



Étude et discrétisation de modèles cinétiques et de modèles fluides à bas nombre de Mach

Stéphane Dellacherie

► To cite this version:

Stéphane Dellacherie. Étude et discrétisation de modèles cinétiques et de modèles fluides à bas nombre de Mach. Analyse numérique [math.NA]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2011. tel-00870146

HAL Id: tel-00870146

<https://theses.hal.science/tel-00870146>

Submitted on 7 Oct 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.

École doctorale de Sciences Mathématiques de Paris Centre
Université Pierre et Marie Curie - Paris 6
Laboratoire Jacques-Louis Lions

Mémoire en vue d'obtenir
l'Habilitation à Diriger des Recherches
en Mathématiques

ÉTUDE ET DISCRÉTISATION DE MODÈLES CINÉTIQUES ET DE MODÈLES FLUIDES À BAS NOMBRE DE MACH

TOME 1 *Mémoire de synthèse*

Stéphane DELLACHERIE

Laboratoires d'accueil

COMMISSARIAT À L'ÉNERGIE ATOMIQUE
ET AUX ÉNERGIES ALTERNATIVES

Centres de Bruyères-le-Châtel et de Saclay

Soutenue le mercredi 2 février 2011 devant le jury composé de

Kazuo Aoki	Examineur	Université de Kyoto (Japon)
Bruno Després	Examineur	Université Pierre et Marie Curie - Paris 6
François Golse	Président	École Polytechnique Palaiseau
Thierry Goudon	Rapporteur	INRIA Lille
Hervé Guillard	Rapporteur	INRIA Sophia Antipolis
Shi Jin	Rapporteur	Université du Wisconsin-Madison (USA)
Olivier Lafitte	Examineur	Université Paris 13
Rémi Sentis	Examineur	CEA Bruyères-le-Châtel

(...)
Pour célébrer l'indépendance
Quand on y pense
C'est-y en France
C'est comme en France
Le tour de l'île
Quarante-deux milles
Comme des vagues les montagnes
Les fruits sont mûrs
Dans les vergers
De mon pays
(...)

Le Tour de l'Île
Félix Leclerc
Poète québécois
(1914-1988)

À ma famille.

Remerciements

E mémoire réunit l'ensemble des travaux que j'ai réalisés de 1995 à 2010 au Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA), à l'Université de Montréal, au Centre de Recherches Mathématiques (CRM) de Montréal ainsi qu'à l'Université McGill de Montréal. Aussi, je tiens à remercier tout particulièrement le CEA, l'Université de Montréal, le CRM et l'Université McGill pour la confiance et les moyens qu'ils m'ont accordés durant cette période. Je remercie également la DGA qui a financé une partie de mes activités au Canada.

Cette confiance accordée par ces cinq institutions – et surtout par le CEA – n'est pas le fruit du hasard. Elle est d'abord une conséquence directe de la confiance que certaines personnes m'ont accordée à des moments clefs. Aussi m'est-il impossible de ne pas les remercier. Je déclinerai ces remerciements de façon chronologique, à l'instar des mois se succédant au cours d'une année remplie forcément de joies, de doutes et d'espoirs.

Mes premiers remerciements vont à la fois à Rémi Sentis et à François Golse, tous deux m'ayant encadré en thèse de 1995 à 1998 au CEA sur un sujet passionnant. Rémi Sentis et François Golse n'ont par la suite jamais manqué de me conseiller sur telle ou telle question scientifique ou de me donner quelques coups de pouce pour mes dossiers scientifiques, jusqu'à cette HDR comme le souligne la composition du jury. Je remercie aussi Christophe Buet avec qui j'ai également travaillé durant mes trois années de thèse. Nous continuons d'ailleurs à collaborer lorsque le temps nous le permet, ce qui est une grande chance pour moi.

Mes seconds remerciements vont à Frédéric Doneddu et à Philippe Roblin qui, à la fin de ma thèse en 1998, ont soutenu mon embauche au CEA. Cette période au sein du Laboratoire de Modélisation Physique et de l'Enrichissement qui s'est étalée de 1998 à 2002 aura été une période fantastique où, par exemple, nous réalisons des calculs numériques tout en suivant les expériences de laboratoire réalisées par les physiciens du programme SILVA de Saclay ou de Pierrelatte. Je remercie également Benoît Perthame d'avoir accepté de me conseiller durant cette période ainsi que mes deux premiers étudiants, Christophe Audouze et Nicolas Rency, dont les travaux au cours de leur stage de DEA furent excellents.

Mes troisièmes remerciements vont à Eric Royer et à Jacques Segré qui, lorsqu'il m'a fallu réorienter mes travaux suite à l'arrêt programmé du programme SILVA, m'ont soutenu dans mon projet de détachement à l'Université de Montréal et au CRM en 2003. Jacques Segré aura par ailleurs assuré un suivi remarquable durant ce détachement.

Mes quatrièmes remerciements vont à Alain Vincent qui, au Département de Physique de l'Université de Montréal en 2003, m'a réellement donné les moyens de faire mes premiers pas dans le domaine des écoulements à bas nombre de Mach – comme en témoigne mon premier article sur le sujet, co-signé avec lui en 2003 –, tout en me laissant suivre des cours d'astrophysique. Je remercie aussi Anne Bourlioux qui a soutenu ma candidature à une bourse de recherche du CRM.

Mes cinquièmes remerciements vont à François Drolet qui m'a accueilli au Département de Physique de l'Université McGill. Les six mois que nous avons passés ensemble sont inoubliables et justifient que nous continuions à correspondre et à nous voir. Merci François.

Mes sixièmes remerciements vont, dans un désordre total, à la fois à Frédéric Lagoutière, à Samuel Kokh, à Tony Lelièvre (sans oublier Marion), à Pascal Omnes (sans oublier Chenda) et bien évidemment à Olivier Lafitte qui, de 1995 à 2005, au hasard de rencontres, auront suivi toutes ces pérégrinations, ce qu'ils continuent d'ailleurs à faire.

Mes septièmes remerciements vont à Frédérique Charles et à Yohan Penel qui – entre 2006 et 2010 – auront réalisé des travaux de thèse magnifiques qu’il m’aurait été totalement impossible de réaliser. La seule chose que je leur demande est de ne le dire à personne. Il me faut bien évidemment remercier Laurent Desvilletes et, à nouveau, Olivier Lafitte, Jacques Segré et Philippe Roblin dont les travaux d’encadrement auront été des éléments essentiels.

Mes huitièmes remerciements vont à Juliette Ryan et à Michel Borel et, par leur intermédiaire, à l’ONERA. Juliette et Michel m’ont accompagné de 2007 à 2010 dans le projet *Bulles et AMR* dans un esprit totalement ouvert. Seuls la passion et l’esprit scientifique auront guidé leur attitude. Merci à tous les deux. Je me dois aussi de remercier Eric Royer qui, tout en suivant attentivement ce projet, m’aura donné carte blanche.

Mes neuvièmes remerciements vont tout naturellement à Anouar Mekkas qui a réalisé un travail de Maîtrise exceptionnel en 2008. Sans Anouar, le projet *Bulles et AMR* n’existerait pas. Quelques jours après la *Révolution du Jasmin*, je souhaite profondément qu’Anouar poursuive sa carrière dans une grande institution scientifique française, et que cela soit aussi une façon pour cette institution de contribuer à l’essor de la Tunisie démocratique.

Mes dixièmes remerciements s’adressent à Jean-Marc Martinez, à Christophe Chalons et, à nouveau, à Samuel Kokh. À Jean-Marc Martinez pour toutes nos discussions sur des thèmes allant de l’Algérie française à son expérience des cours de Grothendieck, en passant par l’opportunité de nationaliser ou non le système bancaire ou de valoriser l’agriculture biologique sur le site du CEA-Saclay. À Christophe Chalons et à Samuel Kokh pour nos nombreuses discussions sur des sujets tellement nombreux que quelques pages de remerciements n’y suffiraient pas. Je me limiterai ici à affirmer que nos échanges scientifiques récents ne pourront que se poursuivre.

Mes onzièmes remerciements vont à l’ensemble de mes collègues du Laboratoire d’Études Thermo-hydrauliques des Réacteurs qui – à une époque où les réflexions et demandes sur le futur réacteur Jules Horowitz, sur les futurs réacteurs embarqués et sur la quatrième génération sont omni présentes – font face à des défis bien plus difficiles à relever que celui de soutenir une HDR.

Mes douzièmes remerciements vont à Bruno Després, Olivier Lafitte et Rémi Sentis qui ont accepté d’être examinateurs, à Thierry Goudon, Hervé Guillard et Shi Jin qui ont accepté d’être rapporteurs, et à François Golse qui a accepté d’être Président du jury. Le lecteur attentif aura remarqué que je n’ai remercié que sept personnes pour un jury constitué de huit personnes. C’est parce qu’il me faut remercier tout spécialement Kazuo Aoki qui a accepté de venir de Kyoto pour participer à un jury d’HDR dont l’orateur aura préféré s’exprimer dans la langue de Molière plutôt que dans celle de Kawabata.

Je terminerai ces remerciements par quelques remerciements personnels.

Je remercie mes amis, musiciens ou non, pour leur présence constante.

Je remercie mes familles française et québécoise. Ma famille française pour m’avoir transmis et appris (je pense) la passion de la Recherche et les valeurs qu’elle implique, pour m’avoir appris (je pense) à apprécier les choses simples *a priori* sans valeurs. Ma famille québécoise pour m’avoir appris (j’en suis certain) ce que les valeurs d’un peuple jeune et dynamique en train de construire son Histoire pouvait avoir de rafraîchissant et d’exemplaire.

Merci tout simplement à mes parents, à ma sœur Delphine, à Khaldoun et à ma belle Isabelle.

Le présent document correspond au TOME 1 du mémoire d'HDR qui est constitué de :

TOME 1 : *Mémoire de synthèse*

TOME 2 : *Recueil de publications*. MODÈLES CINÉTIQUES, RELAXATION ET COUPLAGE CINÉTIQUE-FLUIDE

TOME 3 : *Recueil de publications*. MODÈLES FLUIDES À BAS NOMBRE DE MACH

Table des matières

Table des matières	I
Introduction	3
I Modèles cinétiques	5
1 Équations de Fokker-Planck dans un plasma chaud	7
1.1 Collisions ion-électron	8
1.1.1 Propriétés du système	9
1.1.2 La moyenne entropique	10
1.2 Collisions ion-ion isotropes	12
1.3 Le schéma de Chang et Cooper dans le cas linéaire	13
1.4 Moyenne entropique versus moyenne de Chang et Cooper	15
1.4.1 Comportement en homogène en espace	15
1.4.2 Comportement sur un cas-test de type implosion laser	15
2 Équations de Boltzmann semi-classiques	17
2.1 Réaction thermonucléaire	17
2.1.1 Les opérateurs de collision	19
2.1.2 Propriétés des opérateurs	20
2.1.3 Calcul du terme source $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}$	21
2.2 Transition d'énergie quantique	22
2.2.1 L'opérateur de collision	23
2.2.2 Construction d'une classe admissible de sections efficaces	24
2.2.3 Propriétés et notion de catalyseur	26
2.2.4 Limite fluide	28
3 Analyse de l'algorithme LBM appliqué à l'équation de la chaleur	31
3.1 Construction de l'algorithme	32
3.2 Lien avec les différences finies	33
3.3 Stabilité, convergence dans L^∞ et principe du maximum	34
3.4 Limitation de l'algorithme	34
II Relaxation et couplage cinétique-fluide	35
4 Relaxation et analogies avec la théorie cinétique	37
4.1 Relations de fermeture	39
4.1.1 Mélange de gaz	39
4.1.2 Mélange de fluides non-miscibles	39
4.1.3 Fraction massique versus fraction volumique	40
4.1.4 Hypothèse thermodynamique	40

4.2	Entropie thermodynamique pour le mélange	40
4.3	Hyperbolicité	41
4.4	Système avec relaxation pour un mélange binaire	42
4.4.1	Cas d'un mélange de gaz caractérisé par (4.6)(4.11)	42
4.4.2	Cas d'un mélange de fluides non-miscibles caractérisé par (4.8)(4.11)	43
4.5	Développement de Chapman-Enskog pour un mélange binaire	45
4.5.1	Limite fluide au premier ordre	45
4.5.2	Calcul des coefficients de diffusion	46
4.6	Analogie avec la théorie cinétique	47
4.7	Schémas de relaxation dans le cas d'un mélange binaire	48
5	Couplage cinétique-fluide. Application à l'enrichissement par laser	49
5.1	Séparateur, cratère et structure de la zone d'émission	51
5.2	Condition aux limites à l'interface cinétique-fluide	51
5.2.1	Schéma cinétique dans le cas d'un gaz parfait caractérisé par $\gamma = 3$	52
5.2.2	Schéma cinétique adapté à l'équation d'état de l'uranium ou du fer	53
5.2.3	Schéma cinétique adapté au mélange uranium-fer	58
5.2.4	Conditions aux limites à l'interface cinétique-fluide	59
5.3	Couche de Knudsen et raccordement à la surface d'émission du cratère	60
5.3.1	Couche de Knudsen au voisinage de la surface d'émission du cratère	60
5.3.2	Raccordement du schéma cinétique à la surface d'émission du cratère	61
5.4	Algorithme de couplage cinétique-fluide	62
5.5	Simulation d'une détente d'uranium-fer	63
5.5.1	Modélisation des atomes d'uranium et de fer	63
5.5.2	Modélisation de la surface d'émission du cratère	64
5.5.3	Résultats numériques	64
5.6	Un second schéma entropique dans le cas de l'équation d'état de l'uranium ou du fer	67
III	Modèles fluides à bas nombre de Mach	69
6	Un modèle diphasique à bas nombre de Mach	71
6.1	Dérivation formelle du système DLMN	73
6.1.1	Le système de Navier-Stokes diphasique compressible	73
6.1.2	Hypothèses de modélisation et adimensionnalisation	74
6.1.3	Le système DLMN	75
6.2	Propriétés du système DLMN	77
6.2.1	Conservation de la masse et de l'énergie	77
6.2.2	Décroissance de l'entropie	77
6.2.3	Dilatation et compression thermique d'une bulle	78
6.2.4	Dégénérescence lorsqu'un des fluides est incompressible	79
6.3	Importance de l'existence d'une entropie associée au système DLMN	80
6.4	Résolution numérique 2D du système DLMN dans le cas potentiel	81
6.4.1	Le système DLMN potentiel	81
6.4.2	Le schéma numérique 2D	82
6.4.3	Résultats numériques 2D	84
6.4.4	Lien avec le schéma entropique appliqué à l'opérateur de Fokker-Planck	85

7	Un modèle abstrait de vibration de bulle et simulations AMR	87
7.1	Modèle abstrait de vibration de bulle	87
7.1.1	Le modèle ABV	87
7.1.2	Calcul explicite du volume des bulles	88
7.1.3	Analyse théorique	88
7.2	Résolution numérique sur maillage cartésien fixe	89
7.3	Résolution numérique sur maillage cartésien avec AMR	90
7.3.1	Pourquoi un algorithme AMR ?	90
7.3.2	Algorithme AMR sur maillage cartésien	90
7.3.3	Résultats avec AMR cartésien dans le cas du transport linéaire	93
7.3.4	Résultats avec AMR cartésien dans le cas du modèle ABV	93
8	Analyse des schémas de type Godunov à bas nombre de Mach	97
8.1	Convergence du compressible vers l'incompressible	97
8.1.1	Le cas non-linéaire	98
8.1.2	Ondes parasites	99
8.1.3	Le cas linéaire	99
8.1.4	Une condition suffisante pour éviter la création d'ondes parasites	101
8.2	Analyse du schéma de Godunov dans le cas de l'équation des ondes linéaire	101
8.3	Le schéma de Godunov bas Mach en linéaire	102
8.4	Le schéma de Roe-Turkel en linéaire	103
8.5	Construction d'une classe de schémas colocalisés précis à bas nombre de Mach	103
8.6	Le cas particulier des maillages triangulaires	104
8.7	Lien formel avec un schéma incompressible colocalisé	104
8.8	Résultats numériques	105
8.8.1	Le système d'Euler en domaine ouvert	105
8.8.2	Le système de Navier-Stokes en domaine fermé	105
	Conclusion	107
	Articles avec comité de lecture	110
	Comptes rendus de congrès avec comité de lecture	111
	Rapports	113
	Autres références	119

Introduction

CE mémoire présente l'ensemble des travaux que nous avons réalisés de 1995 à 2010. Celui-ci s'articule en trois grandes parties. Dans la première partie, nous étudions et discrétisons des modèles cinétiques. Dans la deuxième partie, nous nous attachons à mettre en avant les points communs entre la notion de relaxation appliquée à des modèles fluides et la théorie cinétique standard, et nous proposons un algorithme de couplage cinétique-fluide. Cette deuxième partie peut être vue comme une transition entre la première et la troisième partie où nous étudions des modèles fluides et des schémas numériques adaptés à la modélisation d'écoulements fluides à bas nombre de Mach.

Nous proposons ci-dessous un résumé succinct de l'ensemble des chapitres de ces trois parties.

I - Modèles cinétiques

Chapitre 1. Équations de Fokker-Planck dans un plasma chaud. Nous nous intéressons à la discrétisation de l'opérateur cinétique de Fokker-Planck décrivant les collisions entre ions et électrons dans un plasma chaud. En introduisant la notion de *moyenne entropique*, nous proposons un schéma numérique entropique. L'idée centrale pour obtenir ce caractère entropique est d'établir pour ce schéma numérique l'équivalence au niveau discret entre la formulation de Fokker-Planck et la formulation de Landau logarithmique de l'opérateur de collision. Nous montrons également le caractère entropique du schéma numérique de Chang & Cooper [14] dans le cas linéaire en établissant pour ce schéma numérique l'équivalence au niveau discret entre la formulation de Fokker-Planck et la formulation de Landau non-logarithmique de l'opérateur de collision. Des résultats numériques obtenus dans des conditions qualitativement représentatives de celles rencontrées dans une implosion laser de type *fusion par confinement inertiel* soulignent qu'en non-linéaire, le schéma numérique basé sur la *moyenne entropique* est à la fois plus précis et plus robuste que le schéma numérique de Chang & Cooper. Ces travaux ont été réalisés au CEA-DAM¹.

Chapitre 2. Équations de Boltzmann semi-classiques. Dans une première section, nous proposons, étudions les propriétés de base et discrétisons un opérateur cinétique de type Boltzmann semi-classique modélisant la réaction thermonucléaire entre un ion deutérium et un ion tritium donnant une particule α et un neutron. Cet opérateur trouve ici son cadre applicatif dans le domaine de la *fusion par confinement inertiel*. Ces travaux ont été réalisés au CEA-DAM. Dans une deuxième section, nous étudions les propriétés de base de l'opérateur cinétique de Boltzmann semi-classique proposé par Wang-Chang & Uhlenbeck [102] dans le cas non-dégénéré, et par Waldmann & Trübenbacher [101] dans le cas dégénéré. Cet opérateur modélise ici les transitions d'énergie quantique dans les couches électroniques d'atomes d'uranium et de fer provoquées par les collisions entre ces mêmes atomes au sein du procédé SILVA de *Séparation Isotopique par Laser sur Vapeur Atomique*. Ces travaux ont été réalisés au CEA-DCC².

Chapitre 3. Analyse de l'algorithme LBM appliqué à l'équation de la chaleur. En partant d'un p-système avec relaxation similaire à celui étudié par Hsiao & Liu [55] et par Jin & Levermore [60], nous construisons

¹DAM est l'acronyme de *Direction des Applications Militaires*.

²DCC est l'acronyme de *Direction du Cycle du Combustible*.

dans le cas de l'équation de la chaleur plusieurs algorithmes de type *Méthode de Boltzmann sur Réseau* (MBR) connue en anglais sous le nom de *Lattice Boltzmann Method* (LBM). En montrant l'équivalence avec le schéma numérique de type différences finies de Du Fort & Frankel [26], nous obtenons la stabilité inconditionnelle et la convergence dans L^∞ des algorithmes LBM obtenus. Cette équivalence permet également d'améliorer les résultats déjà connus sur le schéma de Du Fort & Frankel, les manipulations algébriques à partir des algorithmes LBM étant très simples. Enfin, nous soulignons les limitations des algorithmes LBM obtenus. Ces travaux ont été réalisés à la fois au Département de Physique de l'Université McGill de Montréal et au CEA-DEN³.

II - Relaxation et couplage cinétique-fluide

Chapitre 4. Relaxation et analogies avec la théorie cinétique. Après avoir clairement défini la différence entre un mélange de gaz et un mélange de fluides non-miscibles, nous étudions la limite fluide d'un système avec relaxation pour ces deux types de mélange. Dans le cas d'un mélange binaire de fluides non-miscibles, le système avec relaxation correspond à un modèle diphasique à sept équations de type Baer & Nunziato [6]. La limite fluide à l'ordre un est formellement obtenue *via* un développement de Chapman-Enskog. Dans le cas d'un mélange binaire de gaz, nous retrouvons des phénomènes de diffusion tels que la loi de Fick, la barodiffusion ou la thermodiffusion (appelée aussi effet Soret). Dans le cas d'un mélange binaire de fluides non-miscibles, nous retrouvons un modèle d'écart de vitesse et un modèle de type loi de Fick, modèles parfois utilisés dans les modélisations à l'échelle moyennée d'écoulements diphasiques dans un cœur de réacteur nucléaire à eau. Nous terminons cette étude en soulignant les points communs entre la notion de relaxation appliquée à des modèles fluides et la théorie cinétique standard. La mise en évidence de ces points communs nous semble utile d'un point de vue didactique, le développement de Chapman-Enskog étant beaucoup plus complexe à réaliser sur une équation cinétique de type Boltzmann par rapport à celui réalisé sur le système avec relaxation. Ces travaux ont été réalisés à la fois au CEA-DCC et au CEA-DEN.

Chapitre 5. Couplage cinétique-fluide. Application à l'enrichissement par laser. Nous construisons un algorithme de couplage cinétique-fluide qui raccorde une zone cinétique décrite par les équations cinétiques de Wang-Chang & Uhlenbeck à la limite fluide de ce système dans le cas multi-espèces. Ce couplage cinétique-fluide, dont le but est de réduire le coût du calcul, s'inspire des travaux de Qiu [11], et nous incite à écrire un schéma cinétique adapté aux équations d'état du mélange décrit par la limite fluide du modèle cinétique. Cette étude est motivée par le procédé SILVA d'enrichissement de l'uranium par laser dans lequel existe, d'une part, une zone à l'équilibre thermodynamique (zone fluide) et une zone hors équilibre thermodynamique (couche de Knudsen) où un mélange binaire de gaz constitué d'atomes d'uranium et de fer est très dense, et, d'autre part, une zone où ce mélange de gaz d'uranium-fer est raréfié (zone cinétique). Les résultats numériques montrent la précision et la robustesse de l'algorithme de couplage cinétique-fluide proposé. Le gain sur le temps de calcul et sur la mémoire RAM induit par l'algorithme de couplage cinétique-fluide permet de réaliser un plus grand nombre de calculs numériques. Il est alors possible de mieux comprendre la physique de la détente d'uranium-fer en modifiant tel ou tel paramètre de modélisation. Par exemple, l'effet catalyseur du fer vis à vis de la vitesse de retour à l'état fondamental de l'uranium est numériquement mis en évidence (cet effet est expliqué au Chapitre 2). Ces travaux ont été réalisés au CEA-DCC.

III - Modèles fluides à bas nombre de Mach

Chapitre 6. Un modèle diphasique à bas nombre de Mach. En nous inspirant de travaux réalisés en combustion lente par Majda dans [73, 75], nous proposons un modèle fluide sans ondes acoustiques adapté à la modélisation à bas nombre de Mach de la déformation d'une interface entre deux fluides non-miscibles induite par de forts gradients thermiques. Ce modèle nous permet de retrouver facilement des comportements phénoménologiques standards à bas nombre de Mach tels que la dilatation d'une bulle de

³DEN est l'acronyme de *Direction de l'Énergie Nucléaire*.

gaz se réchauffant. Nous discrétisons ensuite sur maillage cartésien ce modèle diphasique à bas nombre de Mach en supposant que le champ de vitesse est potentiel, l'algorithme de capture de l'interface utilisant le schéma anti-dissipatif de Després & Lagoutière [25]. Cette simplification focalise l'étude sur l'influence du champ de température, ce qui nous permet de proposer un schéma numérique entropique sous certaines conditions. Les résultats numériques 2D valident et justifient l'algorithme numérique proposé. Ces travaux ont pour cadre applicatif l'étude à l'échelle des bulles d'écoulements diphasiques à bas nombre de Mach dans un cœur de réacteur nucléaire à eau, et ont été réalisés au CRM⁴ de Montréal.

Chapitre 7. Un modèle abstrait de vibration de bulle et simulations AMR. Nous proposons, analysons et discrétisons un modèle simplifié de déformation d'une interface $\Sigma(t)$ qui couple de façon non-linéaire une équation hyperbolique à une équation elliptique. Ce modèle – que nous nommons *modèle abstrait de vibration de bulle* ou *abstract bubble vibration model* (ABV) en anglais – est intéressant car sa structure mathématique est proche de celle du modèle diphasique à bas nombre de Mach avec hypothèse de champ de vitesse potentiel étudié au Chapitre 6, ce qui nous permet d'étudier l'existence et l'unicité en temps petit de solutions régulières pour ce modèle ABV en appliquant les techniques développées par Embid [29, 30] pour le modèle bas Mach proposé par Majda dans [73, 75]. Mais, surtout, le modèle ABV permet de valider et d'étudier la précision et la robustesse de tout algorithme de suivi d'interface car il est possible d'établir une formule explicite donnant l'évolution au cours du temps du volume de la bulle d'interface $\Sigma(t)$. Ces travaux ont été réalisés au CRM de Montréal. Afin d'améliorer la précision de l'algorithme de résolution du modèle ABV tout en diminuant le coût du calcul, on couple à celui-ci un algorithme de raffinement automatique de maillage de type AMR sur maillage cartésien. Des résultats numériques 2D et 3D en linéaire valident le couplage du schéma anti-dissipatif de Després & Lagoutière avec l'AMR, et montrent clairement le gain en précision ainsi que le gain sur le temps de calcul, sur la mémoire RAM et sur le stockage du calcul induits par l'AMR ; des résultats numériques 2D avec AMR obtenus avec le modèle ABV vont dans le même sens. Ces travaux ont pour cadre applicatif l'étude à l'échelle des bulles d'écoulements diphasiques à bas nombre de Mach dans un cœur de réacteur nucléaire à eau, et ont été réalisés au CEA-DEN en collaboration avec l'ONERA.

