| \delta \underline{U}_k). \tag{6.12}$$

### 6.1.2 Rappels sur les solveurs simples pour le cas non-conservatif

On complète le système (6.1) par un terme non-conservatif. On obtient le système hyperbolique non-conservatif suivant :

$$\partial_t \underline{U} + \partial_x \underline{F}(\underline{U}) + \underline{\underline{P}}(\underline{U}) \partial_x \underline{B}(\underline{U}) = 0, \tag{6.13}$$

avec $\underline{B}$ un vecteur de $\mathbb{R}^N$ et $\underline{\underline{P}}$ une matrice $N \times N$.

Nous étendons maintenant la notion de solveur de Riemann simple aux systèmes non-conservatifs de la forme (6.13).

**Définition 4.** On dira que $\underline{\mathbf{W}}$ est de type Godunov pour le système (6.13) s'il est consistant, i.e. si et seulement si il existe une matrice $\underline{\underline{\mathcal{P}}}$ telle que $\underline{\underline{\mathcal{P}}}(\underline{U}, \underline{U}) = \underline{\underline{P}}$ et vérifiant la relation

$$\sum_{k=1}^{m} \lambda_k \delta \underline{U}_k = \triangle \underline{F} + \underline{\underline{\mathcal{P}}} \triangle \underline{B}. \tag{6.14}$$

Dans ce cas, le schéma numérique devient [Gal02] :

$$\underline{U}_i^{n+1} = \underline{U}_i^n - \frac{\triangle t}{\triangle x} \left( \underline{\mathbf{H}}_{i+1/2} - \underline{\mathbf{H}}_{i-1/2} \right) - \frac{\triangle t}{2 \triangle x} \big( (\underline{\underline{\mathcal{P}}} \triangle \underline{B})_{i-1/2} + (\underline{\underline{\mathcal{P}}} \triangle \underline{B})_{i+1/2} \big). \tag{6.15}$$

### 6.1.3 Liens entre solveurs eulériens et solveurs lagrangiens

Pour définir la forme lagrangienne du système (6.13), on définit les variables $\tau = t$, $m = \int \rho dx$ et les vecteurs :

$$\underline{n} = (1, 0, \ldots, 0)^t,\ \underline{U} = \rho\underline{n} + \underline{U}^0,\ \underline{V} = \upsilon\underline{n} + \underline{V}^0,\ \underline{G} = -u\underline{n} + \underline{G}^0. \tag{6.16}$$

La forme lagrangienne de (6.13) est alors la suivante :

$$\partial\tau\underline{V} + \partial_m\underline{G}(\underline{V}) + \underline{\underline{P}}(\underline{V})\partial_m\underline{B}(\underline{V}) = 0. \tag{6.17}$$

Considérons un schéma de type Godunov pour le système lagrangien (6.17) et supposons le associé à un solveur de Riemann simple $(\mathbf{V}, \Lambda)$ défini par les pentes $(\Lambda_k)_{k=1,m}$ et les états intermédiaires suivants :

$$\underline{\mathbf{W}}_{\mathbf{L}}(m/\tau) = \begin{cases} \underline{V}_g \text{ si } m/\tau < \Lambda_1, \\ \underline{V}_k \text{ si } \Lambda_{k-1} \leq m/\tau < \Lambda_k \text{ pour } k = 2, m, \\ \underline{V}_d \text{ si } \Lambda_m \leq m/\tau. \end{cases} \tag{6.18}$$

Puisque le schéma associé est de type Godunov, il existe $\underline{\underline{\mathcal{P}}}$ tel que l'on ait la relation suivante

$$\sum_{k=1}^{m} \Lambda_k \delta\underline{V}_k = \triangle\underline{F} + \underline{\underline{\mathcal{P}}}\triangle\underline{B}. \tag{6.19}$$

Rappelons ici que la première équation du système lagrangien a la forme suivante :

$$\partial_\tau\upsilon - \partial_m u = 0, \tag{6.20}$$

qui correspond à la conservation de la masse en coordonnées eulériennes :

$$\partial_t\rho + \partial_x\rho u = 0. \tag{6.21}$$

Ceci implique qu'au travers d'un choc de pente $\Lambda$, on a la relation de saut :

$$\triangle u + \Lambda\triangle\upsilon = 0. \tag{6.22}$$

Dans la suite on considérera des solveurs simples vérifiant l'analogue discret de (6.20) au travers de chaque changement d'état, i.e., on supposera que :

$$\delta u_k + \Lambda_k\delta\upsilon_k = 0 \text{ pour } k = 1, m. \tag{6.23}$$

Cette hypothèse est naturelle car l'équation (6.20) est linéaire. Soient $(a, b)$ un couple de réels conjugués, i.e., vérifiant, $a+b = 1$, ainsi qu'une suite $(X_k)_k$. On notera alors : $X_{a,k} = aX_k + bX_{k+1}$. Soient enfin deux couples $(X_g, X_d)$ et $(Y_g, Y_d)$ ; alors, on a l'identité :

$$\triangle(XY) = X_a \triangle Y + Y_b \triangle X. \tag{6.24}$$

En utilisant la notation précédente, on note que si (6.23) est vérifié, on a alors pour tout $a$ et tout $k$ :

$$u_{a,k} + \Lambda_k v_{a,k} = u_k + \Lambda_k v_k = u_{k+1} + \Lambda_k v_{k+1}. \tag{6.25}$$

On notera dans ce cas :

$$\lambda_k = u_{a,k} + \Lambda_k v_{a,k}. \tag{6.26}$$

On remarque en outre que si les quantités $(v_k)_k$ sont positives, alors la suite $(\lambda_k)_k$ est croissante. Ceci nous amènera à considérer par la suite l'hypothèse suivante :

$$v_k \geq 0 \text{ pour } k = 1, m. \tag{6.27}$$

On construit pour le système eulérien (6.13) le solveur de Riemann suivant $(\mathbf{U}, \lambda)$ défini par les pentes $(\lambda_k)_{k=1,m}$ et les états intermédiaires ci-dessous :

$$\underline{\mathbf{W}}_{\mathbf{E}}(x/t) = \begin{cases} \underline{U}_g \text{ si } x/t < \lambda_1, \\ \underline{U}_k = \underline{U}(\underline{V}_k) \text{ si } \lambda_{k-1} \leq x/t < \lambda_k \text{ pour } k = 2, m, \\ \underline{U}_d \text{ si } \lambda_m \leq x/t. \end{cases} \tag{6.28}$$

On a alors le résultat suivant :

**Proposition 6** ([Gal02])**.** *Supposons (6.23) et (6.27) vérifiées. Le solveur de Riemann simple lagrangien $(\boldsymbol{V}, \Lambda)$ (6.18) induit un schéma de type Godunov si et seulement si le solveur de Riemann eulérien $(\boldsymbol{U}, \lambda)$ (6.28) induit un schéma de type Godunov. Dans ce cas, les pentes eulériennes $(\lambda_k)_{k=1,m}$ s'expriment à partir des pentes lagrangiennes $(\Lambda_k)_{k=1,m}$ par la relation (6.26). Les états intermédiaires eulériens sont définis en fonction des états intermédiaires lagrangiens par $\underline{U}_k = U(\underline{V}_k)$, $k = 1, m$.*

**Proposition 7** ([Gal02])**.** *Supposons (6.23) et (6.27) vérifiées. Le solveur de Riemann simple lagrangien (6.18) est positif si et seulement si le solveur de Riemann simple eulérien (6.28) est positif.*

En outre, on a le résultat suivant permettant de construire facilement des schémas entropiques en coordonnées eulériennes :

**Proposition 8** ([Gal02])**.** *Supposons (6.23) et (6.27) vérifiées. Le solveur de Riemann simple lagrangien (6.18) est entropique si et seulement si le solveur de Riemann simple eulérien (6.28) est entropique.*

La **condition CFL** associée au système (6.15) pour le système non-conservatif est

$$\triangle t \leq CFL \max_i \left( \frac{\triangle x}{2 \max_k \lambda_{k,i+1/2}} \right), \tag{6.29}$$

où $CFL \in [0,1]$.

## 6.2 Construction via les états intermédiaires d'un solveur lagrangien-eulérien pour le système diphasique

A partir du système (4.86), on obtient un système équivalent, en substituant par commodité l'équation en $\alpha_l \rho_l$ par l'équation sur $\rho$ pour faciliter le passage en Lagrange. On a donc le système eulérien suivant

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \\ \dfrac{\partial \alpha_g \rho_g c_{g,1}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g c_{g,1} u) = 0, \\ \cdots \\ \dfrac{\partial \alpha_g \rho_g c_{g,n_e}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g c_{g,n_e} u) = 0, \\ \dfrac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u^2 + P) = 0, \\ \dfrac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P) u) = 0, \\ \dfrac{\partial \alpha}{\partial t} + u \cdot \nabla \alpha = 0, \end{cases}$$

avec $\alpha = \alpha_g$. Il peut se réécrire sous la forme générale

$$\partial_t \underline{U} + \partial_x \underline{F}(\underline{U}) + \underline{\underline{P}}(\underline{U})\partial_x \underline{B}(\underline{U}) = 0, \tag{6.30}$$

avec

$$\begin{aligned}
&\underline{U^0} = (0, \alpha_g\rho_g c_{g,1}, \cdots, \alpha_g\rho_g c_{g,n_e}, \rho u, \rho E, \alpha)^t \\
&\underline{U} = \rho\underline{n} + \underline{U^0}, \\
&\underline{F}(\underline{U}) = u\underline{U} + \underline{G^0}(\underline{U}), \\
&\underline{G^0}(\underline{U}) = (0, \cdots, 0, P, Pu, -u\alpha)^t, \\
&\underline{\underline{P}} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & & \vdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -u \end{pmatrix}, \\
&\underline{B}(\underline{U}) = (0, \cdots, 0, \alpha)^t.
\end{aligned}$$

L'équation eulérienne $\partial_t\alpha + u\partial_x\alpha = 0$ s'écrit en Lagrange $\partial_\tau(\upsilon\alpha) - \partial_m(u\alpha) + u\partial_m\alpha = 0$ Le système (4.57) sous la forme lagrangienne s'écrit

$$\partial_\tau \underline{V} + \partial_m \underline{G}(\underline{V}) + \underline{\underline{P}}(\underline{V})\partial_m \underline{B}(\underline{V}) = 0, \tag{6.31}$$

avec

$$\underline{V^0} = \upsilon\underline{U^0}, \tag{6.32}$$

$$\underline{V} = \upsilon\underline{n} + \underline{V^0} = (\upsilon, y_g c_{g,1}, \cdots, y_g c_{g,n_e}, u, E, \upsilon\alpha)^t, \tag{6.33}$$

$$\underline{G}(\underline{V}) = -u\underline{n} + \underline{G^0}(\underline{V}). \tag{6.34}$$

### 6.2.1 Construction d'un solveur de Godunov pour le modèle diphasique

Le système lagrangien (6.31) possède trois valeurs propres $\pm\mathcal{C}, 0$ et la solution du problème de Riemann exact possède quatre états. Par analogie avec le solveur obtenu pour la dynamique des gaz dans [Gal02], le solveur simple de Riemann que nous proposons pour (6.31) est alors défini ci-dessous

$$\underline{\mathbf{W_L}}(m/\tau, \underline{V_g}, \underline{V_d}) = \begin{cases} \underline{V_g}, & \text{si } m/\tau < -\mathcal{C}_-, \\ \underline{V_g^*} = \underline{V_g} + \phi_-\underline{\mathbf{R}}_-, & \text{si } -\mathcal{C}_- \leq m/\tau < 0 \\ \underline{V_d^*} = \underline{V_d} - \phi_+\underline{\mathbf{R}}_+, & \text{si } 0 \leq m/\tau < \mathcal{C}_+ \\ \underline{V_d}, & \text{si } \mathcal{C}_+ \leq m/\tau, \end{cases} \tag{6.35}$$

où $\underline{\mathbf{R}}_\pm = (-1, 0, \ldots, 0, \pm\mathcal{C}_\pm, P_b \pm u_a\mathcal{C}_\pm, -\alpha^\pm)^t$ avec $\alpha^- = \alpha_g$ et $\alpha^+ = \alpha_d$, $\phi_\pm = \dfrac{\triangle P \pm \mathcal{C}_\mp \triangle u}{\mathcal{C}_-\mathcal{C}_- + (\mathcal{C}_\pm)^2}$ et $a = \dfrac{\mathcal{C}_-}{\mathcal{C}_- + \mathcal{C}_+}$.

La notation $x_a$ désigne la moyenne introduite précédemment $x_a = ax_g + bx_d$ pour un couple $(x_g, x_d)$, avec $b$ le conjugué de $a$, i.e., $b = 1 - a$. Les états intermédiaires lagrangiens sont définis grâce à (6.35) en fonction des vitesses des ondes $\mathcal{C}_+$ et $\mathcal{C}_-$. Il est a noter que l'on a fait le choix naturel $\alpha_g = \alpha_g^*$ et $\alpha_d = \alpha_d^*$.

**Proposition 9.** *On a alors le résultat suivant : le solveur de simple de Riemann (6.35) est de Godunov.*

Pour montrer que le solveur simple de Riemann (6.35) est de Godunov, il suffit de montrer qu'il existe la matrice $\underline{\underline{\mathcal{P}}}$ telle que $\sum_{k=1}^m \Lambda_k \delta \underline{V}_k = \triangle \underline{G} + \underline{\underline{\mathcal{P}}} \triangle \underline{B}$ (voir relation (6.19)).

Il suffit de vérifier que l'on a l'égalité pour la dernière ligne de la relation vectorielle précédente. En effet, pour les autres lignes le calcul est identique au cas de la dynamique des gaz classique. Posons $\Upsilon = \sum_k \Lambda_k \delta(\alpha\upsilon)_k$

$$\begin{aligned}\Upsilon &= -\mathcal{C}_-((\alpha\upsilon)_g^* - (\alpha\upsilon)_g) + \mathcal{C}_+((\alpha\upsilon)_d - (\alpha\upsilon)_d^*) \\ &= -\mathcal{C}_-\alpha_g(\upsilon_g^* - \upsilon_g) + \mathcal{C}_+\alpha_d(\upsilon_d - \upsilon_d^*)\end{aligned}$$

En utilisant la relation (6.23), rappelée ici

$$\delta u_k + \Lambda_k \delta \upsilon_k = 0 \text{ pour } k = 1, m,$$

on a

$$\Upsilon = -\alpha_g \delta u_g - \alpha_d \delta u_d^*.$$

Or dans le solveur (6.35) les deux états intermédiaires ont la même vitesse $u^*$ telle que

$$u^* = u_g^* = u_d^* = \frac{\mathcal{C}_- u_g + \mathcal{C}_+ u_d - \triangle P}{\mathcal{C}_- + \mathcal{C}_+}, \tag{6.36}$$

d'où

$$\Upsilon = -\alpha_g(u^* - u_g) - \alpha_d(u_d - u^*) \tag{6.37}$$

$$= -\triangle(\alpha u) + u^* \triangle \alpha. \tag{6.38}$$

L'expression de $\Upsilon$ est donc compatible avec la relation (6.19). Dans notre cas, on peut donc identifier la matrice $\underline{\underline{\mathcal{P}}}$ en posant

$$\underline{\underline{\mathcal{P}}} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & & \vdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & u^* \end{pmatrix}.$$

Le solveur de Riemann simple lagrangien (6.35) est de type Godunov. On a (6.23) et en supposant que l'on a (6.27), on utilise les relations (6.26) et la tranformation $\underline{U} = U(\underline{V})$ pour définir le solveur de Godunov eulérien associé.

Tout calcul fait, sous les hypothèses (6.23) et (6.27), on obtient le schéma d'advection eulérien suivant pour la fraction volumique

$$\alpha_i^{n+1} = \alpha_i^n - \frac{\triangle t}{\triangle x}\left[(u^*)^-_{i+1/2}(\alpha_{i+1}^n - \alpha_i^n) + (u^*)^+_{i-1/2}(\alpha_i^n - \alpha_{i-1}^n)\right], \qquad (6.39)$$

où $(u)^\pm = \dfrac{u \pm |u|}{2}$.

**Proposition 10.** *Le schéma préserve les discontinuités de contact (i.e. problème de Riemann où la pression $P$ et la vitesse $u$ sont constants et $\rho$ est discontinue).*

### 6.2.2 Conditions de positivité et d'entropie du solveur de Riemann (6.35)

**Proposition 11.** *Le solveur de Riemann (6.35) induit un schéma de type Godunov qui sera positif, i.e. $\mathcal{C}_+$ et $\mathcal{C}_-$ sont suffisamment grands.*

Il faut déterminer la borne minimale de sorte que les états intermédiaires du solveur de Riemann lagrangien (6.35) soient positifs (i.e. $v^*_{g,d} > 0$ et $\varepsilon^*_{g,d>0}$). On pose $r = \dfrac{\mathcal{C}_+}{\mathcal{C}_-}$ donc $a = \dfrac{\mathcal{C}_-}{\mathcal{C}_- + \mathcal{C}_+} = \dfrac{1}{1+r}$.

Comme pour premières contraintes minimales sur $\mathcal{C}_+$ et $\mathcal{C}_-$, on demande $\mathcal{C}_+ \geq (\rho a)_d$ et $\mathcal{C}_- \geq (\rho a)_g$. C'est à dire qu'elles soient supérieures aux vitesses du son lagrangiennes locales de par et d'autre de l'interface.

**Proposition 12.** *Pour $r$ fixé, on a les conditions de positivité exactes suivantes*

- $v_g^* \geq 0$ *si* $\boldsymbol{d}_g \leq 0$, *ou bien si* $\boldsymbol{d}_g > 0$ *et* $\mathcal{C}_- \geq \dfrac{-r\triangle u + \sqrt{\boldsymbol{d}_g}}{2(1+r)v_g}$,

- $v_d^* \geq 0$ *si* $\boldsymbol{d}_d \leq 0$, *ou bien si* $\boldsymbol{d}_d > 0$ *et* $\mathcal{C}_- \geq \dfrac{-\triangle u + \sqrt{\boldsymbol{d}_d}}{2r(1+r)v_d}$,

- $\varepsilon_g^* \geq 0$ *si* $\boldsymbol{D}_g \leq 0$, *ou bien si* $\boldsymbol{D}_g > 0$ *et* $\mathcal{C}_- \geq \dfrac{r\triangle u(\triangle P + \Pi_g) + \sqrt{\boldsymbol{D}_g}}{4(1+r)^2\varepsilon_g + 2r^2(\triangle u)^2}$,

- $\varepsilon_d^* \geq 0$ *si* $\boldsymbol{D}_d \leq 0$, *ou bien si* $\boldsymbol{D}_d > 0$ *et* $\mathcal{C}_- \geq \dfrac{\triangle u(\Pi_d - r\triangle P) + \sqrt{\boldsymbol{D}_d}}{4r(1+r)^2\varepsilon_d + 2r(\triangle u)^2}$,

*où*

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{d}_g &= r^2(\triangle u)^2 + 4v_g(1+r)\triangle P,\\
\boldsymbol{d}_d &= (\triangle u)^2 - 4rv_g(1+r)\triangle P,\\
\Pi_g &= 2(rP_g + P_d) - \triangle P,\\
\Pi_d &= 2(rP_g + P_d) + r\triangle P,\\
\boldsymbol{D}_g &= r^2(\triangle u)^2(\triangle P + \Pi_g)^2 - 4\Pi_g\triangle P\Big(2(1+r)^2\varepsilon_g + r^2(\triangle u)^2\Big),\\
\boldsymbol{D}_d &= (\triangle u)^2(r\triangle P - \Pi_d)^2 + 4\Pi_d\triangle P\Big(2r(1+r)^2\varepsilon_d + r(\triangle u)^2\Big).
\end{aligned}
$$

*On prendra* $\mathcal{C}_-$ *supérieur à toutes ces contraintes pour assurer que le solveur (6.35) soit positif.*

*Démonstration.* En utilisant la définition de l'état intermédiaire $\underline{V}_g^*$ donné par (6.35), on obtient

$$\mathcal{C}_-^2 v_g^* = \mathcal{C}_-^2 v_g + (r\mathcal{C}_-\triangle u - \triangle P)/(1+r). \tag{6.40}$$

On a donc un polynôme du second degré en $\mathcal{C}_-$ dont il faut étudier le signe. On cherche donc la racine positive ($\mathcal{C}_- > 0$) de ce polynôme si son discriminant $\mathbf{d}_g$ est positif. On en déduit que pour tout $\mathcal{C}_-$ supérieur à cette racine positive que $\mathcal{C}_-^2 v_g^*$ est positif donc que $v_g^*$ positif. Si par contre $\mathbf{d}_g$ est négatif ou nul, alors $\mathcal{C}_-^2 v_g^*$ est du signe de $\mathcal{C}_-^2 v_g$ et $v_g^*$ est positif.

De même à partir de (6.35),on a :

$$E_g^* = E_g + \frac{\triangle P - r\mathcal{C}_-\triangle u}{\mathcal{C}_-^2(1+r)}(P_b - u_a\mathcal{C}_-), \tag{6.41}$$

$$u^* = u_g - \frac{\triangle P - r\mathcal{C}_-\triangle u}{\mathcal{C}_-(1+r)}. \tag{6.42}$$

Or $\varepsilon_g^* = E_g^* - \frac{1}{2}u^{*2}$, après calculs, on aboutit à

$$\mathcal{C}_-^2 \varepsilon_g^* = \mathcal{C}_-^2 \varepsilon_g + \frac{1}{2(1+r)^2}(r\mathcal{C}_- \triangle u - \triangle P)(r\mathcal{C}_- \triangle u - \Pi_g). \tag{6.43}$$

On mène une analyse de signe du polynôme du second degré en $\mathcal{C}_-$ similaire à celle effectuée précédemment pour $\mathcal{C}_-^2 v_g^*$.

Pour l'état intermédiaire du coté droit, on obtient les polynômes du second degré en $\mathcal{C}_-$,

$$r\mathcal{C}_-^2 v_d^* = r\mathcal{C}_-^2 v_d + (\mathcal{C}_- \triangle u + \triangle P)/(1+r), \tag{6.44}$$

$$r\mathcal{C}_-^2 \varepsilon_d^* = r\mathcal{C}_-^2 \varepsilon_d + \frac{1}{2(1+r)^2}(\mathcal{C}_- \triangle u + \triangle P)(r\mathcal{C}_- \triangle u - \Pi_d). \tag{6.45}$$

On en déduit les conditions de positivité énoncées dans la proposition. □

On détermine également les conditions sur $\mathcal{C}_-$ pour que les états intermédiaires restent dans le domaine d'hyperbolicité

$$\mathbf{D}_{\rho,a} = \{\underline{V}, \text{ tel que } \rho > 0, y_k > 0, z \in [0,1], P + P_{\infty,eq} > 0\}.$$

**Proposition 13.** *Pour $r$ fixé, on a les conditions exactes suivantes afin que les états intermédiaires appartiennent au domaine $\boldsymbol{D}_{\rho,a}$ pour la loi de mélange (4.68) :*

- $(P + P_{\infty,eq})_g^* \geq 0$ *si* $\mathcal{D}_g \leq 0$, *ou bien si* $\mathcal{D}_g > 0$

  *et* $\mathcal{C}_- \geq \dfrac{r\triangle u\Big(\triangle P + \Pi_g + 2r(1+r)P_{\infty,eq,g}\Big) + \sqrt{\mathcal{D}_g}}{4(1+r)^2\Theta_g + 2r^2(\triangle u)^2}$,

- $(P + P_{\infty,eq})_d^* \geq 0$ *si* $\mathcal{D}_d \leq 0$, *ou bien si* $\mathcal{D}_d > 0$

  *et* $\mathcal{C}_- \geq \dfrac{\triangle u\Big(\Pi_d - r\triangle P + 2(1+r)P_{\infty,eq,d}\Big) + \sqrt{\mathcal{D}_d}}{4r(1+r)^2\Theta_d + 2r(\triangle u)^2}$,

*où*

$$
\begin{aligned}
\Theta_g &= \varepsilon_g - \varepsilon_{\infty,g} - \gamma_{\infty,g} P_{\infty,eq,g} \upsilon_g, \\
\Theta_d &= \varepsilon_d - \varepsilon_{\infty,d} - \gamma_{\infty,d} P_{\infty,eq,d} \upsilon_d, \\
\Pi_g &= 2(rP_g + P_d) - \triangle P, \\
\Pi_d &= 2(rP_g + P_d) + r\triangle P, \\
\mathcal{D}_g &= r^2(\triangle u)^2 \Big( \triangle P + \Pi_g + 2r(1+r) P_{\infty,eq,g} \Big)^2 \\
&\quad - 4\Pi_g \triangle P \Big( \Pi_g + 2(1+r) P_{\infty,eq,g} \Big) \Big( 2(1+r)^2 \Theta_g + r^2 (\triangle u)^2 \Big), \\
\mathcal{D}_d &= (\triangle u)^2 \Big( r\triangle P - \Pi_d - 2(1+r) P_{\infty,eq,d} \Big)^2 \\
&\quad + 4\triangle P \Big( \Pi_d + 2(1+r) P_{\infty,eq,d} \Big) \Big( 2r(1+r)^2 \Theta_d + r(\triangle u)^2 \Big).
\end{aligned}
$$

*Démonstration.* La loi de mélange (4.68)

$$P = (\gamma_{\infty,eq} - 1)(\rho\varepsilon - \rho\varepsilon_{\infty,eq}) - \gamma_{\infty,eq} P_{\infty,eq},$$

implique

$$
\begin{aligned}
(P + P_{\infty,eq})\upsilon &= (\gamma_{\infty,eq} - 1) \Big( \varepsilon - \varepsilon_{\infty,eq} - \gamma_{\infty,eq} P_{\infty,eq} \upsilon \Big) && (6.46) \\
&= (\gamma_{\infty,eq} - 1)\Theta. && (6.47)
\end{aligned}
$$

On a de plus par construction du solveur que $\alpha_g = \alpha_g^*$ et $y_{k,g} = y_{k,g}^*$, $k = g, l$. On en déduit que $\gamma_{\infty,eq,g} = \gamma_{\infty,eq,g}^*$, $P_{\infty,eq,g} = P_{\infty,eq,g}^*$ et $\varepsilon_{\infty,eq,g} = \varepsilon_{\infty,eq,g}^*$. Alors chercher la condition sur $\mathcal{C}_-$ pour que $(P + P_{\infty,eq})_g^*$ soit positif revient à chercher la condition pour que $\Theta_g^*$ soit positif. A partir de (6.43) et (6.40), on a

$$
\begin{aligned}
\mathcal{C}_-^2 \Theta_g^* &= \mathcal{C}_-^2 \Theta_g + \frac{1}{2(1+r)^2} (r\mathcal{C}_- \triangle u - \triangle P)(r\mathcal{C}_- \triangle u - \Pi_g) \\
&\quad - \frac{(r\mathcal{C}_- \triangle u - \triangle P) P_{\infty,eq,g}}{1+r}. \qquad (6.48)
\end{aligned}
$$

L'étude de signe du polynôme du second degré en $\mathcal{C}_-$ donne les conditions données dans la proposition. Le calcul est similaire pour le coté droit. □

**Proposition 14.** *Soit s une entropie du système (6.31). Supposons que r est fixé et positif. Alors, pour $\mathcal{C}_+$ et $\mathcal{C}_-$ suffisamment grands, le solveur (6.35) est un solveur de type Godunov entropique.*

*Démonstration.* Afin de montrer que le solveur (6.35) est un solveur de type Godunov entropique, il suffit de vérifier que l'on a $s_g^* \leq s_g$ et $s_d^* \leq s_d$ pour $\mathcal{C}_+$ et $\mathcal{C}_-$ suffisamment grands. La démonstration s'appuie sur la relation thermodynamique introduite dans le chapitre précédent

$$Tds = d\varepsilon + Pd\upsilon + ldy + gd\alpha. \tag{6.49}$$

Dans cette égalité, $s$ est une entropie physique concave (l'entropie mathématique est l'opposée de l'entropie physique).

Entre les états intermédiaires, $\underline{V}_g$ et $\underline{V}_g^*$ (ainsi qu'entre $\underline{V}_d$ et $\underline{V}_d^*$), on a $y$ et $\alpha$ constants donc $dy = 0$ et $d\alpha = 0$.

Pour simplifier la démonstration, on supposera que $\mathcal{C}_- = \mathcal{C}_+ = \mathcal{C}$. On a alors d'après (6.35)

$$\upsilon_g^* = \upsilon_g + \frac{\mathcal{C}\triangle u - \triangle P}{2\mathcal{C}^2}, \tag{6.50}$$

$$\varepsilon_g^* = \varepsilon_g + \frac{1}{8\mathcal{C}^2}(\mathcal{C}\triangle u - \triangle P)(\mathcal{C}\triangle u - \Pi_g), \tag{6.51}$$

où $\Pi_g = P_d + 3P_g$. On en tire

$$\lim_{\mathcal{C}\to+\infty} \upsilon_g^* = \upsilon_g, \tag{6.52}$$

$$\lim_{\mathcal{C}\to+\infty} \varepsilon_g^* = \varepsilon_g + \frac{(\triangle u)^2}{8}. \tag{6.53}$$

Si $\triangle u \neq 0$, en utilisant (6.49), on voit de suite que pour $\mathcal{C}$ assez grand $s_g^* \geq s_g$.

Supposons maintenant que $\triangle u = 0$. Alors, on a

$$\upsilon_g^* = \upsilon_g - \frac{\triangle P}{2\mathcal{C}^2}, \tag{6.54}$$

$$\varepsilon_g^* = \varepsilon_g - \frac{\Pi_g \triangle P}{8\mathcal{C}^2}. \tag{6.55}$$

On définit le petit paramètre $\mu = \dfrac{1}{2\mathcal{C}^2}$, ce qui permet de définir les fonctions

$$\upsilon_g^*(\mu) = \upsilon_g - \mu\triangle P,\ \varepsilon_g^*(\mu) = \varepsilon_g + \mu\frac{\Pi_g\triangle P}{4}. \tag{6.56}$$

On considère alors la fonction $f$ définie par $f(\mu) = s(\upsilon_g^*(\mu), \varepsilon_g^*(\mu))$, et on a en utilisant (6.49)

$$f'(\mu) = -\frac{\partial s}{\partial \upsilon}\triangle P + \frac{\partial s}{\partial \varepsilon}\frac{\Pi_g\triangle P}{4}, \tag{6.57}$$

$$= \frac{p}{T}\triangle P + \frac{1}{T}\frac{\Pi_g\triangle P}{4}, \tag{6.58}$$

où $p = P(\upsilon_g^*(\mu), \varepsilon_g^*(\mu))$.

En remarquant que $\Pi_g = \triangle P + 4P_g$, on a finalement

$$f'(\mu) = \frac{(\triangle P)^2}{4T} + \frac{\triangle P}{T}(P_g - p). \tag{6.59}$$

Il y a alors deux cas. Pour le premier cas, on suppose que $\triangle P = 0$, et on a alors trivialement $s_g^* = s_g$. Pour le second, on suppose que $\triangle P \neq 0$, et on voit facilement que pour $\mu$ assez petit $p$ tend vers $P_g$, et donc $f'(0)$ sera strictement positif. On en conclut que $s_g^* > s_g$. □

### 6.2.3 Choix du coefficient $r = \dfrac{\mathcal{C}^+}{\mathcal{C}^-}$

Nous avons défini les contraintes de positivité des états intermédiaires à $r$ fixé. Ceci assure que si $\underline{V}_g$ et $\underline{V}_d$ sont positifs et si $\mathcal{C}_-$ respecte ces contraintes alors les états intermediaires seront positifs.

Du fait de la convexité du domaine

$$\mathbf{D}_{\rho,\varepsilon} = \{\underline{U},\ \text{tel que } y_k > 0, \alpha \in [0,1], \rho > 0, \varepsilon > 0\}$$

(voir chapitre précédent), le schéma (6.15) garantit la positivité de la solution au temps $n+1$ si la solution au temps $n$ est positive (i.e. $\upsilon_i > 0$, $\varepsilon_i > 0$, $\forall i$) et si les contraintes de posivité pour les $\mathcal{C}_{-,i+1/2}$ sont respectées pour tout $i$ (le pas de temps étant donné par (6.29)).

Pour éviter de trop pénaliser le pas de temps $\triangle t$, il est judicieux de prendre pour chaque interface $i+1/2$

$$r_{i+1/2} = \frac{(\rho\ a_{eq})_{i+1}}{(\rho\ a_{eq})_i}. \tag{6.60}$$

## 6.3 Second ordre en espace et en temps

Le schéma (6.15) est d'ordre 1 en temps et en espace. Il entraîne naturellement de la diffusion numérique, notamment à l'interface entre les deux phases. Pour améliorer la précision numérique, il est alors nécessaire d'utiliser un schéma explicite d'ordre deux en temps et en espace.

**Second ordre en espace**

La méthode choisie ici consiste à utiliser le limiteur de pente MUSCL (Monotone Ustream-centered Schemed for Conservation Laws). Il permet

par des reconstructions de limiter l'écart de valeur d'une même variable entre deux cellules voisines.

Le limiteur de pente est appliqué sur les variables $(\rho_g\alpha_g, \rho_l\alpha_l, u, P, z)$ [ACK02]. Il est possible de retrouver les autres variables à partir de celles-ci.

Pour une variable $a$, on définit deux états $a_{g,i+1/2}$ et $a_{d,i+1/2}$ à chaque interface $i+1/2$ par

$$a_{d,i+1/2} = a_{i+1} - \frac{1}{2} minmod\big(a_{i+2} - a_{i+1}, a_{i+1} - a_i\big), \tag{6.61}$$

$$a_{g,i+1/2} = a_i - \frac{1}{2} minmod\big(a_{i+1} - a_i, a_i - a_{i-1}\big), \tag{6.62}$$

avec

$$minmod(x,y) = signe(x) \max\left\{0, \min\left[|x|, y\ signe(x)\right]\right\}. \tag{6.63}$$

On utilise les variables conservatives issue de la reconstruction pour évaluer le flux à l'interface $i+1/2$.

**Second ordre en temps**

Pour améliorer la précision en temps, on adopte une discrétisation temporelle soit de type Runge-Kutta [ACK02, GM03, Mur03], soit de type Prédicteur-Correcteur [Bra07, Pé03].

## 6.4 Corrections du solveur de Riemann pour traiter les écoulements à bas nombre de Mach

Considérons le système (4.57) sans les termes dissipatifs avec une phase gazeuse mono-espèce, ici rappelé

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \alpha}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \alpha = 0, \\ \dfrac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}) = 0, \\ \dfrac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) + \nabla P = 0, \\ \dfrac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + P)\vec{u}) = 0. \end{cases} \tag{6.64}$$

En choisissant les échelles de références suivantes

$$\rho_{ref} = max(\rho_g^0, \rho_l^0),\ u_{ref} = max(|u^0|),\ P_{ref} = \rho_{ref}(c_{ref})^2 \max(c^0)^2, \quad (6.65)$$

et une échelle de longueur $l_{ref}$ et de temps $t_{ref}$, [Pé03, Mur03, GM03] montrent que les solutions du modèle (4.6), avec chacune des phases régie par une loi d'état Mie-Gruneisen, convergent faiblement vers les solutions du modèle incompressible suivant quand le nombre de Mach tend vers zero

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \alpha}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \alpha = 0, \\ \rho_g = Cte, \\ \rho_l = Cte, \\ \dfrac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \otimes \vec{u}) + \dfrac{1}{\rho(\alpha)} \nabla P = 0, \\ \nabla \cdot \vec{u} = 0, \end{cases} \quad (6.66)$$

Ce modèle limite à été obtenu en effectuant un développement de toutes les inconnues selon les puissances du nombre de Mach de référence $\mathbf{Ma}_{ref}$. Dans ce modèle la densité $\rho(\alpha)$ dépend uniquement de la fraction volumique qui elle même est simplement advectée par le champ de vitesse $\vec{u}$. Lors de l'analyse asymptotique, on obtient également que les fluctuations de la pression à l'ordre 0 et 1 du Mach sont constantes en espace. On a donc le développement suivant pour la pression

$$P(\vec{x}, t) = P^0(t) + \mathbf{Ma}_{ref}^2 P^2(\vec{x}, t). \quad (6.67)$$

Le système limite (6.66) s'apparente aux équations d'Euler incompressible mono-phasique. En d'autres termes, les solutions du modèle compressible tendent vers les solutions du modèle incompressible.

Cependant, comme l'ont montré [Tur93, Mur03, Rie11, Rie08], les expériences numériques effectuées avec des schémas élaborés pour des écoulements compressibles ne procurent pas une approximation précise des solutions du modèle incompressible. Une analyse asymptotique (décomposition des variables primitives en puissances de Mach) du schéma numérique montre que le problème provient d'une imprécision sur le champ de pression [ST86, Mur03, Rie08, Del10]. En effet pour un champ de pression avec des fluctuations initiales de l'ordre du nombre de Mach au carré, le schéma numérique fait apparaître

des fluctuations acoustiques de pression de l'ordre du nombre de Mach. Ceci a une influence directe sur le comportement de la solution des équations du modèle compressible discret.

Des méthodes ont été élaborées afin de corriger ces erreurs de précisions. Les techniques de préconditionnement [Tur87, Tur93, TFVL94, GV99] ont été adaptées pour le traitement des écoulements diphasiques [Mur03, Bra07]. Nous proposons dans notre étude des corrections du solveur de Riemann décrit dans ce chapitre. Ces corrections sont inspirées de corrections proposées dans le cas des équations d'Euler mono-phasique résolues avec le solveur de Roe. Le but est d'adapter cette correction , tout en recherchant la simplicité de mise en oeuvre informatique et un surcoût de temps de calcul minimal.

### 6.4.1 Correction Low-Mach proposée par Rieper [Rie11]

Dans [Rie11], Rieper identifie pour le solveur de Roe le terme responsable du manque de précision en régime Low-Mach pour les équations d'Euler mono-phasique. Les équations d'Euler mono-phasique en 2D sont données par

$$\frac{\partial \underline{Q}}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{\mathcal{F}}(\underline{Q}) = 0, \tag{6.68}$$

$$\underline{\mathcal{F}}(\underline{Q}) = \begin{pmatrix} \underline{f}(\underline{Q}) \\ \underline{g}(\underline{Q}) \end{pmatrix}, \tag{6.69}$$

où les vecteurs $\underline{Q}$, $\underline{f}$ et $\underline{g}$ sont donnés par

$$\underline{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \ \underline{f} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ u(\rho E + P) \end{pmatrix}, \ \underline{g} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ v(\rho E + P) \end{pmatrix}. \tag{6.70}$$

Le flux numérique associé au schéma de Roe pour le système (6.68), à travers une face de normale $\vec{n} = (n_x, n_y)^t$, s'écrit

$$\begin{aligned} \underline{\Phi}_{Roe}(\underline{Q}_g, \underline{Q}_d, \vec{n}) = & \frac{1}{2}\left(\underline{\mathcal{F}}(\underline{Q}_g) + \underline{\mathcal{F}}(\underline{Q}_d)\right) \cdot \vec{n} \\ & + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{4} |\lambda_k(\underline{Q}_{gd})| \underline{r}_k(\underline{Q}_{gd}) \triangle\omega_k(\underline{Q}_{gd}). \end{aligned} \tag{6.71}$$

La notation $\varphi_{gd}$ renvoie à la moyenne de Roe des inconnues $\varphi_g$ et $\varphi_d$. On note également $u_n = (u, v) \cdot \vec{n}$ et $u_\tau = (u, v) \cdot \vec{\tau}$ avec $\vec{\tau}$ le vecteur tangent à la

face. Les quatres vecteurs $\underline{r}_k$ propres s'expriment par

$$\underline{r}_1(\underline{Q}_{gd}) = \begin{pmatrix} 1 \\ u_{gd} - a_{gd}n_x \\ v_{gd} - a_{gd}n_y \\ H_{gd} - a_{gd}u_{n,gd} \end{pmatrix}, \ \underline{r}_2(\underline{Q}_{gd}) = \begin{pmatrix} 1 \\ u_{gd} \\ v_{gd} \\ \frac{1}{2}(u_{gd}^2 + v_{gd}^2) \end{pmatrix},$$

$$\underline{r}_3(\underline{Q}_{gd}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -n_y \\ n_x \\ u_{\tau,gd} \end{pmatrix}, \ \underline{r}_4(\underline{Q}_{gd}) = \begin{pmatrix} 1 \\ u_{gd} + a_{gd}n_x \\ v_{gd} + a_{gd}n_y \\ H_{gd} + a_{gd}u_{n,gd} \end{pmatrix}.$$

Les quatres coefficients $\triangle\omega_k$ sont donnés par

$$\triangle\omega_1(\underline{Q}_{gd}) = \frac{1}{2a_{gd}}\left(\frac{\triangle P}{a_{gd}} - \rho_{gd}\triangle u_n\right), \tag{6.72a}$$

$$\triangle\omega_2(\underline{Q}_{gd}) = \triangle\rho - \frac{\triangle P}{a_{gd}^2}, \tag{6.72b}$$

$$\triangle\omega_3(\underline{Q}_{gd}) = \rho_{gd}\triangle u_\tau, \tag{6.72c}$$

$$\triangle\omega_4(\underline{Q}_{gd}) = \frac{1}{2a_{gd}}\left(\frac{\triangle P}{a_{gd}} + \rho_{gd}\triangle u_n\right). \tag{6.72d}$$

Enfin, les valeurs propres ont pour expression

$$\lambda_1(\underline{Q}_{gd}) = u_{n,gd} - a_{gd},\ \lambda_2(\underline{Q}_{gd}) = u_{n,gd},\ \lambda_3(\underline{Q}_{gd}) = u_{n,gd},\ \lambda_4(\underline{Q}_{gd}) = u_{n,gd} + a_{gd}.$$

Dans le flux de Roe (6.71), [Rie11] montre, grâce à un développement asymptotique en puissance du Mach, que l'ordre du terme $\triangle u_n$ dans l'expression des $\triangle\omega_k$ (6.72) n'est pas en accord avec celui du développement asymptotique sur le problème continu. [Rie11] propose donc de remplacer ce terme comme suit

$$\triangle u_n \longrightarrow \min(\theta, 1)\triangle u_n, \tag{6.73}$$

où $\theta$ est un terme de l'ordre du nombre de Mach local. On constate que la correction est activée uniquement si l'écoulement est subsonique (c'est-à-dire que $\theta < 1$), dans le cas contraire le solveur reste inchangé.

**Remarque 4.** On note $\underline{\Phi}_{RoeLM}$ le flux de Roe avec la modification Low Mach dans sa partie décentrée, proposée par [Rie11]. En isolant les termes

en $\theta$ dans le flux $\underline{\Phi}_{RoeLM}$, tout calcul fait, on aboutit à

$$\underline{\Phi}_{RoeLM} = \underline{\Phi}_{Roe} \underbrace{- \frac{1}{2}(1-\min(1,\theta))\rho_{gd} a_{gd} \triangle u_{n,gd} \begin{pmatrix} 0 \\ n_x \\ n_y \\ u_{n,gd} \end{pmatrix}}_{\Psi_1} \underbrace{- \frac{1}{2}(1-\min(1,\theta))\rho_{gd} \triangle u_{n,gd} \frac{u_{n,gd}}{a_{gd}} \begin{pmatrix} 1 \\ u_{gd} \\ v_{gd} \\ H_{gd} \end{pmatrix}}_{\Psi_2}. \tag{6.74}$$

On retrouve le flux classique du solveur de Roe auquel s'ajoute deux autres flux dépendant de $\theta$. Le flux $\Psi_2$ est petit devant $\Psi_1$. Dans le flux $\Psi_1$, le flux sur l'énergie est négligeable par rapport à ceux sur la composante en vitesse. On retrouve dans ce cas une autre correction pour le solveur de Roe proposée dans [TC98] et étudiée entre autre dans [DOR13], soit

$$\underline{\Phi}_{RoeLM} = \underline{\Phi}_{Roe} - \frac{1}{2}(1-\min(1,\theta))\rho_{gd} a_{RL} \triangle u_{n,gd} \begin{pmatrix} 0 \\ n_x \\ n_y \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{6.75}$$

On souhaite ici adapter la correction faite par Rieper [Rie11] pour le solveur de Roe au solveur entropique. On remarque que cette correction ne concerne que la partie décentrée du flux de Roe qui s'exprime par $\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{2} |\lambda_k(\underline{Q}_{gd})| \underline{r}_k(\underline{Q}_{gd}) \triangle \omega_k(\underline{Q}_{gd})$ (6.71). Dans le cadre du solveur entropique présenté dans les sections précédentes (6.15), la partie décentrée du flux s'exprime par $\sum_k |\lambda_k| \delta \underline{U}_k$ dans le formalisme eulérien. Le terme $\triangle u_n$ n'apparaît pas de façon explicite. Il est nécessaire d'écrire les sauts $\delta \underline{U}_k$ du solveur entropique sous une forme plus appropriée.