Chapitre 8. Analyse des schémas de type Godunov à bas nombre de Mach. Nous analysons sur maillage cartésien le mauvais comportement à bas nombre de Mach des schémas de type Godunov appliqués au système d'Euler compressible. Nous montrons que ce problème peut être étudié sur l'équation des ondes linéaire et ne concerne que les géométries 2D et 3D. Les arguments théoriques sont basés sur la décomposition de Hodge, sur le fait qu'un sous-espace *ad hoc* est ou n'est pas invariant pour l'équation des ondes linéaire et sur la notion d'équation modifiée du premier ordre. Cette approche nous permet d'intuiter en non-linéaire une modification très simple à appliquer à tout schéma compressible colocalisé de type Godunov ou non, rendant celui-ci précis à bas nombre de Mach sur tout type de maillage. Elle nous permet également de justifier d'autres schémas colocalisés précis à bas nombre de Mach comme le schéma de Roe-Turkel. Sur maillage cartésien et en linéaire, on établit un lien formel entre le schéma de Godunov ainsi modifié et le schéma incompressible colocalisé stabilisé avec une stabilisation de type Brezzi-Pitkäranta proposé par Eymard *et al.* dans [33] pour résoudre le système incompressible de Stokes. Des résultats numériques justifient les arguments théoriques proposés. Ces travaux ont pour cadre applicatif l'étude à l'échelle des bulles ou à l'échelle moyennées d'écoulements diphasiques à bas nombre de Mach dans un cœur de réacteur nucléaire à eau, et ont été réalisés au CEA-DEN.

⁴CRM est l'acronyme de *Centre de Recherches Mathématiques*.

Première partie

Modèles cinétiques

Chapitre 1

Équations de Fokker-Planck dans un plasma chaud

CE chapitre résume les travaux publiés dans [Dellacherie *et al.*, 1998], [DBS99], [Dellacherie, 1999], [Dellacherie *et al.*, 2001], [Dellacherie, 2002] et [Dellacherie et Buet, 2010]. Ces articles se penchent sur la résolution numérique homogène en espace d'opérateurs cinétiques de type Fokker-Planck modélisant les interactions entre ions et électrons dans un plasma chaud. Le domaine d'application concerne plus particulièrement la Fusion par Confinement Inertiel (FCI). La FCI consiste à créer les conditions thermodynamiques propices à la réaction thermonucléaire



(cf. Chapitre 2, §2.1) dans une sphère d'environ 1 *mm* de diamètre remplie d'un mélange équimolaire de Deutérium-Tritium (D-T) (dans (1.1), D, T, α et n sont respectivement un ion deutérium, un ion tritium, un ion hélium 4 et un neutron). Pour obtenir ces conditions, la sphère de D-T est irradiée (directement ou indirectement) par des lasers intenses qui ablatent sa coquille externe. Par réaction de type effet fusée, une implosion hydrodynamique converge vers le centre pour former un point chaud. À la formation du point chaud, la température peut atteindre une cinquantaine de millions de degrés. Le D-T est alors totalement ionisé ; ions et électrons forment un plasma chaud. Lorsque la température est suffisamment importante, la réaction thermonucléaire (1.1) est possible. De plus, dans des conditions thermodynamiques particulièrement favorables, celle-ci peut être auto-entretenu¹ *via* les particules α qui déposent sur le plasma de D-T non-brûlé une partie de l'énergie thermonucléaire de 17,6 MeV : une onde thermonucléaire centrifuge brûle alors l'ensemble du mélange de D-T.

Lorsque l'on se contente de décrire les ions D (masse atomique de 2) et T (masse atomique de 3) par l'intermédiaire d'un ion moyen (masse atomique de 2,5) et que l'on néglige la disparition des ions D-T suite à la réaction nucléaire (1.1), le choc hydrodynamique et l'onde thermonucléaire peuvent en partie être modélisés par le système compressible d'Euler à deux températures

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} N + \nabla_x \cdot (NU) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (mNU) + \nabla_x \cdot (mNU \otimes U) + \nabla_x [N(T + ZT_e)] = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} NT \right) + \nabla_x \cdot \left(\frac{3}{2} NTU \right) + NT \nabla_x \cdot U = 3\Omega N(T_e - T) + \mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} ZNT_e \right) + \nabla_x \cdot \left(\frac{3}{2} ZNT_e U \right) + ZNT_e \nabla_x \cdot U = 3\Omega N(T - T_e) + \mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow e}^{fluide}. \end{array} \right. \quad (1.2)$$

¹On dit que l'on a atteint le *breakeven*.

Dans (1.2), $(t, x) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega$ où $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ (Ω est la cible de D-T, initialement sphérique), et $Z \in \mathbb{N}_*$, $m \in \mathbb{R}_*$, $N \in \mathbb{R}_*$, $U \in \mathbb{R}^3$, $T \in \mathbb{R}_*$ et $T_e \in \mathbb{R}_*$ définissent respectivement le numéro atomique de l'ion moyen ($Z = 1$ pour le D et le T, donc également pour l'ion moyen), la masse atomique, la densité de l'ion moyen, la vitesse de l'ion moyen², la température de l'ion moyen et la température des électrons (T et T_e sont exprimées en unité d'énergie). Les quantités positives $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}(T, N)$ et $\Omega(T_e, N)$ définissent respectivement le dépôt d'énergie des particules α sur le plasma³ (cf. Chapitre 2, §2.1) et la fréquence des collisions ion-électron. Ces deux grandeurs physiques dépendent de façon non-linéaire de T , T_e et N . De même, le terme source $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow e}^{fluide}$ dans l'équation de transport de l'énergie électronique (1.2) décrit le dépôt d'énergie des particules α sur les électrons ; ce terme source n'est pas étudié dans ce travail.

La fréquence de collision $\Omega(T_e, N)$ est proportionnelle à $NT_e^{-3/2}$. En supposant que $T_e = \mathcal{O}(T)$, on peut alors écrire que le libre parcours moyen λ_i de l'ion moyen est proportionnel à T^2 . Or, à la formation du point chaud, T est de l'ordre de plusieurs dizaines de millions de degrés : dans ces conditions, on vérifie que λ_i est supérieur au diamètre de la sphère de D-T. Le système fluide (1.2) n'est alors plus valable et doit être remplacé par le système cinétique

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f - \frac{\nabla_x(ZNT_e)}{Nm} \cdot \nabla_v f = S(f) + B(f) + P(f) + Q_{\alpha \rightarrow i}^{cinétique}(f), \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} ZNT_e \right) + \nabla_x \cdot \left(\frac{3}{2} ZNT_e U \right) + ZNT_e \nabla_x \cdot U = 3\Omega(T_e, N)N(T - T_e) + \mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow e}^{fluide} \end{cases} \quad (1.3)$$

dans lequel seuls les électrons sont supposés être à l'équilibre thermodynamique (la masse très faible des électrons implique que le libre parcours moyen λ_e des électrons reste petit par rapport au diamètre de la sphère de D-T). Dans (1.3), $(t, x, v) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega \times \mathbb{R}^3$, et $f(t, x, v) \in \mathbb{R}^+$, $S(f)$, $B(f)$ et $P(f)$ définissent respectivement la distribution de l'ion moyen, les opérateurs de collisions ion-électron (cf. §1.1) et ion-ion (cf. §1.2) de type Fokker-Planck, et l'opérateur de collision nucléaire de type Boltzmann (cf. Chapitre 2, §2.1). L'opérateur $Q_{\alpha \rightarrow i}^{cinétique}(f)$ décrit le dépôt d'énergie sur le plasma de D-T *via* le ralentissement des particules α . L'opérateur $Q_{\alpha \rightarrow i}^{cinétique}(f)$ est donc la version cinétique du terme source $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}$ dans (1.2). L'opérateur cinétique $Q_{\alpha \rightarrow i}^{cinétique}(f)$ n'est pas étudié dans ce travail ; seul le terme source $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}$ sera décrit au §2.1 du Chapitre 2 (sans l'hypothèse simplificatrice d'ion moyen).

1.1 Collisions ion-électron

Cette section résume les travaux présentés dans [Dellacherie *et al.*, 1998], [DBS99], [Dellacherie *et al.*, 2001] et [Dellacherie, 2002] dans lesquels nous nous sommes intéressés à la résolution numérique du système cinétique ion-électron homogène en espace

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} = S(f), \\ \frac{Z}{2} \frac{\partial}{\partial t} (NT_e) = \Omega N(T - T_e), \\ f(t = 0) = f^0, \\ T_e(t = 0) = T_e^0 \end{cases} \quad (1.4)$$

où l'opérateur de Fokker-Planck $S(f)$ est donné par

$$S(f)(v) = \Omega \nabla_v \cdot \left[(v - U)f + \frac{T_e}{m} \nabla_v f \right]. \quad (1.5)$$

²Dans (1.2), la densité électronique et la vitesse électronique sont respectivement égales à ZN et U .

³On pourrait aussi tenir compte d'un dépôt d'énergie des neutrons sur le plasma de D-T. Mais, ce dépôt d'énergie est beaucoup plus faible que celui des particules α sur ce même plasma, les neutrons ne subissant aucune interaction coulombienne avec le plasma. De plus, il faudrait en toute rigueur également tenir compte d'un dépôt de quantité de mouvement dans (1.2) des neutrons et des particules α sur le plasma de D-T : dans nos travaux, ce terme n'a pas du tout été étudié.

On rappelle que $N = \langle f \rangle$, $U = \langle vf \rangle / N$ et $\frac{3T}{2} = \frac{m}{2} \langle (v - U)^2 f \rangle / N$ où $\langle \cdot \rangle := \int_{\mathbb{R}^3} \cdot dv$.

1.1.1 Propriétés du système

L'opérateur de Fokker-Planck $S(f)$ vérifie les propriétés de conservation :

Propriété 1.1.1.

$$\begin{cases} \langle S(f) \rangle = 0, & (a) \\ \langle v S(f) \rangle = 0, & (b) \\ \frac{m}{2} \langle v^2 S(f) \rangle = 3\Omega N(T_e - T). & (c) \end{cases} \quad (1.6)$$

L'opérateur $S(f)$ vérifie également :

Lemme 1.1.1. *Pour tout $f > 0$ et $T_e > 0$:*

$$\langle S(f) \log \left(\frac{f}{\mathcal{M}_{N,U,T_e}} \right) \rangle \leq 0 \quad (1.7)$$

où

$$\mathcal{M}_{N,U,T_e}(v) = \frac{N}{(2\pi T_e/m)^{3/2}} \exp \left[-\frac{m(v-U)^2}{2T_e} \right]. \quad (1.8)$$

De plus, $\langle S(f) \log (f/\mathcal{M}_{N,U,T_e}) \rangle = 0$ si et seulement si $f = \mathcal{M}_{N,U,T_e}$.

L'inégalité (1.7) s'obtient très simplement en remarquant que l'opérateur de Fokker-Planck (1.5) – qui est de la forme *convection-diffusion* – s'écrit aussi sous la forme de *Landau logarithmique*

$$S(f) = \Omega \frac{T_e}{m} \nabla_v \cdot \left[f \nabla_v \log \left(\frac{f}{\mathcal{M}_{N,U,T_e}} \right) \right]. \quad (1.9)$$

Le Lemme 1.1.1 permet d'obtenir le théorème H suivant :

Lemme 1.1.2. *Soit l'entropie cinétique*

$$H(f, T_e)(t) = \langle f \log f \rangle - \frac{3}{2} Z N \log T_e \quad (1.10)$$

et soit (f, T_e) solution de (1.4). Alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} H(f, T_e)(t) = \langle S(f) \log \left(\frac{f}{\mathcal{M}_{N,U,T_e}} \right) \rangle \leq 0. \quad (1.11)$$

Ces propriétés sont essentielles : elles vont guider notre principe de construction d'un schéma numérique robuste au §1.1.2.

Dans [Dellacherie, 2002], nous avons par ailleurs établi le résultat suivant qui généralise dans le cas du système non-linéaire (1.4) un résultat préalablement établi par Toscani [94] dans le cas linéaire :

Théorème 1.1.1. *Soit (f, T_e) solution de (1.4). Alors, il existe $\alpha > 0$ tel que*

$$\|f - \mathcal{M}_{N,U,T_e^\infty}\|_{L^1} \leq \alpha \exp(-\omega t) \quad (1.12)$$

et

$$|T_e - T_e^\infty| \leq \alpha \exp \left(-2 \frac{1+Z}{Z} \omega t \right) \quad (1.13)$$

avec $T_e^\infty = \frac{T^0 + Z T_e^0}{1+Z}$ et $\omega = \inf_{t \geq 0} \Omega$.

Ce résultat montre que les électrons ont tendance à relaxer vers l'équilibre thermodynamique plus rapidement que les ions D-T (la température des ions relaxe cependant vers la température d'équilibre à la même vitesse que celle des électrons du fait de la conservation de l'énergie). Notons que $\omega > 0$ puisque Ω est une fonction décroissante de la température $T_e(t)$ qui est majorée par $\max(T_e^0, T_e^\infty)$.

1.1.2 La moyenne entropique

Dans [Dellacherie *et al.*, 2001], nous avons proposé le schéma numérique semi-discret monodimensionnel

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{df_j}{dt} = S(f)_j, & \text{(a)} \\ \frac{Z}{2} \frac{d}{dt}(NT_e) = \Omega(\widetilde{NT} - NT_e), & \text{(b)} \\ f_j(0) = f_j^0, & \text{(c)} \\ T_e(0) = T_e^0 & \text{(d)} \end{array} \right. \quad (1.14)$$

pour résoudre (1.4) dans l'intervalle de vitesse $[v_{1/2}, v_{j_{\max}+1/2}] \subset \mathbb{R}$ ($v_{1/2} < 0$ et $v_{j_{\max}+1/2} > 0$). Dans (1.14), $j \in \{1, \dots, j_{\max}\}$ est l'indice de la maille d'épaisseur Δv centrée en v_j ,

$$N = \langle f \rangle \quad \text{où} \quad \langle \cdot \rangle := \sum_j \cdot \Delta v \quad (1.15)$$

et

$$S(f)_j = \frac{\Omega}{\Delta v} \left[(v_{j+1/2} - \widetilde{U}) \widetilde{f}_{j+1/2} - (v_{j-1/2} - \widetilde{U}) \widetilde{f}_{j-1/2} \right] + \frac{\Omega T_e}{m \Delta v^2} (a_j f_{j+1} - b_j f_j + c_j f_{j-1}) \quad (1.16)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{ll} \widetilde{N} = \sum_j \widetilde{f}_{j+1/2} \Delta v, & \text{(a)} \\ \widetilde{U} = \sum_j v_{j+1/2} \widetilde{f}_{j+1/2} \Delta v / \widetilde{N} + \delta \widetilde{u}, & \text{(b)} \\ \widetilde{NT} = \sum_j m(v_{j+1/2} - \widetilde{U})^2 \widetilde{f}_{j+1/2} \Delta v + \widetilde{N} \delta \widetilde{t}. & \text{(c)} \end{array} \right. \quad (1.17)$$

Comme on résout (1.4) sur un intervalle borné $[v_{1/2}, v_{j_{\max}+1/2}]$ et non sur $\mathbb{R}$, on impose des conditions aux limites de Robin

$$(v - U)f + \frac{T_e}{m} \partial_v f = 0 \quad \text{en} \quad v = v_{1/2} \quad \text{et} \quad v = v_{j_{\max}+1/2} \quad (1.18)$$

pour que le système (1.4) reste conservatif en masse⁴. On prend en compte ces conditions aux limites dans l'opérateur discret (1.16) en imposant

$$\left\{ \begin{array}{ll} a_j = 1 & \text{si } j \neq j_{\max}, \\ b_j = 2 & \text{si } j \in \{2, \dots, j_{\max} - 1\}, \\ c_j = 1 & \text{si } j \neq 1, \\ b_1 = b_{j_{\max}} = 1 & \text{et } a_{j_{\max}} = c_1 = 0 \end{array} \right. \quad (1.19)$$

et

$$\widetilde{f}_{1/2} = \widetilde{f}_{j_{\max}+1/2} = 0. \quad (1.20)$$

Les quantités $\delta \widetilde{u}$ et $\delta \widetilde{t}$ dans (1.17) sont des termes correctifs qui rendent le schéma numérique (1.16) conservatif en quantité de mouvement et en énergie⁵. Ceux-ci sont directement liés à l'application des

⁴Lorsque l'on résout le système (1.4) avec $v \in \mathbb{R}$, on suppose que f est à décroissance rapide. Dans ce cas, il y a conservation de la masse.

⁵Le schéma numérique (1.16) couplé aux conditions aux limites de Robin est par contre conservatif en masse sans terme correctif particulier.

conditions aux limites de Robin et sont définis avec⁶

$$\begin{cases} \delta\tilde{u} = \frac{T_e}{m\tilde{N}} (f_{j_{\max}} - f_1), \\ \delta\tilde{t} = \frac{T_e}{\tilde{N}} \left[f_{j_{\max}} (v_{j_{\max}+1/2} - \tilde{U}) + f_1 (\tilde{U} - v_{1/2}) \right]. \end{cases} \quad (1.21)$$

Notons que le facteur 3 intervenant dans la définition classique de la température $3NT := m\langle (v - U)^2 f \rangle$ n'apparaît pas dans la définition (1.17)(c) de $\tilde{NT}$. Cela vient du fait que l'on suppose ici que $v \in \mathbb{R}$ au lieu de $v \in \mathbb{R}^3$. Pour la même raison, la maxwellienne $\mathcal{M}_{N,U,T_e}(v)$ ainsi que l'entropie $H(f, T_e)$ respectivement définies avec (1.8) et (1.10) sont remplacées par

$$\mathcal{M}_{N,U,T_e}(v) = \frac{N}{\sqrt{2\pi T_e/m}} \exp \left[-\frac{m(v - U)^2}{2T_e} \right]$$

et

$$H(f, T_e)(t) = \langle f \log f \rangle - \frac{ZN}{2} \log T_e.$$

Dans (1.16) et (1.17), $\tilde{f}_{j+1/2}(t)$ est une moyenne de $f_j(t)$ et $f_{j+1}(t)$ définie *via* la notion de *moyenne entropique* :

Définition 1.1.1. La moyenne entropique $\tilde{f}_{j+1/2}$ de deux quantités strictement positives f_j et f_{j+1} est définie avec

$$\tilde{f}_{j+1/2} = \begin{cases} \frac{f_{j+1} - f_j}{\log f_{j+1} - \log f_j} & \text{si } f_j \neq f_{j+1}, \\ f_j & \text{sinon.} \end{cases}$$

Par continuité, on étend cette définition en posant $\tilde{f}_{j+1/2} = 0$ lorsque $f_j = 0$ ou $f_{j+1} = 0$.

Le schéma numérique (1.14) vérifie le résultat suivant :

Théorème 1.1.2. Pour toute condition initiale strictement positive (f^0, T_e^0) , le schéma semi-discret (1.14)(1.16) admet une unique solution globale en temps (f, T_e) qui vérifie :

i)

$$H(f^\infty, T_e^\infty) \leq H(f, T_e);$$

ii)

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} f_j(t) = f_j^\infty;$$

iii)

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} T_e(t) = T_e^\infty$$

où l'état d'équilibre discret (f^∞, T_e^∞) est défini avec

$$\begin{cases} f_j^\infty = \frac{N}{\langle \mathcal{M}_{N, \tilde{U}^\infty, T_e^\infty} \rangle} \mathcal{M}_{N, \tilde{U}^\infty, T_e^\infty}(v_j), \\ \mathcal{M}_{N, \tilde{U}^\infty, T_e^\infty}(v) = \frac{N}{\sqrt{2\pi T_e^\infty/m}} \exp \left[-\frac{m(v - \tilde{U}^\infty)^2}{2T_e^\infty} \right] \end{cases} \quad (1.22)$$

⁶Pour les applications numériques, les termes correctifs (1.21) peuvent être négligés dès que $-v_{1/2}$ et $v_{j_{\max}+1/2}$ sont suffisamment grands.

sachant que $(\tilde{U}^\infty, T_e^\infty)$ est solution du système non-linéaire

$$\begin{cases} \frac{N}{\langle \mathcal{M}_{N, \tilde{U}^\infty, T_e^\infty} \rangle} \langle v \mathcal{M}_{N, \tilde{U}^\infty, T_e^\infty} \rangle = \langle v f^0 \rangle, \\ \frac{N}{\langle \mathcal{M}_{N, \tilde{U}^\infty, T_e^\infty} \rangle} \langle (v - U^0)^2 \mathcal{M}_{N, \tilde{U}^\infty, T_e^\infty} \rangle + \frac{ZN}{m} T_e^\infty = \langle (v - U^0)^2 f^0 \rangle + \frac{ZN}{m} T_e^0. \end{cases} \quad (1.23)$$

Soulignons que dans (1.22), $\frac{N}{\langle \mathcal{M}_{N, \tilde{U}^\infty, T_e^\infty} \rangle} \neq 1$. En effet, $\langle \cdot \rangle$ est la somme discrète $\sum_j \cdot \Delta v$ (voir (1.15)) et

non pas l'intégrale $\int_{\mathbb{R}} \cdot dv$. Du Théorème 1.1.2, on déduit par ailleurs :

Corollaire 1.1.1. *Pour toute condition initiale strictement positive (f^0, T_e^0) , le système (1.23) admet une unique solution.*

À l'instar du cas continu, l'état d'équilibre discret (f^∞, T_e^∞) est donc complètement caractérisé par la densité, la vitesse et l'énergie macroscopiques du système.

L'argument central dans la preuve du Théorème 1.1.2 réside dans le choix de la moyenne définissant $f_{j+1/2}$. En effet, en choisissant la *moyenne entropique*, on peut réécrire l'opérateur discret (1.16) sous une forme qui correspond à une discrétisation de la forme de Landau logarithmique (1.9). Cette équivalence discrète entre formulations de Fokker-Planck (1.5) et de Landau logarithmique (1.9) permet alors de vérifier au niveau discret d'un côté les égalités (1.6) – d'où l'obtention d'un schéma conservatif – et d'un autre côté l'inégalité (1.7) – d'où l'obtention d'un schéma entropique *i.e.* vérifiant (1.11) au niveau discret. C'est l'obtention du caractère entropique du schéma semi-discret (1.14) grâce à la moyenne introduite à la Définition 1.1.1 qui nous a incité à nommer celle-ci *moyenne entropique*.

Nous avons généralisé dans [Dellacherie, 2002] ces résultats au cas axisymétrique pour lequel $S(f)$ est défini avec

$$\begin{cases} S(f) = S(f)^\parallel + S(f)^\perp, \\ S(f)^\parallel = \Omega \partial_{v_\parallel} \left[(v_\parallel - U) f(v_\parallel, v_\perp) + \frac{T_e}{m} \partial_{v_\parallel} f(v_\parallel, v_\perp) \right], \\ S(f)^\perp = \frac{\Omega}{v_\perp} \partial_{v_\perp} \left\{ v_\perp \left[v_\perp f(v_\parallel, v_\perp) + \frac{T_e}{m} \partial_{v_\perp} f(v_\parallel, v_\perp) \right] \right\} \end{cases} \quad (1.24)$$

où $v_\parallel \in]-\infty, +\infty[$ et $v_\perp \in [0, +\infty[$ sont respectivement les vitesses radiale et orthoradiale.

Dans [Dellacherie *et al.*, 2001], nous avons également montré le caractère entropique du schéma explicite en temps déduit de (1.14) sous une contrainte de type CFL. Les résultats numériques montrent que ce schéma numérique est extrêmement robuste : en effet, son caractère entropique permet de résoudre le système ion-électron (1.4) sur un petit nombre de mailles. On constate de plus que, toujours sous une contrainte de type CFL et sur un maillage grossier ou non, la solution numérique (f_j^n, T_e^n) (n étant l'indice de temps) converge vers un équilibre thermodynamique discret (f_j^∞, T_e^∞) , ce qui est cohérent avec le résultat du Théorème 1.1.2 obtenu en semi-discret.

1.2 Collisions ion-ion isotropes

Nous avons appliqué dans [Dellacherie, 1999] les idées présentées au §1.1.2 au cas du système cinétique ion-ion

$$\frac{\partial f}{\partial t} = B(f) \quad (1.25)$$

lorsque l'opérateur de collision ion-ion $B(f)$ est isotrope et s'exprime donc en variable d'énergie $\varepsilon := mv^2$. Dans ce cas, l'opérateur de Fokker-Planck $B(f)$ est défini avec [7]

$$B(f) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \partial_\varepsilon \int_0^{+\infty} [f(\varepsilon_1) \partial_\varepsilon f(\varepsilon) - f(\varepsilon) \partial_{\varepsilon_1} f(\varepsilon_1)] J(\varepsilon, \varepsilon_1) d\varepsilon_1 \quad (1.26)$$

pour la forme de Fokker-Planck (*i.e.* forme convection-diffusion) et de manière équivalente avec

$$B(f) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \partial_{\varepsilon} \int_0^{+\infty} [\partial_{\varepsilon} \log f(\varepsilon) - \partial_{\varepsilon_1} \log f(\varepsilon_1)] f(\varepsilon) f(\varepsilon_1) J(\varepsilon, \varepsilon_1) d\varepsilon_1 \quad (1.27)$$

pour la forme de Landau logarithmique, $J(\varepsilon, \varepsilon_1)$ étant la version isotrope du tenseur de Landau à savoir

$$J(\varepsilon, \varepsilon_1) = \frac{1}{2} \left(\varepsilon^{3/2} + \varepsilon_1^{3/2} - \left| \varepsilon^{3/2} - \varepsilon_1^{3/2} \right| \right) = \min \left(\varepsilon^{3/2}, \varepsilon_1^{3/2} \right). \quad (1.28)$$

En utilisant à nouveau la *moyenne entropique* (voir la Définition 1.1.1) pour définir la distribution f aux interfaces du maillage en énergie, on rend équivalentes au plan discret, comme dans le cas ion-électron, les formulations de Fokker-Planck (1.26) et de Landau logarithmique (1.27), ce qui permet d'obtenir un schéma numérique conservatif et entropique. Là aussi, les résultats numériques sont concluants.