Pour simplifier, considérons le solveur entropique dans le cadre des équations d'Euler mono-phasique 2D. Dans ce cas, on a

$$\underline{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix} = \rho \begin{pmatrix} 1 \\ u \\ v \\ E \end{pmatrix} = \rho \underline{\mathtt{V}}, \tag{6.76}$$

où $\underline{\mathtt{V}} = \underline{n} + \underline{U}^0$ avec les notations antérieures. Ainsi, si l'on considère le saut $\delta\underline{U}_1 = \underline{U}_g^* - \underline{U}_g$ associé à la valeur propre $\lambda_1 = u_{n,g} - \dfrac{\mathcal{C}_-}{\rho_g}$, on a :

$$\delta\underline{U}_1 = \delta(\rho\underline{\mathtt{V}}) = \rho_g^*\delta\underline{\mathtt{V}}_1 + \underline{\mathtt{V}}_g\delta\rho_1. \tag{6.77}$$

D'après l'expression des états intermédiaires en Lagrange (6.35)

$$\underline{V}_g^* = \underline{V}_g + \phi_-\underline{\mathbf{R}}_-,$$

où $\underline{\mathbf{R}}_\pm = (-1, \pm\mathcal{C}_\pm, P_b \pm \mathcal{C}_\pm u_a)^t$ pour les équations d'Euler, on obtient

$$\frac{1}{\rho_g^*} = \frac{1}{\rho_g} - \phi_- \Rightarrow \delta\rho_1 = \rho_g^*\rho_g\phi_-, \tag{6.78}$$

$$\delta\underline{\mathtt{V}}_1 = \phi_-\underline{\mathtt{R}}_-, \tag{6.79}$$

avec $\underline{\mathtt{R}}_\pm = (0, \pm\mathcal{C}_\pm, P_b \pm \mathcal{C}_\pm u_a)^t$.

On aboutit à

$$\delta\underline{U}_1 = \rho_g^*\phi_-\underline{\mathtt{R}}_- + \rho_g\rho_g^*\underline{\mathtt{V}}_g\phi_-, \tag{6.80}$$

$$= \rho_g^*\phi_-(\underline{U}_g + \underline{\mathtt{R}}_-). \tag{6.81}$$

On fait de même pour $\delta\underline{U}_3 = \underline{U}_d - \underline{U}_d^*$ associé à $\lambda_3 = u_{n,d} - \dfrac{\mathcal{C}_+}{\rho_d}$ et on a alors

$$\delta\underline{U}_3 = \rho_d^*\phi_+(\underline{U}_d + \underline{\mathtt{R}}_+). \tag{6.82}$$

On utilise le fait que le solveur de Riemann est de Godunov, c'est à dire que $\sum_k \delta\underline{U}_k = \triangle\underline{U}$ pour avoir

$$\delta\underline{U}_2 = \triangle\underline{U} - \rho_g^*\phi_-(\underline{U}_g + \underline{\mathtt{R}}_-) - \rho_d^*\phi_+(\underline{U}_d + \underline{\mathtt{R}}_+). \tag{6.83}$$

On a ainsi réécrit la partie décentrée du flux solveur de Riemann entropique sous une forme compatible avec celle de Roe puisque $\phi_\pm = \dfrac{\triangle P \pm \mathcal{C}_\mp\triangle u}{\mathcal{C}_-\mathcal{C}_- + (\mathcal{C}_\pm)^2}$ ($\phi_+$ et $\phi_-$ jouent le rôle de $\triangle\omega_4$ et $\triangle\omega_1$ respectivement). On peut maintenant proposer la modification du solveur par analogie avec la correction de [Rie11] pour le solveur de Roe.

**Proposition 15.** *Pour éliminer le terme d'ordre* 1 *en Mach sur le champ de pression induit par le schéma numérique, on effectue la modification du terme* $\triangle u_n$ *qui devient* $\min(\theta, 1)\triangle u_n$ *dans les coefficients* $\phi_\pm$ *lors de l'assemblage de la partie décentrée des flux. Pour le modèle diphasique, la même correction est utilisée par analogie.*

### 6.4.2 Correction Low Mach proposée par [TMD$^+$08]

[TMD$^+$08] propose une correction Low Mach sans modification du solveur de Riemann. Il s'agit de modifier uniquement les vitesses normales à l'interface entre les états $\underline{U}_g$ et $\underline{U}_d$. Les vecteurs vitesses $\vec{u} = (u, v)^t$ des états $\underline{U}_g$ et $\underline{U}_d$ sont alors reconstruits pour le calcul des flux par

$$\vec{u}_g^{LM} = \frac{1}{2}(\vec{u}_g + \vec{u}_d) + \frac{1}{2}\min(1, \theta)(\vec{u}_g - \vec{u}_d), \tag{6.84}$$

$$\vec{u}_d^{LM} = \frac{1}{2}(\vec{u}_g + \vec{u}_d) + \frac{1}{2}\min(1, \theta)(\vec{u}_d - \vec{u}_g). \tag{6.85}$$

L'énergie interne des états n'est pas modifiée, on a donc la modification de l'énergie totale comme suit

$$E_k^{LM} = E_k - \frac{1}{2}\vec{u}_g + \frac{1}{2}\vec{u}_g^{LM},\ k = g, d.$$

Cette correction garantit que la pression n'est pas modifiée. De plus, on retrouve le principe de la modification de Rieper puisque $\triangle u_n$ devient $\min(\theta, 1)\triangle u_n$. Cette correction est très simple à mettre en oeuvre puisqu'il n'y a pas de modification du solveur.

Toutes les corrections Low Mach présentées ici préservent les discontinuités de contact.

## 6.5 Résultats numériques

Nous présentons les résultats obtenus avec le schéma numérique positif entropique élaboré dans cette partie. Pour cela, des cas test numériques mono et bi-dimensionnel de la littérature seront montrés.

### 6.5.1 Résultats numériques mono-dimensionnels

On se place dans un domaine 1D de longueur 1m. Les deux cas test qui seront présentés sont des tubes à choc eau/air dans des conditions extrêmes. Ces problèmes de Riemann entre fluides purs sont comparés à la solution exacte.

**Test mono-dimensionnel 1 : Tube à choc avec ratio de pression modéré et ratio de densité élevé**

Le tube est séparé en deux par une interface localisée en $x = 0.7$. Les deux fluides purs sont modélisés à l'aide de la loi stiffened gas $P = (\gamma - 1)\rho\varepsilon - \gamma P_\infty$.

| | $\rho\ (kg.m^{-3})$ | $P\ (Pa)$ | $u\ (m.s^{-1})$ | $\gamma$ | $P_\infty\ (Pa)$ |
|---|---|---|---|---|---|
| eau | 1000 | $10^9$ | 0 | 4.4 | $6.0 \times 10^8$ |
| air | 50 | $10^5$ | 0 | 1.4 | 0 |

TABLE 6.1 – Données initiales du cas test mono-dimensionnel 1 [Pé03].

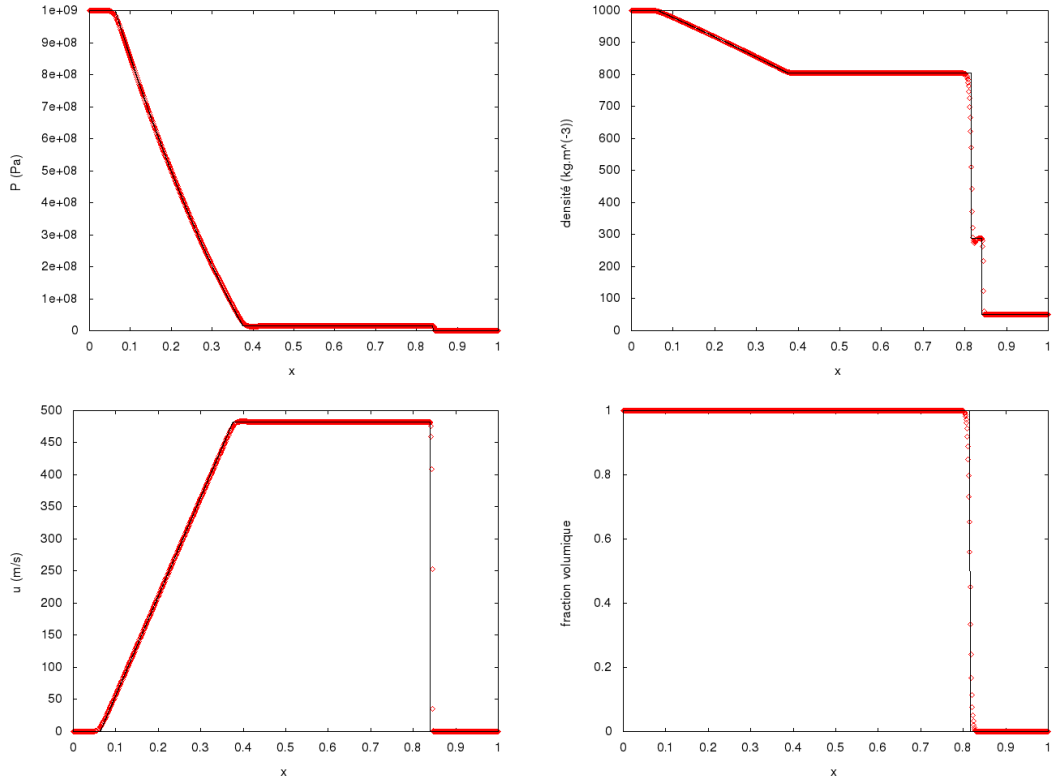



FIGURE 6.1 – Pression, densité, vitesse et fraction volumique pour la solution exacte (trait noir) et la solution numérique (points rouges) au temps $t = 2.4 \times 10^{-4} s$ pour le cas test mono-dimensionnel 1.

Les caractéristiques initiales de l'eau et de l'air sont fournis dans le tableau Tab. 6.1. Ce cas test est proposé dans [ACK02, Pé03] notamment.

Le différentiel de pression entre les deux fluides génère une onde de choc transmise dans le gaz. Une onde de détente prend également naissance au niveau de la discontinuité initiale et se propage dans le liquide. La difficulté du test réside donc en partie sur l'aptitude de la méthode à traiter la discontinuité de choc. La solution exacte ainsi que la solution numérique sur 1000 cellules sont présentées dans la figure Fig. 6.1. Le schéma utilisé est d'ordre 2 en temps et en espace avec une CFL de 0.9. Le choc et la discontinuité de

contact sont bien distincts.

**Test mono-dimensionnel 2 : Tube à choc dans des conditions extrêmes**

Cette fois le tube est séparé en deux par une interface localisée en $x = 0.6$. Les deux fluides purs sont modélisés à l'aide de la loi stiffened gas $P = (\gamma - 1)\rho\varepsilon - \gamma P_\infty$. Les caractéristiques initiales de l'eau et de l'air modélisées à l'aide de la loi stiffened gas sont fournis dans le tableau Tab. 6.2. Le saut

| | $\rho\ (kg.m^{-3})$ | $P\ (Pa)$ | $u\ (m.s^{-1})$ | $\gamma$ | $P_\infty\ (Pa)$ |
|---|---|---|---|---|---|
| eau | 1000 | $10^{12}$ | 0 | 4.4 | $6.0 \times 10^8$ |
| air | 10 | $10^5$ | 0 | 1.4 | 0 |

TABLE 6.2 – Données initiales du cas test mono-dimensionnel 1 [SPB09].

de pression est extrêmement raide. Il est de $10^7$. Ce cas test est proposé dans [SPB09].

Comme le cas test précédent le schéma utilisé est d'ordre 2 en temps et en espace avec une CFL de 0.9 et un maillage de 1000 cellules. Comme le montre la figure Fig. 6.2, on retouve bien une solution numérique en accord avec la solution exacte, malgré la raideur du cas test.

Ce cas test ne fonctionne pas avec le solveur de Roe. Ceci montre bien que la mise en place des contraintes de positivité et d'hyperbolicité du schéma entropique positif assure la robustesse de celui-ci.

### 6.5.2 Résultats numériques bi-dimensionnel

Ici, le fluide $l$ sera un gaz et non un liquide. Ce cas test est décrit dans [BN09]. On se place dans un domaine rectangulaire de taille $L_1 = 0.30cm$ et $L_2 = 0.10cm$. A $t = 0s$, un bulle d'hélium de rayon $r = 0.035cm$ est placée au point $(x_1, x_2) = (0.05cm, 0.05cm)$ dans un domaine rempli d'air (figure Fig. 6.3). Les caractéristiques du modèle stiffened gas de chaque fluide sont exposées dans le tableau Tab. 6.3.

| | $\rho\ (kg.m^{-3})$ | $P\ (Pa)$ | $(u, v)\ (m.s^{-1})$ | $\gamma$ | $P_\infty\ (Pa)$ |
|---|---|---|---|---|---|
| eau | 1000 | $10^{12}$ | $(0, 0)$ | 4.4 | $6.0 \times 10^8$ |
| air | 10 | $10^5$ | $(0, 0)$ | 1.4 | 0 |

TABLE 6.3 – Données initiales du cas test bi-dimensionnel [BN09]

.

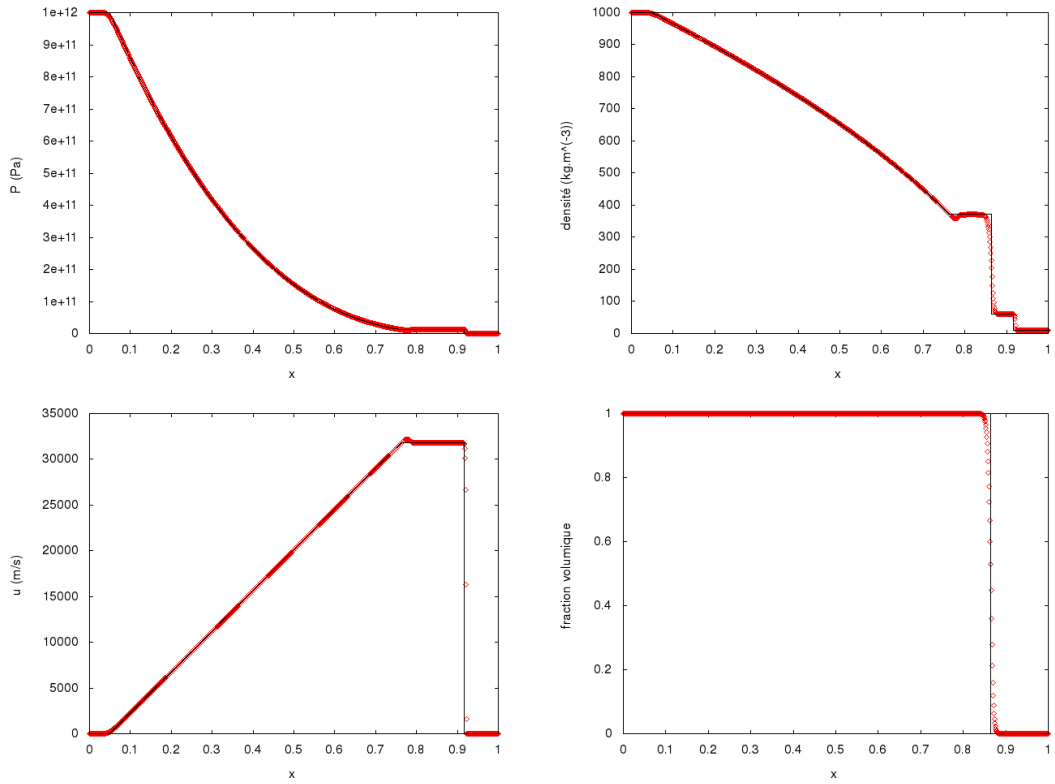



FIGURE 6.2 – Pression, densité, vitesse et fraction volumique pour la solution exacte (trait noir) et la solution numérique (points rouges) au temps $t = 8.3 \times 10^{-6} s$ pour le cas test mono-dimensionnel 2.

On utilise un maillage cartésien de taille $2400 \times 800$ et une CFL de 0.9 pour cette simulation.

Les conditions aux limites sont :

- au nord et au sud, des conditions de mur,
- à l'est, une condition de flux nul,
- à l'ouest, une condition d'entrée supersonique à $\mathbf{Ma} = 1.22$, soit une vitesse de $(u, v) = (1.443, 0.0)$.

Dans un premier temps, il y a création d'un choc en entrée qui vient percuter la bulle. L'hélium étant plus léger que l'air, on remarque l'apparition de deux vortex qui entraînent la séparation de la bulle en deux parties.

On remarque une très forte diffusion (couleur verte) pour le calcul avec le schéma d'ordre 1, voir Fig. 6.4. Les résultats obtenus grâce au schéma

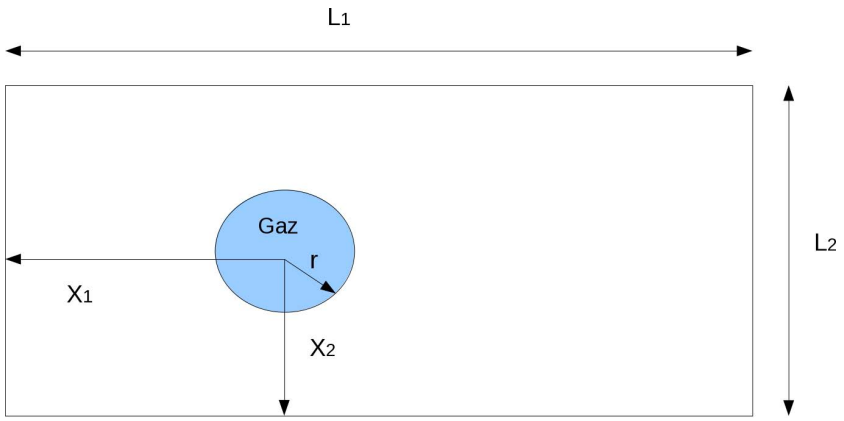



FIGURE 6.3 – Configuration initiale du cas test bi-dimensionnel.

du second ordre Fig. 6.5 sont très satisfaisants en comparaison avec [BN09]. En effet, la diffusion est moindre par rapport à l'ordre un. Ce cas test nous permet de valider le second ordre dans le cas du 2D.

### 6.5.3 Correction Low Mach

**Cas test monophasique**

Nous proposons de montrer les effets des corrections Low Mach introduites au chapitre précédent. Il s'agit d'un cas test proposé par [Del10]. Le domaine 2D $[0,4] \times [0,1]$ a sur sa frontière inférieure une bosse donnée par

$$y(x) = \begin{cases} 0.1[1 - \cos((x-1)\pi)] & \text{in } x \in [1,3] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} .$$

Le fluide est un gaz parfait : $P = \rho(\gamma - 1)\varepsilon = \rho C_v(\gamma - 1)T$ avec $\gamma = 1.4$ et $C_v = 717.5 kg^{-1}K^{-1}$. L'état initial du domaine est défini par $(P_0, h_0, u_0)$ avec $P_0 = 10^5 Pa$, $h_0 = \varepsilon_0 + \dfrac{P_0}{\rho_0} = 25kJ\ kg^{-1}$ (ce qui implique que $\rho_0 = 14 kg.m^{-3}$). Le vecteur vitesse $\vec{u}_0 = (u_0, v_0)$ est tel que $u_0$ est strictement positif. $u_0$ est choisi de sorte que le nombre de mach initial $\mathbf{Ma} = \dfrac{|u_0|}{\sqrt{\gamma P_0/\rho_0}}$ soit égal à $10^{-1}$, ou $10^{-2}$, ou $10^{-3}$. Le choix des paramètres de l'état initial permet d'avoir $u_0 = 10^{-2}\mathbf{Ma}$.

Ce calcul Euler est réalisé avec des conditions de paroi sur les bords haut et bas. La condition du bord gauche ($x = 0$) correspond à une entrée

subsonique utilisant les données de l'état initial. Pour la condition de sortie subsonique du bord droit $x = 4$, on impose la pression $P_0$.

Le cas test est réalisé sur un maillage $40 \times 10$. La pression normalisée est donnée par $\dfrac{P - P_0}{P_0}$.

Sans correction Low Mach, la solution numérique ne capte pas la solution incompressible. En effet, la solution numérique, comme on peut le voir sur la figure pour un nombre de mach de $\mathbf{Ma} = 10^{-2}$ possède des fluctuations de pression de l'ordre de $\mathbf{Ma}^{-1}$. Les fluctuations attendues devraient être symétriques et de l'ordre de $\mathbf{Ma}^{-2}$.

Avec les deux corrections proposées au chapitre précédent pour le solveur entropique, nous obtenons les résultats attendus comme le montre la figure Fig. 6.7. Les solutions convergent vers une approximation raisonnable de la solution incompressible [Mur03]. En effet, les fluctuations sont de l'ordre de l'ordre de $\mathbf{Ma}^{-2}$ et quasi-symétriques.