1.3 Le schéma de Chang et Cooper dans le cas linéaire

Cette section présente les travaux réalisés dans [Dellacherie et Buet, 2010]. On s'intéresse ici à l'équation linéaire

$$\frac{\partial f}{\partial t} = S(f) \quad (1.29)$$

où $S(f)$ est l'opérateur de Fokker-Planck linéaire

$$S(f) = \Omega \nabla_v \cdot \left[(v - U_e) f + \frac{T_e}{m} \nabla_v f \right], \quad (1.30)$$

$U_e \in \mathbb{R}^3$, $T_e \in \mathbb{R}_*^+$ et $\Omega \in \mathbb{R}_*^+$ étant constants. L'équation (1.29)(1.30) est donc la version linéaire de (1.4)(1.5). Le schéma de Chang et Cooper [14] est un schéma classique pour discrétiser des opérateurs de type Fokker-Planck [69, 22, 31, 80]. Dans le cas de l'équation linéaire (1.29)(1.30) écrite en géométrie monodimensionnelle, le schéma de Chang et Cooper explicite en temps est défini avec

$$\frac{1}{\Delta t} (f_j^{n+1} - f_j^n) = S(f^n)_j \quad (1.31)$$

et

$$S(f)_j = \frac{\Omega}{\Delta v} \left[(v_{j+1/2} - U_e) \bar{f}_{j+1/2} - (v_{j-1/2} - U_e) \bar{f}_{j-1/2} \right] + \frac{\Omega T_e}{m \Delta v^2} (a_j f_{j+1} - b_j f_j + c_j f_{j-1}) \quad (1.32)$$

où $a_j, b_j, c_j, \bar{f}_{1/2}$ et $\bar{f}_{j_{\max}+1/2}$ sont définis avec (1.19) et (1.20) (en remplaçant $\tilde{f}$ par $\bar{f}$ dans cette dernière relation). L'opérateur discret (1.32) est *quasi* identique à l'opérateur (1.16). La différence principale tient en ce que $\bar{f}_{j+1/2}$ n'est pas défini avec la *moyenne entropique* (voir la Définition 1.1.1) mais avec la *moyenne de Chang et Cooper* :

Définition 1.3.1. La moyenne de Chang et Cooper $\bar{f}_{j+1/2}$ de f_j et f_{j+1} est définie avec

$$\bar{f}_{j+1/2} = \delta_{j+1/2} f_j + (1 - \delta_{j+1/2}) f_{j+1} \quad (1.33)$$

où

$$\begin{cases} \delta_{j+1/2} = \frac{1}{w_{j+1/2}} - \frac{1}{\exp(w_{j+1/2}) - 1}, \\ w_{j+1/2} = \frac{m \Delta v}{T_e} (v_{j+1/2} - U_e). \end{cases}$$

Le schéma de Chang et Cooper (1.31)(1.32) – qui ne se limite pas au cas linéaire – a l'avantage de préserver l'état d'équilibre maxwellien

$$\mathcal{M}_{f^0} = \frac{N^0}{\sqrt{2\pi T_e/m}} \exp \left[-\frac{m(v - U_e)^2}{2T_e} \right]$$

lorsqu'il est atteint, $N^0 := \langle f^0 \rangle$ étant la densité macroscopique initiale⁷ (voir (1.15)). Malgré cette propriété intéressante, il est légitime de se poser la question de la positivité et de la convergence de la solution vers l'équilibre maxwellien en temps long sous critère CFL.

Pour répondre à cette équation, introduisons

$$\Delta t^n = \Delta t^* \cdot \frac{h_{\min}^n}{h_{\max}^n}$$

avec

$$\begin{cases} h_{\max}^n = \max_j \left(\frac{f^n}{\mathcal{M}_{f^0}} \right)_j, \\ h_{\min}^n = \min_j \left(\frac{f^n}{\mathcal{M}_{f^0}} \right)_j \end{cases}$$

et

$$\begin{cases} \Delta t^* = \frac{m}{4\Omega T_e} \cdot \frac{\Delta v^2}{M^0}, \\ M^0 = \max_j \left(\frac{\mathcal{M}_{f^0, j \pm 1}}{\mathcal{M}_{f^0, j}} \right). \end{cases}$$

Introduisons également l'entropie

$$H^n = \langle f^n \log \left(\frac{f^n}{\mathcal{M}_{f^0}} \right) \rangle.$$

Nous avons démontré dans [Dellacherie et Buet, 2010] le résultat suivant :

Proposition 1.3.1. *Pour toute condition initiale strictement positive $\{f_j^0\}_j$, lorsque $\bar{f}_{j+1/2}^n$ est la moyenne de Chang et Cooper de f_j^n et f_{j+1}^n , sous le critère CFL*

$$\Delta t \leq \Delta t^n, \tag{1.34}$$

le schéma explicite (1.31)(1.32) vérifie l'inégalité entropique

$$H^{n+1} \leq H^n. \tag{1.35}$$

De cette inégalité, on obtient que

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \Delta t^n = \Delta t^* \tag{1.36}$$

et

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} f_j^n = \frac{N^0}{\langle \mathcal{M}_{f^0, j} \rangle} \mathcal{M}_{f^0, j} \tag{1.37}$$

dès que $\Delta t > 0$.

Pour établir la preuve de la Proposition 1.3.1, il faut d'abord noter qu'au niveau continu, l'opérateur de Fokker-Planck (1.30) est équivalent à l'opérateur

$$S(f) = \Omega \frac{T_e}{m} \nabla_v \cdot \left[\mathcal{M}_{N, U_e, T_e} \nabla_v \left(\frac{f}{\mathcal{M}_{N, U_e, T_e}} \right) \right] \tag{1.38}$$

qui correspond à la *forme de Landau non-logarithmique*. La preuve de la Proposition 1.3.1 repose alors sur le fait qu'au niveau discret, il y a aussi équivalence entre les versions monodimensionnelles discrètes de (1.30) (c'est à dire (1.32)) et de (1.38).

⁷Du fait des conditions aux limites de Robin (1.18) imposées via (1.19) et (1.20) (où $\tilde{f}$ est remplacée par $\bar{f}$), le schéma explicite (1.31)(1.32) est conservatif en masse c'est à dire $\langle N^n \rangle = \langle N^0 \rangle$ pour tout $n \geq 0$.

1.4 Moyenne entropique versus moyenne de Chang et Cooper

On tente ici de comparer les *moyennes entropique* et de *Chang et Cooper*.

1.4.1 Comportement en homogène en espace

Les raisonnements effectués en homogène en espace avec la *moyenne entropique* (voir la Définition 1.1.1 et le Théorème 1.1.2) et avec la *moyenne de Chang et Cooper* (voir la Définition 1.3.1 et la Proposition 1.3.1) sont similaires. En effet :

- dans le cas de la *moyenne entropique*, on obtient le caractère entropique du schéma non-linéaire (1.14)(1.16) en utilisant l'équivalence au niveau discret entre la formulation de Fokker-Planck (1.5) et la formulation de Landau logarithmique (1.9) ;
- dans le cas de la *moyenne de Chang et Cooper*, on obtient le caractère entropique du schéma linéaire (1.31)(1.32) en utilisant l'équivalence au niveau discret entre la formulation de Fokker-Planck (1.30) et la formulation de Landau non-logarithmique (1.38).

Il faut cependant noter que nous avons obtenu le caractère entropique du schéma de Chang et Cooper uniquement dans le cas *linéaire*. En non-linéaire, le schéma de Chang et Cooper⁸ semble donner des résultats proches de ceux obtenus avec la *moyenne entropique* lorsque le maillage en vitesse est fin (*i.e.* lorsque $j_{\max}$ est grand). Néanmoins, lorsque le maillage en vitesse est grossier (*i.e.* lorsque $j_{\max}$ est petit), les résultats sont moins précis que ceux obtenus avec la *moyenne entropique* : voir les figures 1-2 ci-dessous. Ces deux figures montrent les relaxations des températures ionique $T(t)$ et électronique $T_e(t)$ vers la température d'équilibre T_e^∞ obtenues avec la *moyenne entropique* (*cf.* Figure 1) et avec la *moyenne de Chang et Cooper* (*cf.* Figure 2) lorsque la condition initiale $f(t=0, v)$ est une bi-maxwellienne vérifiant de plus $T(t=0) \neq T_e(t=0)$. À titre indicatif, on représente également sur la Figure 3 ces mêmes résultats lorsque la *moyenne entropique* $\tilde{f}$ dans (1.14)(1.16) est remplacée par la *moyenne arithmétique* : on constate que les résultats obtenus avec la *moyenne arithmétique* sur maillage grossier sont nettement moins bons que ceux obtenus avec les *moyennes entropique* et de *Chang et Cooper* (pour ce cas-test, l'utilisation de la *moyenne arithmétique* ne permet pas de préserver la positivité de la distribution f sur maillage grossier, d'où cette forte détérioration des résultats).

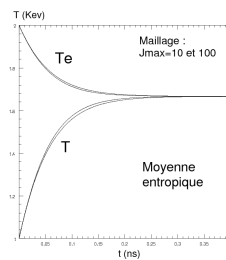


Figure 1

Moyenne entropique

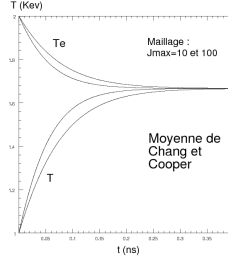


Figure 2

Moyenne de Chang et Cooper

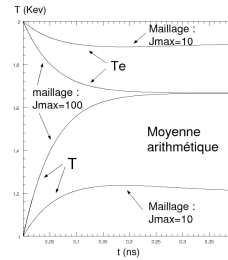


Figure 3

Moyenne arithmétique

1.4.2 Comportement sur un cas-test de type implosion laser

Au delà d'être moins précis sur maillage grossier, le schéma de Chang et Cooper non-linéaire peut surtout ne pas conserver la positivité de la distribution f lorsque le cas-test est très difficile, et donc ne pas être entropique *a fortiori*. Par exemple, pour le cas-test non-linéaire *non-homogène en espace* proposé

⁸Le schéma de Chang et Cooper non-linéaire correspond au schéma numérique (1.14)(1.16) dans lequel on remplace la *moyenne entropique* $\tilde{f}$ par la *moyenne de Chang et Cooper* $\bar{f}$.

au §6 dans [Dellacherie, 2002] pour lequel un choc fort converge de $x = x_{\max}$ vers $x = 0$ pour ensuite rebondir⁹ en $x = 0$ et repartir vers $x = x_{\max}$, la distribution $f(t, x = 0, v)$ en $x = 0$ passe *brutalement* (ici, en quelques nanosecondes) d'une distribution maxwellienne à relativement faible température ($T^0 = T_e^0 = 0,1$ KeV) à une distribution à trois bosses puis à deux bosses à température très élevée ($T(x = 0)$ atteint un maximum de 6 KeV alors que $T_e(x = 0)$ reste inférieur à 2,5 KeV)¹⁰. Ce cas-test simule de façon *très simpliste* la formation d'un point chaud en géométrie cartésienne monodimensionnelle¹¹, la cible étant définie ici par l'intervalle $[0, x_{\max}]$ avec $x_{\max} = 10^{-3}$ m. Les figures 4-5 représentent pour ce cas-test la distribution $f(t, x, v)$ au temps $t = 1,8 \cdot 10^{-9}$ s (à cet instant, le choc converge vers $x = 0$) et au temps $t = 4,2 \cdot 10^{-9}$ s (à cet instant, le choc converge vers $x = x_{\max}$, le rebond en $x = 0$ ayant eu lieu) ; la Figure 6 représente la distribution $f(t, x = 0, v)$, donc au centre de la cible. Lorsque l'on applique le schéma de Chang et Cooper non-linéaire, il faut au moins de l'ordre de 1000 mailles en vitesse pour que le calcul préserve la positivité de $f(t, x, v)$ et puisse être mené à terme¹² ; avec la *moyenne entropique*, ce minimum passe à une centaine de mailles. Ce cas-test souligne donc la grande robustesse du schéma numérique (1.14)(1.16) construit avec la *moyenne entropique* et montre les limites du schéma de Chang et Cooper dans le cas de l'opérateur de collision *non-linéaire* ion-électron (1.4)(1.5) bien que ce schéma numérique possède de bonnes propriétés en *linéaire*.

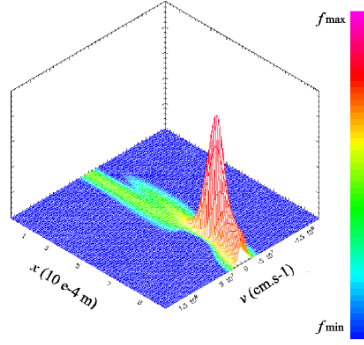


Figure 4
 $f(t, x, v)$ pour $t = 1,8 \cdot 10^{-9}$ s

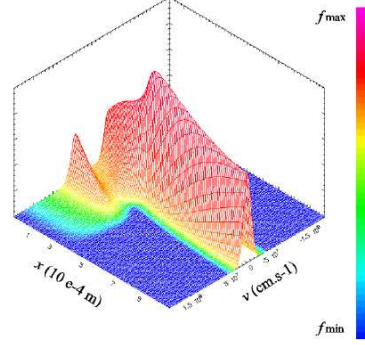


Figure 5
 $f(t, x, v)$ pour $t = 4,2 \cdot 10^{-9}$ s

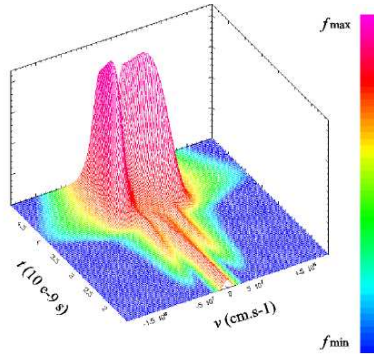


Figure 6
 $f(t, x = 0, v)$ pour $0 \leq t \leq 5 \cdot 10^{-9}$ s

⁹Des conditions de mur sont imposées en $x = 0$.

¹⁰On rappelle que 1 KeV correspond à environ 11,6 millions de degrés Kelvin.

¹¹Le choc fort convergeant vers $x = 0$ est provoqué par un dépôt d'énergie au voisinage de $x = x_{\max}$ modélisant de façon *très simpliste* un dépôt d'énergie photonique induit par un laser. Soulignons que l'objectif du cas-test présenté dans [Dellacherie, 2002] a uniquement pour but de montrer la *robustesse* du schéma numérique (1.14)(1.16) basé sur la *moyenne entropique* dans des conditions physiques *qualitativement* représentatives d'une implosion laser de type FCI.

¹²Le schéma numérique basé sur la *moyenne arithmétique* a sur ce cas-test un comportement comparable à celui du schéma numérique basé sur la *moyenne de Chang et Cooper*.

Chapitre 2

Équations de Boltzmann semi-classiques



Ce chapitre résume les travaux publiés dans [Dellacherie et Sentis, 2000] et [Dellacherie, 2003b]. Ces deux articles s'intéressent aux propriétés de base de deux opérateurs de collision de Boltzmann semi-classiques.

Les opérateurs de collision proposés dans [Dellacherie et Sentis, 2000] modélisent la réaction thermonucléaire entre le deutérium et le tritium intervenant dans la fusion par confinement inertiel (voir le Chapitre 1). Ces opérateurs correspondent, pour le plasma de deutérium-tritium (D-T), à l'opérateur cinétique $P(f)$ dans (1.3) à ceci près que nous ne faisons pas ici l'hypothèse de l'ion moyen. *Via* cette description cinétique, il est possible de déterminer le terme source de dépôt d'énergie $Q_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}$ intervenant dans (1.2) lorsque le plasma de deutérium-tritium n'est pas à l'équilibre thermodynamique¹. Il est par ailleurs possible d'avoir une estimation de la température du plasma de deutérium-tritium à partir de la forme de l'opérateur de collision agissant sur les neutrons.

L'opérateur de collision étudié dans [Dellacherie, 2003b] permet de modéliser les transitions d'énergie quantique dans les couches électroniques d'un atome d'uranium constituant un gaz raréfié produit par le procédé SILVA d'enrichissement par laser². L'opérateur étudié correspond à l'opérateur de collision de Wang-Chang & Uhlenbeck [102, 17]. Le procédé SILVA est décrit au Chapitre 5.

2.1 Réaction thermonucléaire

Cette section résume les travaux publiés dans [Dellacherie et Sentis, 2000]. Nous avons souligné au Chapitre 1 qu'une description fluide de la formation du point chaud *via* le système d'Euler compressible à deux températures (1.2) devait être remplacée par la description cinétique (1.3), les ions deutérium et tritium étant hors équilibre thermodynamique à cet instant. Ce déséquilibre thermodynamique implique par exemple que la formule classiquement utilisée donnant le terme source de dépôt d'énergie $Q_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}$ dans (1.2) n'est pas valable puisque celle-ci est déduite à partir d'une hypothèse d'équilibre thermodynamique du milieu³. Or, ce terme source est essentiel. En effet, plus il est important, plus il y a de chance pour

¹Le terme source $Q_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}$ dans (1.2) suppose un dépôt instantané de l'énergie des particules α sur le plasma de D-T. Dans (1.3), ce dépôt d'énergie est modélisé par l'opérateur cinétique $Q_{\alpha \rightarrow i}^{cinétique}$. Cet opérateur peut supposer que le dépôt d'énergie est instantané ou non. L'opérateur $Q_{\alpha \rightarrow i}^{cinétique}$ n'est pas étudié dans ce travail.

²SILVA est l'acronyme de *Séparation Isotopique par Laser sur Vapeur Atomique*.

³De plus, dans cette section, nous ne faisons pas l'hypothèse d'ion moyen alors que c'est le cas dans (1.2) ainsi que dans le système cinétique (1.3). Cependant, cette différence de modélisation contribue peu à l'incertitude sur le calcul de $Q_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}$ par rapport à l'incertitude sur ce même calcul provoquée par le caractère hors équilibre thermodynamique du plasma de D-T.

qu'une onde thermonucléaire soit créée et se propage dans le milieu à partir du point chaud. Aussi est-il intéressant d'étudier l'impact potentiel d'un déséquilibre thermodynamique sur le calcul de $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}$ à la formation du point chaud⁴. Bien sûr, cette approche ne devrait pas se substituer à une description cinétique de type (1.3) de la formation du point chaud.

Pour obtenir une bonne estimation de $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}$ lorsque le plasma de D-T n'est pas à l'équilibre thermodynamique, il est nécessaire d'avoir une description cinétique des collisions nucléaires

$$D + T \rightarrow \alpha + n + 17,6 \text{ MeV} \quad (2.1)$$

basée sur des opérateurs cinétiques de type Boltzmann. Dans le cas homogène en espace, le modèle cinétique proposé dans [Dellacherie et Sentis, 2000] est donné par

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f_D}{\partial t} = -P_D(f_D, f_T), \quad (a) \\ \frac{\partial f_T}{\partial t} = -P_T(f_D, f_T), \quad (b) \\ \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} = G_\alpha(f_D, f_T), \quad (c) \\ \frac{\partial f_n}{\partial t} = G_n(f_D, f_T) \quad (d) \end{array} \right. \quad (2.2)$$

auquel on adjoint les conditions initiales

$$\left\{ \begin{array}{l} f_D(t=0, v_D) = f_D^0(v_D), \\ f_T(t=0, v_T) = f_T^0(v_T), \\ f_\alpha(t=0, v_\alpha) = 0, \\ f_n(t=0, v_n) = 0. \end{array} \right. \quad (2.3)$$

Dans (2.2)(2.3), $f_D(t, v_D)$, $f_T(t, v_D)$, $f_\alpha(t, v_\alpha)$ et $f_n(t, v_n)$ définissent au temps $t \in \mathbb{R}^+$ les distributions des ions deutérium et tritium, des particules α (ions hélium 4) et des neutrons, les vitesses cinétiques v_a appartenant à $\mathbb{R}^3$ ($a \in \{D, T, \alpha, n\}$). On suppose par ailleurs que f_D^0 et f_T^0 sont des fonctions positives appartenant à

$$L^{1,2} := L^1 [(1 + |v|^2)dv]. \quad (2.4)$$

Par la suite, on utilisera les constantes physiques

$$\left\{ \begin{array}{l} \zeta = \sqrt{\frac{2Q}{\mu_{\alpha n}}}, \\ \mu_{DT} = \frac{m_D m_T}{m_D + m_T}, \\ \mu_{\alpha n} = \frac{m_\alpha m_n}{m_\alpha + m_n} \end{array} \right.$$

où $Q = 17,6 \text{ MeV}$ et où m_a est la masse de la particule a ($a \in \{D, T, \alpha, n\}$). L'énergie Q correspond au défaut de masse MC^2 où $M = m_D + m_T - m_\alpha - m_n$ (C est la vitesse de la lumière). Ce défaut de masse peut être négligé dans la cinématique de la collision prise en compte dans le système (2.2) (voir (2.8) ci-dessous) bien que celui-ci soit la source de l'énergie Q . Dans la suite, on prendra donc $m_D = 2m_p$, $m_T = 3m_p$, $m_\alpha = 4m_p$ et $m_n = m_p$ où m_p est la masse d'un proton.

⁴Dans cette section, le terme source $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}$ est noté $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}$ pour ainsi souligner que ce terme source n'est pas nécessairement calculé en supposant que le plasma de D-T est à l'équilibre thermodynamique. Soulignons que $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}$ est un terme source d'énergie : il ne correspond donc pas à l'opérateur cinétique $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}^{cinétique}$ dans (1.3).

Comme au Chapitre 1, on a $N_a = \langle f_a \rangle$, $U_a = \langle v_a f_a \rangle / N_a$ et $\frac{3T_a}{2} = \frac{m_a}{2} \langle (v_a - U_a)^2 f_a \rangle / N_a$ ($a \in \{D, T, \alpha, n\}$) où $\langle \cdot \rangle := \int_{\mathbb{R}^3} \cdot dv$.

2.1.1 Les opérateurs de collision

L'opérateur de perte P_D est donné par

$$P_D(f_D, f_T)(v_D) = f_D(v_D) \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} f_T(v_T) q(|v_D - v_T|, \Omega) dv_T d\Omega. \quad (2.5)$$

L'opérateur de gain G_n est donné par

$$G_n(f_D, f_T)(v_n) = \int_{W_\alpha(v_n)} \int_{S^2} f_D(v_D) f_T(v_T) q(|v_D - v_T|, \Omega) |\Phi| dv_\alpha d\omega. \quad (2.6)$$

Les opérateurs P_T et G_α se déduisent respectivement de P_D et G_n par symétrie. Dans (2.5) et (2.6), S^2 est la sphère unité de $\mathbb{R}^3$ et

$$W_\alpha(v_n) := \{v_\alpha \in \mathbb{R}^3 / |v_\alpha - v_n| \geq \zeta\}.$$

D'autre part, le noyau de collision q est ici isotrope – i.e. $q(|v_D - v_T|, \Omega) = q(|v_D - v_T|)$ – et défini avec

$$q(|v_D - v_T|) = |v_D - v_T| \cdot \sigma(|v_D - v_T|)$$

où $\sigma(|v_D - v_T|)$ est la section efficace de la réaction thermonucléaire (2.1). Celle-ci est de la forme

$$\sigma(|v_D - v_T|) = \frac{p_5 + p_2 / [(p_4 - p_3 E)^2 + 1]}{E [\exp(p_1 / \sqrt{E}) - 1]} \quad (2.7)$$

où $E = \frac{1}{2} m_D |v_D - v_T|^2$ et où $p_i \in \mathbb{R}^+$ sont les coefficients de Duane [10, 27]. Par ailleurs, v_D , v_T , Ω et $|\Phi|$ sont définis avec

$$\begin{cases} v_D(v_\alpha, v_n, \omega) = v_g + \omega \frac{\mu_{DT}}{m_D} \sqrt{\frac{\mu_{\alpha n}}{\mu_{DT}} (|v_\alpha - v_n|^2 - \zeta^2)}, \\ v_T(v_\alpha, v_n, \omega) = v_g - \omega \frac{\mu_{DT}}{m_T} \sqrt{\frac{\mu_{\alpha n}}{\mu_{DT}} (|v_\alpha - v_n|^2 - \zeta^2)}, \\ \Omega(v_\alpha, v_n, \omega) = \frac{v_\alpha - v_n}{|v_\alpha - v_n|} \end{cases} \quad (2.8)$$

et

$$\begin{aligned} |\Phi| &= \frac{\mu_{\alpha n}}{\mu_{DT}} \cdot \frac{|v_D - v_T|}{|v_\alpha - v_n|} \\ &= \left(\frac{\mu_{\alpha n}}{\mu_{DT}} \right)^{3/2} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\mu_{\alpha n}}{\mu_{DT}} \zeta^2 / |v_D - v_T|^2}} \\ &= \left(\frac{\mu_{\alpha n}}{\mu_{DT}} \right)^{3/2} \cdot \sqrt{1 - \zeta^2 / |v_\alpha - v_n|^2}. \end{aligned}$$

Soulignons que (2.8) est une conséquence de

$$\begin{cases} m_D v_D + m_T v_T = m_\alpha v_\alpha + m_n v_n, & (a) \\ \frac{1}{2} m_D v_D^2 + \frac{1}{2} m_T v_T^2 + Q = \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2 + \frac{1}{2} m_n v_n^2. & (b) \end{cases} \quad (2.9)$$

Ce système modélise au niveau microscopique la collision nucléaire (2.1) via un système binaire isolé avec création d'énergie puisque $Q > 0$. Notons que $|\Phi|$ est le jacobien de la transformation

$$\Phi : (v_\alpha, v_n, \omega) \mapsto (v_D, v_T, \Omega).$$

2.1.2 Propriétés des opérateurs

Les opérateurs P_D , P_T , G_α et G_n vérifient la propriété suivante :

Propriété 2.1.1.

$$\begin{cases} \langle P_D(f_D, f_T) \rangle = \langle P_T(f_D, f_T) \rangle = \langle G_\alpha(f_D, f_T) \rangle = \langle G_n(f_D, f_T) \rangle, \\ m_D \langle v_D P_D(f_D, f_T) \rangle + m_T \langle v_T P_T(f_D, f_T) \rangle = m_\alpha \langle v_\alpha G_\alpha(f_D, f_T) \rangle + m_n \langle v_n G_n(f_D, f_T) \rangle, \\ \frac{1}{2} m_T \langle v_T^2 P_D(f_D, f_T) \rangle + \frac{1}{2} m_T \langle v_T^2 P_T(f_D, f_T) \rangle + Q \langle P_D(f_D, f_T) \rangle = \frac{1}{2} m_\alpha \langle v_\alpha^2 G_\alpha(f_D, f_T) \rangle + \frac{1}{2} m_n \langle v_n^2 G_n(f_D, f_T) \rangle. \end{cases}$$

La Propriété 2.1.1 est l'analogie de la Propriété 1.1.1.