On a ainsi montré la nécessité et aussi l'efficacité des corrections low Mach dans la simulation numérique à faible nombre de Mach en monophasique. Dans le cas test suivant, on aborde le cas diphasique.

**Cas test diphasique**

Le cas test low Mach diphasique considéré ici à été proposé dans [Mur03] avec le modèle diphasique avec le terme source sur l'équation de la fraction volumique (4.1). Il s'agit de la remontée d'une bulle d'air dans l'eau. Nous nous plaçons dans la configuration proposée par [Mur03]. Le domaine est un carré de $2m$ de coté. La bulle circulaire est initialement de centre $(0m, 0.3m)$ et de rayon $R = 0.2$. Les lois d'états de l'air et de l'eau sont de type stiffened gas avec les paramètres suivants donnés par le tableau Tab. 6.4. La gravité est fixée à $g = 9.81 m.s^{-1}$. Les forces de tension de surface et de viscosité ne sont pas considérées ici. Initialement la bulle est au repos et le champ de pression est hydrostatique.

| | $\rho\ (kg.m^{-3})$ | $P\ (Pa)$ | $\gamma$ | $P_\infty\ (Pa)$ |
|---|---|---|---|---|
| eau | 1000 | $10^5$ | 4.4 | $6.0 \times 10^8$ |
| air | 10 | $10^5$ | 1.4 | 0 |

TABLE 6.4 – Données initiales du cas test diphasique low Mach [Mur03, GM04, Bra07].

Du point de vue numérique, ce cas test est relativement difficile. En effet, la bulle est initialement au repos, ce qui signifie que le nombre de mach est nul

dans l'ensemble du domaine. Au cours du calcul il va croître pour atteindre lentement une valeur d'environ $10^{-1}$ en fin de calcul. De plus, le rapport de densité entre les deux fluides est égal à 1000.

Nous avons utilisé la correction proposée par [TMD+08], présentée au chapitre précédent. Le calcul est mené avec le schéma explicite à l'ordre un en espace et en temps avec un CFL de 0.45. La figure 6.8 montre les résultats du champ de fraction volumique aux instants t=0s, 0.15s, 0.35s, 0.55s, 0.75s, 1.0s sur un maillage de $100 \times 100$ cellules. La bulle remonte sous l'effet d'une surpression à sa base. Le centre de la bulle remonte plus vite que ses extrémités car la surpression y est plus forte. Il y a formation de deux vortex se mettant à tourner sur eux-mêmes. Ils se séparent en formant ainsi deux petites bulles. Les résultats obtenus sont en accord avec ceux de [Mur03, GM04], voir figure Fig. 6.9, qui utilise une correction low Mach basée sur le préconditionnement de type Turkel du système diphasique avec terme source dans l'équation d'advection de la fraction volumique 4.1. Nous avons également constaté que la correction que nous avons élaborée en s'inspirant de celle de Rieper, est instable pour ce cas test. Une analyse plus poussée pour connaître les raisons des ces instabilités serait nécessaire. Nous retiendrons donc la correction proposée par [TMD+08] qui a l'avantage d'être simple et stable.

## 6.6 Conclusion

Dans ce chapitre, à partir des travaux de [Gal02, Gal03], nous avons mis au point un solveur de Riemann positif et entropique en s'inspirant des travaux de [Gal02]. Ce solveur approché de type Godunov utilise la correspondance entre les formalismes eulérien et lagrangien. L'équation d'advection de la fraction volumique est résolue sous une forme non-conservative en accord avec la littérature afin de préserver les discontinuités de contact. On montre que le schéma numérique suivant possède des propriétés intéressantes telles que la positivité

$$\begin{aligned} \underline{U}_i^{n+1} = \underline{U}_i^n - \frac{\triangle t}{\triangle x}\left(\underline{\mathbf{H}}_{i+1/2} - \underline{\mathbf{H}}_{i-1/2}\right) \\ - \frac{\triangle t}{2\triangle x}\big((\underline{\underline{\mathcal{P}}}\triangle \underline{B})_{i-1/2} + (\underline{\underline{\mathcal{P}}}\triangle \underline{B})_{i+1/2}\big), \end{aligned} \tag{6.86}$$

où $\underline{\mathbf{H}}_{i+1/2} = \dfrac{1}{2}(\underline{F}_i + \underline{F}_{i+1} - \sum_{k=1}^{m} |\lambda_k| \delta \underline{U}_k)$.

Nous avons également adapté des corrections au solveur de Riemann pour traiter des écoulements de type Low Mach. Comme nous travaillons sur des maillages structurés curvilignes, le passage au 2D se fait naturellement.

Dans ce chapitre, nous avons montré à travers des expériences numériques que le schéma numérique mis au point pour le modèle diphasique permet de traiter des écoulements faibles ou fortement compressibles.

En ce qui concerne l'implicitation d'un tel schéma, nous avons eu recours à deux variantes pour la linéarisation. Ces deux voies se distinguent par la façon d'impliciter la partie décentrée des flux. La première voie consiste à majorer les pentes du solveur pour la partie implicite, ce qui simplifie comme suit la partie décentrée $|\lambda_{max}|\triangle\underline{U}$. La partie implicite s'apparente alors au solveur de Rusanov [Pé03]. L'autre voie est l'inplicitation que nous qualifierons de totale. On calcule les jacobiennes de la partie décentrée du flux en considérant les pentes comme constantes. Pour faciliter les calculs des jacobiennes, nous avons eu recours au moteur de différentiation automatique **TAPENADE** mis au point par l'équipe TROPICS de l'INRIA-Sophia-Antipolis (Institut National de Recherche en Informatique et Automatique) [HP04].

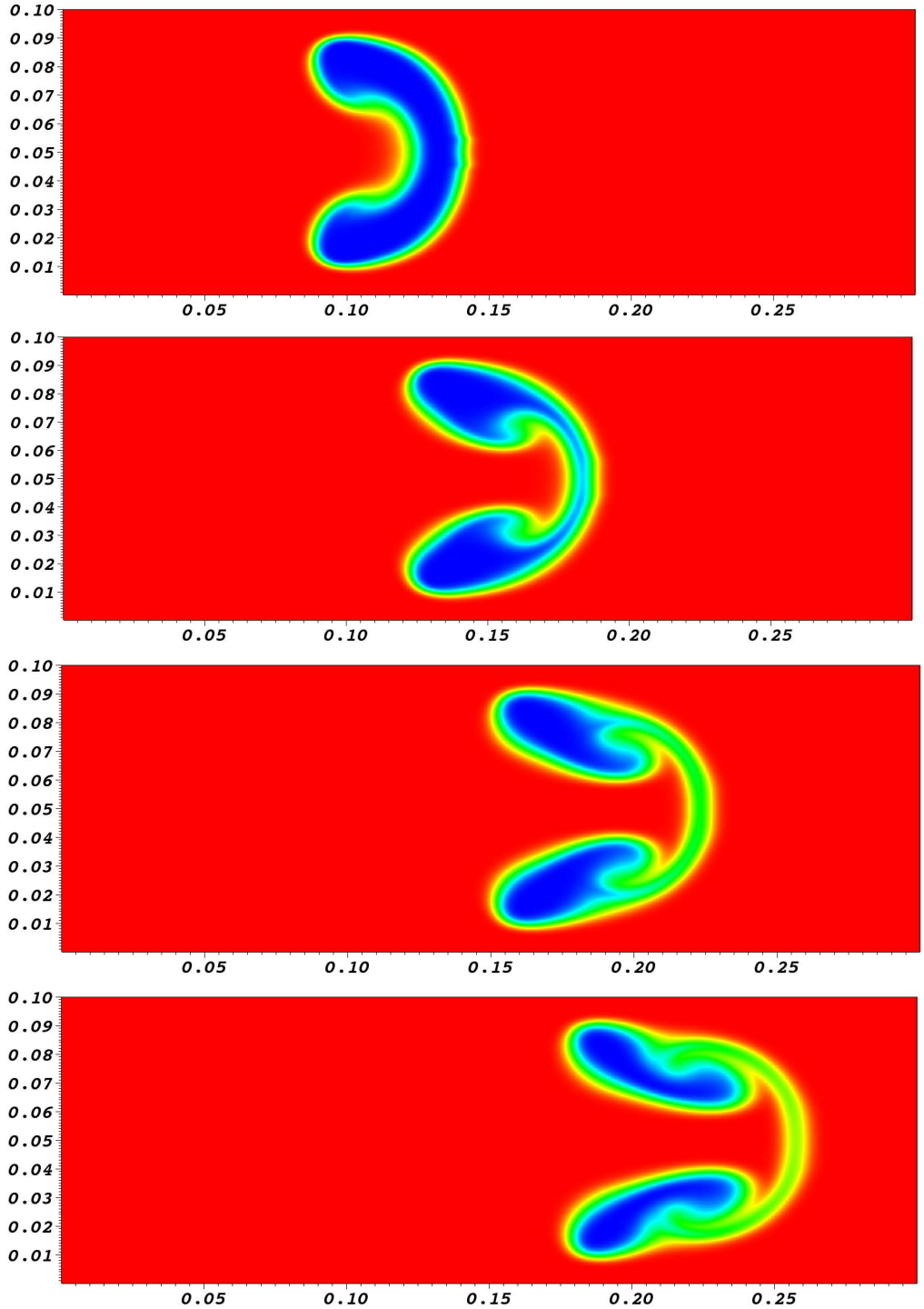



FIGURE 6.4 – Fraction volumique de l'hélium pour les temps 0.1s, 0.15s, 0.20s et 0.24s pour le cas test bi-dimensionnel avec le schéma à l'ordre 1.

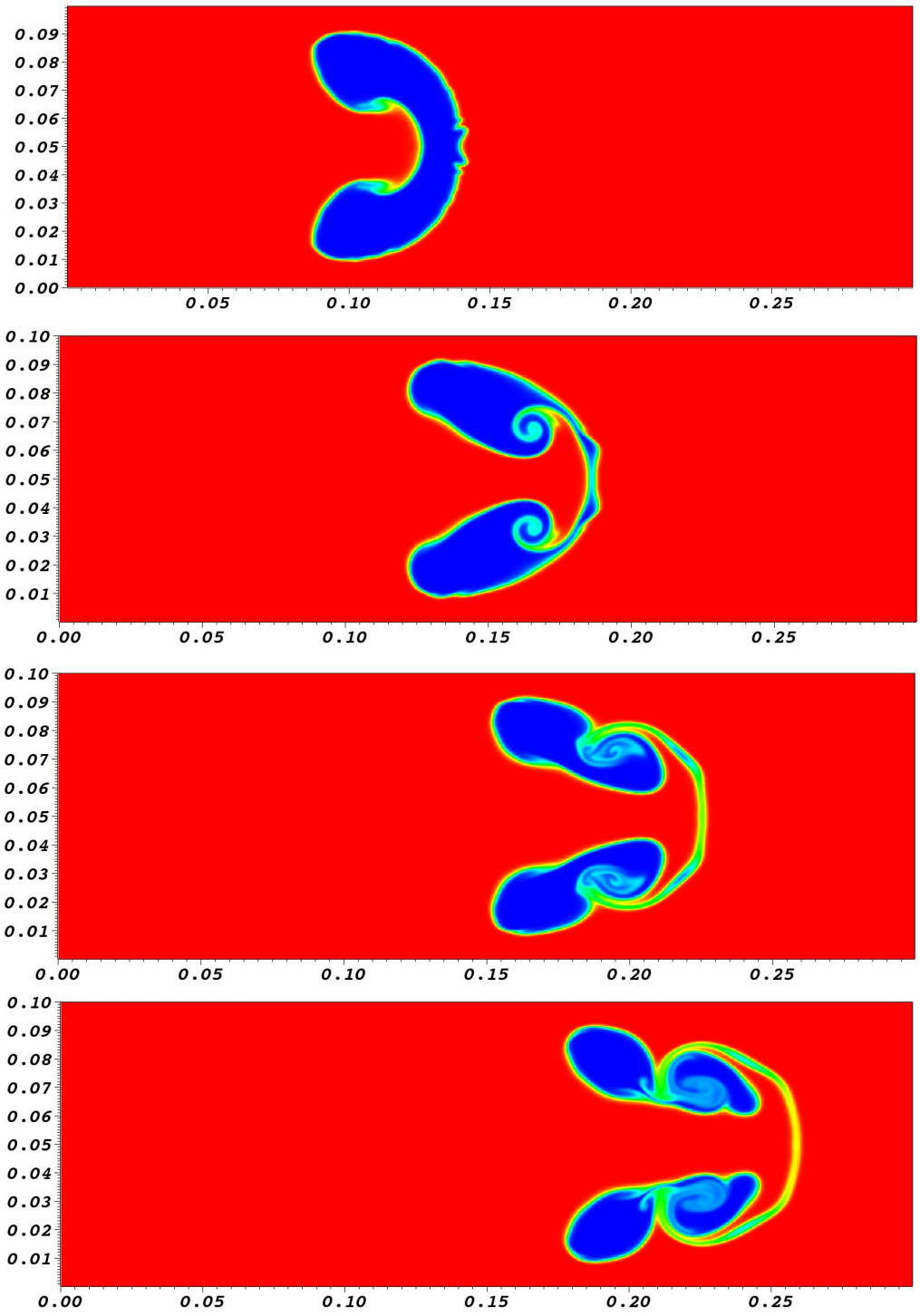



FIGURE 6.5 – Fraction volumique de l'hélium pour les temps 0.1s, 0.15s, 0.20s et 0.24s pour le cas test bi-dimensionnel avec le schéma à l'ordre 2.

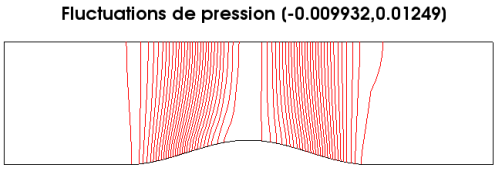



FIGURE 6.6 – Isovaleurs de la pression normalisée pour $\mathbf{Ma} = 10^{-2}$ pour le solveur entropique sans correction low Mach.

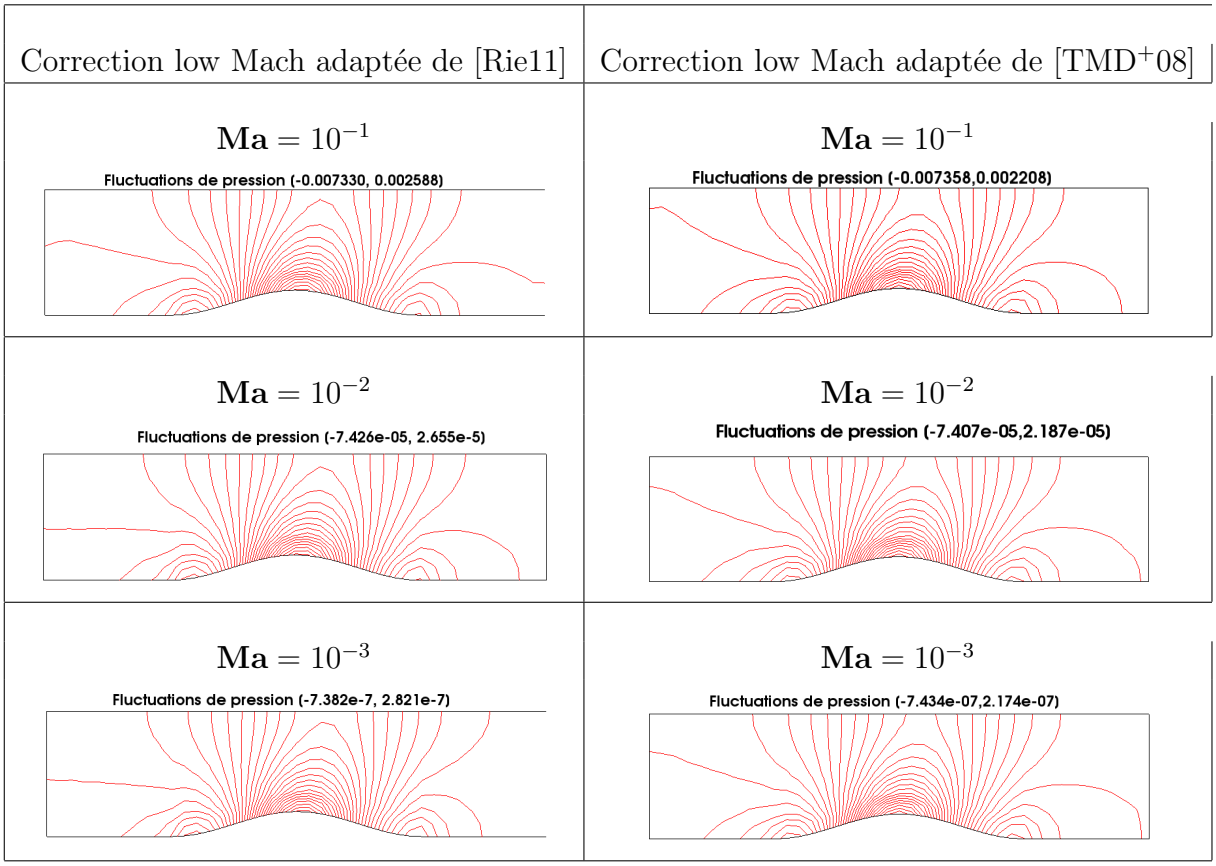



FIGURE 6.7 – Isovaleurs de la pression normalisée pour $\mathbf{Ma} = 10^{-1}$ (haut), $\mathbf{Ma} = 10^{-2}$ (milieu), $\mathbf{Ma} = 10^{-3}$ (bas), avec la correction du solveur entropique inspirée de [Rie11] (gauche) et de celle de [TMD$^+$08] (droite).

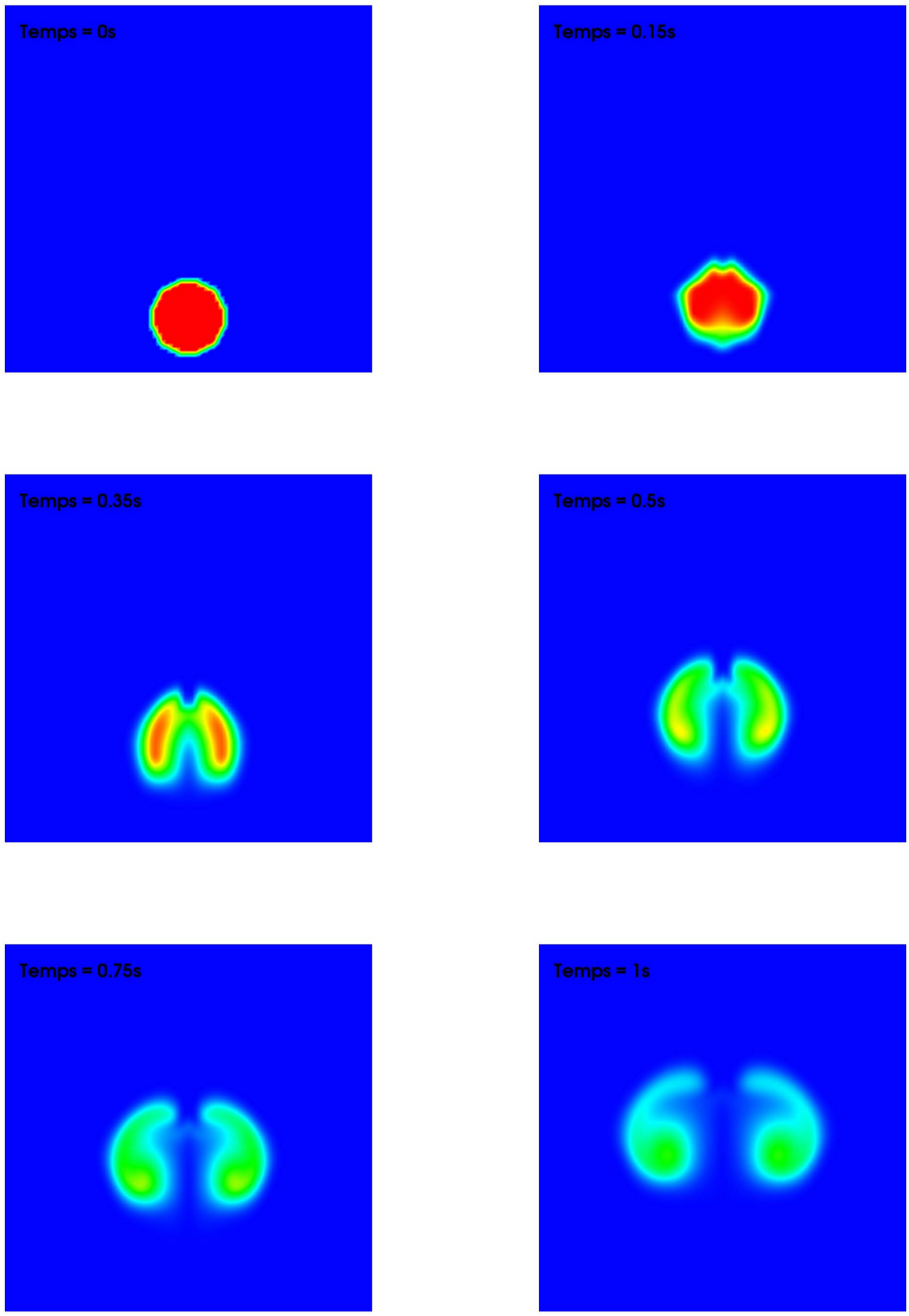



FIGURE 6.8 – Fraction volumique pour six temps différents 0s, 0.15s, 0.35s, 0.55s, 0.75s et 1s pour le cas de l'ascension d'une bulle d'air dans l'eau sur un maillage de $100 \times 100$ cellules.