Il est par ailleurs possible de simplifier considérablement les opérateurs de gain G_α et G_n via une analyse asymptotique :

Proposition 2.1.1. *Posons*

$$\begin{cases} \bar{V}_\alpha = \sqrt{2 \frac{m_n}{m_\alpha} \cdot \frac{Q}{m_\alpha + m_n}}, \\ \bar{V}_n = \sqrt{2 \frac{m_\alpha}{m_n} \cdot \frac{Q}{m_\alpha + m_n}}, \\ \bar{V} = \max \left(\sqrt{\frac{2\theta_D}{m_D}}, \sqrt{\frac{2\theta_T}{m_T}} \right), \\ \varepsilon = \frac{\bar{V}}{\bar{V}_\alpha} \end{cases}$$

où θ_D et θ_T sont des ordres de grandeurs de la température des ions deutérium et tritium (exprimée en unité d'énergie). Supposons que les distributions $f_D(v)$ et $f_T(v)$ sont dans $L^{1,2}$ et que le noyau de collision $q(|v|)$ est dans $L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Alors :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{G_*(f_D, f_T)}{\langle G_*(f_D, f_T) \rangle} = \delta_* \quad \text{avec} \quad * \in \{\alpha, n\}$$

au sens de la convergence faible des mesures et où δ_* est la mesure définie avec

$$\forall \chi \in (L^{1,2})' \cap \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^3) : \int_{\mathbb{R}^3} \chi(v) \delta_*(v) dv = \int_{S^2} \chi(\bar{V}_* \Omega) d\Omega.$$

On rappelle que $L^{1,2}$ est défini avec (2.4) et que $(L^{1,2})'$ peut être identifié à l'espace des fonctions

$$\{\chi, \exists C > 0 / \forall v \in \mathbb{R}^3 : |\chi(v)| < C \cdot (1 + |v|^2)\}.$$

Cet espace est suffisamment grand puisque seules les quantités $\langle G_*(f_D, f_T) \rangle$, $\langle v_* G_*(f_D, f_T) \rangle$ et $\langle v_*^2 G_*(f_D, f_T) \rangle$ ont un intérêt physique. En outre, l'hypothèse $(f_D, f_T) \in L^{1,2} \times L^{1,2}$ n'est pas restrictive puisque celle-ci est satisfaite lorsque (f_D, f_T) est solution de (2.2)(2.3) (dès lors que $(f_D^0, f_T^0) \in L^{1,2} \times L^{1,2}$). On vérifie par ailleurs que l'hypothèse $q \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ est satisfaite lorsque la section efficace $\sigma(|v_D - v_T|)$ est donnée par la formule (2.7).

L'interprétation physique de la Proposition 2.1.1 correspond à un résultat standard en physique de la fusion. En effet, la Proposition 2.1.1 affirme que lorsque la vitesse thermique du plasma de deutérium-tritium est négligeable devant $\bar{V}_\alpha$ – ce qui est le cas pour les températures rencontrées en fusion par confinement inertiel⁵ –, les particules α et les neutrons sont émis, d'une part, de façon isotrope dans l'espace et, d'autre part, aux énergies respectives $E_\alpha := \frac{1}{2} m_\alpha \bar{V}_\alpha^2 = 3,5$ MeV et $E_n := \frac{1}{2} m_n \bar{V}_n^2 = 14,1$ MeV. Soulignons que ce résultat est vrai, que le plasma de deutérium-tritium soit ou non à l'équilibre thermodynamique.

⁵Celles-ci sont de l'ordre quelques dizaines de millions de degrés Kelvin.

2.1.3 Calcul du terme source $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}$

Le terme source $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}$ intervenant dans (1.2) est donné par la formule⁶

$$\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}(T, N) = \frac{1}{2} m_{\alpha} \bar{V}_{\alpha}^2 \times \tau_{eq}(T, N) \quad (2.10)$$

où

$$\tau_{eq}(T, N) := \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} M_D(v_D) M_T(v_T) q(|v_D - v_T|) dv_D dv_T$$

est le taux de réaction nucléaire⁷ calculé en supposant que le plasma de deutérium-tritium de densité particulaire N est à l'équilibre thermodynamique à la température T (*i.e.* en supposant que f_D et f_T sont des maxwelliennes centrées M_D et M_T de densité $N/2$ et de température T ; dans le contexte physique étudié ici, les vitesses macroscopiques U_D et U_T peuvent être prises égales à zéro car elles sont négligeables en norme devant $\bar{V}_{\alpha}$). Connaissant la section efficace σ (voir (2.7)), on peut alors obtenir une formule approchée donnant $\tau_{eq}(T, N)$ et donc $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}(T, N)$ *via* (2.10).

Cependant, le système (2.2) montre qu'un plasma de deutérium-tritium initialement à l'équilibre thermodynamique ne peut le rester que lorsque le noyau de collision $q = |v|\sigma(|v|)$ est une constante, ce qui est loin d'être le cas ici. Pour que la formule donnant $\tau_{eq}(T, N)$ soit applicable, il faut donc que les collisions ion-électron et ion-ion – *cf.* Chapitre 1 – soit assez nombreuses pour forcer f_D et f_T à être proches d'une maxwellienne. Or, nous avons souligné qu'à la formation du point chaud, le plasma de deutérium-tritium n'est pas à l'équilibre thermodynamique, le libre parcours moyen des ions devenant important par rapport au diamètre de la sphère de deutérium-tritium (voir le cas-test du §1.4.2). La formule donnant $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}(T, N)$ *via* (2.10) n'est dès lors pas valable.

En nous inspirant de la technique proposée dans [16], nous avons explicité un algorithme de type Monte-Carlo adapté au calcul du taux de réaction nucléaire hors équilibre thermodynamique

$$\tau(f_D, f_T) := \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} f_D(v_D) f_T(v_T) q(|v_D - v_T|) dv_D dv_T,$$

algorithme que nous avons aussi utilisé pour évaluer les opérateurs de perte P_D , P_T , et de gain G_{α} , G_n .

Les résultats numériques montrent clairement que le taux de réaction nucléaire $\tau(f_D, f_T)$ ainsi obtenu peut-être différent d'un ordre de grandeur du taux de réaction nucléaire $\tau_{eq}(T, N)$. Dans ce cas, la formule (2.10) doit être remplacée par la formule

$$\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}(f_D, f_T) = \frac{1}{2} m_{\alpha} \bar{V}_{\alpha}^2 \times \tau(f_D, f_T).$$

Les résultats numériques obtenus permettent également d'estimer la déviation de l'opérateur de gain des neutrons $G_n / \langle G_n \rangle$ par rapport à la distribution δ_n (voir la Proposition 2.1.1). Cette estimation est importante. En effet, la déviation de $G_n / \langle G_n \rangle$ par rapport à δ_n dépend de la température T du plasma de deutérium-tritium⁸. En mesurant cette déviation, on peut donc espérer remonter à la température T du plasma sachant que les neutrons quittent le milieu en étant peu perturbés⁹. Là aussi, on montre numériquement qu'à température T donnée, cette relation n'est pas la même suivant que le plasma de deutérium-tritium est ou n'est pas à l'équilibre thermodynamique.

⁶La formule (2.10) ne donne pas exactement le $\mathcal{Q}_{\alpha \rightarrow i}^{fluide}(T, N)$ dans (1.2) car l'on ne fait pas ici l'hypothèse d'ion moyen : voir la note de bas de page 3.

⁷Le taux de réaction nucléaire $\tau_{eq}(N, T)$ est parfois noté $N_D N_T \langle |v| \sigma(|v|) \rangle$ [10].

⁸Comme $N_D = N_T$, on peut définir T avec $T = \frac{m_D \theta_D + m_T \theta_T}{m_D + m_T}$. En pratique, on a $T = \mathcal{O}(\theta_D) = \mathcal{O}(\theta_T)$ car $\frac{m_D}{m_T} = \mathcal{O}(1)$.

⁹Voir la note de bas de page 3 du Chapitre 1.

2.2 Transition d'énergie quantique

Le travail présenté dans cette section a été publié dans [Dellacherie, 2003b]. Dans cet article, nous avons étudié les propriétés de base de l'opérateur de Wang-Chang & Uhlenbeck $Q_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$ [102, 17] intervenant dans l'équation cinétique de type Boltzmann

$$\begin{cases} \partial_t f_i^k + v \cdot \nabla_x f_i^k = Q_i^k(\{f_j^{k_*}\}_{j,k_*}), \\ f_i^k(t=0) \in L^1[(1+|v|^2)dv] \end{cases} \quad (2.11)$$

où

$$Q_i^k(\{f_j^{k_*}\}_{j,k_*}) = \sum_{j,h,l,k_*} Q_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}. \quad (2.12)$$

Le système cinétique (2.11) modélise les collisions binaires

$$A_i^k + A_j^{k_*} \rightleftharpoons A_h^k + A_l^{k_*} + \text{énergie de transition} \quad (2.13)$$

entre un atome A^k d'espèce k et un atome A^{k_*} d'espèce k_* ($k = k_*$ ou $k \neq k_*$) avec transition entre les niveaux d'énergie quantique (i, j) et (h, l) . Le système cinétique (2.11) est très proche du système de type Boltzmann qui modélise la réaction chimique réversible [42]

$$A^{k_1} + A^{k_2} \rightleftharpoons A^{k_3} + A^{k_4} + \text{énergie de la réaction chimique}. \quad (2.14)$$

Le système (2.11) sera utilisé au Chapitre 5 pour décrire le mélange de gaz raréfiés d'uranium et de fer dans le procédé SILVA¹⁰ d'enrichissement de l'uranium par laser. Dans ce contexte, la température de la vapeur d'uranium et de fer est suffisamment importante¹¹ pour que les collisions entre atomes A^k et A^{k_*} provoquent des transitions d'énergie quantique entre les couches électroniques¹². Ces niveaux d'énergie sont dits *métastables* car ils peuvent être considérés comme stables par rapport au temps de collision entre atomes A^k et A^{k_*} .

La masse volumique ρ_k , la vitesse macroscopique u_k et l'énergie totale E_k de l'espèce k sont reliées à la distribution f_i^k via

$$\begin{cases} \rho_k = \sum_i \int_{\mathbb{R}^3} m_k f_i^k(v) dv, \\ \rho_k u_k = \sum_i \int_{\mathbb{R}^3} m_k v f_i^k(v) dv, \\ \rho_k E_k = \sum_i \int_{\mathbb{R}^3} m_k \left(\frac{v^2}{2} + \epsilon_i^k \right) f_i^k(v) dv \end{cases} \quad (2.15)$$

où $\epsilon_i^k \in \mathbb{R}^+$ et m_k sont respectivement l'énergie du $i^{\text{ème}}$ niveau d'énergie quantique¹³ et la masse atomique de l'espèce k . On définit par ailleurs la masse volumique ρ , la vitesse macroscopique u , l'énergie totale E

¹⁰SILVA est l'acronyme de *Séparation Isotopique par Laser sur Vapeur Atomique*.

¹¹Celle-ci est de l'ordre de 3000 K.

¹²Dans des contextes différents de SILVA, les niveaux d'énergie quantique peuvent correspondre à des niveaux d'énergie rotationnels ou vibrationnels de molécules.

¹³L'énergie ϵ_i^k est reliée au nombre d'onde du niveau d'énergie considéré par l'intermédiaire de la relation de de Broglie : voir plus loin (5.42).

du mélange de gaz et la fraction massique Y_k du gaz k avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho = \sum_k \rho_k := \frac{1}{\tau}, \\ \rho u = \sum_k \rho_k u_k, \\ \rho E = \sum_k \rho_k E_k := \rho \left(\frac{u^2}{2} + \mathcal{E} \right), \\ Y_k = \frac{\rho_k}{\rho} \in [0, 1] \quad (\text{donc } \sum_k Y_k = 1). \end{array} \right. \quad (2.16)$$

Les quantités τ et $\mathcal{E}$ sont respectivement le volume spécifique et l'énergie interne du mélange de gaz.

2.2.1 L'opérateur de collision

L'opérateur de collision semi-classique $Q_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$ de Wang-Chang & Uhlenbeck (1951) proposé dans [102] est défini avec¹⁴

$$Q_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} = \int_{\Delta_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v)} \left[f_h^k(v') f_l^{k_*}(v'_*) \frac{g_i^k g_j^{k_*}}{g_h^k g_l^{k_*}} - f_i^k(v) f_j^{k_*}(v_*) \right] \mathcal{B}_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) dv_* d\Omega. \quad (2.17)$$

L'entier positif g_i^k est la dégénérescence du $i^{\text{ème}}$ niveau d'énergie quantique de l'espèce k . Le noyau de collision $\mathcal{B}_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega)$ est relié à la section efficace $\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega)$ de la collision

$$[(v, i, k), (v_*, j, k_*)] \rightarrow [(v', h, k), (v'_*, l, k_*)]$$

par la relation

$$\mathcal{B}_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) := |v - v_*| \cdot \sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega). \quad (2.18)$$

La cinématique de la collision binaire $[(v, i, k), (v_*, j, k_*)] \rightarrow [(v', h, k), (v'_*, l, k_*)]$ est décrite par

$$\left\{ \begin{array}{l} v' = \mathcal{V}_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) := v_g + \Omega \frac{\sqrt{2}\mu_{kk_*}}{m_k} \sqrt{\frac{1}{2}|v - v_*|^2 + \Delta\epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}}, \\ v'_* = \mathcal{W}_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) := v_g - \Omega \frac{\sqrt{2}\mu_{kk_*}}{m_{k_*}} \sqrt{\frac{1}{2}|v - v_*|^2 + \Delta\epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}}, \\ v_g := \frac{m_k v + m_{k_*} v_*}{m_k + m_{k_*}} \end{array} \right. \quad (2.19)$$

avec

$$\mu_{kk_*} \Delta\epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} = m_k (\epsilon_i^k - \epsilon_h^k) + m_{k_*} (\epsilon_j^{k_*} - \epsilon_l^{k_*}) \quad (2.20)$$

où $\mu_{kk_*} = \frac{m_k m_{k_*}}{m_k + m_{k_*}}$. Le domaine d'intégration $\Delta_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v)$ dans (2.17) est défini avec

$$\Delta_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v) = \mathcal{S}^2 \times \left\{ v_* \in \mathbb{R}^3 \text{ tel que } \frac{1}{2}|v - v_*|^2 + \Delta\epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} \geq 0 \right\}.$$

¹⁴Wang-Chang & Uhlenbeck ont proposé dans [102] l'opérateur (2.17) dans le cas non-dégénéré (*i.e.* avec $g_i^k = 1$ pour tout (i, k)); de Boer a également écrit avec Wang-Chang & Uhlenbeck un article (1964) sur cet opérateur (voir la note de bas de page § p. 336 dans [15] du §17.6. *Quantized internal energies*, ainsi que la note de bas de page 8 p. 501 dans [54]) : c'est pourquoi l'on parle aussi d'opérateur WCUB. L'extension au cas dégénéré (*i.e.* lorsqu'il existe (i, k) tel que $g_i^k \neq 1$) a été introduit par Waldmann & Trübenbacher dans [101].

Ce domaine d'intégration strictement inclus dans $\mathbb{R}^3$ souligne que la température du mélange de gaz d'espèces k et k_* doit être assez importante pour que les transitions entre niveaux d'énergie quantique ne soient pas négligeables. Soulignons que (2.19) est une conséquence de

$$\begin{cases} m_k v + m_{k_*} v_* = m_k v' + m_{k_*} v'_*, & (a) \\ m_k \frac{v^2}{2} + m_{k_*} \frac{v_*^2}{2} + \mu_{kk_*} \Delta \epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} = m_k \frac{v'^2}{2} + m_{k_*} \frac{v'^2_*}{2}. & (b) \end{cases} \quad (2.21)$$

On peut faire une analogie entre le système (2.9) modélisant la collision nucléaire (2.1) et le système (2.21) modélisant la transition d'énergie quantique (2.13). Cependant, les énergies $Q = 17,6$ MeV dans (2.9)(b) et $\mu_{kk_*} \Delta \epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$ dans (2.21)(b) (définie avec (2.20)) n'ont pas du tout la même origine physique. En effet, l'énergie Q est liée à une modification de la structure du noyau des ions deutérium et tritium alors que l'énergie $\mu_{kk_*} \Delta \epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$ est liée à une modification des couches électroniques des atomes k et k_* . D'autre part, l'énergie Q est strictement positive alors que $\Delta \epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$ est positive ou négative. En outre, la réaction nucléaire (2.1) est irréversible alors que la transition d'énergie quantique (2.13) est réversible. Il sera donc possible de proposer un théorème H et une limite fluide pour le système cinétique (2.11) modélisant la transition d'énergie quantique (2.13) contrairement au cas de la collision nucléaire (2.1).

2.2.2 Construction d'une classe admissible de sections efficaces

Pour qu'il soit possible de proposer un théorème H, les sections efficaces $\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$ et $\sigma_{h,l \rightarrow i,j}^{k,k_*}$ doivent être reliées par la relation

$$\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) \cdot |v - v_*| dv dv_* d\mu_i^k(\epsilon^k) d\mu_j^{k_*}(\epsilon^{k_*}) d\Omega = \quad (2.22)$$

$$\sigma_{h,l \rightarrow i,j}^{k,k_*}(v', v'_*, \Omega') \cdot |v' - v'_*| dv' dv'_* d\mu_h^k(\epsilon^k) d\mu_l^{k_*}(\epsilon^{k_*}) d\Omega'$$

où

$$\begin{cases} v' = \mathcal{V}_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega), \\ v'_* = \mathcal{W}_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega), \\ \Omega' := \frac{v - v_*}{|v - v_*|} \end{cases}$$

et où $d\mu_i^k(\epsilon)$ est la mesure discrète $g_i^k \delta(\epsilon^k - \epsilon_i^k) d\epsilon^k$. En utilisant le fait que le jacobien $\left| \frac{D(v, v_*, \Omega)}{D(v', v'_*, \Omega')} \right|$ de la transformation $(v, v_*, \Omega) \mapsto (v', v'_*, \Omega')$ est égal à $|v - v_*|/|v' - v'_*|$, on voit de suite que (2.22) s'écrit plus simplement

$$g_i^k g_j^{k_*} \sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) \cdot |v - v_*|^2 = g_h^k g_l^{k_*} \sigma_{h,l \rightarrow i,j}^{k,k_*}(v', v'_*, \Omega') \cdot |v' - v'_*|^2 \quad (2.23)$$

ou encore

$$g_i^k g_j^{k_*} \mathcal{B}_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) \cdot |v - v_*| = g_h^k g_l^{k_*} \mathcal{B}_{h,l \rightarrow i,j}^{k,k_*}(v', v'_*, \Omega') \cdot |v' - v'_*| \quad (2.24)$$

en utilisant (2.18). Les relations (2.22), (2.23) ou (2.24) correspondent à la *relation de micro-réversibilité* :

- la relation (2.22) correspond à la relation (2) dans [17] avec $\forall(i, k, k_*) : k = k_*$ et $g_i^k = 1$ (cas mono-espèce sans dégénérescence) ;

- la relation (2.23) correspond à la relation (3) dans [102] avec $\forall(i, k, k_*) : k = k_*$ et $g_i^k = 1$ (cas mono-espèce sans dégénérescence)¹⁵ ;

¹⁵Les auteurs ont semble-t-il "oublié" la puissance 2 apparaissant dans (2.23) au profit d'une puissance 1. Rappelons que cette puissance 2 est directement liée au jacobien $\left| \frac{D(v, v_*, \Omega)}{D(v', v'_*, \Omega')} \right|$.

- la relation (2.24) correspond à la relation (19) dans [42] écrite pour le cas de la réaction chimique (2.14) (cas sans dégénérescence mais où les masses des particules avant collision et après collision changent contrairement au cas de la transition (2.13)).

De plus, la section efficace $\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$ doit satisfaire

$$\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) = \sigma_{j,i \rightarrow l,h}^{k_*,k}(v_*, v, -\Omega). \quad (2.25)$$

La relation (2.25) est un principe d'indiscernabilité interdisant toute distinction entre les collisions

$$[(v, i, k), (v_*, j, k_*)] \rightarrow [(v', h, k), (v'_*, l, k_*)]$$

et

$$[(v_*, j, k_*), (v, i, k)] \rightarrow [(v'_*, l, k_*), (v', h, k)].$$

Il est possible de définir une large classe de sections efficaces satisfaisant les relations (2.23) et (2.25) :

Proposition 2.2.1. *La relation de micro-réversibilité (2.23) est satisfaite lorsque*

$$\begin{aligned} \sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) = \\ \sigma_{\mathcal{I}}^{k,k_*} \left(\frac{\Omega \cdot (v - v_*)}{|v - v_*|}, \frac{1}{2}|v - v_*|^2 + \Delta\epsilon_{i,j \rightarrow m_1, n_1}^{k,k_*}, \frac{1}{2}|v - v_*|^2 + \Delta\epsilon_{i,j \rightarrow m_2, n_2}^{k,k_*}, \dots \right) \\ \times \frac{\zeta_{\mathcal{I}}^{k,k_*}(g_i^k, g_j^{k_*}, g_h^k, g_l^{k_*})}{g_i^k g_j^{k_*}} \cdot \frac{\left(\frac{1}{2}|v - v_*|^2 + \Delta\epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} \right)^{\beta^{k,k_*}}}{|v - v_*|^{2(1-\beta^{k,k_*})}} \end{aligned} \quad (2.26)$$

où $\beta^{k,k_*} \in \mathbb{R}$ et $\mathcal{I} := \{(i, j), (h, l)\}$, $\{m_p\}_p$ et $\{n_p\}_p$ étant deux suites de $\mathbb{N}$ arbitrairement choisies pour chaque $\mathcal{I}$ et où $\zeta_{\mathcal{I}}^{k,k_*}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \zeta_{\mathcal{I}}^{k,k_*}(x_3, x_4, x_1, x_2)$.

La notation $\{(i, j), (h, l)\}$ pour $\mathcal{I}$ sous-entend que $\{(i, j), (h, l)\} = \{(h, l), (i, j)\}$. Autrement dit :

- les fonctions $\sigma_{\mathcal{I}}^{k,k_*}(\dots)$ et $\zeta_{\mathcal{I}}^{k,k_*}(\dots)$ apparaissant dans $\sigma_{h,l \rightarrow i,j}^{k,k_*}(v', v'_*, \Omega')$ sont identiques à celles apparaissant dans (2.26) ;
- les suites $\{m_p\}_p$ et $\{n_p\}_p$ apparaissant dans $\sigma_{h,l \rightarrow i,j}^{k,k_*}(v', v'_*, \Omega')$ sont identiques à celles apparaissant dans (2.26) ;

En outre, puisque $\Delta\epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} = \Delta\epsilon_{j,i \rightarrow l,h}^{k_*,k}$, il est nécessaire et suffisant que

$$\begin{cases} \sigma_{\mathcal{I}}^{k,k_*}(x, y_1, \dots) = \sigma_{\mathcal{I}}^{k_*,k}(x, y_1, \dots), \\ \zeta_{\mathcal{I}}^{k,k_*}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \zeta_{\mathcal{I}}^{k_*,k}(x_2, x_1, x_4, x_3), \\ \beta^{k,k_*} = \beta^{k_*,k} \end{cases} \quad (2.27)$$

avec ${}^t\mathcal{I} := \{(j, i), (l, h)\}$ pour que la classe de sections efficaces (2.26) satisfasse le principe d'indiscernabilité (2.25).

La classe de sections efficaces $\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$ vérifiant (2.26) et (2.27) n'est pas vide. En effet :

Corollaire 2.2.1. *Soit la section efficace*

$$\begin{aligned} \sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) = \sigma_0^{k,k_*} \left(\frac{\Omega \cdot (v - v_*)}{|v - v_*|} \right) \cdot \left[\frac{1}{|v - v_*|} p_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} H(\Delta\epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}) \right. \\ \left. + \frac{|v' - v'_*|}{|v - v_*|^2} p_{h,l \rightarrow i,j}^{k,k_*} H(\Delta\epsilon_{h,l \rightarrow i,j}^{k,k_*}) \right] \cdot \frac{\zeta_{\mathcal{I}}^{k,k_*}(g_i^k, g_j^{k_*}, g_h^k, g_l^{k_*})}{g_i^k g_j^{k_*}} \end{aligned} \quad (2.28)$$

où

$$H(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0, \\ 1/2 & \text{if } x = 0, \\ 0 & \text{if } x < 0 \end{cases}$$

et où $p_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} > 0$ est une probabilité de transition vérifiant $\sum_{h,l} p_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} = 1$ et $p_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} = p_{j,i \rightarrow l,h}^{k_*,k}$, $\sigma_0^{k,k_*}(x)$ étant une fonction strictement positive vérifiant $\sigma_0^{k,k_*}(x) = \sigma_0^{k_*,k}(x)$. Alors, la section efficace $\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega)$ ainsi définie satisfait (2.26) et (2.27).

Dans le cas mono-espèce (i.e. $k = k_*$), sans dégénérescence des niveaux d'énergie quantique (i.e. $\forall i : g_i^k = 1$) et lorsque σ_0^{k,k_*} est une constante (cas isotrope), la section efficace (2.28) correspond à la section efficace de Uhlenbeck [97].

On a également :

Corollaire 2.2.2. *Soit la section efficace*

$$\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) = \sigma_0^{k,k_*} \left(\frac{\Omega \cdot (v - v_*)}{|v - v_*|} \right) \cdot p_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*) \quad (2.29)$$

avec

$$p_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*) = \frac{g_h^k g_l^{k_*} \cdot \left(\frac{1}{2} |v - v_*|^2 + \Delta \epsilon_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} \right)}{\sum_{\oplus m,n} g_m^k g_n^{k_*} \cdot \left(\frac{1}{2} |v - v_*|^2 + \Delta \epsilon_{i,j \rightarrow m,n}^{k,k_*} \right)}, \quad (2.30)$$

$\sigma_0^{k,k_*}(x)$ étant une fonction strictement positive vérifiant $\sigma_0^{k,k_*}(x) = \sigma_0^{k_*,k}(x)$. Alors, la section efficace $\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega)$ ainsi définie satisfait (2.26) et (2.27).