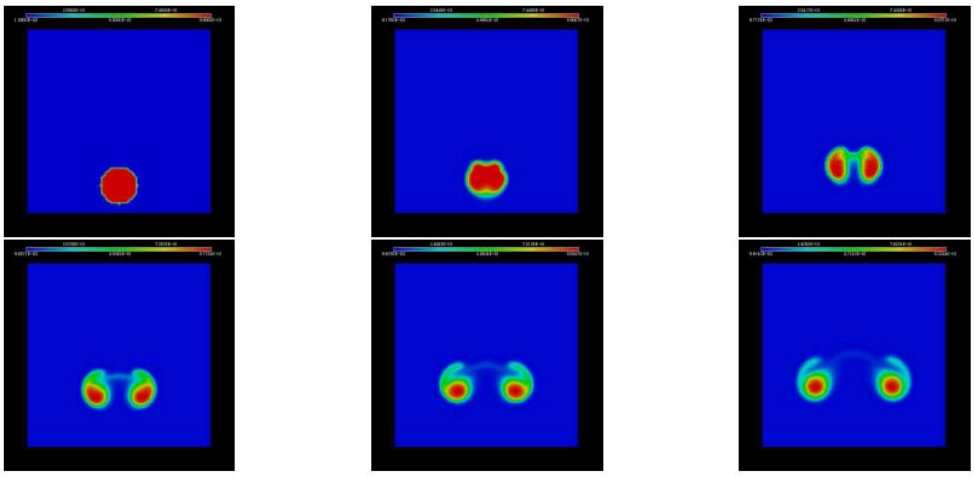


FIGURE 6.9 – Fraction volumique pour six temps différents 0s, 0.15s, 0.35s, 0.55s, 0.75s et 1s pour le cas de l'ascension d'une bulle d'air dans l'eau sur un maillage de $100 \times 100$ cellules pour le système diphasique 4.1 avec terme source sur l'équation d'advection de la fraction voumique en utilisant une correction low Mach basée sur le préconditionnement de type Turkel [Mur03].

# Quatrième partie

# Etude de couplages fluide-solide

# Chapitre 7

# Etude numérique de différents couplages fluide-solide pour la rentrée atmosphérique

Les conditions de couplages entre le domaine solide et le domaine fluide sont détaillées : bilans de masse et d'énergie. En ce basant sur une analyse des temps caractéristiques, nous proposons des algorithmes pour la réalisation de ces couplages. Nous proposons deux exemples permettant d'appréhender de façon préliminaire la phénoménologie numérique des différents couplages.

## 7.1 Couplage gaz-solide

### 7.1.1 Description des réactions d'ablation pour un bouclier thermique en composite Carbone/Carbone

Comme nous l'avons décrit précédemment, lors de la phase de rentrée atmosphérique l'écoulement du fluide autour de l'engin se situe dans le régime hypersonique et une onde de choc détachée se crée devant le bouclier thermique. Le transfert de chaleur que reçoit la protection est extrêmement important du fait de la conversion de l'énergie cinétique en énergie thermique. La paroi va alors être consommée par les réactions chimiques. Il y a injection d'espèces chimiques dans la couche limite. Ces réactions d'ablation sont soit endothermiques dans le cas de la vaporisation ou de la sublimation, soit exothermiques pour l'oxydation. La résine composant le matériau pyrolyse sous l'impact du flux thermique. Dans notre étude, la pyrolyse ne sera pas modélisée car on considèrera des matériaux non sujet aux effets de carbonisation ("non-charring thermal protection material" en anglais). La diffusion

dans la couche limite des espèces consommées ou produites par les réactions chimiques joue un rôle important puisqu'elle limite le taux de réaction à la surface.

Le processus d'ablation est un processus compliqué. De nombreux modèles ont été élaborés pour prendre en compte tous les phénomènes concourant à la disparition de matière à la surface du matériau (érosion mécanique, changement de phase, ...). Certains modèles sont basés sur des tables thermodynamiques [BNMO07, CdWL98, Bia07, KHP01]. La vitesse d'ablation s'exprime sous la forme $f(T_w, P_w, \mathcal{B}') = 0$ [Bia07] où $\mathcal{B}'$ est un paramètre sans dimension tabulé représentant l'injection pariétale (appelé également coefficient de "blocage"). $T_w$ et $P_w$ sont respectivement la température et la pression à la paroi. [Mul10] fait un état des lieux des modèles existants.

Dans le cadre de l'ablation de composés Carbone, deux mécanismes sont relativement importants [Vel07, Mul10] : la réaction d'oxydation et les réactions de sublimation.

**La réaction d'oxydation du carbone.**

La réaction d'oxydation du carbone entraîne la formation du monoxyde de carbone ($\mathtt{CO}$) :

$$2\mathtt{C}_{solide} + \mathtt{O}_2 \longrightarrow 2\mathtt{CO}. \tag{7.1}$$

Pour une température $T < 1000K$, l'oxydation est contrôlée principalement par la cinétique des réactions d'oxydation à la paroi. Cependant les réactions sont trop lentes pour consommer tout l'oxygène qui diffuse de l'extérieur de la couche limite vers la paroi. Le débit d'ablation par cette réaction d'oxydation est une fonction croissante de la température de paroi.

Avec les notations introduites dans la section 4.4.5, le flux massique est donné grâce à la loi d'Arrhenius :

$$\dot{m}_{oxy} = \mathtt{A} \exp -\frac{T_\mathtt{A}}{T} P_{g,\mathtt{O}_2}, \tag{7.2}$$

où $T_\mathtt{A} = 22100K$ la température d'activation, $\mathtt{A} \approx 1.03 \times 10^7 kg/(s.m^2.Pa^{1/2})$ la fréquence de collision pour le graphite et $P_{g,\mathtt{O}_2}$ la pression partielle de dioxygène. Cette réaction est fortement lié à la diffusion du dioxygène.

Pour $1000K < T < 2500K$, l'ablation est limitée par la diffusion de l'oxygène vers la paroi. L'intégralité de l'oxygène qui diffuse vers la paroi est alors consommée immédiatement. Pour des températures plus élevées, les molécules de dioxygène se dissocient. La réaction d'oxydation devient dans ce cas

$$\mathtt{C}_{solide} + \mathtt{O} \longrightarrow \mathtt{CO}. \tag{7.3}$$

Toutefois, la réaction d'oxydation pour des températures supérieures à $3000K$ devient négligeable devant les réactions de sublimation comme le montre la figure Fig. 7.1.

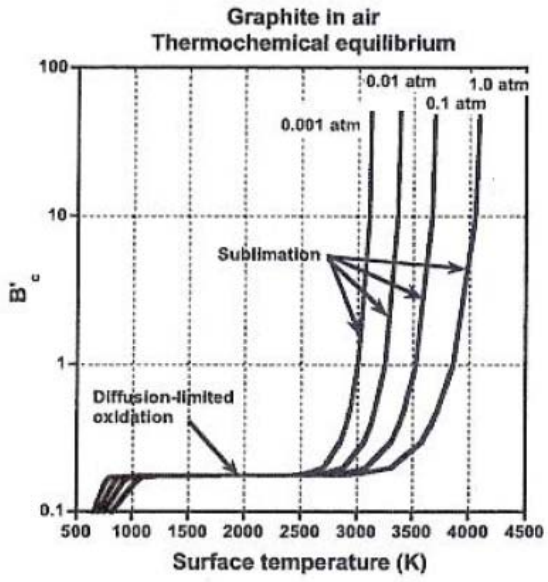



FIGURE 7.1 – Débit d'ablation en fonction de la température [NAS04].

**La réaction de sublimation**

A très haute température, le carbone se sublime en créant une multitude d'espèces gazeuses $\mathtt{C_n}$ avec $\mathtt{n} = 1$ à 5

$$\mathtt{n}\mathtt{C}_{solide} \longrightarrow \mathtt{C_n}. \tag{7.4}$$

Les changements de phase (solide-gaz ou liquide-gaz) sont décrits par le mécanisme de Knudsen-Langmuir. Cette approche cinétique repose sur la représentation du solide par une espèce gazeuse à sa pression de vapeur saturante [Sch].

Le flux de masse pour la sublimation est estimé par la relation suivante [Blo70] :

$$\dot{m}_{sub,\mathtt{n}} = \mathtt{a_n} \left( \frac{M_{mol,\mathtt{C_n}}}{2\pi R_u T} \right)^{\frac{1}{2}} (\hat{P}_{\mathtt{C_n}}(T) - P_{\mathtt{C_n}}), \tag{7.5}$$

où $\hat{P}_{\mathtt{C_n}}$ est la pression de vapeur saturante de $\mathtt{C_n}$, $\mathtt{a_n}$ le coefficient d'accomodation (ou de collage) de l'espèce $\mathtt{C_n}$, $M_{mol,\mathtt{C_n}}$ la masse molaire de l'espèces $\mathtt{C_n}$ et $R_u = 8.314 Jmol^{-1}K^{-1}$ la constante des gaz parfaits.

La pression de vapeur saturante est la pression à laquelle la phase gazeuse d'une substance est en équilibre avec sa phase liquide ou solide (dans notre cas) à une température $T$ donnée dans un système fermé. Dans le cas d'un milieu ouvert, en contact avec l'air, la pression de vapeur saturante est la pression partielle de la vapeur à partir de laquelle on ne peut plus former de molécules sous forme vapeur dans l'air, l'air est saturé.

Il y a donc trois cas possibles pour la loi de sublimation (7.5). Dans le premier cas, on a $\hat{P}_{\mathtt{C_n}}(T) = P_{\mathtt{C_n}}$ ($\dot{m}_{sub,\mathtt{n}} = 0$), c'est-à-dire que la pression partielle dans l'air de la substance, ici le $\mathtt{C_n}$ gazeux, est à la pression de vapeur saturante. Il n'y a pas de changement de phase possible car la réaction de sublimation est à l'équilibre. Dans le cas où $\hat{P}_{\mathtt{C_n}}(T) > P_{\mathtt{C_n}}$ ($\dot{m}_{sub,\mathtt{n}} > 0$), il y a sublimation de la phase solide jusqu'à ce que la pression partielle de la substance dans l'air ait atteint la pression de vapeur saturante à la température $T$ de l'air, ou bien jusqu'à la sublimation de la totalité de la phase solide. Pour le troisième cas, $\hat{P}_{\mathtt{C_n}}(T) < P_{\mathtt{C_n}}$ ($\dot{m}_{sub,\mathtt{n}} < 0$), la substance gazeuse va se condenser jusqu'à atteindre une pression partielle égale à la pression de vapeur saturante, ou bien jusqu'à condensation de la totalité de la phase gazeuse. La loi de sublimation (7.5) tend à garantir l'équilibre entre les phases gazeuse et solide. Cet équilibre sera atteint lorsque que la fraction massique de la substance dans l'air ne varie plus au cours du temps. En d'autres termes, la notion d'équilibre implique que le flux de molécules passant de l'état solide à l'état gazeux est équivalent, sur un intervalle de temps donné, au flux de molécules passant de l'état gazeux à l'état solide.

Le débit de masse $\dot{m}_{sub,\mathtt{n}}$ croît exponentiellement avec la température de paroi. L'espèce majoritaire est alors $\mathtt{C_3}$ aux pressions élevées ($P > 1$ bar) et $\mathtt{C_1}$ aux basses pressions. Ces réactions sont fortement endothermiques et vont contribuer à la baisse de la température de paroi.

En général, les espèces chimiques créées par la sublimation à la paroi sont $\mathtt{C}$, $\mathtt{C_2}$ et $\mathtt{C_3}$. Les espèces $\mathtt{C_4}$ et $\mathtt{C_5}$ sont principalement obtenues par des réactions homogènes dans le milieu gazeux. La pression de vapeur saturante est une fonction de la température. Celle de $\mathtt{C_3}$ est prépondérante sur celles de $\mathtt{C_2}$ et $\mathtt{C_3}$ comme le montre la figure Fig. 7.2.

Dans notre étude, seule la sublimation du carbone en $\mathtt{C_3}$ sera considérée La pression de vapeur saturante de $\mathtt{C_3}$ est estimée par la relation suivante [Blo70] :

$$\hat{P}_{\mathtt{C_3}} = 2.821 \times 10^5 \mathtt{A_3} T^{\mathtt{n_3}} \exp\left(\frac{-\mathtt{E_3}}{T}\right), \tag{7.6}$$

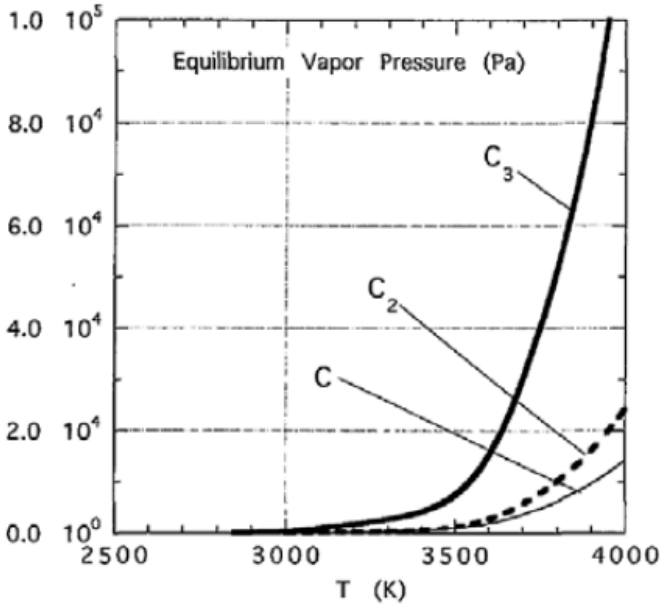



FIGURE 7.2 – Pression de vapeur saturante des différentes espèces carbonées en fonction de la température [Vel07].

| Espèce | $\mathtt{a_n}(2700K$ (plan basal) | $\mathtt{a_n}(2450K$ | $\mathtt{a_n}(2500K$ |
|---|---|---|---|
| $\mathtt{C}$ | 0.24 | 0.37 | $014 - 0.23$ |
| $\mathtt{C_2}$ | 0.25 | 0.34 | $0.26 - 0.38$ |
| $\mathtt{C_3}$ | 0.023 | 0.08 | $0.03 - 0.04$ |

TABLE 7.1 – Coefficients d'accomodation [ZA99].

avec $\mathtt{A_3} = 4.3 \times 10^{15}$, $\mathtt{n_3} = -1.5$, $\mathtt{E_3} = 97597.0K$.

Les coefficients $\mathtt{a_n}$ peuvent être estimés par une analyse semi-quantique en focntion de la température et de la constante rotationnelle de la molécule. Ils sont données par différentes sources expérimentales. [ZA99] donne des valeurs pour différentes configurations d'un graphite monocristallin récapitulées dans le tableau Tab. 7.1.

Nous prendons dans notre application la valeur suivante $\mathtt{a_3} = 0.07$ fournie par [Vel07].

Le flux de masse total vaut alors $\dot{m} = \dot{m}_{oxy} + \dot{m}_{sub,\mathtt{3}}$.

Nous nous placerons à des régimes où la réaction de sublimation est prépondérante par rapport à la réaction d'oxydation, c'est à dire à des

températures de paroi supérieures à $3000K$. Les propriétés du solide $\rho_s$, $C_v$ et $K_s$ sont également considérées comme constantes.

### 7.1.2 Conditions à la paroi du matériau

Pour effectuer les bilans à l'interface, il est nécessaire de rappeler les équations de part et d'autre de l'interface, c'est-à-dire dans le domaine fluide et dans le solide.

Le domaine fluide est régi par les équations de Navier-Stokes multi-espèces suivantes (on omettra la phase liquide ainsi que la pesanteur pour simplifier l'approche)

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{\partial \rho_g c_{g,1}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g c_{g,1} \vec{u}_g) = -\nabla \cdot (\vec{J}_{g,1}), \\ \\ \ldots \\ \\ \dfrac{\partial \rho_g c_{g,n_e}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g c_{g,n_e} \vec{u}_g) = -\nabla \cdot (\vec{J}_{g,n_e}), \\ \dfrac{\partial \rho_g \vec{u}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}_g \otimes \vec{u}_g + P_g \underline{\underline{\mathbf{Id}}}) = \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}_g, \\ \dfrac{\partial \rho_g E_g}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho_g E_g + P_g) \vec{u}_g) = \nabla \cdot (\underline{\underline{\tau}}_g \cdot \vec{u}_g) \\ \quad -\nabla \cdot (-K_g \nabla T_g + \sum_{i=1}^{n_e} \rho_g D_i h_{g,i} \nabla c_{g,i}) \, . \end{array}\right. \tag{7.7}$$

Les flux radiatifs ne sont pas pris en compte dans cette analyse.

En ce qui concerne le solide, sa masse volumique est prise constante. De plus, il n'y a pas de déplacement de matière dans le solide. L'équation d'énergie dans le solide donne

$$\frac{\partial \rho_s E_s}{\partial t} = \nabla \cdot (K_s \nabla T_s) \, . \tag{7.8}$$

**Bilan de masse**

A partir de ces relations de conservation, on va définir les relations de saut à la paroi. La notation $[\Psi]$ représente $\Psi_g - \Psi_s$.

On considère deux fluides compressibles (le solide est considéré comme un fluide compressible de sorte à pouvoir établir les relations de saut à la paroi), séparés par une interface. La normale espace-temps à l'interface est $(n_t, \vec{n}_X)$.

Le vecteur vitesse de déplacement de l'interface est donné par $\vec{v}_w = v_w \dfrac{\vec{n}_X}{||\vec{n}_X||}$ avec $v_w = -\dfrac{n_t}{||\vec{n}_X||}$.

La conservation de la masse s'écrit (il faut sommer les $n_e$ premières équations pour le modèle Navier-Stokes (7.7))

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0. \tag{7.9}$$

La relation de Rankine-Hugoniot donne :

$$[\rho n_t] + [\rho \vec{u} \cdot \vec{n}_X] = 0. \tag{7.10}$$

Dans la suite, on notera $\vec{n} = \dfrac{\vec{n}_X}{||\vec{n}_X||}$ la normale spatiale à l'interface.

On aboutit à l'expression du flux de masse à travers la paroi (le flux de masse est dans la direction normale à celle-ci)

$$\dot{m} = -\rho_s (v_w \vec{n}) \cdot \vec{n} = \rho_g (\vec{u}_g - v_w \vec{n}) \cdot \vec{n}. \tag{7.11}$$

On en déduit les deux relations suivantes

$$v_w = -\frac{\dot{m}}{\rho_s}, \tag{7.12}$$

$$\vec{u}_g \cdot \vec{n} = \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_g}\right) v_w. \tag{7.13}$$

De la relation (7.13), on conclut que la vitesse normale d'injection $\vec{u}_g \cdot \vec{n}$ est grande devant la vitesse de l'interface $v_w$ parce que le ratio $\dfrac{\rho_s}{\rho_g}$ est supérieur à 1000. Alors les vitesses $v_w$ et $\vec{u}_g \cdot \vec{n}$ sont de signe opposé.

**Bilan de masse par l'espèce**

On note $\dot{m}_i$ le flux de masse à la paroi pour l'espèce $i$ de sorte que l'on ait $\sum_{i=1}^{n_e} \dot{m}_i = \dot{m}$. Dans le cas de la sublimation, on a par exemple $\dot{m}_{\mathsf{C_3}} = \dot{m}_{sub,3}$.

On procède de la même façon que précédemment pour obtenir les relations de saut

$$- \rho_g c_{g,i} v_w \vec{n} + \rho_g c_{g,i} \vec{u}_g \cdot \vec{n} - \rho_g D_g \nabla c_{g,i} \cdot \vec{n} = \dot{m}_i, \ i = 1, n_e,$$

$$\Rightarrow \dot{m} c_{g,i} - \rho_g D_g \nabla c_{g,i} \cdot \vec{n} = \dot{m}_i, \ i = 1, n_e. \tag{7.14}$$

**Echange de quantité de mouvement**

Dans les systèmes que nous étudierons, les échanges de quantité de mouvement sont réduits à leur plus simple expression, le solide est supposé indéformable. On a donc une équation de type couche limite [NBGDB, Bia07]

$$\nabla P \cdot \vec{n} = 0. \tag{7.15}$$

**Bilan d'énergie**

Le bilan d'énergie s'effectue de la même manière que le bilan de masse et on obtient

$$-v_w \vec{n}[\rho E] + \rho_g H_g \vec{u}_g \cdot \vec{n} = [q] + \underline{\underline{\tau}}_g \cdot \vec{u}_g. \tag{7.16}$$

Or on a $[\rho E] = [\rho H - P] = [\rho H]$ car $[P] = 0$. En utilisant (7.11), on aboutit à

$$\dot{m}[H] = [q] + \underline{\underline{\tau}}_g \cdot \vec{u}_g. \tag{7.17}$$

Si le flux de masse $\dot{m}$ est nul, on constate que le flux de conduction du solide est égale au flux total du fluide à la paroi.

Nous avons déterminé les équations du problème sur l'interface, ainsi que de part et d'autre de celle-ci. Il faut maintenant définir le processus de résolution numérique pour coupler les deux domaines fluide et solide tout en garantissant les relations de saut à l'interface.

### 7.1.3 Algorithme de couplage

Afin de définir un algorithme de couplage, il est nécessaire de procéder à une analyse dimensionnelle au préalable pour évaluer les ordres de grandeur.

**Analyse dimensionnelle**

$\rho_g^*$, $L^*$, $u_g^*$, $\mu_g^*$, $C_{v,g}^*$, $K_g^*$ et $a_g^*$ sont respectivement les paramètres d'adimensionnement de la masse volumique $\rho_g$, de la longueur caractéristique, de la vitesse $u_g^*$, de la viscosité $\mu_g$, de la capacité calorifique à volume constant $C_{v,g}$ et de la conductivité thermique $K_g^*$ du fluide. $u_g^*$ est la vitesse de l'écoulement à l'infini. L'énergie totale est adimensionnée par $a_g^{*2}$ et la température par $\dfrac{a_g^{*2}}{C_{v,g}^*}$.

On introduit les nombres sans dimension suivants : $\mathbf{Re} = \dfrac{\rho_g^* L^* u_g^*}{\mu_g^*}$ le nombre de Reynolds, $\mathbf{Pr} = \dfrac{\mu_g^* C_{v,g}^*}{K_g^*}$ le nombre de Prandtl, $\mathbf{Ma} = \dfrac{u_g^*}{a_g^*}$ le

nombre de Mach. Le temps caractéristique de l'écoulement est $t_g^* = \dfrac{L^*}{u_g^*}$ et celui de l'interface est $t_w^* = \dfrac{L^*}{u_w^*}$.