La notation $\oplus m, n$ dans (2.30) sous-entend que les niveaux d'énergie m et n sont choisis dans la somme quand $\frac{1}{2} |v - v_*|^2 + \Delta \epsilon_{i,j \rightarrow m,n}^{k,k_*}$ est positif. Lorsque σ_0^{k,k_*} est une constante (cas isotrope), la section efficace (2.29) correspond à la section efficace de Anderson [4].

2.2.3 Propriétés et notion de catalyseur

Dans la suite, on suppose que la section efficace $\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$ satisfait (2.26) et (2.27). On définit par ailleurs le graphe $G^{k,k_*} := (V^{k,k_*}, E^{k,k_*})$ de sommets V^{k,k_*} et d'arêtes E^{k,k_*} associé aux transitions $(i, j, k, k_*) \rightarrow (h, l, k, k_*)$ avec

$$\begin{cases} V^{k,k_*} = \{(i, j)\} := \{v_1, \dots, v_n\}, \\ E^{k,k_*} = \{\{v_q, v_r\}, q \in \{1, \dots, n\}, r \in \{1, \dots, n\} \text{ tel que } \sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*} \neq 0\}. \end{cases} \quad (2.31)$$

Outre des propriétés standards de conservation de l'opérateur $Q_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$, nous avons pu établir le résultat suivant :

Lemme 2.2.1. *On suppose que $\forall (i, k) : f_i^k(v) \in L^1[(1 + |v|^2)dv]$ et que $\forall k \neq k_* : G^{k,k_*}$ est un graphe fermé¹⁶. Alors :*

$$\forall (i, k) : Q_i^k(\{f_j^{k_*}\}_{j,k_*}) = 0 \iff \exists (\{Y_k > 0\}_k, \rho > 0, u, T > 0) \text{ tel que } \forall (i, k) : f_i^k(v) = \mathcal{M}_i^k(v)$$

où $\mathcal{M}_i^k(v)$ est la maxwellienne définie avec

$$\mathcal{M}_i^k(v) = \frac{Y_k}{m_k} \cdot \frac{\rho}{\left(2\pi \frac{T}{m_k}\right)^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{g_i^k}{\mathcal{Z}_k(T)} \exp \left[-\frac{\frac{1}{2}(v - u)^2 + \epsilon_i^k}{T/m_k} \right], \quad (2.32)$$

$\mathcal{Z}_k(T) := \sum_i g_i^k \exp \left(-\frac{m_k \epsilon_i^k}{T} \right)$ étant la fonction de partition de l'espèce k .

¹⁶Le graphe G^{k,k_*} est fermé lorsque pour tout $\{v_q, v_r\} \in V^{k,k_*} \times V^{k,k_*}$, il existe un chemin entre v_q et v_r constitué d'éléments de E^{k,k_*} .

Dans (2.32), Y_k , ρ , u et T définissent respectivement la fraction massique de l'espèce k , la densité volumique, la vitesse macroscopique et la température thermodynamique¹⁷ du mélange de gaz. Remarquons que la formule (2.32) s'écrit aussi

$$\mathcal{M}_i^k(v) = p_i^k \cdot \frac{Y_k}{m_k} \cdot \frac{\rho}{\left(2\pi \frac{T}{m_k}\right)^{\frac{3}{2}}} \exp \left[-\frac{(v-u)^2}{2T/m_k} \right]$$

où

$$p_i^k = \frac{g_i^k}{\mathcal{Z}_k(T)} \exp \left[-\frac{m_k \epsilon_i^k}{T} \right] \in [0, 1] \quad (2.33)$$

définit, à l'équilibre thermodynamique, la probabilité pour que l'espèce k se trouve à l'état i . La formule (2.33) est classique en mécanique statistique.

La fonction de partition $\mathcal{Z}_k(T)$ montre qu'à l'équilibre thermodynamique et à température fixée, plus un niveau i est de basse énergie, plus il est peuplé¹⁸, le niveau d'énergie le plus peuplé étant le niveau fondamental i pour lequel $\epsilon_i^k = 0$. La fonction de partition $\mathcal{Z}_k(T)$ montre également que les niveaux de basse énergie sont d'autant plus peuplés que la température T est basse. À basse température¹⁹, on peut donc négliger les transitions d'énergie quantique pour ne considérer que l'évolution de l'état fondamental de chaque espèce k du mélange : dans ce cas là, le mélange de gaz peut être décrit par les équations de Boltzmann multi-espèces classiques. Par contre, à haute température²⁰, il faut tenir compte des transitions entre les niveaux d'énergie quantique pour chaque espèce k : le mélange de gaz doit alors être décrit par les équations de Wang-Chang & Uhlenbeck (2.11).

Pour démontrer le Lemme 2.2.1, nous avons généralisé à notre contexte la preuve établie par B. Perthame [85] pour le cas de l'opérateur de Boltzmann classique mono-espèce. Celle-ci est basée sur une transformée de Fourier des distributions $f_i^k(v)$. Le grand intérêt de la preuve de B. Perthame tient en ce qu'elle ne suppose aucune régularité de la distribution f contrairement à la preuve donnée par Boltzmann [9] (où f est supposée deux fois dérivable) ou par Cercignani [12] (où f est supposée continue en au moins un point). Ici, le Lemme 2.2.1 n'impose aucune condition de régularité. En effet :

- la condition $\forall(i, k) : f_i^k(v) \in L^1[(1 + |v|^2)dv]$ impose que la masse et l'énergie de chaque espèce sont finies. C'est une hypothèse physique standard qui est implicitement imposée par Boltzmann et Cercignani dans leurs preuves respectives ;
- la condition G^{k,k_*} est un graphe fermé est liée au caractère multi-espèces avec niveaux d'énergie quantique de l'opérateur de Boltzmann $Q_i^k(\{f_j^{k_*}\}_{j,k_*})$. Cette condition impose qu'il y ait suffisamment de transitions d'énergie quantique $(i, j, k, k_*) \rightarrow (h, l, k, k_*)$ pour qu'aucun ensemble de niveaux d'énergie quantique ne soit isolé²¹. Cette hypothèse est légitime d'un point de vue physique.

Notion de catalyseur : Notons que pour V^{k,k_*} fixé, il n'y a pas unicité du graphe fermé $G^{k,k_*} := (V^{k,k_*}, E^{k,k_*})$. D'autre part, on peut imaginer un processus de transition tel qu'il n'existe aucune transition du type

$$(i, j, k, k) \rightarrow (h, l, k, k) \quad \text{lorsque} \quad (i, j, h, l) \neq (i, i, i, i).$$

Dans ce cas, lorsque le graphe G^{k,k_*} est fermé, les niveaux d'énergie i de l'espèce k transitionnent vers les niveaux d'énergie h ($h \neq i$) *uniquement* par l'intermédiaire des collisions avec l'espèce k_* ($k_* \neq k$). Dès lors, l'équilibre (2.32) pourra tout de même être atteint. L'espèce k_* peut donc jouer un rôle de catalyseur en accélérant, voire en provoquant, le retour vers l'équilibre de l'espèce k – et donc le retour

¹⁷La température T est exprimée en unité d'énergie.

¹⁸On suppose ici que les dégénérescences de l'espèce k sont toutes du même ordre de grandeur.

¹⁹La température doit cependant être beaucoup plus grande que le zéro absolu, température pour laquelle les phénomènes quantiques sont trop importants pour que l'état du gaz puisse être décrit par une équation cinétique de type Boltzmann.

²⁰La température doit cependant être plus faible que la température d'ionisation.

²¹Dans le cas contraire, il faudrait définir un équilibre thermodynamique pour chaque ensemble isolé de niveaux d'énergie quantique.

vers l'état fondamental caractérisé par $\epsilon_i^k = 0$ – grâce à l'introduction de nouveaux chemins possibles entre niveaux d'énergie quantique : ce phénomène est connu dans la physique de l'enrichissement par laser ; il est par exemple mis en évidence *via* des simulations numériques dans [Dellacherie, 2003a] (voir le paragraphe *Mise en évidence de l'effet catalyseur du fer* à la fin du §5.5.3 du Chapitre 5). Soulignons enfin que si le graphe fermé $G^{k,k_*} := (V^{k,k_*}, E^{k,k_*})$ n'est pas unique, on peut par contre affirmer que la vitesse de relaxation de f_i^k vers (2.32) en dépend : qualitativement, on peut écrire que pour V^{k,k_*} fixé, plus $\text{card}(E^{k,k_*})$ est grand, plus la vitesse de relaxation est grande.

Dans la suite, on suppose que $\forall k \neq k_* : G^{k,k_*}$ est un graphe fermé, la section efficace $\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$ satisfaisant toujours (2.26) et (2.27). En définissant l'entropie cinétique

$$\begin{cases} \mathcal{H}(f) = \sum_k \mathcal{H}^k(f^k), \\ \mathcal{H}^k(f^k) = \sum_i H_i(f_i^k), \\ H_i(f_i^k) = \int f_i^k(v) \log \left(\frac{f_i^k(v)}{g_i^k} \right) dv, \end{cases} \quad (2.34)$$

on établit le théorème H suivant :

Lemme 2.2.2. *Soit f_i^k solution de (2.11). Alors :*

$$\frac{d}{dt} \mathcal{H}(f)(t) \leq 0.$$

Remarquons qu'il est *a priori* possible de trouver une espèce k et un intervalle de temps borné $[a, b]$ pour lequel $\partial_t \mathcal{H}^k(f^k) \geq 0$ puisque, sous l'hypothèse $\forall k \neq k_* : G^{k,k_*}$ est un graphe fermé, aucune espèce k ne définit un système isolé. Par contre, l'entropie du mélange $\mathcal{H}(f)(t)$ décroît car le mélange de gaz définit un système isolé.

Le Lemme 2.2.2 couplé à l'inégalité de Csiszár-Kullback [20, 66] permet d'établir le résultat suivant :

Lemme 2.2.3. *Soit f_i^k solution de (2.11). Alors :*

$$\forall (i, k) : \lim_{t \rightarrow +\infty} \|f_i^k - \mathcal{M}_i^k\|_{L^1} = 0.$$

Soulignons que lorsque le graphe G^{k,k_*} n'est pas fermé, il n'y a pas nécessairement unicité de l'état d'équilibre $\mathcal{M}_i^k$ et le Lemme 2.2.3 n'est donc pas nécessairement valable, l'entropie restant par ailleurs une fonction décroissante. L'hypothèse $\forall k \neq k_* : G^{k,k_*}$ est un graphe fermé, au même titre que les conditions (2.26) et (2.27) sur la section efficace $\sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}$, est donc un élément essentiel pour obtenir la convergence vers un état d'équilibre maxwellien.

2.2.4 Limite fluide

À l'équilibre thermodynamique défini par la distribution (2.32), le mélange de gaz est caractérisé par les relations

$$\forall k : u_k = u \text{ (loi isovitesse)}$$

ainsi que par

$$\left\{ \begin{array}{ll} \forall k : Y_k \tau_k = \tau & \text{(loi de mélange),} \\ \sum_{k=1}^{\bar{k}} P_k = P & \text{(loi de Dalton),} \\ \forall k : T_k = T & \text{(loi isotherme),} \\ \forall k : \tau_k P_k = \frac{T_k}{m_k} & \text{(équation d'état d'un gaz parfait)} \end{array} \right. \quad (2.35)$$

($\bar{k}$ est le nombre d'espèces du mélange) où u et u_k sont respectivement la vitesse du mélange et du gaz k , où $\tau := 1/\rho$ et $\tau_k := \tau/Y_k$ sont respectivement le volume spécifique du mélange et du gaz k , où P et P_k sont respectivement la pression du mélange et du gaz k , et où T et T_k sont respectivement la température du mélange et du gaz k . D'autre part, l'énergie interne $\mathcal{E}$ et l'entropie s du mélange de gaz sont respectivement données par

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{E}(Y_1, \dots, Y_{\bar{k}-1}, T) = \sum_k Y_k \mathcal{E}_k(T), & (a) \\ \mathcal{E}_k(T) = \mathcal{E}_k^{cl}(T) + \mathcal{E}_k^{ncl}(T), & (b) \\ \mathcal{E}_k^{cl}(T) = \frac{3}{2} \cdot \frac{T}{m_k}, & (c) \\ \mathcal{E}_k^{ncl}(T) = -\frac{\partial \log \mathcal{Z}_k(T)}{\partial(m_k/T)} = \frac{\sum_i g_i^k \epsilon_i^k \exp\left(-\frac{m_k \epsilon_i^k}{T}\right)}{\mathcal{Z}_k(T)} & (d) \end{array} \right. \quad (2.36)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{ll} s(Y_1, \dots, Y_{\bar{k}-1}, \tau, \mathcal{E}) = \sum_k Y_k s_k(Y_k, \tau, T), & (a) \\ s_k(Y_k, \tau, T) = s_k^{cl}(\tau_k, T) + s_k^{ncl}(T), & (b) \\ s_k^{cl}(\tau_k, T_k) = -\frac{1}{m_k} \left[\log(m_k \tau_k) + \frac{3}{2} \log\left(\frac{T_k}{m_k}\right) \right], & (c) \\ s_k^{ncl}(T_k) = -\frac{1}{m_k} \left[\log(\mathcal{Z}_k(T_k)) + \frac{\epsilon_k^{ncl}(T_k)}{\frac{T_k}{m_k}} \right]. & (d) \end{array} \right. \quad (2.37)$$

Les quantités $\mathcal{E}_k^{cl}(T)$ et $s_k^{cl}(\tau_k, T)$ sont liées aux degrés de liberté classiques de l'espèce k ; les quantités $\mathcal{E}_k^{ncl}(T)$ et $s_k^{ncl}(T)$ sont liées aux degrés de liberté non-classiques de l'espèce k . Nous réutiliserons ces quantités au Chapitre 5. L'équation d'état (2.35)(d) caractérise un gaz thermiquement parfait alors que l'équation d'état (2.36)(b,c,d) caractérise un gaz calorifiquement imparfait. Le gaz k serait calorifiquement parfait si l'énergie interne $\mathcal{E}_k^{ncl}(T_k)$ était nulle pour tout T_k , ce qui ne peut se produire que lorsque $\forall i : \epsilon_i^k = 0$, c'est à dire uniquement dans le cas classique. Notons que les formules (2.36)(d) et (2.37)(d) sont classiques en mécanique statistique lorsqu'un système est caractérisé par un ensemble discret d'états : voir par exemple les formules (2.4-5) et (2.4-14) dans [54].

On montre que l'entropie $s(Y_1, \dots, Y_{\bar{k}-1}, \tau, \mathcal{E})$ ainsi définie est une fonction strictement convexe de $(\tau, \mathcal{E})$ qui vérifie la relation différentielle classique $-Tds = d\mathcal{E} + Pd\tau$ lorsque $dY_k = 0$. La fonction $s(Y_1, \dots, Y_{\bar{k}-1}, \tau, \mathcal{E})$ définit donc l'entropie thermodynamique du mélange de gaz.

Le Lemme 2.2.3 nous incite à formellement définir la limite fluide des équations de Wang-Chang & Uhlenbeck (2.11)(2.12)(2.17) :

Propriété 2.2.1. *On suppose que les sections efficaces sont telles que*

$$\exists \lambda > 0 / \forall (v, v_*, \Omega, i, j, h, l, k, k_*) : \sigma_{i,j \rightarrow h,l}^{k,k_*}(v, v_*, \Omega) \simeq \frac{1}{\lambda}. \quad (2.38)$$

Soit $f_i^k(t, x, v)$ – maintenant notée $f_{i,\lambda}^k(t, x, v)$ – solution de (2.11)(2.12)(2.17). Alors, on peut formellement écrire que

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} f_{i,\lambda}^k = \mathcal{M}_i^k \quad (2.39)$$

où $\mathcal{M}_i^k$ est défini avec (2.32). De plus, les grandeurs macroscopiques $\{Y_k\}_k$, ρ , u et T qui définissent $\mathcal{M}_i^k$ sont solutions du système d'Euler multi-espèces compressible

$$\begin{cases} \forall k : \partial_t(Y_k \rho) + \nabla_x \cdot (Y_k \rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u + P \bar{1}) = 0, \\ \partial_t(\rho E) + \nabla_x \cdot [(\rho E + P)u] = 0 \end{cases} \quad (2.40)$$

fermé avec (2.35), (2.36) et $E = \frac{1}{2}u^2 + \mathcal{E}(Y_1, \dots, Y_{k-1}, T)$. Enfin, le système (2.40) admet l'entropie thermodynamique (2.37) qui est strictement convexe lorsque $dY_k = 0$. Le système (2.40) est donc hyperbolique.

Le paramètre λ correspond au nombre de Knudsen pour une densité macroscopique de particules caractéristique et une longueur macroscopique caractéristique normalisées (*i.e.* d'ordre 1). La preuve de la Propriété 2.2.1 est purement formelle : une preuve rigoureuse de ce résultat est un exercice très complexe qui sort du cadre du présent travail. Seul le caractère hyperbolique du système (2.40) est obtenu de façon rigoureuse²². Les valeurs propres et vecteurs propres sont explicités dans [Dellacherie, 2003b]²³. Soulignons que l'hypothèse (2.38) est importante : elle permet d'affirmer qu'il n'existe qu'une seule échelle de temps au niveau microscopique. Dans le cas contraire, il faudrait remplacer (2.39) par autant de limites qu'il y aurait d'échelles de temps microscopiques. Le système (2.40) devrait alors être remplacé par un système d'Euler compressible plus complexe²⁴.

²²L'hyperbolicité du système (2.40) est une conséquence directe de l'existence d'une entropie strictement convexe. Ce lien direct entre hyperbolicité et entropie correspond au théorème de Godunov-Mock écrit dans le cas multi-espèces : voir à ce sujet le §4.3 du Chapitre 4.

²³On vérifie que la présence de niveaux d'énergie quantique diminue la vitesse du son par rapport à un gaz standard. Ce résultat peut se comprendre en notant que les niveaux d'énergie quantique peuvent être vus comme un réservoir d'énergie qui "absorbe" l'énergie interne de translation et donc d'agitation thermique du gaz, cette "absorption" étant d'autant plus importante que la température du gaz est importante.

²⁴En particulier, la loi isovitesse $\forall k : u_k = u$ et la loi isotherme $\forall k : T_k = T$ ne seraient pas valables *a priori*. Un tel système pourrait ressembler au système d'Euler compressible (4.15) du Chapitre 4 avec termes de relaxation en vitesse et en température dans le cas d'un mélange binaire de gaz (*i.e.* avec $\alpha_k = 1$ et $\kappa = 0$ dans (4.15), $\alpha_k \in [0, 1]$ et $\kappa = 1$ correspondant au cas d'un mélange binaire de fluides non-miscibles).

Chapitre 3

Analyse de l'algorithme LBM appliqué à l'équation de la chaleur

Les résultats présentés dans ce chapitre n'ont fait l'objet d'aucune publication à ce jour. Ils ont cependant été présentés dans plusieurs séminaires en France entre 2007 et 2009. Ces résultats – obtenus en collaboration avec C. Le Potier – concernent la *Méthode de Boltzmann sur Réseau* (MBR) connue également sous le nom de *Lattice Boltzmann Method*. Dans la suite, nous utiliserons l'acronyme LBM pour faire référence à cet algorithme.

L'algorithme LBM est une méthode numérique originale présentée comme étant une alternative aux méthodes numériques classiques. Cet algorithme a initialement été proposé pour résoudre le système de Navier-Stokes incompressible 2D ou 3D [51, 13, 81]. Historiquement, l'algorithme LBM trouve ses origines dans l'automate cellulaire¹ proposé par Frisch, Hasslacher et Pomeau, cet automate permettant de restituer au moins qualitativement des écoulements incompressibles [35, 68, 34]. Par ailleurs, l'algorithme LBM est également utilisé pour résoudre l'équation de la chaleur avec ou sans transfert radiatif [103, 79], et a été étendu au système de Navier-Stokes incompressible couplé à de la thermique en faiblement dilatable (approximation de Boussinesq) [50, 57] ou à des modèles bas Mach prenant en compte de fortes dilatations thermiques² [50, 47]. Toutes ces études montrent que l'algorithme LBM est simple, robuste et *a priori* précis, ce qui en fait un algorithme actuellement populaire, notamment dans le milieu industriel.

L'algorithme LBM est simple car il est explicite, et, dans le cas du système de Navier-Stokes incompressible, n'est pas basé sur la résolution d'une équation de Poisson. De plus, son stencil est petit ce qui en fait un bon candidat pour des calculs hautes performances intégrant des accélérateurs matériels de type GPU³. L'algorithme LBM est robuste car il semble inconditionnellement stable bien qu'étant explicite. Malgré tout, ce n'est que très récemment que la communauté des Mathématiques Appliquées s'y est intéressée [3, 61, 64, 65, 62, 63, 28]. Des origines liées aux automates cellulaires⁴, des propriétés jugées peut-être trop miraculeuses pour être vraies, le fait que le maillage soit nécessairement constitué de mailles carrées ou une façon peut-être quelque fois obscure d'introduire l'algorithme LBM expliquent sans doute cet état de fait. Néanmoins, force est de constater que les résultats numériques obtenus avec l'algorithme LBM semblent intéressants, ce qui justifie de notre point de vue que la communauté des Mathématiques Appliquées s'y intéresse sérieusement.

Aussi, il nous a semblé utile de tenter de comprendre le processus de construction de l'algorithme

¹Un automate cellulaire est un ensemble de “cellules” distribuées sur les nœuds d'un maillage cartésien qui sont caractérisées par un état appartenant à un ensemble discret et fini d'états possibles, l'état de la “cellule” dépendant au temps $t + 1$ de celui au temps t de ses voisines *via* des règles simples. L'automate cellulaire le plus connu est celui dit du *jeu de la vie* (*game of life* en anglais) proposé par John Conway [37].

²Nous dérivons un modèle de ce type au Chapitre 6.

³GPU est l'acronyme de *Graphics Processing Unit*.

⁴Les outils mathématiques pour étudier les automates cellulaires utilisent des notions de système dynamique discret et non des notions d'EDP.

LBM dans un cas simple, en l'occurrence celui de l'équation de la chaleur monodimensionnelle $\partial_t \rho = \nu \partial_{xx}^2 \rho$ ($\nu \in \mathbb{R}_*^+$), pour ensuite étudier ses propriétés et limitations.

3.1 Construction de l'algorithme

Le principe de construction de l'algorithme LBM que nous proposons est basé sur le résultat formel suivant :

Lemme 3.1.1. *Soit $f_q(t, x)$ solution du système cinétique à deux vitesses discrètes*

$$\begin{cases} \partial_t f_1 - c_\varepsilon \partial_x f_1 = \frac{1}{2\varepsilon}(f_2 - f_1), \\ \partial_t f_2 + c_\varepsilon \partial_x f_2 = \frac{1}{2\varepsilon}(f_1 - f_2) \end{cases} \quad (3.1)$$

où $c_\varepsilon = \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}} \in \mathbb{R}_*^+$. Alors, la densité $\rho := f_1 + f_2$ est solution de

$$\partial_t \rho = \nu \partial_{xx}^2 \rho + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (3.2)$$

lorsque $\varepsilon \ll 1$.

La preuve de ce résultat est formelle ; elle utilise un développement de Chapman-Enskog pour lequel on suppose que $f_q = \frac{\rho}{2} + \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$. Remarquons qu'en posant $w := f_2 - f_1$, le système (3.1) est équivalent au p-système avec relaxation

$$\begin{cases} \partial_t \rho + c_\varepsilon \partial_x w = 0, & (a) \\ \partial_t w + \partial_x p_\varepsilon(\rho) = -\frac{w}{\varepsilon} & (b) \end{cases} \quad (3.3)$$

avec $p_\varepsilon(\rho) = c_\varepsilon \rho$. Les distributions f_1 et f_2 peuvent alors être vues comme les invariants de Riemann du p-système avec relaxation (3.3). Le système (3.3) a été étudié par Hsiao & Liu [55] et par Jin & Levermore [60] dans le cas particulier

$$c_\varepsilon := 1 \quad \text{et} \quad p_\varepsilon(\rho) := p(\rho). \quad (3.4)$$

Sous cette condition, Hsiao & Liu montrent que lorsque $\varepsilon \ll 1$, l'équation (3.3)(a) peut être approchée par

$$\partial_t \rho = \varepsilon \partial_{xx}^2 p(\rho),$$

équation qui n'a aucune chance de correspondre à la limite fluide (3.2) puisque ν est une constante d'ordre un. Cette différence est directement liée au fait que, dans notre cas, c_ε et $p_\varepsilon(\rho)$ dépendent de ε contrairement au cas particulier (3.4) étudié par Hsiao & Liu.

En utilisant le Lemme 3.1.1 et en discrétisant de façon astucieuse (3.1), on peut alors proposer un processus de construction compréhensible menant aux deux algorithmes

$$\begin{cases} g_{1,i}^{n+1} = g_{1,i+1}^n (1 - \frac{\eta}{2}) + g_{2,i+1}^n \frac{\eta}{2}, \\ g_{2,i}^{n+1} = g_{2,i-1}^n (1 - \frac{\eta}{2}) + g_{1,i-1}^n \frac{\eta}{2}, \\ \rho_i^{n+1} = g_{1,i}^{n+1} + g_{2,i}^{n+1} \end{cases} \quad (3.5)$$

et

$$\begin{cases} g_{1,i}^{n+1} = g_{1,i+1}^n (1 - \frac{\eta}{2}) + g_{2,i-1}^n \frac{\eta}{2}, \\ g_{2,i}^{n+1} = g_{2,i-1}^n (1 - \frac{\eta}{2}) + g_{1,i+1}^n \frac{\eta}{2}, \\ \rho_i^{n+1} = g_{1,i}^{n+1} + g_{2,i}^{n+1} \end{cases} \quad (3.6)$$

dont on espère qu'ils définissent chacun une bonne approximation de l'équation de la chaleur $\partial_t \rho = \nu \partial_{xx}^2 \rho$. Dans (3.5) et (3.6), i et n sont respectivement les indices en espace et en temps, et η est défini avec

$$\eta := \frac{1}{C_d + \frac{1}{2}} \in [0, 2] \quad \text{avec} \quad C_d := \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2} \in \mathbb{R}^+ \quad (3.7)$$

où Δx et Δt sont respectivement le pas d'espace et le pas de temps. Les deux algorithmes (3.5) et (3.6) sont de type LBM, l'algorithme (3.5) correspondant d'ailleurs à l'algorithme LBM proposé dans [103]. Remarquons que g_q dans (3.5) et (3.6) ne correspond pas exactement à f_q dans (3.1). En fait, g_q et f_q sont liés par la relation $g_q := f_q + \frac{(-1)^k}{2C_d}(M_q - f_q)$ avec $k = 1$ pour l'algorithme (3.5) et $k = 2$ pour l'algorithme (3.6). Via cette relation, on peut alors proposer deux autres schémas de type LBM respectivement équivalents à (3.5) et (3.6) dont la variable est cette fois-ci f_q . Par exemple, dans le cas de l'algorithme (3.5), on obtient l'algorithme LBM

$$\begin{cases} f_{1,i}^{n+1} = \frac{f_{1,i+1}^n(16C_d^2 - 1) + f_{2,i+1}^n(4C_d + 1) + f_{2,i-1}^n(4C_d - 1) + f_{1,i-1}^n}{16C_d(C_d + \frac{1}{2})}, \\ f_{2,i}^{n+1} = \frac{f_{1,i+1}^n(4C_d - 1) + f_{2,i+1}^n + f_{2,i-1}^n(16C_d^2 - 1) + f_{1,i-1}^n(4C_d + 1)}{16C_d(C_d + \frac{1}{2})}, \\ \rho_i^{n+1} = f_{1,i}^{n+1} + f_{2,i}^{n+1}. \end{cases}$$

Nous n'utiliserons pas ces formulations en f_q car elles sont plus complexes que (3.5) et (3.6)⁵.