Posons $\Upsilon_g = \dfrac{t_g^*}{t_w^*}$. Le temps de référence pour l'adimensionnement est $t_w^*$ qui est le temps caractéristique du système complet (solide+fluide+interface). Tous calculs effectués, on obtient

$$\Upsilon_g \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}_g) = 0, \tag{7.18}$$

$$\Upsilon_g \frac{\partial \rho_g \vec{u}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u} \otimes \vec{u}_g) + \frac{1}{\mathbf{Ma}^2} \nabla P_g = \frac{1}{\mathbf{Re}} \nabla \cdot \overline{\overline{\tau}}_g, \tag{7.19}$$

$$\Upsilon_g \frac{\partial \rho_g E_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g H_g \vec{u}_g) = \frac{1}{\mathbf{RePr}} \nabla \cdot (K_g \nabla T_g) + \frac{\mathbf{Ma}^2}{\mathbf{Re}} \nabla \cdot (\overline{\overline{\tau}}_g \cdot \vec{u}_g). \tag{7.20}$$

De même pour le domaine solide, on définit le temps caractéristique pour le processus thermique $t_s^* = \dfrac{L^{*2} \rho_s C_{v,s}^*}{K_s^*}$. On posant $\Upsilon_s = \dfrac{t_s^*}{t_w^*}$, on obtient

$$\Upsilon_s \frac{\partial \rho_s E_s}{\partial t} - \nabla \cdot (K_s \nabla T_s) = 0. \tag{7.21}$$

La vitesse d'interface est très faible $u_w^* << 1$ et la vitesse en amont du domaine est de l'ordre de plusieurs milliers de mètre par seconde. Or $\Upsilon_g = \dfrac{u_w^*}{u_g^*}$, et donc $\Upsilon_g$ est extrêmement faible. Par rapport à la dynamique de l'interface, le domaine fluide peut être traité en stationnaire. Tandis que pour le solide, $\Upsilon_s = \dfrac{u_w^* K_s^*}{L^{*2} \rho_s C_{v,s}^*}$ n'est pas négligeable. Le calcul de la thermique du domaine solide sera traité en instationnaire.

**Algorithme de résolution**

Nous allons maintenant définir l'algorithme de couplage du domaine solide avec le domaine fluide en utilisant les conditions d'interface. L'analyse dimensionnelle précédente a mis en avant la nécessité de calculer le domaine fluide en stationnaire et le domaine solide en instationnaire. L'algorithme doit prendre en compte cette disparité de traitement. La paroi $\Gamma$ doit être également déplacée au cours du temps en fonction des conditions de saut.

Comme il a été dit auparavant, on travaille dans des régimes où la loi d'ablation est dirigée par la réaction de sublimation (la température de la paroi est supérieure à $3000K$). Cette loi cherche à retrouver l'équilibre chimique entre les phases gazeuse et solide. Il est donc nécessaire que la re-

cherche de l'état stationnaire pour le domaine fluide se fasse en adéquation avec l'équilibre de réaction de sublimation à la paroi.

Nous proposons l'algorithme de couplage suivant :

1. La première étape consiste à initialiser les domaines fluide et solide en tout point. La position de la paroi est connue.

2. A partir des champs de pression partielle de $\mathtt{C}_3$ connue dans le domaine fluide et de la température de paroi fournie par le domaine solide, on calcule le flux de masse $\dot{m}$ en tout point de la paroi grâce à la relation de sublimation (7.5).

3. La connaissance du flux de masse $\dot{m}$ sur $\Gamma$ définit le champ de vitesse de recul de la paroi par la relation (7.12).

4. L'interface est déplacée vers sa nouvelle position.

5. On calcule la solution stationnaire du modèle Navier-Stokes multi-espèces. Le calcul stationnaire est obtenu par convergence en pseudo-temps du modèle (7.7). Le processus de recherche de la solution stationnaire est initialisé avec la solution stationnaire du pas de temps (temps de couplage) précédent.

   Les conditions de bord (comme par exemple les caractéristiques de l'écoulement amont) du domaine fluide sont fixes sauf au niveau de la paroi. En ce qui concerne la paroi, le champ de température de la paroi $T_w$ est fourni par la domaine solide comme condition de Dirichlet sur $\Gamma$. Les conditions de bord pour les vitesses, la pression et toutes les quantités liées aux fractions massiques des espèces gazeuses sont obtenues grâce au bilan (7.14). Dans ce bilan, le flux de masse $\dot{m}(P_{\mathtt{C}_3}, T_w)$ est alors actualisé à chaque itération de recherche de la solution stationnaire. La température de la paroi $T_w$ est fixe et la pression partielle $P_{\mathtt{C}_3}$ est déduite à partir de l'intérieur du domaine fluide à chaque itération. Le but étant de trouver la solution stationnaire qui garantit l'équilibre (c'est-à-dire que les fractions massiques des espèces ont convergés au cours des itérations en pseudo-temps).

6. On calcule le flux de conduction $q_s$, qui servira de condition de bord pour le domaine solide, grâce au bilan d'énergie (7.17). Le flux de masse a été actualisé à la suite du calcul stationnaire du domaine fluide. Les autres quantités telles que l'enthalpie $H_g$, le flux $q_g$ et les flux visqueux sont issues de la solution convergée du domaine fluide de l'étape précédente.

7. On procède au calcul de la solution instationnaire thermique (7.8) dans le domaine solide à partir de la solution du pas de temps de couplage précédent. Les conditions de bord à la paroi se résument en une condition de Neumann en imposant le flux de conduction calculé à partir du bilan d'énergie de l'étape précédente.

8. De la solution du domaine flux, on en déduit la température de paroi pour le pas de couplage suivant.

9. La solution du pas de couplage actuel est déterminée : on connaît la position de la paroi ainsi que les champs de variables respectifs des domaines fluide et solide. On passe au pas de temps de couplage suivant en retournant à l'étape **2** de l'algorithme.

L'algorithme est un algorithme de couplage explicite. Il est possible de coupler plus fortement en itérant à chaque pas de temps de couplage des étapes **2** à **8** jusqu'à convergence des différents champs de variables de chacun des domaines.

On peut noter que le fait d'avoir le flux de masse dans la recherche de la solution du domaine fluide à température de paroi fixée permet de traiter les domaines fermés également. En effet, la solution dans le domaine fermé vérifie $\dot{m} = 0$ pour la température $T_w$ fixée ce qui est possible avec cet algorithme.

### 7.1.4 Approche numérique

Nous avons fait le choix d'utiliser des grilles structurées curvilignes pour les domaines fluide et solide. Ce type de maillage est couramment utilisé dans les codes d'ablation [BNMO07, KHP01, Bia07, Mul10] car il permet d'avoir une discrétisation relativement simple des équations sur leurs domaines respectifs et de gérer plus facilement les déplacements de maillage. De plus, afin de rendre plus aisé les couplages grâce aux relations de saut, nous avons choisi d'avoir les maillages des deux domaines fluide et solide en vis-à-vis : une maille fluide de la paroi est en face d'une maille solide. La figure Fig.7.3 montre un exemple de disposition des maillages dans les deux domaines. Les maillages sont raffinés à la paroi de façon à capturer la couche limite due aux phénomènes visqueux dans la partie fluide.

Les équations sont discrétisées sur des maillages mobiles par une approche volumes finis espace-temps, appelée également méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian Method). La discrétisation garantit la condition de conservation géométrique (GCL Geometric conservation Law). Le solveur de Riemann approché utilisé correspond à celui mis en place dans la partie précédente.

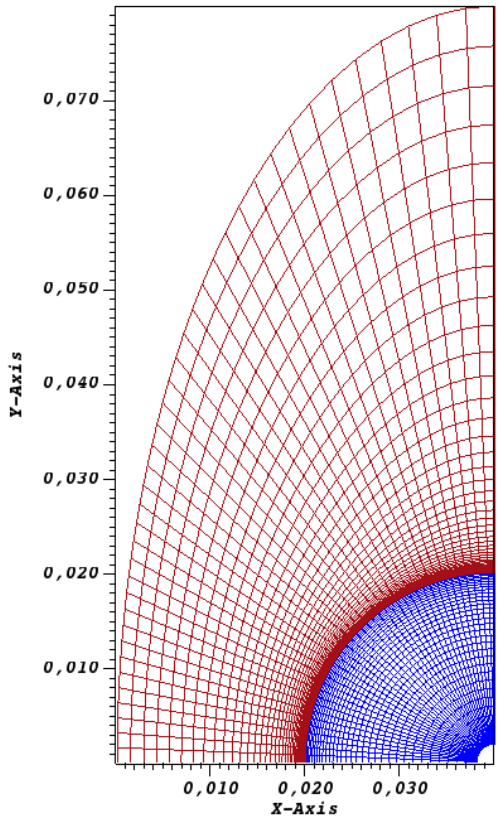



FIGURE 7.3 – Maillages curvilignes des domaines fluide (grille rouge) et solide (grille bleue) en vis-à-vis.

Pour accélérer la recherche de la solution stationnaire, le modèle Navier-Stokes multi-espèces (7.7) est implicité. On utilise une version linéarisée. Comme il s'agit de la recherche d'un état stationnaire, on utilise des grands pas de temps associés à des CFL de $10^4$ à $10^5$. Pour le domaine solide, le schéma est également implicite. Ceci permet d'utiliser des CFL allant jusqu'à $10^3$ pour un pas de temps défini par

$$\triangle t_{solide} = CFL * \min \frac{h}{\alpha_{solide}}, \tag{7.22}$$

où $h$ une longueur caractéristique des cellules du maillage et $\alpha_{solide} = \dfrac{K_s}{\rho_s C_{v,s}}$. L'implicitation nous permet de s'affranchir des conditions de CFL des do-

maines respectifs et de préserver la stabilité des schémas numériques. Le pas de temps de la thermique solide est choisi comme pas de temps de couplage (le pas de temps de déplacement de l'interface lui est généralement supérieur).

Afin d'optimiser les temps de calcul, il est indispensable de paralléliser le code. Nous avons décidé d'utiliser la librairie **MPI** au cours de cette thèse. La figure Fig. 7.4 présente un exemple de partionnement des domaines pour 4 processeurs. Le maillage du domaine de chaque processeur est complété par deux rangées de mailles fictives. Ces mailles fictives permettent d'imposer les conditions de bord. Les communications entre processeurs sont réalisées à l'aide de ces mailles fictives qui représentent une zone de recouvrement entre deux processeurs consécutifs. Cette stratégie simple de parallélisation est possible car le partionnement entre les processeurs est conforme.

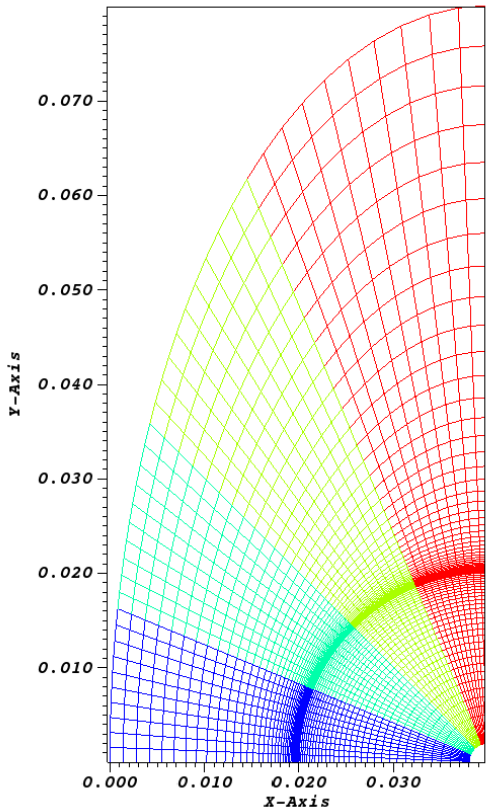



FIGURE 7.4 – Partitionnement des domaines fluide et solide pour 4 processeurs.

Le chapitre suivant donnera des résultats numériques pour la simulation numérique de l'ablation par la réaction de sublimation.

Après avoir présenté l'algorithme que nous utilisons pour le couplage gaz-solide, nous aborderons dans la section suivante le couplage solide-liquide modélisé par le problème de Stefan.

## 7.2 Couplage liquide-solide

### 7.2.1 Problème de Stefan avec convection

Lors de la rentrée atmosphérique d'un objet métallique, par exemple un débris de satellite ou une roche, du fait de son échauffement par friction, la paroi de l'objet va entrer en fusion. Le cas d'un bouclier thermique composite est un autre exemple de ce type de problème. Entre les fibres de carbone, la résine de ce matériau entre en fusion et forme des poches de liquide. Il s'agit d'aborder le couplage entre le domaine solide et sa phase liquide modélisé par le problème de Stefan. Comme dans l'analyse du chapitre 3, la température de fusion du solide est supposée constante. La paroi est à la température de fusion donc $T_w = T_{fusion}$. Les propriétés du solide $\rho_s$, $C_v$ et $K_s$ sont également considérées comme constantes.

Ici pour simplifier, on considère une situation moins complexe que celle d'une rentrée atmosphérique, qui est une cavité entrainée. Le domaine fluide est régi par les équations de Navier-Stokes de la phase liquide. Le modèle est donné ci-dessous

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \vec{u}_l) = 0, \\ \dfrac{\partial \rho_l \vec{u}_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \vec{u}_l \otimes \vec{u}_l + P_l \underline{\underline{\mathbf{Id}}}) + \nabla P_l = \nabla \cdot \overline{\overline{\tau}}_l, \\ \dfrac{\partial \rho_l E_l}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho_l E_l + P_l)\vec{u}_l) = \nabla \cdot (\overline{\overline{\tau}}_l \cdot \vec{u}_l) - \nabla \cdot (-K_l \nabla T_l)\,. \end{cases} \tag{7.23}$$

Les flux radiatifs ne sont pas pris en compte dans cette analyse.

En ce qui concerne le solide, sa masse volumique est prise constante. De plus, il n'y a pas de déplacement de matière dans le solide. L'équation d'énergie dans le solide donne

$$\frac{\partial \rho_s E_s}{\partial t} = \nabla \cdot (K_s \nabla T_s)\,. \tag{7.24}$$

### 7.2.2 Condition à la paroi

L'analyse est similaire à celle de la section précédente. On décrit les relations de saut.

**Bilan de masse**

Le bilan de masse est identique à celui obtenu dans le cadre du couplage d'un solide avec une phase gazeuse. On a donc

$$\dot{m} = -\rho_s(v_w\vec{n})\cdot\vec{n} = \rho_l(\vec{u}_l - v_w\vec{n})\cdot\vec{n}. \tag{7.25}$$

On en déduit les deux relations suivantes

$$v_w = -\frac{\dot{m}}{\rho_s}, \tag{7.26}$$

$$\vec{u}_l = \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_l}\right) v_w\vec{n}. \tag{7.27}$$

Cette fois, de la relation (7.13), on conclut que la vitesse d'injection $\vec{u}_l$ est du même ordre que la vitesse de l'interface $v_w$ car le ratio $\dfrac{\rho_s}{\rho_l}$ est proche de 1.1 en général. On supposera que l'injection dans le domaine fluide se fait suivant la normale à l'interface donc $\vec{u}_l = u_{n,g}\vec{n}$. Il y a le cas particulier où $\rho_s = \rho_l$. Dans ce cas, la vitesse d'injection est nulle, il y a adhérence du liquide sur la paroi mobile.

**Echange de quantité de mouvement**

Le solide est supposé indéformable. On a donc

$$[P] = 0. \tag{7.28}$$

**Bilan d'énergie**

Le bilan d'énergie s'effectue de la même manière que le bilan de masse et on obtient

$$-v_w\vec{n}[\rho E] + \rho_l H_l\vec{u}_l\cdot\vec{n} = [q] + \overline{\overline{\tau}}_l\cdot\vec{u}_l. \tag{7.29}$$

Or on a $[\rho E] = [\rho H - P] = [\rho H]$ car $[P] = 0$. En utilisant (7.25), on aboutit à

$$\dot{m}[H] = [q] + \overline{\overline{\tau}}_l\cdot\vec{u}_l. \tag{7.30}$$

On retrouve la relation de Stefan (7.30) introduite au chapitre 3 quand les vitesses sont nulles.

Nous avons déterminé les équations du problème sur l'interface, ainsi que de part et d'autre de celle-ci. Il faut maintenant définir le processus de résolution numérique pour coupler les deux domaines fluide et solide tout en garantissant les relations de saut à l'interface.

### 7.2.3 Algorithme de couplage

En procédant à une analyse dimensionnelle, on obtient un adimensionnement des équations similaire à celui du couplage gaz-solide de la section antérieure. La vitesse de référence du liquide correspond à la vitesse d'entrainement qui est beaucoup plus faible que dans le cas de la rentrée atmosphérique. La vitesse caractéristique de la phase liquide est également proche de la vitesse d'interface. On en conclut que le calcul du domaine liquide doit être mené en instationnaire. En ce qui concerne le domaine solide, les conclusions sont les mêmes que pour le couplage gaz-solide. On a donc une différence avec le couplage précédent.

Nous allons maintenant définir l'algorithme de couplage du domaine solide avec le domaine fluide avec le respect des conditions d'interface. Pour le problème de Stefan, on rappelle que la paroi est définie par la température de fusion $T_w$. Nous proposons l'algorithme de couplage suivant :

1. La première étape consiste à initialiser les domaines fluide et solide en tout point. La position de la paroi est connue.

2. On calcule la vitesse de l'interface $v_w$ grâce à la relation de Stefan (7.30) et au bilan de masse (7.26).

3. L'interface est déplacée vers sa nouvelle position.

4. On calcule la solution instationnaire du modèle Navier-Stokes de la phase liquide à partir de la solution du pas de temps de couplage précédent.

   En ce qui concerne les conditions de bord, il y a une condition de Dirichlet pour imposer la température de fusion $T_w$ à la paroi. La pression respecte la condition (7.28) et la vitesse à la paroi est donnée par la vitesse d'injection (7.27).

5. On procède au calcul de la solution instationnaire thermique (7.8) dans le domaine solide à partir de la solution du pas de temps de couplage précédent. Les conditions de bord à la paroi se résument en une condition de Dirichlet pour imposer la température de fusion $T_w$.

6. La solution du pas de couplage actuel est déterminée : on connaît la position de la paroi ainsi que les champs de variables respectifs des domaines fluide et solide. On passe au pas de temps de couplage suivant en démarrant à l'étape **2** de l'algorithme.

L'algorithme est un algorithme de couplage explicite. Il est possible de coupler plus fortement en itérant à chaque pas de temps de couplage des étapes **2** à **5**.

L'approche numérique est similaire à celle du couplage solide-gaz. On a recourt à une discrétisation volumes-finis espace-temps (ALE). La différence se résume par le traitement en instationnaire du calcul dans le domaine fluide.

## 7.3 Résultats numériques

### 7.3.1 Simulation de l'ablation d'une sphère de carbone

Cette simulation consiste à modéliser la récession de la paroi lors de l'ablation d'une sphère de carbone. L'ablation est modélisée uniquement par la réaction de sublimation du carbone en $C_3$. Nous allons considérer trois espèces chimiques dans le milieu fluide. L'air est constitué de 78% diazote ($N_2$) et de 22% de dioxygène ($O_2$). Il n'y a pas de $C_3$ dans l'air au départ. Le tableau Tab. 7.2 fournit les données utilisées pour chaque espèce (elles sont choisies constantes pour simplifier).

| | $M_i$ $(g.mol^{-1})$ | $\mu_i$ $(Pa.s)$ | $C_v$ $(J.m^{-1}.kg^{-1})$ |
|---|---|---|---|
| $O_2$ | $32 \times 10^{-3}$ | $1.909 \times 10^{-4}$ | 730 |
| $N_2$ | $28 \times 10^{-3}$ | $1.657 \times 10^{-4}$ | 650 |
| $C_3$ | $36 \times 10^{-3}$ | $1.00693 \times 10^{-4}$ | 577.25 |

TABLE 7.2 – Propriétés physiques des espèces gazeuses utilisées lors de la sublimation du carbone .

L'écoulement amont a une vitesse de $3000m.s^{-1}$, une pression de $10^5 Pa$ et une masse volumique de $1kg.m^{-3}$. Les conditions de l'écoulement aux limites sont : symétrie en bas, entrée hypersonique à gauche et sortie hypersonique à droite.

Le solide est entièrement constitué de carbone de masse volumique de $2267.1kg.m^{-3}$ et de conductivité thermique de $129W.m^{-1}.kg^{-1}$. La température initiale du solide est de $3300K$, la sublimation est donc la réaction majoritaire de l'ablation. Le solide est une sphère de rayon de $2cm$.

Le maillage est constitué de $20 \times 70$ cellules pour le domaine fluide et de $20 \times 40$ pour le domaine solide, tous deux resserrés à la paroi.

La recherche de la solution stationnaire, à l'ordre 2 en espace, dans le domaine fluide pour chaque temps de couplage s'effectue avec une CFL évolutive allant de 0.4 (pour les 200 premières itérations) à $10^4$ (après une rampe de pente 1 en fonction du nombre d'itérations). La thermique dans le solide est implicitée ce qui permet de prendre des CFL de $10^2$. L'écoulement étant hypersonique, il y a formation d'un choc détaché en amont de l'objet. La figure Fig. 7.5 montre le champ de température et de pression avec leurs isovaleurs respectives au temps de simulation $t = 3s$.