Soulignons que le passage par un modèle cinétique à vitesse discrète et par un développement de Chapman-Enskog pour justifier l'algorithme LBM est standard. Néanmoins, l'algorithme LBM est souvent considéré comme étant lui même un modèle cinétique à vitesse discrète – et n'est donc pas présenté comme découlant d'une discrétisation d'un système cinétique continu du type (3.1) – et le développement de Chapman-Enskog est réalisé directement sur l'algorithme LBM (on pourra par exemple consulter [81]), ce qui, de notre point de vue, ne facilite pas toujours la compréhension profonde de l'algorithme LBM⁶.

3.2 Lien avec les différences finies

Dans le cas périodique, on montre l'équivalence de l'algorithme LBM (3.6) avec le schéma de type différences finies de Du Fort & Frankel [26]

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^{n-1} + 2C_d(\rho_{i+1}^n - \rho_i^{n+1} - \rho_i^{n-1} + \rho_{i-1}^n) \quad (3.8)$$

lorsque la condition initiale g_q^0 est donnée par

$$\begin{cases} g_{1,i}^0 = (1 - \alpha)\rho_i^0, \\ g_{2,i}^0 = \alpha\rho_i^0 \end{cases} \quad (3.9)$$

où $\alpha \in \mathbb{R}$ et lorsque la première itération ρ_i^1 du schéma de Du Fort & Frankel est donnée par

$$\rho_i^1 := \alpha\rho_{i-1}^0 + (1 - \alpha)\rho_{i+1}^0. \quad (3.10)$$

Soulignons que le schéma de Du Fort & Frankel (3.8) est un schéma à deux pas en temps qui nécessite donc la connaissance de ρ_i^1 en plus de celle de la condition initiale ρ_i^0 . Par ailleurs, en appliquant des conditions aux limites particulières sur $g_{q,i=0}^n$, on obtient également cette équivalence avec le schéma de

⁵Cette plus grande complexité de l'algorithme LBM exprimé en fonction de f_q justifie l'introduction de g_q .

⁶De plus, l'algorithme LBM est souvent présenté en choisissant $\Delta x = \Delta t = 1$, ce qui ne facilite pas non plus la compréhension de celui-ci. L'origine de ce choix réside certainement dans le lien historique de l'algorithme LBM avec les automates cellulaires.

Du Fort & Frankel (3.8)(3.10) muni d'une condition aux limites de Dirichlet ou de Neumann en $x = x_{\min}$. Notons qu'il est possible d'établir un résultat similaire dans le cas de l'algorithme LBM (3.5)⁷, ce qui souligne également l'équivalence entre les algorithmes LBM (3.5) et (3.6)⁸. Dans le cas périodique, cette équivalence est mentionnée dans [3] sans qu'il y soit pour autant noté l'importance des conditions (3.9) et (3.10). D'autre part, les cas des conditions aux limites de Dirichlet et de Neumann ne sont pas traités dans [3].

3.3 Stabilité, convergence dans L^∞ et principe du maximum

L'équivalence des algorithmes LBM (3.5) et (3.6) munis de la condition initiale (3.9) avec le schéma de Du Fort & Frankel (3.8)(3.10) est une propriété très intéressante. En effet, elle permet d'obtenir la stabilité inconditionnelle dans L^∞ du schéma de Du Fort & Frankel (3.8)(3.10) en utilisant la convexité inconditionnelle de (3.5) et (3.6) (on rappelle que $\eta \in [0, 2]$), puis, par application du théorème de Lax, la convergence inconditionnelle dans L^∞ du schéma de Du Fort & Frankel (3.8)(3.10). Par conséquent, on obtient également la convergence inconditionnelle dans L^∞ des algorithmes LBM (3.5) et (3.6) munis de la condition initiale (3.9). Dans le cas où $\alpha = 1/2$ dans (3.9) et (3.10), cette convergence est d'ordre deux en espace. Soulignons que la convergence inconditionnelle du schéma de Du Fort & Frankel (3.8) dans L^2 est connue depuis 1953. Ici, nous avons obtenu la convergence inconditionnelle dans L^∞ dans le cas particulier où la première itération est donnée par (3.10) grâce à l'interprétation du schéma de Du Fort & Frankel en un algorithme LBM très simple à manipuler au plan algébrique. On peut de même montrer l'existence d'un principe du maximum discret en utilisant (3.5) ou (3.6) dans le cas périodique lorsque $\alpha \in [0, 1]$, le cas non-périodique étant plus complexe.

3.4 Limitation de l'algorithme

L'équation modifiée du schéma de Du Fort & Frankel est l'équation du télégraphe⁹

$$\partial_t \rho = \nu \square^2 \rho \quad \text{où} \quad \begin{cases} \square^2 = \partial_{xx}^2 - \frac{\partial_{tt}^2}{c^2} & (\text{opérateur de d'Alembert}), \\ c = \frac{\Delta x}{\Delta t} \end{cases} \quad (3.11)$$

(à un terme en $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ près). De ce fait, si le schéma de Du Fort & Frankel possède des propriétés de stabilité inconditionnelles, *il est par contre conditionnellement consistant*. En effet, lorsque $\Delta t = \mathcal{O}(\Delta x^2)$, $1/c^2$ est d'ordre Δx^2 et (3.11) est une approximation à l'ordre deux de l'équation de la chaleur. Mais, lorsque $\Delta t = \mathcal{O}(\Delta x)$ (donc $C_d \gg 1$ puisque $C_d := \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2}$), c est d'ordre un et (3.11) est une mauvaise approximation de l'équation de la chaleur. Dans ce cas, les algorithmes LBM (3.5) et (3.6) donnent de mauvais résultats, la solution numérique faisant apparaître des ondes solutions de l'équation du télégraphe (3.11) se propageant à la vitesse finie c d'ordre un. Ces ondes apparaissent très clairement sur les résultats numériques lorsque $C_d \gg 1$ et ne sont pas numériquement diffusées car choisir $c = \Delta x / \Delta t$ dans (3.11) implique que la constante CFL liée au transport à la vitesse c est égale à un. Cet effet se comprend facilement en prenant $\eta := 0$ dans (3.5) et (3.6) ($\eta = 0$ lorsque $C_d = +\infty$) : dans ce cas, g_1 et g_2 décrivent deux populations de “particules” totalement découplées se déplaçant respectivement vers la gauche et vers la droite à la vitesse c .

Les algorithmes LBM (3.5) et (3.6) munis de la condition initiale (3.9) possèdent donc des propriétés de stabilité inconditionnelle et de convergence. Néanmoins, lorsque le pas de temps Δt est trop important par rapport à $\Delta x^2 / \nu$, les algorithmes LBM (3.5) et (3.6) ne sont pas précis.

⁷ Dans le cas de l'algorithme (3.5), il faut remplacer (3.10) par $\rho_i^1 := \xi \rho_{i-1}^0 + (1 - \xi) \rho_{i+1}^0$ où $\xi = \eta/2 + \alpha(1 - \eta)$. On notera que cette relation et (3.10) sont identiques lorsque $\alpha = 1/2$.

⁸ Les algorithmes LBM (3.5) et (3.6) se différencient par la relation (3.10) qui initie le schéma de Du Fort & Frankel, cette relation n'étant pas tout à fait la même dans le cas de l'algorithme LBM (3.5) sauf lorsque $\alpha = 1/2$ où les deux algorithmes LBM sont alors *exactement* identiques : voir la note de bas de page 7.

⁹ L'équation du télégraphe (3.11) est aussi connue sous le nom d'*équation hyperbolique de conduction de la chaleur*. L'équation (3.11) a en effet été proposée pour tenter de modéliser la propagation à vitesse finie de la chaleur [1].

Deuxième partie

Relaxation et couplage cinétique-fluide

Chapitre 4

Relaxation et analogies avec la théorie cinétique

CE chapitre présente les travaux publiés dans [Dellacherie, 2003c]. Ces travaux ont en partie été réécrits ou complétés dans [Del10], ce rapport constituant une version détaillée du présent chapitre¹. Nous avons en effet souhaité à la fois améliorer la présentation des résultats et proposer des prolongements n'ayant fait l'objet d'aucune publication de notre part (voir le §2.2.2 du Chapitre 2, le §3.4 du Chapitre 3 et le Chapitre 6 dans [Del10]).

Dans [Dellacherie, 2003b] (voir le §2.2.4 du chapitre 2), nous avons formellement établi que la limite fluide à l'ordre zéro (*i.e.* sans les termes de dissipation) des équations de Wang-Chang & Uhlenbeck (2.11)(2.12)(2.17) est donnée par le système d'Euler multi-espèces compressible

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall k \in \{1, \dots, \bar{k} - 1\} : \partial_t(Y_k \rho) + \partial_x(Y_k \rho u) = 0, \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + P) = 0, \\ \partial_t(\rho E) + \partial_x[(\rho E + P)u] = 0, \\ E = \frac{u^2}{2} + \varepsilon, \\ \forall k : \varepsilon_k = \varepsilon_k(\tau_k, P_k), \\ \sum_k Y_k = 1 \end{array} \right. \quad (4.1)$$

fermé avec (2.35) et (2.36). Les quantités ρ , u , P , E , ε définissent respectivement la densité, la vitesse, la pression, l'énergie totale et l'énergie interne² du mélange constitué de $\bar{k}$ espèces. Les quantités Y_k , $\tau_k := 1/\rho_k$, P_k et ε_k définissent la fraction massique, le volume spécifique, la pression et l'énergie interne de l'espèce k . Dans (2.35), nous avons introduit la loi de mélange

$$\forall k : Y_k \tau_k = \tau \quad (4.2)$$

où $\tau := 1/\rho$. Cette fermeture suppose implicitement que le mélange entre les espèces k et k_* est *intime* au sens où chaque espèce k occupe localement le même volume que l'espèce k_* . Cette hypothèse est légitime

¹L'article [Dellacherie, 2003c] est inclus dans l'annexe du rapport [Del10], lui-même inclus dans le TOME 2 : *Recueil de publications*. MODÈLES CINÉTIQUES, RELAXATION ET COUPLAGE CINÉTIQUE-FLUIDE qui accompagne le présent TOME 1 : *Mémoire de synthèse*.

²L'énergie interne ε est notée $\mathcal{E}$ dans (2.36).

dans le cas d'un mélange de gaz. Par contre, lorsque l'on souhaite modéliser un mélange de fluides non-miscibles *via* le système d'Euler multi-espèces (4.1), la loi de mélange (4.2) n'est pas valable et doit être remplacée par

$$\sum_k Y_k \tau_k = \tau. \quad (4.3)$$

Ce faisant, on perd $\bar{k} - 1$ relations de fermeture. Dans le cas d'un mélange de fluides non-miscibles, il est donc nécessaire de proposer $\bar{k} - 1$ nouvelles relations de fermeture pour fermer le système (4.1).

Cette remarque nous a incités à étudier en parallèle deux familles de relations de fermeture possibles, chacune de ces deux familles intégrant en particulier (4.2) ou (4.3). Dans ce contexte, la limite fluide des équations de Wang-Chang & Uhlenbeck (2.11)(2.12)(2.17) doit être vue comme un cas particulier du système (4.1) fermé avec (4.2). Soulignons que nous avons choisi ces deux familles de relations de fermeture de telle sorte qu'il soit possible de définir une entropie thermodynamique pour le mélange lorsque chaque espèce admet une entropie thermodynamique. Cette hypothèse est intéressante car elle permet, premièrement, d'établir aisément le caractère hyperbolique du système (4.1) et, deuxièmement, de définir un système d'Euler compressible à deux espèces³ avec termes de relaxation dont la limite fluide formelle d'ordre zéro correspond à (4.1), et dont la limite fluide formelle d'ordre un obtenue *via* un développement de type Chapman-Enskog correspond à un système de Navier-Stokes compressible à deux espèces. En étudiant les termes de diffusion d'ordre un ainsi obtenus, nous avons montré pour les mélanges binaires de gaz ou de fluides non-miscibles caractérisés par (4.2) ou (4.3) l'existence d'un phénomène de diffusion inter-espèces :

- par gradient de concentration. Cette diffusion est qualitativement identique à la loi de Fick ;
- par gradient de pression autorisant la séparation d'espèces par centrifugation ou par gravité. Cette diffusion est connue sous le nom de *barodiffusion* dans le cas des gaz ;
- par gradient de température. Cette diffusion est connue sous le nom de *thermodiffusion* (ou *diffusion thermique*) dans le cas des gaz [15, 41] et sous le nom d'*effet Soret* dans le cas d'un liquide constitué d'un solvant et d'un soluté [41].

Notons que dans le cas d'un mélange de fluides non-miscibles caractérisé par (4.3), le système d'Euler compressible avec relaxation correspond au *modèle diphasique à sept équations* connu aussi sous le nom de *modèle diphasique à deux pressions*. Enfin, nous avons proposé des schémas numériques entropiques pour le système (4.1) construits à partir du système avec relaxation.

Ce travail s'est inspiré de travaux de Lagoutière [67] pour l'établissement des relations de fermeture⁴, de travaux de Saurel et Abgrall [92] pour le choix d'une partie des termes de relaxation et de travaux de Coquel et Perthame [18] pour l'établissement du développement de Chapman-Enskog. Soulignons que, de manière indépendante, Helluy et Seguin ont également proposé dans [52] une approche par relaxation pour des mélanges de fluides prenant en compte la distinction entre mélanges de type *mélange de gaz* (4.2) et de type *mélange de fluides non-miscibles* (4.3). Les travaux présentés dans [Dellacherie, 2003c] et [52] nous semblent cependant complémentaires⁵.

³Le mélange est dit *binnaire* dans ce cas particulier.

⁴Dans [67], Lagoutière propose plusieurs familles de relations de fermeture dans le cas d'un mélange de fluides non-miscibles caractérisé par la loi de mélange (4.3). Dans [DR01], nous avons étendu ces familles de relations de fermeture au cas des mélanges de gaz caractérisé par la loi de mélange (4.2). Ici, nous ne nous intéressons qu'à deux de ces familles de relations de fermeture : une première pour un mélange de gaz et une seconde pour un mélange de fluides non-miscibles.

⁵Par exemple, le changement de phase est pris en compte dans [52] *via* un terme de relaxation sur l'équation de transport de la fraction massique alors qu'aucun changement de phase n'est modélisé dans [Dellacherie, 2003c] ; d'un autre côté, le système avec relaxation étudié dans [52] ne prend en compte aucun terme de relaxation en vitesse et température (et pression dans le cas d'un mélange de fluides non-miscibles) contrairement au système avec relaxation étudié dans [Dellacherie, 2003c]. En outre, aucun développement de Chapman-Enskog n'est étudié dans [52] alors que c'est un point important du travail présenté dans [Dellacherie, 2003c].

4.1 Relations de fermeture

Le système (4.1) est constitué de $2\bar{k} + 4$ équations et de $4\bar{k} + 5$ inconnues. On a donc besoin de $2\bar{k} + 1$ relations supplémentaires pour fermer le système. Pour cela, on choisit $\bar{k} + 2$ relations qui caractérisent le type de mélange – en l'occurrence un *mélange de gaz* ou un *mélange de fluides non-miscibles* – et on impose $\bar{k} - 1$ relations thermodynamiques qui permettent de se placer dans un cadre thermodynamique classique pour le mélange.

Avant de proposer ces relations de fermeture, on introduit la notion de *fraction volumique* avec

$$\alpha_k := \frac{Y_k \rho}{\rho_k} = \frac{Y_k \tau_k}{\tau}. \quad (4.4)$$

On a donc

$$\sum_k \alpha_k \rho_k = \rho \quad (4.5)$$

puisque $\sum_k Y_k = 1$. La notion de fraction volumique est importante dans le cas d'un mélange de fluides non-miscibles ; elle est par contre inutile dans le cas d'un mélange de gaz.

4.1.1 Mélange de gaz

Choisissons les $\bar{k} + 2$ relations de fermeture suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \forall k : Y_k \tau_k = \tau & \text{(loi de mélange),} \\ \sum_k Y_k \varepsilon_k = \varepsilon & \text{(extensivité de l'énergie),} \\ \sum_k P_k = P & \text{(loi de Dalton)} \end{array} \right. \quad (4.6)$$

(on rappelle que $\tau_k := 1/\rho_k$ et $\tau := 1/\rho$). La relation (4.6)(a) est une *loi de mélange* qui caractérise un mélange intime entre les espèces k du fluide. On se place donc ici implicitement dans le cas d'un mélange de gaz. La relation (4.6)(b) est imposée par le caractère extensif de l'énergie interne. La relation (4.6)(c) est la *loi de Dalton* : elle est également caractéristique d'un mélange de gaz. On voit de suite que la loi de mélange (4.6)(a) est équivalente à

$$\forall k : \alpha_k = 1 \quad (4.7)$$

où α_k est la fraction volumique définie avec (4.4). La relation (4.7) caractérise le fait que chaque espèce de gaz est présente dans chaque élément de volume à l'échelle mésoscopique. La relation (4.5) s'écrit donc simplement

$$\sum_k \rho_k = \rho$$

dans le cas d'un mélange de gaz.

4.1.2 Mélange de fluides non-miscibles

À la place des relations de fermeture (4.6), choisissons maintenant les $\bar{k} + 2$ relations de fermeture suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \sum_k Y_k \tau_k = \tau & \text{(loi de mélange),} \\ \sum_k Y_k \varepsilon_k = \varepsilon & \text{(extensivité de l'énergie),} \\ \forall (k, k') : P_k = P_{k'} =: P & \text{(fermeture isobare).} \end{array} \right. \quad (4.8)$$

La relation (4.8)(a) est une *loi de mélange* qui caractérise un mélange constitué de $\bar{k}$ espèces de fluides non-miscibles. Comme dans le cas d'un mélange de gaz, la relation (4.8)(b) est imposée par le caractère extensif de l'énergie interne. La relation (4.8)(c) est la *fermeture isobare* : celle-ci est souvent utilisée dans le cas de fluides non-miscibles. La *loi de mélange* (4.8)(a) est équivalente à

$$\sum_k \alpha_k = 1 \quad (4.9)$$

où α_k est la fraction volumique définie avec (4.4). La relation (4.9) caractérise le fait que le mélange est constitué de fluides non-miscibles qui occupent donc des éléments de volume différents à l'échelle mésoscopique ($\alpha_k \neq \alpha_{k_*}$ a priori lorsque $k \neq k_*$).

4.1.3 Fraction massique versus fraction volumique

La relation (4.7) souligne que la notion de fraction volumique α_k n'est pas une notion pertinente pour un mélange de gaz. C'est pourquoi l'on utilise la notion de fraction massique Y_k pour un mélange de gaz dans les systèmes du type (4.1) (α_k et Y_k sont reliées *via* la définition (4.4)). Par contre, la relation (4.9) montre que, contrairement au cas d'un mélange de gaz, la notion de fraction volumique α_k est une notion pertinente pour un mélange de fluides non-miscibles.

4.1.4 Hypothèse thermodynamique

Les relations (4.6) ou (4.8) définissent $\bar{k} + 2$ relations de fermeture. Pour imposer les $\bar{k} - 1$ relations de fermeture manquantes, on se place dans le cadre thermodynamique classique suivant :

Hypothèse 4.1.1. *Pour tout k , on peut associer à l'équation d'état $\varepsilon_k(\tau_k, P_k)$ une entropie thermodynamique $s_k(\tau_k, \varepsilon_k)$ et une température thermodynamique T_k . En d'autres termes, l'entropie $s_k(\tau_k, \varepsilon_k)$ est strictement convexe et vérifie le second principe de la thermodynamique⁶*

$$-T_k ds_k = d\varepsilon_k + P_k d\tau_k. \quad (4.10)$$

Soulignons que sous cette hypothèse, l'équation d'état $\varepsilon_k(\tau_k, P_k)$ est équivalente au couple d'équations d'état $\varepsilon_k(T_k, P_k)$ et $\tau_k(T_k, P_k)$ [19]. L'introduction des $\bar{k}$ nouvelles inconnues T_k est donc compensée par les $\bar{k}$ nouvelles relations $\tau_k(T_k, P_k)$. De façon équivalente, on peut écrire que l'introduction des $\bar{k}$ nouvelles inconnues T_k est compensée par l'existence des $\bar{k}$ entropies thermodynamiques $s_k(\tau_k, \varepsilon_k)$. Il manque donc bien $\bar{k} - 1$ relations de fermeture malgré l'introduction des températures T_k dans la modélisation.

On impose les $\bar{k} - 1$ relations de fermeture manquantes *via*

$$\forall(k, k') : T_k = T_{k'} =: T \quad (\text{fermeture isotherme}) \quad (4.11)$$

pour les deux types de mélange. La fermeture (4.11) correspond à la *fermeture isotherme*. La température commune T définit la *température de mélange*.

4.2 Entropie thermodynamique pour le mélange

Le système d'Euler multi-espèces (4.1) est donc fermé avec les relations de fermeture (4.6)(4.11) (mélange de gaz) ou avec (4.8)(4.11) (mélange de fluides non-miscibles) auxquelles on adjoint l'Hypothèse (thermodynamique) 4.1.1. Soulignons qu'il est possible de proposer d'autres lois de fermeture (voir la note de bas de page 4). Cependant, les relations de fermeture (4.6)(4.11) et (4.8)(4.11) couplées à l'Hypothèse 4.1.1 vont permettre de montrer simplement chacune de leur côté le caractère hyperbolique de (4.1) et de proposer un système avec relaxation dont la limite fluide formelle obtenue par un développement de Chapman-Enskog correspond au système (4.1) avec termes de diffusion. Ce bon comportement est lié au fait que :

⁶Soulignons que traditionnellement, en mathématique, l'entropie est convexe alors qu'en physique, celle-ci est concave. L'entropie du physicien est donc donnée par $s_k^{phys} := -s_k$, d'où la relation $T_k ds_k^{phys} = d\varepsilon_k + P_k d\tau_k$ qui est peut-être plus satisfaisante pour le physicien.

– d’une part, pour tout $(\{Y_k\}_k, \tau, \varepsilon) \in (\mathbb{R}^+)^{\bar{k}+2}$, le système

$$\begin{cases} \forall k : Y_k \tau_k(T, P_k) = \tau, \\ \sum_k Y_k \varepsilon_k(T, P_k) = \varepsilon \end{cases} \quad (\text{mélange de gaz}) \quad (4.12)$$

admet une unique solution $(T, \{P_k\}_k)$ dans $(\mathbb{R}^+)^{\bar{k}+1}$. De même, le système

$$\begin{cases} \sum_k Y_k \tau_k(T, P) = \tau, \\ \sum_k Y_k \varepsilon_k(T, P) = \varepsilon \end{cases} \quad (\text{mélange de fluides non-miscibles}) \quad (4.13)$$

admet une unique solution (T, P) dans $(\mathbb{R}^+)^2$;

– d’autre part, la température de mélange T définie avec (4.11) est une température thermodynamique au sens où la fonction

$$s := \sum_k Y_k s_k(\tau_k, \varepsilon_k) \quad (4.14)$$

couplée à (4.12) ou (4.13) peut être vue comme une fonction $s(\{Y_k\}_k, \tau, \varepsilon)$, strictement convexe par rapport à (τ, ε) et telle que

$$-Tds = d\varepsilon + Pd\tau \quad \text{lorsque} \quad dY_k = 0.$$

La fonction $s(\{Y_k\}_k, \tau, \varepsilon)$ définit une entropie thermodynamique pour le mélange que l’on nommera simplement entropie de mélange.

Dans le cas d’un mélange de fluides non-miscibles caractérisé par (4.8)(4.11) (et donc par (4.13)), ces résultats ont initialement été établis dans [67]. En nous inspirant de cette référence, nous avons généralisé ces résultats au cas d’un mélange de gaz caractérisé par (4.6)(4.11) (et donc par (4.12)).

Soulignons que les relations (4.12) et (4.13) définissent chacune une fonction $\varepsilon(\{Y_k\}_k, \tau, P)$ caractérisant l’énergie interne du mélange. Cette fonction réunit l’ensemble des relations de fermeture qui ferment le système (4.1).

4.3 Hyperbolicité

Le théorème de Godunov-Mock relie l’hyperbolicité d’un système de loi de conservation à l’existence d’une entropie mathématique [38]. Or, l’entropie thermodynamique $s(\{Y_k\}_k, \tau, \varepsilon)$ définie avec (4.14) n’est pas une entropie mathématique pour le système (4.1) puisqu’elle n’est pas strictement convexe par rapport à Y_k . Cependant, en utilisant le fait que $\partial_t Y_k + u \partial_x Y_k = 0$, Lagoutière a pu généraliser dans [67] le théorème de Godunov-Mock et ainsi déduire de l’existence de $s(\{Y_k\}_k, \tau, \varepsilon)$ le caractère hyperbolique de (4.1) fermé avec (4.8)(4.11) sous l’Hypothèse 4.1.1. Nous obtenons le caractère hyperbolique du système (4.1) fermé avec (4.6)(4.11) sous l’Hypothèse 4.1.1 par la même technique. On pourra consulter [DR01] pour le détail des démonstrations.

4.4 Système avec relaxation pour un mélange binaire

On introduit maintenant le système avec relaxation

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial_t(\alpha_1 \rho_1) + \partial_x(\alpha_1 \rho_1 u_1) = 0, & (a) \\ \partial_t(\alpha_1 \rho_1 u_1) + \partial_x(\alpha_1 \rho_1 u_1^2 + \alpha_1 P_1) = \frac{1}{\lambda_u} (u_2 - u_1) + \kappa P_{int} \partial_x \alpha_1, & (b) \\ \partial_t(\alpha_1 \rho_1 E_1) + \partial_x[(\alpha_1 \rho_1 E_1 + \alpha_1 P_1) u_1] = \frac{1}{\lambda_T} (T_2 - T_1) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_2 - u_1) \\ \quad + \kappa \left[P_{int} U_{int} \partial_x \alpha_1 + \frac{P_{int}}{\lambda_P} (P_2 - P_1) \right], & (c) \\ \partial_t(\alpha_2 \rho_2) + \partial_x(\alpha_2 \rho_2 u_2) = 0, & (a') \\ \partial_t(\alpha_2 \rho_2 u_2) + \partial_x(\alpha_2 \rho_2 u_2^2 + \alpha_2 P_2) = \frac{1}{\lambda_u} (u_1 - u_2) + \kappa P_{int} \partial_x \alpha_2, & (b') \\ \partial_t(\alpha_2 \rho_2 E_2) + \partial_x[(\alpha_2 \rho_2 E_2 + \alpha_2 P_2) u_2] = \frac{1}{\lambda_T} (T_1 - T_2) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_1 - u_2) \\ \quad + \kappa \left[P_{int} U_{int} \partial_x \alpha_2 + \frac{P_{int}}{\lambda_P} (P_1 - P_2) \right] & (c') \end{array} \right. \quad (4.15)$$

défini pour un mélange binaire⁷. L'entier $\kappa \in \{0, 1\}$ est un “interrupteur” dont la valeur dépend du type de mélange (voir ci-dessous). Les quantités U_{int} et P_{int} sont respectivement appelées *vitesse interfaciale* et *pression interfaciale*; elles dépendent *a priori* des autres variables du système (4.15). Ici, elles seront simplement définies avec (4.28). Les quantités strictement positives λ_u , λ_T et λ_P caractérisent les temps de relaxation vers l'équilibre en vitesse, en température et en pression. Ces trois variables sont des paramètres de modélisation qui dépendent *a priori* des autres variables du système (4.15). Enfin, on rappelle que $E_k := \frac{1}{2} u_k^2 + \varepsilon_k(\tau_k, P_k)$ est l'énergie totale de l'espèce k , que $\alpha_k := \frac{Y_k \rho}{\rho_k}$ est la fraction volumique de l'espèce k (Y_k étant la fraction massique : cf. (4.4)) et que T_k est la température thermodynamique associée à l'équation d'état $\varepsilon_k(\tau_k, P_k)$ (cf. Hypothèse 4.1.1). Les termes de relaxation sont choisis de telle sorte que la limite fluide à l'ordre zéro de (4.15) soit formellement égale au système (4.1) fermé avec (4.6)(4.11) (mélange de gaz) ou avec (4.8)(4.11) (mélange de fluides non-miscibles).

4.4.1 Cas d'un mélange de gaz caractérisé par (4.6)(4.11)

La loi de Dalton (4.6)(c) est telle que les pressions P_1 et P_2 ne sont pas identiques *a priori* dans (4.1). Donc, on supprime la relaxation en pression dans (4.15). Le système (4.15) est alors fermé lorsque

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_1 = 1, \\ \alpha_2 = 1. \end{array} \right. \quad (4.16)$$

Les relations (4.16) sont imposées par la loi de mélange (4.6)(a) (voir (4.7)). Dans le cas d'un mélange de gaz, on ne fait pas intervenir la notion de pression interfaciale. On résume les considérations précédentes en imposant

$$\kappa = 0 \quad (4.17)$$

dans (4.15). Remarquons que l'on pourrait supprimer le facteur κ devant les termes en $\partial_x \alpha_k$ dans (4.15) puisque ces termes sont automatiquement nuls du fait des relations de fermeture (4.16).

⁷Le système avec relaxation pour un mélange constitué de plus de deux espèces n'est pas étudié dans [Dellacherie, 2003c]. Soulignons que le développement de Chapman-Enskog étudié au §4.5 est infiniment plus complexe lorsque le mélange est constitué de plus de deux espèces.

4.4.2 Cas d'un mélange de fluides non-miscibles caractérisé par (4.8)(4.11)

On construit ici des *modèles diphasiques à six ou à sept équations* à partir du système avec relaxation (4.15). Seul le *modèle diphasique à sept équations* sera étudié dans la suite.

Modèle diphasique à sept équations

La fermeture isobare (4.8)(c) incite à inclure un terme de relaxation en pression contrairement au cas d'un mélange de gaz. Pour ce faire, on ferme le système (4.15) avec

$$\partial_t \alpha_1 + U_{int} \partial_x \alpha_1 = \frac{1}{\lambda_P} (P_1 - P_2) \quad (4.18)$$

auquel on adjoint la fermeture

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1. \quad (4.19)$$

La fermeture (4.18) est de type EDP : cette relation ainsi que les termes non-conservatifs $P_{int} \partial_x \alpha_k$ et $P_{int} U_{int} \partial_x \alpha_k$ dans (4.15)(b,c,b',c') sont essentiels pour pouvoir mener à bien le développement de Chapman-Enskog appliqué au système (4.15). Ceci nous amène à imposer

$$\kappa = 1 \quad (4.20)$$

dans (4.15). Notons que le terme $\frac{1}{\lambda_P} (P_1 - P_2)$ dans (4.18) peut être vu comme un terme de compressibilité. La fermeture (4.19) est imposée par la loi de mélange (4.8)(a) (voir (4.9)). Remarquons que, du fait des fermetures (4.18) et (4.19), les équations de transport de l'énergie (4.15)(c,c') s'écrivent aussi

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_1 \rho_1 E_1) + \partial_x [(\alpha_1 \rho_1 E_1 + \alpha_1 P_1) u_1] + \kappa P_{int} \partial_t \alpha_1 = \frac{1}{\lambda_T} (T_2 - T_1) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_2 - u_1), \\ \partial_t (\alpha_2 \rho_2 E_2) + \partial_x [(\alpha_2 \rho_2 E_2 + \alpha_2 P_2) u_2] + \kappa P_{int} \partial_t \alpha_2 = \frac{1}{\lambda_T} (T_1 - T_2) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_1 - u_2). \end{cases} \quad (4.21)$$

Les systèmes du type (4.15)(4.18) sont connus sous le nom de *modèle diphasique à sept équations* ou *modèles diphasiques à deux pressions* car $P_1 \neq P_2$ *a priori*. Le premier modèle de ce type à avoir été proposé est celui de Baer et Nunziato (voir les équations (53) à (59) dans [6]). Sans les termes de relaxation en température, le système avec relaxation (4.15) fermé avec (4.18)(4.19)(4.20) correspond exactement au système avec relaxation proposé par Abgrall et Saurel dans [92] (voir le système (14) p. 437 dans [92]). Le système avec relaxation (4.15) fermé avec (4.18)(4.19)(4.20) a par la suite été étudié dans [46] avec des termes de relaxation supplémentaires dans (4.15)(a,a') modélisant un changement de phase fluide 1 $\leftrightarrow$ fluide 2 (voir la partie I dans [46]). Le caractère hyperbolique de la partie convective du système avec relaxation (4.15) fermé avec (4.18)(4.19)(4.20) a été étudié dans [36] (voir également sur ce sujet le chapitre 4 de la partie I dans [46]) ; notons que cette étude est importante compte tenu de l'existence de termes non-conservatifs en $\partial_x \alpha_k$ dans le cas non-miscible⁸. Notons également que le système avec relaxation (4.15) fermé avec (4.18)(4.19)(4.20) a été étudié dans [2] *mais dans le cas barotrope i.e.* sans les équations de transport de l'énergie (4.15)(c,c') (ou (4.21)) et, donc en particulier, sans les termes de relaxation en température (voir le système (2.1) dans [2]).

Modèles diphasiques à six équations

On peut imposer la fermeture algébrique

$$P_1 = P_2 =: P \quad (\text{fermeture isobare}) \quad (4.22)$$

dans (4.15) en lieu et place de la fermeture de type EDP (4.18) (rappelons que la fermeture isobare (4.22) ne peut pas être imposée dans le cas d'un mélange de gaz). Sous les fermetures (4.19)(4.20)(4.22), les

⁸Dans le cas d'un mélange de gaz, le système avec relaxation (4.15) ne comporte aucun terme non-conservatif en $\partial_x \alpha_k$ du fait des relations de fermeture (4.16). L'étude du caractère hyperbolique du système avec relaxation (4.15) ne pose donc pas de problème puisque, sans termes de relaxation, les systèmes (4.15)(a,b,c) et (4.15)(a',b',c') sont des systèmes d'Euler compressibles monophasiques découplés l'un de l'autre.

termes de relaxation en pression disparaissent et le système (4.15) est fermé. Il est intéressant de noter que sous les fermetures (4.19)(4.20)(4.22), les systèmes

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\alpha_1 \rho_1 E_1) + \partial_x[(\alpha_1 \rho_1 E_1 + \alpha_1 P)u_1] = \frac{1}{\lambda_T} (T_2 - T_1) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_2 - u_1) + P_{int} U_{int} \partial_x \alpha_1, \\ \partial_t(\alpha_2 \rho_2 E_2) + \partial_x[(\alpha_2 \rho_2 E_2 + \alpha_2 P)u_2] = \frac{1}{\lambda_T} (T_1 - T_2) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_1 - u_2) + P_{int} U_{int} \partial_x \alpha_2 \end{array} \right. \quad (4.23)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\alpha_1 \rho_1 E_1) + \partial_x[(\alpha_1 \rho_1 E_1 + \alpha_1 P)u_1] + P_{int} \partial_t \alpha_1 = \frac{1}{\lambda_T} (T_2 - T_1) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_2 - u_1), \\ \partial_t(\alpha_2 \rho_2 E_2) + \partial_x[(\alpha_2 \rho_2 E_2 + \alpha_2 P)u_2] + P_{int} \partial_t \alpha_2 = \frac{1}{\lambda_T} (T_1 - T_2) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_1 - u_2) \end{array} \right. \quad (4.24)$$

ne sont pas équivalents, alors que sous les fermetures (4.18)(4.19)(4.20), les systèmes (4.15)(c,c') et (4.21) sont équivalents. Sous les fermetures (4.18)(4.19)(4.20), on peut donc *a priori* proposer les systèmes

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\alpha_1 \rho_1) + \partial_x(\alpha_1 \rho_1 u_1) = 0, \\ \partial_t(\alpha_1 \rho_1 u_1) + \partial_x(\alpha_1 \rho_1 u_1^2 + \alpha_1 P) = \frac{1}{\lambda_u} (u_2 - u_1) + \kappa P_{int} \partial_x \alpha_1, \\ \partial_t(\alpha_1 \rho_1 E_1) + \partial_x[(\alpha_1 \rho_1 E_1 + \alpha_1 P)u_1] = \frac{1}{\lambda_T} (T_2 - T_1) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_2 - u_1) + P_{int} U_{int} \partial_x \alpha_1, \\ \partial_t(\alpha_2 \rho_2) + \partial_x(\alpha_2 \rho_2 u_2) = 0, \\ \partial_t(\alpha_2 \rho_2 u_2) + \partial_x(\alpha_2 \rho_2 u_2^2 + \alpha_2 P) = \frac{1}{\lambda_u} (u_1 - u_2) + \kappa P_{int} \partial_x \alpha_2, \\ \partial_t(\alpha_2 \rho_2 E_2) + \partial_x[(\alpha_2 \rho_2 E_2 + \alpha_2 P)u_2] = \frac{1}{\lambda_T} (T_1 - T_2) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_1 - u_2) + P_{int} U_{int} \partial_x \alpha_2 \end{array} \right. \quad (4.25)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\alpha_1 \rho_1) + \partial_x(\alpha_1 \rho_1 u_1) = 0, \\ \partial_t(\alpha_1 \rho_1 u_1) + \partial_x(\alpha_1 \rho_1 u_1^2 + \alpha_1 P) = \frac{1}{\lambda_u} (u_2 - u_1) + \kappa P_{int} \partial_x \alpha_1, \\ \partial_t(\alpha_1 \rho_1 E_1) + \partial_x[(\alpha_1 \rho_1 E_1 + \alpha_1 P)u_1] + P_{int} \partial_t \alpha_1 = \frac{1}{\lambda_T} (T_2 - T_1) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_2 - u_1), \\ \partial_t(\alpha_2 \rho_2) + \partial_x(\alpha_2 \rho_2 u_2) = 0, \\ \partial_t(\alpha_2 \rho_2 u_2) + \partial_x(\alpha_2 \rho_2 u_2^2 + \alpha_2 P) = \frac{1}{\lambda_u} (u_1 - u_2) + \kappa P_{int} \partial_x \alpha_2, \\ \partial_t(\alpha_2 \rho_2 E_2) + \partial_x[(\alpha_2 \rho_2 E_2 + \alpha_2 P)u_2] + P_{int} \partial_t \alpha_2 = \frac{1}{\lambda_T} (T_1 - T_2) + \frac{U_{int}}{\lambda_u} (u_1 - u_2) \end{array} \right. \quad (4.26)$$

qui ne sont pas équivalents. Contrairement au modèle diphasique à sept équations, on obtient donc deux modèles à six équations – les systèmes (4.25) et (4.26) –, le système (4.25) étant le seul des deux modèles à être *directement* dérivé du système avec relaxation (4.15).

Le système (4.26) est dit *modèle diphasique à six équations* ou *modèle diphasique à une pression*. Ce type de système n'est pas du tout étudié dans la suite bien qu'il soit utilisé pour modéliser des écoulements diphasiques dans les réacteurs nucléaires à eau [FCDK09]. Le système (4.25) n'est pas utilisé semble-t-il, et n'est pas non plus étudié dans la suite.

4.5 Développement de Chapman-Enskog pour un mélange binaire

Sous l'Hypothèse 4.1.1 et sous la condition

$$U_{int} \in [\min(u_1, u_2), \max(u_1, u_2)] \quad (4.27)$$

pour un mélange de gaz ou sous la condition

$$\begin{cases} U_{int} \in [\min(u_1, u_2), \max(u_1, u_2)], \\ P_{int} \in [\min(P_1, P_2), \max(P_1, P_2)] \end{cases} \quad (4.28)$$

pour un mélange de fluides non-miscibles, il est possible d'établir l'analogie d'un théorème H pour le système (4.15) dans le cas *homogène en espace*, l'entropie s définie avec (4.14) jouant ici le rôle de l'entropie cinétique du théorème H standard (voir par exemple le Lemme 2.2.2). Ce résultat justifie la forme des termes de relaxation dans (4.15). Cependant, il reste à justifier l'EDP

$$\partial_t \alpha_1 + U_{int} \partial_x \alpha_1 = \frac{1}{\lambda_P} (P_1 - P_2)$$

(voir (4.18)) ainsi que les termes non-conservatifs

$$P_{int} \partial_x \alpha_k \quad \text{et} \quad P_{int} U_{int} \partial_x \alpha_k$$

dans (4.15)(b,c,b',c') lorsque le mélange est constitué de fluides non-miscibles ($\kappa = 1$) : cette justification peut être vue comme une conséquence du développement de Chapman-Enskog appliqué au système avec relaxation (4.15).

Dans cette section, on impose

$$\lambda_u = \lambda_T = \lambda_P := \lambda \in \mathbb{R}_*^+.$$

Cette hypothèse, couplée à l'hypothèse de mélange binaire, simplifie *considérablement* l'établissement de la limite fluide d'ordre un. Notons que λ dépend continûment des variables du système et a vocation à être un petit paramètre.

4.5.1 Limite fluide au premier ordre

On a le résultat formel suivant :

Théorème 4.5.1. *Sous l'Hypothèse 4.1.1 et les conditions (4.27) ou (4.28), il existe un unique couple (J_k, μ) tel que la limite fluide à l'ordre un de (4.15) fermé avec (4.6)(4.11)(4.16)(4.17) ou (4.8)(4.11)(4.18)(4.19)(4.20) obtenue par un développement de Chapman-Enskog soit donnée par le système de Navier-Stokes compressible à deux espèces*

$$\begin{cases} \partial_t(Y_1 \rho) + \partial_x(Y_1 \rho u) = \partial_x(\lambda J_1), & (a) \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, & (b) \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + P) = \partial_x(\lambda \mu \partial_x u), & (c) \\ \partial_t(\rho E) + \partial_x[(\rho E + P)u] = \partial_x[\lambda(J_1 h_1 + J_2 h_2)] + \partial_x(\lambda \mu u \partial_x u) & (d) \end{cases} \quad (4.29)$$

fermé avec (4.6)(4.11) ou (4.8)(4.11), $h_k := \varepsilon_k + P_k/\rho_k$ étant l'enthalpie spécifique de l'espèce k .

La limite fluide (4.29) est obtenue en supposant que la solution $U_k := (\alpha_k, u_k, P_k, T_k, \tau_k, \varepsilon_k)$ du système avec relaxation (4.15) s'écrit formellement

$$U_k = U_k^{eq} + \lambda \delta U_k + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (4.30)$$

Dans (4.30), δU_k est une perturbation autour de l'état d'équilibre thermodynamique

$$U_k^{eq} := (\alpha_k^{eq}, u^{eq}, P_k^{eq}, T^{eq}, \tau_k^{eq}, \varepsilon_k^{eq})$$

qui est construit à partir de (U_1, U_2) en imposant

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_1^{eq} = Y_1 := \alpha_1 \tau / \tau_1, \\ Y_2^{eq} = Y_2 = 1 - Y_1, \\ 1/\tau^{eq} = 1/\tau := \alpha_1/\tau_1 + \alpha_2/\tau_2, \\ u^{eq} = u := Y_1 u_1 + Y_2 u_2, \\ E^{eq} = E := Y_1 \left(\frac{u_1^2}{2} + \varepsilon_1 \right) + Y_2 \left(\frac{u_2^2}{2} + \varepsilon_2 \right) \end{array} \right. \quad (4.31)$$

et en résolvant le système (4.12) pour un mélange binaire de gaz ou le système (4.13) pour un mélange binaire de fluides non-miscibles en notant que (4.31) implique que $\varepsilon^{eq} = E - \frac{u^2}{2}$. Soulignons que $\varepsilon^{eq} \neq \varepsilon$ puisque $\varepsilon := Y_1 \varepsilon_1 + Y_2 \varepsilon_2 \neq E - \frac{u^2}{2}$ lorsque $u_1 \neq u_2$; d'autre part, pour un mélange de fluides non-miscibles, on a *a priori* $\alpha_k^{eq} \neq \alpha_k$ où α_k est la fraction volumique définie avec (4.4). L'état macroscopique $(\delta Y_1, \delta Y_2, \delta \rho, \delta(\rho u), \delta(\rho E))$ associé à la perturbation $(\delta U_1, \delta U_2)$ étant nul, (U_1^{eq}, U_2^{eq}) est la projection de (U_1, U_2) sur l'état d'équilibre thermodynamique associé au mélange. En étudiant la perturbation $(\delta U_1, \delta U_2)$, on montre *formellement* que $(Y_1 \rho, \rho, \rho u, \rho E)$ est solution de (4.29) lorsque $\lambda \ll 1$, les termes dissipatifs d'ordre un dans (4.29) étant une conséquence directe de la perturbation d'ordre un $\lambda \delta U_k$ dans (4.30). Le développement (4.30) sous la contrainte (4.31) est un développement de type Chapman-Enskog (voir aussi le §4.6).

4.5.2 Calcul des coefficients de diffusion

On peut expliciter les formules donnant le flux diffusif λJ_k en fonction des équations d'état de chaque fluide. On a en particulier que $J_2 = -J_1$. Les équations (4.29)(a,b) sont donc bien évidemment équivalentes à

$$\forall k \in \{1, 2\} : \partial_t(Y_k \rho) + \partial_x(Y_k \rho u) = \partial_x(\lambda J_k)$$

ou encore à

$$\forall k \in \{1, 2\} : \partial_t(\alpha_k \rho_k) + \partial_x(\alpha_k \rho_k u) = \partial_x(\lambda J_k).$$

On peut donner une interprétation physique de ces formules en montrant l'existence de liens qualitatifs avec des phénomènes physiques répertoriés dans la littérature. Ainsi :

i) dans le cas d'un mélange binaire de gaz caractérisé par (4.6)(4.11), nous retrouvons certains phénomènes de diffusion comme la barodiffusion ou la thermodiffusion (nommée aussi effet Soret). Ces questions sont abordées au §3.3 du chapitre 3 dans [Del10];

ii) dans le cas d'un mélange binaire de fluides non-miscibles caractérisé par (4.8)(4.11) et lorsque le domaine d'application concerne la modélisation d'écoulements diphasiques dans un cœur de réacteur à eau sous pression (REP) ou à eau bouillante (REB), le système (4.29) est connu sous le nom de *modèle diphasique à quatre équations*; le flux λJ_k étant une approximation de $-Y_k \rho(u_k - u)$ à l'ordre un en λ , la formule donnant λJ_k en fonction de (Y_1, ρ, u, T, P) définit un *modèle d'écart de vitesse* de type *flux de dérive*⁹. Lorsque la pression est proche d'un champ hydrostatique imposé par la gravité, on peut obtenir un modèle d'écart de vitesse du type

$$\begin{aligned} \lambda J_1 &= -Y_1 \rho V_{1m} \\ &= -\alpha_1 \rho_1 V_{1m} \end{aligned} \quad (4.32)$$

⁹ *Drift-flux model* en anglais.

avec

$$V_{1m} = \frac{\rho_2}{\rho} V_{1j} \quad (4.33)$$

et

$$V_{1j} = \sqrt{2} \left(\frac{\sigma g \Delta \rho}{\rho_2^2} \right)^{\frac{1}{4}} (1 - \alpha_1)^{\frac{3+\kappa}{2}}. \quad (4.34)$$

où $\kappa > 0$ est un paramètre physique donné et où $\sigma > 0$ est la tension de surface entre les fluides 1 et 2 (on suppose ici que $\rho_1 < \rho_2$ soit encore que $\Delta \rho > 0$). À l'instar de [2], on retrouve un modèle d'écart de vitesse classique en prenant $\kappa = 1/2$: voir la formule (60) dans [53] (on pourra aussi consulter [40] pour des modèles plus complexes). Le modèle d'écart de vitesse (4.34) (avec $\kappa = 1/2$) correspond au cas d'un écoulement de bulles de gaz (fluide 1) dispersées¹⁰ dans un liquide (fluide 2). Soulignons à nouveau le caractère purement *formel* de la dérivation du modèle d'écart de vitesse (4.34) à partir d'une approche de type Chapman-Enskog, les vitesses *axiales* de l'eau vapeur et de l'eau liquide étant très différentes dans un cœur de réacteur à eau¹¹. Par contre, dans la direction *radiale* au cœur du réacteur¹², d'une part le gradient de pression n'est pas (ou peu) lié à la gravité et, d'autre part, certaines modélisations physiques supposent que u_1 et u_2 sont proches de u (ce qui justifie plus une approche de type Chapman-Enskog dans la direction radiale par rapport à la direction axiale). En supposant que $\partial_x \rho \ll 1$ et $\partial_x T \ll 1$ (toujours dans la direction radiale), on peut établir que

$$\lambda J_k = \lambda \tilde{\chi}_k \partial_x Y_k \quad (4.35)$$

avec $\tilde{\chi}_k > 0$. Le flux (4.35) – de type *loi de Fick* – est qualitativement identique au flux (7-25) proposé dans [58], flux qui est utilisé dans certaines modélisations d'écoulements dans la direction radiale au cœur du réacteur : celui-ci tend à uniformiser la fraction massique Y_k dans cette direction. Ces questions sont abordées au §3.4 du chapitre 3 dans [Del10].

4.6 Analogie avec la théorie cinétique

Le calcul au §4.5 de la limite fluide du système avec relaxation (4.15) à partir d'un développement de Chapman-Enskog permet d'établir quelques analogies avec la théorie cinétique basée sur l'équation de Boltzmann multi-espèces. Rappelons que cette équation – proposée par Boltzmann en 1872 dans le cas mono-espèce [9] – modélise un mélange de gaz parfaits (ou idéaux) et correspond au cas particulier de l'équation de Wang-Chang & Uhlenbeck (2.11)(2.12)(2.17) où seul le niveau d'énergie fondamental est traité (*i.e.* $\forall k : i \in \{0\}, \epsilon_i^k = 0$ et $g_i^k = 1$ dans (2.17)). Ces analogies sont à notre avis utiles d'un point de vue didactique pour, en particulier, introduire *simplement* le développement de Chapman-Enskog et la limite fluide, les calculs basés sur l'équation de Boltzmann étant vite complexes (voir par exemple le chapitre 5 dans [12] et les chapitres 7-8 dans [15]).

En particulier, dans le cas des équations de Boltzmann, le développement de Chapman-Enskog peut être mené à bien lorsque la section efficace de collision vérifie la relation de micro-réversibilité. Cette relation impose une certaine forme à la section efficace de collision. Dans le cas de l'équation de Wang-Chang & Uhlenbeck, la relation de micro-réversibilité correspond à la relation (2.23)¹³. Dans le cas du système avec relaxation (4.15), le développement de Chapman-Enskog peut être mené à bien lorsque chaque espèce admet une entropie strictement convexe (*cf.* Hypothèse 4.1.1). En fait, ce lien *qualitatif* entre *relation de micro-réversibilité* et *stricte convexité des entropies* peut être établi bien avant l'établissement du développement de Chapman-Enskog. En effet, nous avons déjà souligné qu'il était possible de proposer

¹⁰ *Dispersed bubbly flow* en anglais.

¹¹ L'établissement du développement de Chapman-Enskog suppose en effet que les deux fluides sont tous deux proches de l'équilibre isotherme-isovitesse pour un mélange de gaz et de l'équilibre isobare-isotherme-isovitesse pour un mélange de fluides non-miscibles, ce qui suppose en particulier que u_1 et u_2 sont proches de la vitesse du mélange u au sens $u_k = u + \mathcal{O}(\lambda)$.

¹² C'est à dire dans le plan perpendiculaire à la direction axiale au cœur du réacteur.