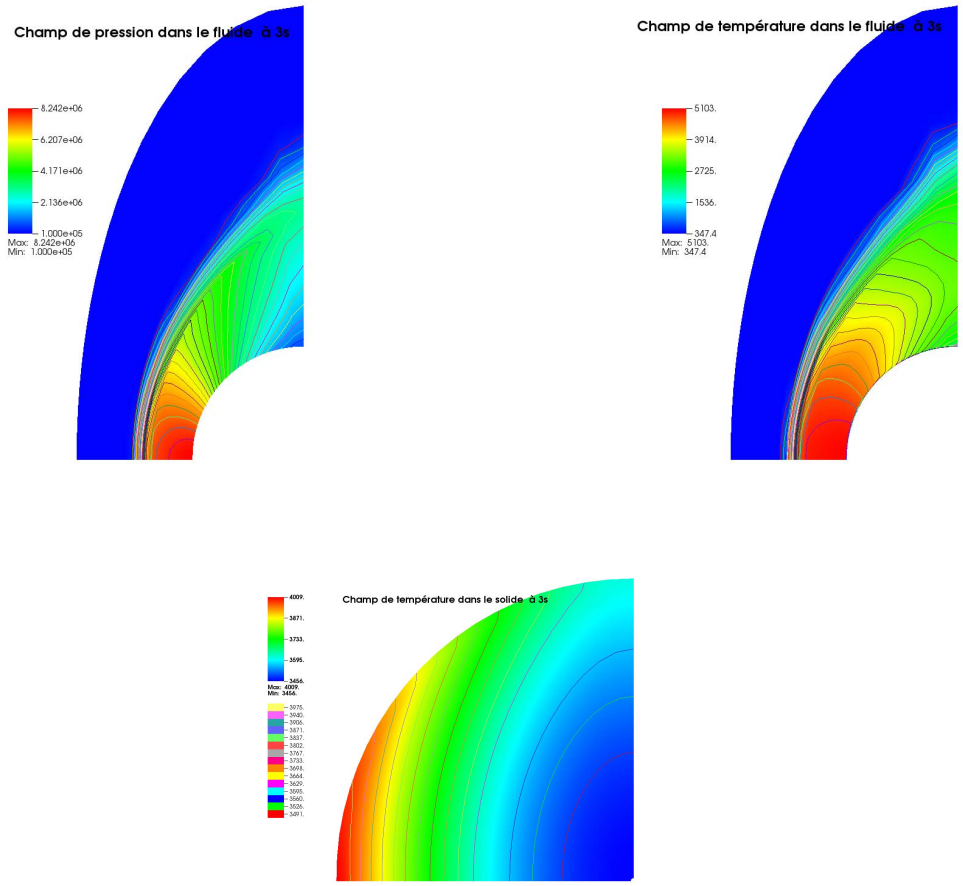



FIGURE 7.5 – Champ de pression (en haut à gauche), de température (en haut à droite) dans le fluide, ainsi que le champ de température dans le solide (en bas) au temps de simulation $t = 3s$.

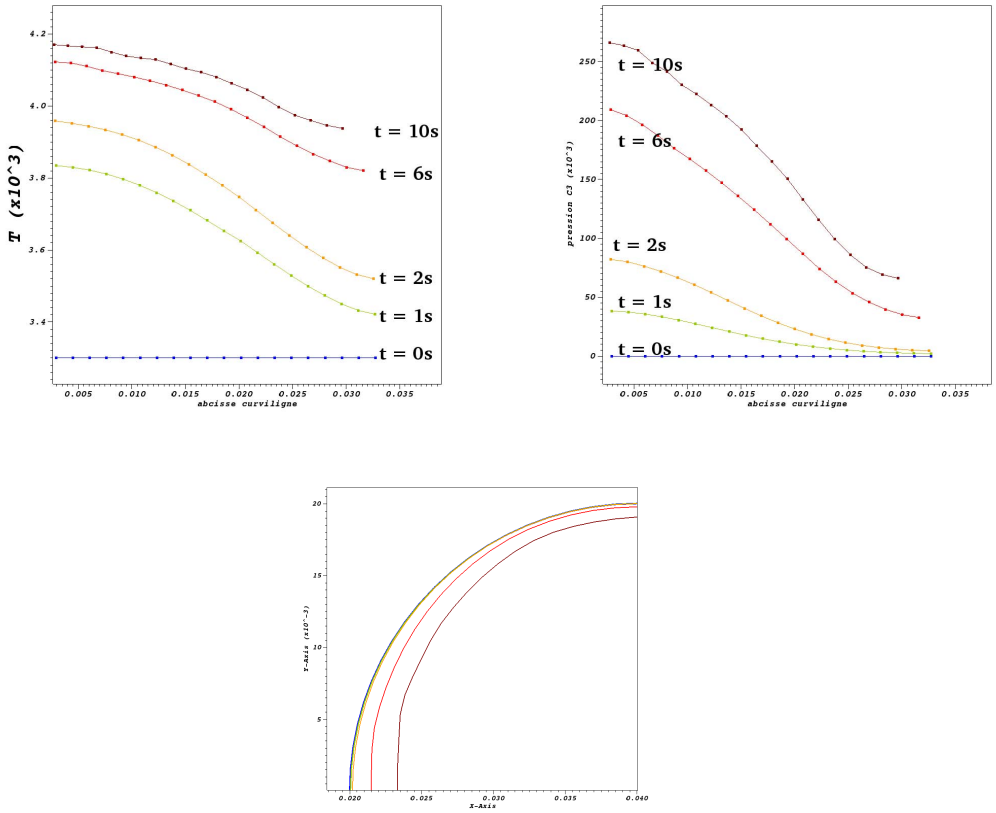



FIGURE 7.6 – Evolution de la température de paroi (en haut à gauche), de la pression de $C_3$ à la paroi (en haut à droite) et de la position de la paroi (en bas) pour six temps différents $0s$, $1s$, $2s$, $6s$ et $10s$ le long de la paroi en fonction d'abscisse curviligne.

Du fait de l'important flux thermique émanant du fluide, la température de paroi du fluide augmente rapidement comme en témoigne la figure Fig. 7.6. La pression de vapeur saturante de $C_3$ augmente de façon exponentielle en fonction de la température de paroi. Ceci implique une augmentation du flux de masse due à la réaction de sublimation modélisée par la loi de Knudsen-Langmuir. La courbe d'évolution de la pression partielle de $C_3$ de la figure Fig. 7.6 témoigne de cette augmentation du flux d'ablation. Le recul de la paroi s'accélère à mesure que la température de paroi augmente, comme le montre l'évolution de la position de la paroi au cours du temps dans la Fig. 7.6.

Cependant, la température maximale dans le fluide est de l'ordre de $5000K$, voir Fig. 7.5. Cette température importante est due à l'utilisation d'un mélange de gaz parfaits. De plus, l'écoulement gazeux dans notre cas est non-réactif. Ceci amplifie également la température de l'écoulement [Mul10], en effet les recombinaisons sont en majorité des réactions endothermiques. Le flux de masse, ainsi que le recul de la paroi, sont surévalués. Malgré une physique incomplète, ce cas test permet de restituer une phénoménologie réaliste de l'ablation régie par le processus de sublimation.

### 7.3.2 Simulation de la fusion dans une cavité entrainée de liquide

Le deuxième cas test proposé dans cette partie est un cas test de Stefan où la convection est prise en compte. Le matériau que nous considérons est l'aluminium. L'aluminium solide a une masse volumique de $2550kg.m^{-3}$, une conductivité thermique de $208W.m^{-1}.kg^{-1}$ et une capacité calorifique de $1240J.m^{-1}.kg^{-1}$ [Dev]. Nous utiliserons la loi d'état élaborée (4.48,4.50) dans le chapitre 4. La viscosité et la conductivité de l'aluminium liquide sont respectivement égales à $2,92448Pa.s$ et $90W.m^{-1}.kg^{-1}$ [Dev]. Les données de l'aluminium sont fournies dans le tableau Tab. 4.2. La température de fusion $T_w$ vaut $933K$, et l'enthalpie latente de la transformation solide-liquide à la température de fusion est $h_0 = 397000J.kg^{-1}$ [Dev]. Le fluide est initialement au repos.

Pour ce cas test, le domaine initial est un rectangle de $[0, 2mm]\times[-2mm, 2mm]$ séparé par la paroi en $y = 0$. Le solide (respectivement le domaine liquide) correspond au sous-domaine caractérisé par $y < 0$ (respectivement $y \geq 0$). La température du domaine solide est maintenue à la température constante de fusion. Les parois gauche et droite de la cavité sont des parois adiabatiques. La paroi supérieure d'entrainement à une vitesse de $100m.s^{-1}$ dirigée de la gauche vers la droite et une température de $2000K$. Le nombre de Reynolds

est $\mathbf{Re} \backsimeq 160$.

Le modèle de Navier-Stokes du domaine fluide est résolu de façon implicite avec une CFL atteignant $10^2$. La résolution du domaine fluide est à l'ordre 2 en espace et avec la correction Low mach adaptée de [TMD+08] (voir section 6.4). Le maillage se compose dans $50 \times 50$ cellules.

La figure Fig. 7.7 montre l'évolution de l'interface, du champ de vitesse ainsi que du champ de température dans le domaine fluide au cours du temps. Le fluide chauffé par la bord suppérieure est entrainé par adhérence sur la droite. Il plonge ensuite vers la paroi du solide guidé par le bord adiabatique droit. Ce liquide chaud apporte un flux thermique important à la paroi. La réaction de fusion est préférentiellement accentuée du coté droit comme en témoigne la figure Fig. 7.7.

La figure Fig. 7.8 montre le champ de masse volumique, ainsi que le champ de la pression à l'instant $t = 2.3 \times 10^{-3}s$. La pression dans le domaine fluide augmente considérablement au cours du temps par rapport à la pression initiale. Ceci vient du fait que la masse volumique du solide est plus élevée que celle de la phase liquide. Il y a une compression lors de l'injection de liquide dans le domaine fluide. La masse volumique moyenne dans le domaine fluide augmente également pour les mêmes raisons au cours du temps. La variation spatiale de la masse volumique est due à la répartition du champ de température (écart de plus $1000K$ entre les températures extrêmes). Cette variation relative d'environ de 10% témoigne de la bonne prise en compte du coefficient de dilatation thermique par la loi d'état que nous avons élaborée.

## 7.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons précisé les types de couplages envisagés entre le fluide et le solide. En ce qui concerne, le couplage solide-gaz, nous nous sommes placés dans les conditions où l'ablation est modélisée par la réaction de sublimation. Nous avons alors mis au point un algorithme compatible avec l'analyse dimensionnelle. En effet, pour réduire les coûts de calculs, le domaine fluide peut être traité en stationnaire.

Pour le couplage liquide-solide, nous ne sommes pas dans les mêmes régimes de vitesse pour l'écoulement de référence. Dans ce cas, le domaine fluide a été résolu en instationnaire. Du fait des conditions de couplage entre les domaines à la paroi, les deux couplages aboutissent à des algorithmes différents.

Les exemples traités constituent une préétude permettant d'appréhender de façon préliminaire la phénoménologie numérique des différents couplages.

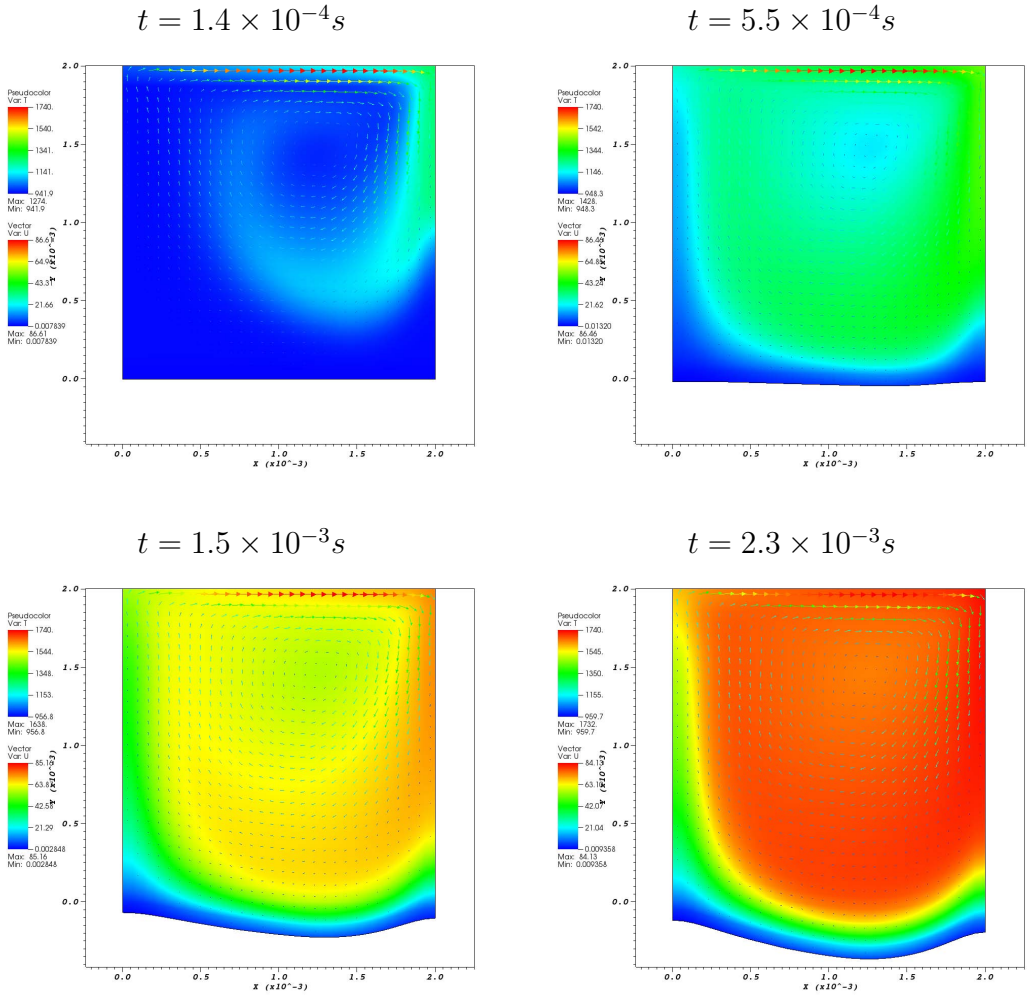



FIGURE 7.7 – Evolution de l'interface, du champ de vitesse ainsi que du champ de température dans le domaine fluide pour quatre temps différents $1.4 \times 10^{-4}s$, $5.5 \times 10^{-4}s$, $1.5 \times 10^{-3}s$ et $2.3 \times 10^{-3}s$.

.

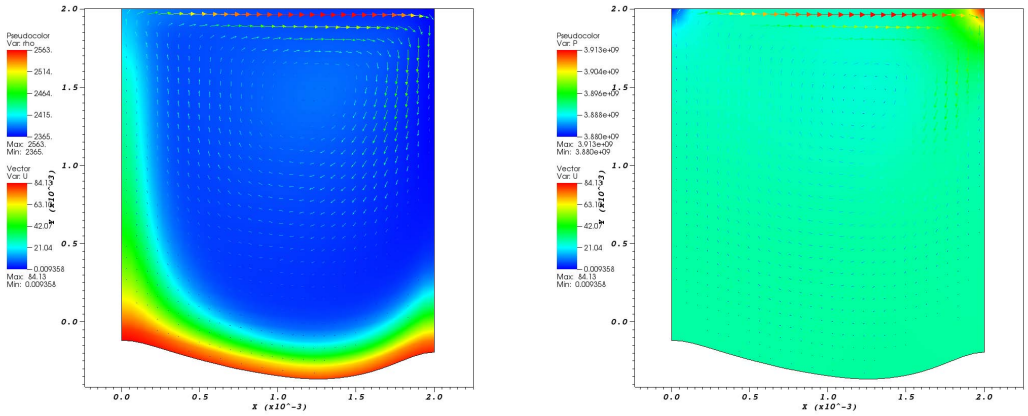



FIGURE 7.8 – Champs de masse volumique (à gauche) et de pression (à droite) dans le domaine fluide à l'instant $2.3 \times 10^{-3} s$.

# Cinquième partie

# Conclusion et perspectives

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à la simulation numérique de l'ablation d'un matériau composite (fibre de carbone-résine) lors de la rentrée atmosphérique. Comme nous l'avons montré dans l'introduction de cette étude, quatre types d'interaction sont présentes :

1. couplage thermique entre matériaux du composite résine-fibres,
2. réactions d'ablation à l'interface entre la fibre de carbone et l'écoulement gazeux,
3. changement de phase de la résine (réaction de fusion),
4. interactions entre la phase liquide (issue de la fusion de la résine) et l'écoulement gazeux.

Pour simplifier cette étude a été réalisée en 2D. Chacune des interfaces a été étudiée séparément.

Nous avons dans un premier temps élaboré une méthode de thermique multimatériaux sur grille cartésienne dans le cas stationnaire. Notre objectif était d'obtenir une discrétisation spatiale à l'ordre 2. Une méthode volumes-finis pour résoudre des problèmes elliptiques à frontières immergées sur grilles cartésiennes a été élaborée à partir des travaux de [OK06]. Cette méthode s'appuie sur des représentations polynomiales de la solution numérique dans les mailles duales de type $P_1$ en 1D et $P_2$ en 2D. Un traitement particulier a été présenté dans l'extension au 2D pour permettre de traiter de la même façon toutes les configurations géométriques possibles de l'interface et ainsi d'être continu par rapport à la position de l'interface. L'utilisation d'une paramétrisation de l'interface associée à un processus de minimisation sur les coefficients des polynômes permet d'éviter les singularités lors de la détermination des coefficients des polynômes. Cette méthode d'ordre 2 a pour avantage d'avoir un stencil constant à trois-points en 1D et de neuf-points en 2D. Elle a été également étendue à la résolution de problèmes elliptiques avec conditions de Dirichlet ou de Neumann sur une interface quelconque en s'appuyant sur une analyse asymptotique. Cette technique s'apparente à la méthode de pénalisation.

Nous avons également employé cette méthode comme discrétisation spatiale dans le cas de problème de thermique multi-matériaux instationnaire sur grille cartésienne. Le stencil compact rend possible la prise en compte de nombreuses interfaces de façon simple et efficace.

Cette méthode a pu être adaptée simplement à la résolution du problème de Stefan sans convection, en l'associant à une méthode Level Set pour suivre l'évolution de l'interface sur une grille cartésienne.

Dans la deuxième partie de la thèse, l'objectif était de modéliser l'écoulement diphasique. Nous avons fait le choix d'un modèle à interface diffuse de [ACK02]. Ce modèle a été complété de sorte à pouvoir traiter une phase gazeuse multi-espèces et les termes visqueux. En particulier, nous avons élaboré une loi d'état pour la phase liquide afin de prendre en compte la dilatation thermique.

Une étude des propriétés mathématiques du modèle nous a permis d'identifier les matériaux envisageables dans notre étude. Il s'agit des matériaux ne présentant pas d'anomalies de dilatométrie (coefficient de dilatation thermique négatif). De plus, nous avons également caractérisé toutes les entropies mathématiques du système diphasique à 5 équations pour des mélanges de fluides régis par une loi de type Mie-Gruneisen.

A partir des travaux de [Gal02, Gal03], nous avons mis au point un solveur de Riemann positif et entropique en s'inspirant des travaux de [Gal02]. Ce solveur approché de type Godunov utilise la correspondance entre les formalismes eulérien et lagrangien. L'équation d'advection de la fraction volumique est résolue sous une forme non-conservative en accord avec la littérature afin de préserver les discontinuités de contact. Nous avons également adapté des corrections au solveur de Riemann pour traiter des écoulements de type Low Mach.

Dans la troisième partie, deux types de couplage ont été envisagés entre le fluide et le solide. En ce qui concerne le couplage solide-gaz, nous nous sommes placés dans les conditions où l'ablation est modélisée par la réaction de sublimation. Nous avons alors mis au point un algorithme compatible avec l'analyse dimensionnelle. En effet, pour réduire les coûts de calcul, le domaine fluide peut être traité en stationnaire. Le couplage solide-liquide dans un domaine confiné nécessite pour sa part que le domaine fluide soit résolu en instationnaire.

Au cours de cette thèse chacun des types de couplage a été abordé séparément pour simplifier l'étude. Il est donc nécessaire de poursuivre l'étude des couplages entre le solide et fluide.

Dans un premier temps, pour effectuer le couplage entre le fluide diphasique et le domaine solide en considérant le processus de fusion, il sera utile d'améliorer la robustesse de l'implicitation du domaine fluide. Le but sera de garantir la positivité des solutions du schéma implicite afin de prendre des pas de temps les plus grands possibles.

D'autres phénomènes physiques plus complexes devront aussi être considérés comme la tension de surface. Les travaux de [Pé03, Bra07] sur ce sujet sont envisageables. Ceci permettrait d'aborder la gestion des points triples et de l'arrachement de gouttes.

En ce qui concerne le couplage entre le matériau carbone de la paroi et l'écoulement gazeux, l'implémentation des réactions chimiques [CMRS03, Mul10] à la fois à la paroi (oxydation, nitridation, etc) et dans l'écoulement (recombinaisons, etc) sont indispensables dans la perspective de simulations numériques pour la prédiction de la rentrée atmosphérique.

Pour terminer cette étude en 2D, la réalisation du couplage entre la thermique multimatériaux et le milieu diphasique dans les conditions de la rentrée atmosphérique pourra être envisageable. Une optimisation de la parallélisation du code permettrait d'améliorer les temps de simulation.

# Bibliographie


[Abg96] Rémi Abgrall. How to prevent pressure oscillations in multicomponenf flow calculation : A quasi-conservative approach. *J. Comput. Phys.*, 125, 1996.

[ACK00] Grégoire Allaire, Sébastien Clerc, and Samuel Kokh. A five-equation modèle for the numérical simulation of interfaces in two-phase flows. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série I*, pages 1017–1022, 2000.

[ACK02] Grégoire Allaire, Sébastien Clerc, and Samuel Kokh. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *Journal of Computational Physics*, 181 :577–616, 2002.

[AH75] J. R. Asay and D. B. Hayes. Shockcompression and release behavior near melt states in aluminium. *J. Appl. Phys.*, 46(4789), 1975.

[AS99] D. Adalsteinsson and J. A. Sethian. The fast construction of extension vélocities in level set methods. *Journal of Computational Physics*, 148 :2–22, 1999.

[Bia07] Daniele Bianchi. *Modeling of ablation phenomena in space applications*. PhD thesis, Università degli Studi di Roma "La Sapienza", 2006/2007.

[Blo70] F. G. Blottner. Prediction of electron density in the boundary layer on entry vehicles with ablation. *NASA SP-252*, pages 219–240, 1970.

[BN86] M. R. Baer and J-W. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials. *Int. J. Multiphase Flow*, 12 :861–889, 1986.

[BN09] Benjamin Braconnier and Boniface Nkonga. An all-speed relaxation scheme for interface flows with surface tension. *Journal of Computational Physics*, 228 :5722–5739, 2009.

[BNMO07] D. Bianchi, F. Nasuti, E. Martelli, and M. Onofri. A numerical approach for hight temperature flows over ablating surfaces. In *39th AIAA Thermophysics Conference*, Miami, 25-28 June 2007.

[Bra07] Benjamin Braconnier. *Modélisation numérique d'écoulement multiphasiques pour des fluides compressibles, non-miscibles et soumis au effets capillaires*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, 2007.

[CCG11] R. K. Crocket, P. Colella, and D. T. Graves. A cartesian grid embedded boundary method for solving the poisson and heat equations with discontinuous coefficients in three dimensions. *Journal of Computational Physics*, 230(7) :2451–2469, 2011.

[CdWL98] J. Couzi, J. de Winne, and B. Leroy. Improvements in ablation predictions for reentry vehicle nosetip. In *Proceedings of the Third European Symposium on Aerothermodunamics for Space Vehichles*, Noordwijk, The Netherlands, December 1998.

[CFC89] Yiding Cao, Amir Faghri, and Won Soon Chang. A numerical analysis of stefan problems for generalized multi-dimensional phase-change structures using the enthalpy transforming model. *Int. J. Heat Mass transfer*, 1989.

[CFGK00] Li-Tien Cheng, Ronald P. Fedkiw, Frederic Gibou, and Myungjoo Kang. A symmetric method for implicit time discretization of the stefan problem, 2000.

[Cho09] Chopp. Another look at velocity extensions in the level set method. *SIAM J. Sci. Comp.*, 31(1) :3255–3273, 2009.

[Cho10] Min Chohong. On reinitializing level set functions. *Journal of Computational Physics*, 229 :2764–2772, 2010.

[Cia85] P.G. Ciarlet. *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation*. Collection Mathématique Appliquées pour la maitrise sous la direction de P.G. Ciarlet et J.L. Lions. Masson, 1985.

[CK09] James Caldwell and Yuen-Yick Kwen. A brief review of several numerical mehods for one dimensional stefan problems. *Thermal Science*, 13(2) :61–72, 2009.

[CMRS03] Y. K. Chen, F. S. Milos, S. C. Reda, and D. A. Stewart. Graphite ablation and thermal response simulation under arc-jet flow conditions. In *36th AIAA Thermophysics Conference*, Orlando, June 23-26 2003.

[CW11] M. Cisternino and L. Weynans. A parallel second order cartesian method for elliptic interface problems. Technical Report 7573, INRIA, 2011.

[Dat92] A. W. Date. Novel strongly implicit enthalpy formulation for multi-dimensional stefan problems. *Numerical Heat Transfer B*, 21 :231–251, 1992.

[Del10] S. Dellacherie. Analysis of godunov type schemes applied to the compressible euler system at low mach number. *Journal of Computational Physics*, 229 :978–1016, 2010.

[Den12] Roland Denis. *Modélisation et simulation de l'effet Leidenfrost'*. PhD thesis, Université de Grenoble, Novembre 2012.

[Dev] Roger Develay. Données numériques sur l'aluminium non allié. Techniques de l'ingénieur, traité Matériaux métalliques. Formulaire.

[DOR13] Stéphane Dellacherie, Pascal Omnes, and Pierre-Arnaud Raviart. Construction of godunov type schemes accurate at any mach number, Janvier 2013.

[Dou57] J. Douglas. A uniqueness theorem for the solution of a stefan problem. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 8 :402–408, 1957.

[DRBS+11] Y. Dutil, D. R. Rousse, N. Ben Salah, S. Lassue, and L. Zalewski. A review on phase change materials : Mathematical modeling and simulations. *Renewable and sustainable Energy reviews*, 15(1) :112–130, 2011.

[Eva51] G. W. Evans. A note on the existence of the solution to a stefan problem. *Quarterly of Applied Mathematics*, 9 :185–193, 1951.

[FABO99] R. Fedkiw, T. Aslam, Merriman B., and S Osher. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *J. Comput. Phys.*, 152(2) :157–192, 1999.

[Fer65] Enrico Fermi. *Thermodynamique*. Dunod, 1965.

[Fra06] Erwin Franquet. *Modélisation eulérienne d'écoulement multiphasiques en présence d'ondes de chocs, de détonations et d'interfaces matérielles*. PhD thesis, Université de Provence (Aix-Marseille I), 2006.

[Gal00] Gérard Gallice. Schemas de type godunov positifs et entropiques pour des systèmes de lois de conservation : Application à la dynamique des gaz et la magnétohydrodynamique en coordonnées eulérienne. Technical report, Mathématiques Appliquées de Bordeaux (MAB), Université Bordeaux 1, 2000.

[Gal02] Gérard Gallice. *Approximation Numérique des Systèmes Hyperboliques Non-Linéaires Conservatif ou Non-Conservatifs*. Habilitation à diriger des recherches, Université Bordeaux 1, 2002.

[Gal03] Gérard Gallice. Positive and entropye stable godunov-type schemes for gas dynamics and mhd equations in lagrangian or eulerian coordinates. *Numerische Mathematik*, 94 :673–713, 2003.

[GB01] Dominique Gobin and Alain Bricard. Transfert de chaleur avec changement d'état solide-liquide, 10 Avril 2001. BE8240.

[GF04] Fredric Gibou and Ronald Fedkiw. A fourth order accurate discretization for the laplace and heat equations on arbitrary domains, with application to stefan problems, 2004.

[GL09] G. Guyomarc'h and C. Lee. A discontinuous galerkin method for elliptic interface problems with application to electroporation. *Communications in numerical methods in engineering*, 25(10) :991–1008, 2009.

[GM03] H. Guillard and A. Murrone. A five equation reduced model for compressible two-phase flow problems. Rapport interne 4778, INRIA, 2003.

[GM04] H. Guillard and A. Murrone. On the behavior of the upwind schemes in the low mach limit 2 : Godunov type schemes. *Comput. Fluids*, 33(4) :655–675, 2004.

[GV99] H. Guillard and C. Viozat. On the behavior of upwind schemes in the low mach number limite. *Computational Fluids*, 28(1) :63–86, 1999.

[HLL11] X. He, T. Lin, and Y. Lin. Immersed finite element methods for elliptic interface problems with non-homogeneous jump conditions. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, 8(2) :284–301, 2011.

[HN81] C. W. Hirt and B. Nichols. Volume of fluid method (vof) for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, 135 :201–225, 1981.

[HP04] Laurent Hascoet and Valérie Pascual. Tapenade 2.1 user 's guide. Technical report, INRIA, 2004.

[Hu96] Stravros A. Hu, Henry andArgyropoulos. Mathematical modelling of solidification and melting : a review. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 4 :371–396, 1996.

[JC98] Hans Johansen and Phillip Colella. A cartesian grid embedded boundary method for poisson's equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 147 :60–85, 1998.

[JP00] G.-S. Jiang and D. Peng. Weighted eno schemes for hamilton jacobi equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21 :2126–2143, 2000.

[JVVVdZ06] E. Javierre, C. Vuik, F. J. Vermolen, and S. Van der Zwaag. A comparaison of numerical models for one-dimensional stefan problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 192 :445–459, 2006.

[KBRS01] A. K. Kapila, BDzil J. B., Menikoff R., and S. F.and Stewart D. S. Son. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : Reduced equations. *Physics of Fluids*, 13(10) :3002–3024, 2001.

[KHP01] D. W. Kuntz, B. Hassan, and D. L. Potter. Prediction of ablating hypersonic vehicles using a iterative coupled fluid thermal approach. *Journal of thermophysics and Heat Transfer*, 15(2), 2001.

[KL10] S. Kokh and F. Lagoutière. An anti-diffusive numerical for the simulation of interfaces between compressible fluids by means of five-equation model. *Journal of Computational Physics*, 229 :2773–2809, 2010.

[LCG13] M. Latige, T. Colin, and G. Gallice. A second order cartesian finite method for elliptic interface and embedded dirichlet problems. *Computer and Fluids*, 83 :70–76, 2013.

[LCM] J. Lachaud, I. Cozmuta, and N. Mansour. Multiscale approach to ablation modeling of phenolic impregnated carbon ablators. Nasa Ames Research Center, Moffet Field, California, 94035.

[Lem99] Don S. Lemons. Thermodynamics of high temperature, mie-gruneisen solids. *Am. J. Phys.*, 67(12), 1999.

[LFK00] X.D. Liu, R.P. Fedkiw, and M. Kang. A boundary condition capturing method for poisson's equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 160 :151–178, 2000.

[LMMS04] O. Le Metayer, J. Massoni, and R. Saurel. Elaboration des lois d'état d'un liquide et de sa vapeur pour les modèles d'écoulements diphasiques. *Int. J. Thermal Sciences*, 43(3) :265–276, 2004. (in french)).

[LSS97] *Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for Hyperbolic Conservation Laws*, 1997.

[LV03] B. Laub and E. Venkatapathy. Thermal protection system technology and facility needs for demanding future planetary missions. The international workshop on planetary probe atmosphéric entry and descent trajectory analysis and science (lisbon), October 2003.

[MD02] R. Merle and J. Dolbow. Solving thermal and phase change problems problems with the extend finite element method. *Computational Mechanics*, 28 :339–350, 2002.

[MR02] J. A. Mackenzie and M. L. Robertson. A moving mesh method for the solution of the one-dimensional phase field equations. *Journal of computationnal Physics*, 181 :526–544, 2002.

[MSNA01] Jacques Massoni, Richard Saurel, Boniface Nkonga, and Rémi Abgrall. Propositions de méthodes et modèles eulériens pour les

problèmes à interfaces entre fluides compressibles en présence de transfert de chaleur. Rapport de recherche, INRIA, 2001.

[Mul10] Nathan Mullenix. *Fully Coupled Model for High-Temperature Ablation and a Reactive-Riemann Solver for its solution.* PhD thesis, Faculty of the University of Akron, May 2010.

[Mur03] Angelo Murrone. *Modèles bi-fluides à six et sept équations pour les écoulements diphasiques à faible nombre de Mach.* PhD thesis, Université de Provence (Aix-Marseille I), 2003.

[NAS04] NASA Ames Conference Center. *Turorial of ablative TPS*, Moffett Field, California USA, August 2004.

[NBGDB] N. T.-H. Nguyen-Bu, Duffa G., B. Dubroca, and Leroy B. New methods for the simulation of ablation thermal protections.

[Neu12] F. Neumann. Die partiellen differentialgleichunger der mathematischen, 1912. p. 121.

[OF03] Stanley Osher and Ronald P. Fedkiw. *Level set methods and dynamic implicit surfaces.* Springer, 2003.

[OG] Wilson Ogoh and Dominic Groulx. Stefan 's problem : Validation of a one dimensional soldi-liquid phase change heat transfer process'. In *Proceedings of COMSOL Conference 2010 Boston.*

[OK06] M. Oevermann and R. Klein. A cartesian grid finite volume method for elliptic equations with variable coefficients and embedded interfaces. *Journal of Computational Physics*, 219 :749–769, 2006.

[OS88] S. Osher and J. Sethian. Fronts propagating with curvature dependant speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *J. Comput. Phys, 79 :12-49*, 1988.

[OS91] Stanley Osher and Chi-Wang Shu. High order essentially non-oscillatory schemes for hamilton-jacobi equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28 :902–921, 1991.

[Pol05] Monika Polner. *Galerkin Least-Squares Stabilisation Operators for the Navier-Stokes Equations.* PhD thesis, Departement of Applied Mathematics in the Faculty EWI, Universiteit Twente, 2005.

[Pou94] D. Poulikakos. *Conduction Heat Transfer*. 1994.

[PPH01] McCorquodale Peter, Colella Phillip, and Johansen Hans. A cartesian grid embedded boundary method for the heat equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 173 :620–635, 2001.

[Pé03] Guillaume Périgaud. *Elaboration et résolution de modèles d'écoulement compressibles à interfaces en présence de capillarité et de viscosité*. PhD thesis, Université de Provence (Aix-Marseille I), 2003.

[REH97] Thierry Gallouët Robert Eymard and Raphaèle Herbin. *Finite Volume Methods*. Handbook of Numerical Analysis, 1997.

[Rie08] F. Rieper. On the behavior of numerical schemes in the low mach number regime. *Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus*, 2008.

[Rie11] F. Rieper. A low-mach number fix for roe's approximate riemann solver. *Journal of Computational Physics*, 230(13) :5263–5287, 2011.

[RJ71] Kenneth A. Rathjen and Latif M. Jiji. Heat conduction with melting or freezing in a corner. *Journal of Heat Transfer*, pages 101–109, Feb. 1971.

[SA99] R. Saurel and R. Abgrall. A multiphase godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 150 :425–467, 1999.

[SBCL06] Peters Schwartz, Michael Barad, Phillip Colella, and Terry Ligocki. A cartesian grid embedded boundary method for the heat equation and poisson 's equation in three dimensions. *Journal of Computational Physics*, 211 :531–550, 2006.

[Sch] R.W. Schrage. A theoretical study of interface mass transfer. *Columbia University Press*.

[Set96] J. Sethian. A fast marching level set method for monotonocally advancing fronts. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 93 :1591–1595, 1996.

[Set99] J. Sethian. Fast marching methods. *SIAM Review*, 41 :199–235, 1999.

[SF99] M. Sussman and E. Fatemi. An efficient interface preserving level set redistanciating algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow. *SIAM Journal on scientific computing*, 20 :1165–1191, 1999.

[Shu03] Chi-Wang Shu. High order finite difference and finite volume weno schemes and discontinuous galerkin methods for cfd. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 17(2) :107–118, 2003.

[SO88] Chi-Wang Shu and Stanley Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, 77(2) :439–471, August 1988.

[SO89] Chi-Wang Shu and Stanley Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, 83(1) :32–78, July 1989.

[SPB09] R. Saurel, F. Petitpas, and R.A. Berry. Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, caviting flows and shocks in multiphase mixtures. *Journal of Computational Physics*, 228 :1678–1712, 2009.

[SSO94] M. Sussmann, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114 :146–159, 1994.

[ST86] R.C. Swanson and E. Turkel. Pseudo-time algorithms for navier-stokes equations. *Int. J. Plast.*, 2 :321–333, 1986.

[ST09] Luca Salvatori and Niccolo Tosi. Stefan problem throught extended finite elements : Review and further investigations. *Algorithms*, 2009.

[Ste91] J. Stefan. Uber die theorie der eisbildung, insbesondere ueber die eibildung im polar -meere. *Ann. Phys. Chem.*, 42 :269–286, 1891.

[SVAC11] A. Sarthou, S. Vincent, P. Angot, and J.P. Caltagirone. The algebraic immersed interface and boundary method for elliptic equation with jump conditions. Technical report, TREFLE, January 2011.

[Sü03] E. Süli. Convergence of finite volume schemes for poisson's equation on nonuniform meshes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 28(5) :527–552, 2003.

[Tan07] Sandra Tancogne. *Calcul numérique et stabilité d'écoulement diphasiques tridimensionnels en Microfluidique*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, Décenbre 2007.

[TC98] I. Toumi and D. Caruge. An implicit second-order numerical method for three-dimensional two-phase flow calculations. *Nucl. Eng. Des.*, 138 :1–13, 1998.

[TFVL94] E. Turkel, A. FIterman, and B. Van Leer. *Preconditioning and the limit of the compressible to the incompressible flow equations for finite difference schemes*. John Wiley and Sons, 1994.

[TMD+08] B. Thornber, A. Mosedale, D. Drikakis, D. Youngs, and R.J.R. Williams. An improved reconstruction method for compressible flows with low mach number features. *Journal of computational Physics*, 227 :4873–4894, 2008.

[Tor97] Toro. *Riemann solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 1997.

[Tur87] E. Turkel. Preconditioned methods for solving the incompressible and low speed compressible equations. *Journal of Computational Physics*, 72(277-298), 1987.

[Tur93] E. Turkel. Review of preconditioning methods for fluid dynamics. *Appl. Numer. Math.*, 12(1-3) :257–284, 1993.

[UMS53] H. S. Udaykumar, R. Mittal, and Wei Shyy. Computation of solid-liquid phase fronts in the sharp interface limit on fixed grids. *Journal of Computational Physics*, 1999 :535–574, 153.

[Vel07] Anthony Velghe. *Modélisation de l'Interaction entre un écoulement Turbulent et une Paroi Ablatable*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, Septembre 2007.

[Vig07] Paul Vigneaux. *Méthodes Level Set pour des problèmes d'interface en microfluidique*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, July 2007.

[Vol87] V. R. Voller. An implicit enthalpy solution for phase change problems : with application to a binary alloy solidification. *Applied Mathematical Modeling*, 1987.

[VST90] V. R. Voller, C. R. Swaminathan, and B. G. Thomas. Fixed grid techniques for phase change problems : A review. *Journal of Numerical Methods in Engineering*, 30(4) :875–898, 1990.

[YZX+08] J. Yin, H. Zhang, X. Xiong, B. Huang, and J. Zuo. Ablation properties of carbon/corabon composites with tungsten carbide. *Applied surface science*, 255 :5036–5040, 2008.

[ZA99] S.V. Zhluktov and T. Abe. Viscous shock-layer simulation of airflow past abalting blunt body with carbon surface. *Journal of Thermophysicsand Heat Transfer*, 13(1) :50–59, 1999.

[ZCMO96] H.-K. Zhao, T. Chan, B. Merriman, and S. Osher. A variational level set approach to multiphase motion. *Journal of Computational Physics*, 127 :179–195, 1996.

# Sixième partie

# Annexes

# Annexe A

Dans la section 2.3.2, nous avons introduit les matrices $\underline{\underline{M}}$ and $\underline{\underline{A}}$. Dans la suite, du fait de la relation (2.71), le nombre de coefficients de polynômes à déterminer n'est plus que de 10. La matrice $19 \times 19$ $\underline{\underline{A}}$ est définie par

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{D}} & \underline{\underline{C}}^T \\ \underline{\underline{C}} & 0 \end{pmatrix} \text{ tel que } \underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} \underline{\xi} \\ \underline{\Lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \underline{\lambda} \end{pmatrix}, \tag{A.1}$$

où la matrice $9 \times 10$ $\underline{\underline{C}}$ est déduite des neufs relations linéaires (2.65), (2.69), (2.70) de sorte que $\underline{\underline{C}}\ \underline{\xi} = \underline{\lambda}$ et que $\underline{\Lambda}$ soit le vecteurs des multiplicateurs de Lagrange [Cia85]. La $10 \times 10$ matrice $\underline{\underline{D}}$ est remplie par des zéros à l'exception de deux coefficients $\underline{\underline{D}}_{5,5} = \dfrac{\mid \omega^A \mid}{2}$ et $\underline{\underline{D}}_{10,10} = \dfrac{\mid \omega^B \mid}{2}$.

La matrice symétrique $\underline{\underline{A}}$ doit etre inversée pour exprimer les coefficients des polynômes. La matrice $10 \times 9$ $\widetilde{\underline{\underline{M}}}$ correspond à la sous-matrice du cadrant supérieur droit de $\underline{\underline{A}}^{-1}$

$$\begin{pmatrix} \underline{\xi} \\ \underline{\Lambda} \end{pmatrix} = \underline{\underline{A}}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \underline{\lambda} \end{pmatrix}, \tag{A.2}$$

de sorte que l'on trouve $\underline{\xi} = \widetilde{\underline{\underline{M}}}\ \underline{\lambda}$ formulé par la relation (2.73) (avec les douze coefficients).

L'inverse de la matrice $\underline{\underline{A}}$ est uniquement calculée pour les mailles duales irrégulières. C'est pourquoi même si notre matrice $\underline{\underline{A}}$ est plus grande que celle de [OK06], le temps de calcul n'est pas influencé significativement.

# Simulation numérique de l'ablation liquide

**Résumé :** Lors de la phase de rentrée atmosphérique d'une sonde spatiale, la paroi du corps est le siège de phénomènes physico-chimiques complexes. Nous nous intéressons dans cette thèse au cas où le matériau solide de l'objet de vol comporte plusieurs constituants s'ablatant de façon différentielle. En particulier, l'un de ces constituants subit un changement de phase donnant lieu à l'apparition d'une phase liquide. Nous sommes en présence de trois phases : solide, liquide et gaz. Les travaux effectués dans cette thèse correspondent au développement de méthodes numériques en 2D capables de modéliser les différentes interfaces en présence ainsi que l'évolution des fluides ou des matériaux séparés par celle-ci. L'enjeu principal de la thèse est de proposer des méthodes et des algorithmes de couplage pour l'écoulement diphasique, la thermique multimatériaux et les changements de phase (fusion et sublimation).

**Mots clés :** Ecoulement diphasique, Navier-Stokes compressible, Low Mach, Thermique multimatériaux, Problème de Stefan



# Numerical Simulation of liquid ablation

**Abstract:** During atmospheric reentry phase of a spacecraft, its body surface is the seat of complex physico-chemical phenomena. We focus in this thesis on the case where the wall of the flying object has several components ablating differentially. In particular, one of those components undergoes a phase change giving the rise to the introduction of a liquid phase. We have three phases in the domain: solid, liquid and gas phases. The work done in this thesis corresponds to the development of 2D numerical methods which can modelize the different interfaces. The main issue of this thesis is to propose methods and algorithms for coupling the two-phase flow, multi-material heat problems and phase changes (melting and sublimation).

**Keywords:** Diphasic flow, Interface, Compressible Navier-Stokes, Low mach, Stefan problem,