¹³ Dans le cas de l'équation de Boltzmann mono-espèce classique, la relation de micro-réversibilité correspond à la relation $\sigma(v, v_*, \Omega) = \sigma(v', v'_*, \Omega')$ où $v' = \frac{v+v_*}{2} + \frac{|v-v_*|}{2}\Omega$ et $v'_* = \frac{v+v_*}{2} - \frac{|v-v_*|}{2}\Omega$ sont les vitesses post-collisionnelles, et où $\Omega' = \frac{v-v_*}{|v-v_*|}$, σ étant la section efficace de collision.

pour le système avec relaxation (4.15) homogène en espace un équivalent du théorème H de Boltzmann – voir par exemple le Lemme 2.2.2 – lorsque l’entropie de chaque espèce est strictement convexe. Or, le théorème H de Boltzmann est démontré en utilisant la relation de micro-réversibilité.

Enfin, au delà de l’analogie entre *relation de micro-réversibilité* et *stricte convexité des entropies*, soulignons que les termes diffusifs obtenus par le développement de Chapman-Enskog appliqué au système avec relaxation (4.15) sont qualitativement proches de ceux obtenus par un développement de Chapman-Enskog appliqué à l’équation de Boltzmann à deux espèces.

4.7 Schémas de relaxation dans le cas d’un mélange binaire

Lorsque le mélange est binaire et sous l’Hypothèse 4.1.1, on propose une classe de schémas entropiques pour le système (4.1) fermé avec (4.6)(4.11) (mélange de gaz) ou avec (4.8)(4.11) (mélange de fluides non-miscibles). Soulignons que l’on sait déjà que le système (4.1) est hyperbolique (voir le §4.3).

L’approche proposée est directement inspirée des travaux de Coquel et Perthame [18] sur les schémas de relaxation. Ici, nous utilisons le système avec relaxation (4.15) pour construire cette classe de schémas entropiques. Cette approche nous permet de construire un schéma cinétique entropique pour le mélange binaire de gaz uranium-fer étudié au chapitre 5 (voir la Proposition 5.2.1). Cette approche nous permet également de montrer que le schéma lagrangien proposé par Després dans [24] est entropique dans le cas d’un mélange binaire de fluides non-miscibles.

Chapitre 5

Couplage cinétique-fluide. Application à l'enrichissement par laser

E chapitre présente les travaux publiés dans [Dellacherie, 2001], [Dellacherie, 2003a]¹ et [Del03]. On pourra aussi consulter les rapports [Del99, Del00a, Del00b]. Nous avons en particulier souhaité améliorer la présentation des travaux publiés dans [Dellacherie, 2003a] pour notamment mieux souligner les connexions avec les travaux présentés au §2.2 du Chapitre 2 et au Chapitre 4. C'est pourquoi ce chapitre pourra paraître long.

Les travaux présentés dans ce chapitre ont été réalisés dans le cadre de l'étude du procédé de *Séparation Isotopique par Laser sur Vapeur Atomique* (SILVA ; AVLIS en anglais) réalisée par le CEA entre les années 1976 et 2003. Par rapport au procédé plus classique de séparation isotopique par ultracentrifugation, pour un enrichissement en ^{235}U souhaité, le procédé SILVA a l'immense avantage de séparer l'isotope léger ^{235}U et l'isotope lourd ^{238}U de l'uranium naturel en une seule étape². Le principe de ce procédé d'enrichissement se décompose en trois axes :

i) un faisceau d'électrons courbé par un champ magnétique impacte la surface d'un lingot d'uranium naturel placé dans un creuset refroidi par un circuit d'eau liquide. Cet uranium entre en fusion sous l'impact des électrons et atteint une température de surface de l'ordre de 3000 K dans la zone proche de l'impact du faisceau d'électrons ;

ii) l'uranium porté à une température de l'ordre de 3000 K en surface du lingot se vaporise. Le flux de vapeur d'uranium ainsi créé se détend dans le vide. Ce flux peut atteindre plusieurs kilogrammes par heure : la perte de masse du lingot d'uranium n'est donc pas négligeable. Celle-ci se traduit par la création d'un cratère au niveau de la zone d'impact du faisceau d'électrons, cratère dont les dimensions sont de l'ordre du centimètre et dont la température de surface est également de l'ordre de 3000 K ;

iii) l'isotope léger ^{235}U contenu dans la vapeur d'uranium est ionisé par l'intermédiaire de lasers réglés sur des longueurs d'onde bien précises, l'isotope lourd ^{238}U ne subissant aucune ionisation. L'isotope ^{235}U ainsi ionisé est ensuite attiré vers des cathodes, impacte ces cathodes puis ruisselle en phase liquide par gravité le long de celles-ci pour être récupéré dans un collecteur.

¹Le Chapitre 2 du rapport [Del02] correspond à l'article [Dellacherie, 2003a], le Chapitre 1 de ce même rapport correspondant à l'article [Dellacherie, 2003b].

²L'enrichissement en ^{235}U par ultracentrifugation s'effectue en plusieurs centaines (voire milliers) d'étapes *via* une cascade de centrifugeuses.

Ces trois étapes sont réalisées dans une enceinte à vide appelée *séparateur*. Le séparateur et le schéma de principe du procédé d'enrichissement par laser SILVA sont décrits sur la Figure 1.

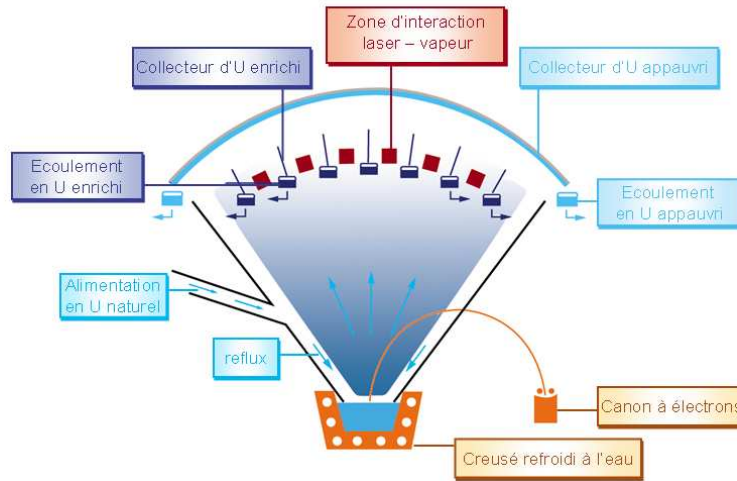


Figure 1
Séparateur et schéma de principe
du procédé SILVA d'enrichissement par laser

Soulignons que pour des raisons de tenue des matériaux, l'uranium naturel en fusion contenu dans le creuset est mélangé avec du fer, le mélange $U-Fe$ ayant une température de fusion plus basse que celle de l'uranium. Ce point est essentiel puisque l'uranium enrichi collecté sur les cathodes ruisselle en phase liquide le long de celles-ci, ce qui sous-entend que la température des cathodes doit au moins être égale à la température de fusion de l'uranium. Or, diminuer la température des cathodes *via* la diminution de la température de fusion de l'uranium mélangé à du fer permet de diminuer la vitesse de corrosion du matériau constituant les cathodes. Ce point souligne implicitement que des atomes de fer, bien que non-ionisés, sont également collectés par les cathodes, et ce pour des raisons purement aérodynamiques et non en raison de la présence d'un champ électrique au niveau des cathodes. Comme il en est de même pour l'isotope ^{238}U , l'alliage d' $U-Fe$ qui ruisselle le long des cathodes n'est pas enrichi à 100 % en ^{235}U mais seulement à quelques pour cent (ce point est essentiel pour des raisons de criticité). Finalement, un réglage fin de l'ensemble du procédé doit permettre de passer en une seule étape d'une teneur naturelle en ^{235}U de 0,7 % à la teneur en ^{235}U utilisée dans le combustible d'un réacteur à eau sous pression, soit à une teneur en ^{235}U de 3 à 5 %. La structure de la détente de la vapeur d' $U-Fe$ avant son passage dans la zone d'interaction avec les lasers et dans la zone des cathodes est un de ces paramètres de réglage.

Ainsi, la vapeur d'uranium produite est un mélange binaire de gaz $U-Fe$ qui se détend dans le vide, la température d'émission à la surface du cratère étant de l'ordre de 3000 K. Or, cette température est suffisante pour que les atomes d'uranium et de fer ne restent pas dans leur état fondamental. La structure de la détente de la vapeur d' $U-Fe$ doit alors être décrite par les équations cinétiques de Wang-Chang & Uhlenbeck (2.11)(2.12)(2.17) qui tiennent compte de la structure quantique des niveaux d'énergie métastables des atomes. Notons que les niveaux d'énergie métastables de l' ^{235}U et de l' ^{238}U sont supposés

identiques ici³. En outre, la différence de masse entre l' ^{235}U et l' ^{238}U d'une part et les gradients pression d'autre part sont trop faibles pour qu'il y ait séparation de l' ^{235}U et de l' ^{238}U par barodiffusion au sein de la détente⁴. On pourra donc se contenter d'un système binaire U-Fe pour décrire la détente de la vapeur d'uranium avant son entrée dans la zone d'interaction avec le laser et dans la zone des cathodes. L'interaction laser-matière ainsi que l'influence du champ électrique induit par les cathodes devront bien évidemment distinguer l' ^{235}U de l' ^{238}U (ces questions ne sont pas abordées ici).

L'objectif du travail présenté ici est de proposer une technique numérique qui optimise le coût en temps de calcul et en place mémoire induit par la résolution des équations de Wang-Chang & Uhlenbeck. Cette technique généralise au cas des équations de Wang-Chang & Uhlenbeck la technique de *couplage cinétique-fluide* proposée par [11, 87] dans le cas de l'équation de Boltzmann mono-espèce classique.

5.1 Séparateur, cratère et structure de la zone d'émission

Le séparateur, le cratère et la structure de la zone d'émission (*i.e.* source d' U-Fe) sont décrits sur les figures 2-3. Les densités de particules proche et loin de la zone du cratère sont respectivement de l'ordre de 10^{21} m^{-3} et de 10^{18} m^{-3} , soit un facteur mille entre ces deux densités. Par ailleurs, la méthode numérique utilisée pour résoudre les équations de Wang-Chang & Uhlenbeck est de type Monte-Carlo. Cette méthode approche les équations cinétiques *via* un ensemble de particules numériques dont le nombre et la probabilité de collision dans une maille donnée dépendent de la densité physique locale. Or, le facteur mille précédent implique que le coût du calcul pour obtenir la structure de la détente d' U-Fe dans l'ensemble du séparateur est principalement dépendant du calcul dans la zone du cratère bien que celui-ci soit petit en volume. En outre, la densité de 10^{21} m^{-3} au niveau du cratère est assez importante pour que le système d'Euler compressible à deux espèces (2.40) – limite fluide à l'ordre zéro des équations cinétiques de Wang-Chang & Uhlenbeck (2.11)(2.12)(2.17) – donne une bonne approximation de la structure de la détente d' U-Fe à cet endroit, couche de Knudsen mise à part⁵. Il est donc légitime de résoudre le système *fluide* d'Euler compressible (2.40) en lieu et place des équations de Wang-Chang & Uhlenbeck dans cette zone dense dite *zone fluide*, le reste du domaine dit *zone cinétique* (zone essentiellement raréfiée) étant décrit par les équations *cinétiques* de Wang-Chang & Uhlenbeck. On parle alors de *couplage cinétique-fluide*. Sur la Figure 3, on indique les zones fluide et cinétique ainsi que l'interface cinétique-fluide.

5.2 Condition aux limites à l'interface cinétique-fluide

Dans [11, 87], une technique de couplage cinétique-fluide basée sur un raccordement par *demi-flux cinétiques* à l'interface cinétique-fluide, sans recouvrement entre les zones cinétique et fluide, a été proposée pour coupler l'équation de Boltzmann au système d'Euler compressible dans le cas mono-espèce classique. Cette technique consiste à décomposer le flux convectif du système d'Euler compressible en un flux entrant et en un flux sortant définis respectivement à partir des demi-flux positif et négatif du schéma cinétique étudié par Perthame [83, 84] et construit *via* une maxwellienne [23]. Ces demi-flux étant directement dérivés d'une interprétation cinétique des flux convectifs du système d'Euler compressible mono-espèce, il est alors aisé de définir clairement des conditions aux limites à l'interface cinétique-fluide pour la zone fluide et pour la zone cinétique de telle sorte que les flux macroscopiques entrant dans la zone fluide soient égaux aux flux macroscopiques sortant de la zone cinétique, et réciproquement. Ainsi, le raccordement entre les zones cinétique et fluide est *conservatif* au niveau macroscopique. Nous nous proposons ici d'étendre cette condition aux limites au cas du couplage entre les équations de Wang-Chang & Uhlenbeck (2.11)(2.12)(2.17) et le système d'Euler compressible (2.40) dans le cadre du procédé

³Les différences sont négligeables dans le contexte étudié ici.

⁴La barodiffusion est un phénomène purement aérodynamique. Lorsque l'écoulement est fluide (*i.e.* non-raréfié), elle correspond au flux diffusif en gradient de pression dans la formule (3.14) du Chapitre 3 dans [Del10]. Contrairement au cas des isotopes de l'uranium, la différence de masse entre l'uranium et le fer est suffisamment importante pour qu'il y ait séparation entre ces deux espèces par barodiffusion : ce point est abordé au §5.5.3 dans la sous-section *Résultats numériques dans la zone raréfiée* (voir la Figure 10).

⁵La couche de Knudsen est une couche limite dense hors équilibre thermodynamique de quelques millimètres d'épaisseur qui est localisée au voisinage immédiat de la surface d'émission du cratère : voir plus loin le §5.3.

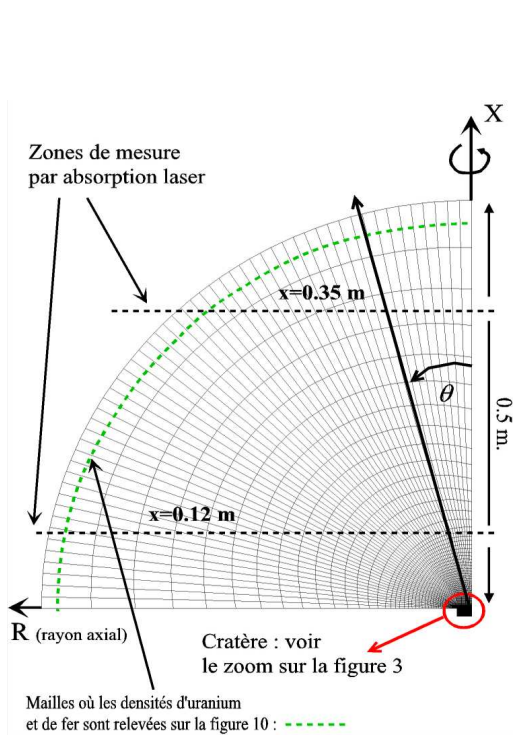


Figure 2
Séparateur

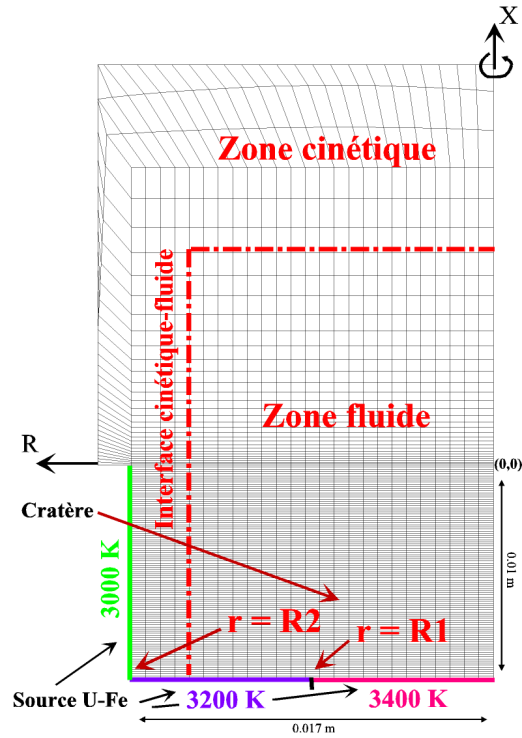


Figure 3
Cratère et source U-Fe

SILVA d'enrichissement.

Pour ce faire, on construit dans le cas monodimensionnel le schéma cinétique adapté au mélange d'uranium et de fer. Puis, on explicite les conditions aux limites à l'interface cinétique-fluide. On consultera [Della] et les rapports [Del99, Del00a, Del00b] pour le cas 2D axisymétrique qui caractérise la géométrie du séparateur SILVA (voir la Figure 2)⁶. Dans la suite, les mailles sont supposées d'épaisseur constante Δx pour simplifier les notations et sont indicées avec j , les interfaces étant indicées avec $j + 1/2$; le pas de temps est noté Δt et n est l'indice de temps.

5.2.1 Schéma cinétique dans le cas d'un gaz parfait caractérisé par $\gamma = 3$

Dans le cas d'un gaz parfait caractérisé par l'équation d'état $\varepsilon(\tau, P) = \tau P/2$ où $\tau := 1/\rho$ – donc, caractérisé par la constante adiabatique $\gamma = 3$ –, le schéma cinétique monodimensionnel appliqué au système d'Euler compressible [83, 84] construit à partir d'une maxwellienne [23] est défini avec

$$\begin{cases} \rho_j^{n+1} &= \rho_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathfrak{S}_{j+1/2}^n - \mathfrak{S}_{j-1/2}^n), \\ (\rho u)_j^{n+1} &= (\rho u)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\wp_{j+1/2}^n - \wp_{j-1/2}^n), \\ (\rho E)_j^{n+1} &= (\rho E)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathfrak{N}_{j+1/2}^n - \mathfrak{N}_{j-1/2}^n) \end{cases} \quad (5.1)$$

⁶On se limite ici au cas monodimensionnel pour simplifier la description de l'algorithme de couplage. En dimension supérieure, le principe est identique.

et

$$\begin{pmatrix} \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2} = \begin{pmatrix} \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2}^+ + \begin{pmatrix} \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2}^- \quad (5.2)$$

où les demi-flux positif et négatif sont donnés par

$$\begin{pmatrix} \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2}^+ = \int_{v_x > 0} m v_x \begin{pmatrix} 1 \\ v_x \\ v_x^2 \end{pmatrix} \mathbf{M}(\rho_j, u_j, P_j)(v_x) dv_x \quad (5.3)$$

et

$$\begin{pmatrix} \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2}^- = \int_{v_x < 0} m v_x \begin{pmatrix} 1 \\ v_x \\ v_x^2 \end{pmatrix} \mathbf{M}(\rho_{j+1}, u_{j+1}, P_{j+1})(v_x) dv_x, \quad (5.4)$$

$\mathbf{M}(\rho, u, P)(v_x)$ étant la maxwellienne

$$\mathbf{M}(\rho, u, P)(v_x) = \frac{\rho/m}{\sqrt{2\pi P/\rho}} \exp \left[-\frac{(v_x - u)^2}{2P/\rho} \right]. \quad (5.5)$$

Les formules donnant les demi-flux en fonction de (ρ, u, P) sont rappelées plus loin en (5.21)(5.22). On montre que le schéma cinétique (5.1) est positif sous un critère CFL : voir le Théorème 3.1 dans [32].

L'extension au cas $\gamma \in]1, 3]$ est immédiate et est directement prise en compte dans le formalisme proposé par Perthame dans [83, 84]. Néanmoins, nous choisissons dans la suite de considérer cette extension comme un cas particulier de la généralisation du schéma cinétique précédent à une équation d'état quelconque.

5.2.2 Schéma cinétique adapté à l'équation d'état de l'uranium ou du fer

Lorsque l'équation d'état du gaz $\varepsilon(\tau, P)$ n'est pas celle d'un gaz parfait caractérisé par la constante adiabatique $\gamma = 3$, on peut, sous certaines conditions, dériver un schéma cinétique positif et éventuellement entropique pour cette équation d'état de telle sorte que les formules donnant les demi-flux $(\mathfrak{S}, \wp, \mathfrak{N})^\pm$ en fonction de (ρ, u, P) soient exactement celles obtenues pour un gaz parfait avec $\gamma = 3$, seul le calcul de P à partir (ρ, u, E) faisant intervenir explicitement $\varepsilon(\tau, P)$. La construction de ce schéma cinétique est une application directe de la technique des schémas de relaxation proposée par Coquel et Perthame [18]. Aussi, nous rappelons succinctement cette technique ci-dessous puis nous en déduisons le schéma cinétique recherché.

Les schémas de relaxation de Coquel et Perthame (rappels)

L'approche par relaxation de Coquel et Perthame [18] consiste à se donner une équation d'état $\varepsilon_1(\tau, P)$ *a priori* plus simple que $\varepsilon(\tau, P)$, à définir la fonction $F(\tau, \varepsilon_1)$ telle que

$$\varepsilon(\tau, P) = \varepsilon_1(\tau, P) + F(\tau, \varepsilon_1) \quad (5.6)$$

puis à résoudre le système relaxé d'inconnue $U_1 := (\rho, \rho u, \rho E_1)^T$, fermé avec $\varepsilon_1(\tau, P)$

$$\begin{cases} \partial_t U_1 + \partial_x \mathcal{F}_1(U_1) = \frac{1}{\lambda} (\varepsilon_2 - F(\tau, \varepsilon_1)), & \text{(a)} \\ \partial_t (\rho \varepsilon_2) + \partial_x (\rho u \varepsilon_2) = -\frac{1}{\lambda} (\varepsilon_2 - F(\tau, \varepsilon_1)) & \text{(b)} \end{cases} \quad (5.7)$$

lorsque $\lambda \rightarrow 0$ en découplant les opérateurs de transport (*étape hydrodynamique*) des termes sources de relaxation (*étape de projection*). L'*étape hydrodynamique* correspond à l'algorithme

$$\begin{cases} U_{1,j}^{n+1/2} = U_{1,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{1,j+1/2}^n - f_{1,j-1/2}^n), & \text{(a)} \\ (\rho \varepsilon_2)_j^{n+1/2} = (\rho \varepsilon_2)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (g_{2,j+1/2}^n - g_{2,j-1/2}^n) & \text{(b)} \end{cases} \quad (5.8)$$

qui est une discrétisation du système

$$\begin{cases} \partial_t U_1 + \partial_x \mathcal{F}_1(U_1) = 0, & \text{(a)} \\ \partial_t(\rho \varepsilon_2) + \partial_x(\rho u \varepsilon_2) = 0 & \text{(b)} \end{cases} \quad (5.9)$$

où l'énergie ε_2 au temps t^n est telle que

$$\varepsilon_2 = F(\tau, \varepsilon_1).$$

L'étape de projection correspond à l'algorithme

$$\begin{cases} \rho_j^{n+1} &= \rho_j^{n+1/2}, \\ u_j^{n+1} &= u_j^{n+1/2}, \\ E_j^{n+1} &= E_{1,j}^{n+1/2} + \varepsilon_{2,j}^{n+1/2}, \\ \varepsilon_2^{n+1} &= F(\tau^{n+1}, \varepsilon_1^{n+1}). \end{cases} \quad (5.10)$$

Cette étape projette l'état intermédiaire $(U_1^{n+1/2}, \varepsilon_2^{n+1/2})$ sur l'équilibre $(U_1^{n+1}, \varepsilon_2^{n+1} := F(\tau^{n+1}, \varepsilon_1^{n+1}))$ du système (5.7) sans termes différentiels en espace (*a priori*, on a $\varepsilon_2^{n+1/2} \neq F(\tau^{n+1}, \varepsilon_1^{n+1/2})$), ce qui correspond formellement à prendre $\lambda \rightarrow 0$ dans l'opérateur de relaxation. Remarquons que le schéma de relaxation (5.8)(5.10) s'écrit sous la forme conservative classique

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{j+1/2}^n - f_{j-1/2}^n) \quad (5.11)$$

où $U := (\rho, \rho u, \rho E)^T$ mais avec

$$f = f_1 + (0, 0, g_2)^T. \quad (5.12)$$

L'intérêt du schéma de relaxation (5.11)(5.12) tient en ce qu'il est possible de lui associer des propriétés entropiques lorsque :

i) L'équation d'état $\varepsilon(\tau, P)$ est telle que :

$$\begin{cases} \varepsilon(\tau, P) \text{ admet une entropie thermodynamique } s(\tau, \varepsilon), & \text{(a)} \\ \partial_\varepsilon P(\tau, \varepsilon) > 0, P(\tau, 0) = 0 \text{ et } P(\tau, +\infty) = +\infty. & \text{(b)} \end{cases} \quad (5.13)$$

Notons que la condition (5.13)(b) peut être affaiblie [18] ;

ii) l'équation d'état $\varepsilon_1(\tau, P)$ vérifie les conditions (5.13) et est telle que la fonction $F(\tau, \varepsilon_1)$ définie avec (5.6) vérifie certaines conditions⁷. Ces conditions supplémentaires sur $F(\tau, \varepsilon_1)$ entraînent en particulier qu'il est possible de définir pour le système (5.9) une entropie $\zeta(\tau, \varepsilon_1, \varepsilon_2)$ strictement convexe vérifiant

$$\begin{cases} \exists \Sigma \text{ telle que } \zeta(\tau, \varepsilon_1, \varepsilon_2) = \Sigma(s_1(\tau, \varepsilon_1), \varepsilon_2), \\ \zeta(\tau, \varepsilon_1, F(\tau, \varepsilon_1)) = s(\tau, \varepsilon_1 + F(\tau, \varepsilon_1)), \end{cases} \quad (5.14)$$

$s_1(\tau, P)$ définissant l'entropie thermodynamique associée à $\varepsilon_1(\tau, P)$. Lorsque $\varepsilon_1(\tau, P) = \frac{\tau P}{\gamma_1 - 1}$, ces conditions sur $F(\tau, \varepsilon_1)$ s'expriment par⁸

$$\begin{cases} \gamma_1 > \sup_{\tau, \varepsilon} \Gamma(\tau, \varepsilon) \quad \text{où} \quad \Gamma(\tau, \varepsilon) := 1 + \tau \partial_\varepsilon P(\tau, \varepsilon), \\ \gamma_1 > \sup_{\tau, \varepsilon} \gamma(\tau, \varepsilon) \quad \text{où} \quad \gamma(\tau, \varepsilon) := \frac{c^2(\tau, \varepsilon)}{\tau P} \end{cases} \quad (5.15)$$

⁷Voir les conditions (2.6), (2.7) et (2.8) dans [18]. Ces conditions impliquent en particulier que $F(\tau, \varepsilon_1)$ est strictement positive lorsque $(\tau, \varepsilon_1) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$.

⁸Voir la condition (2.15) dans [18].

où $c(\tau, \varepsilon)$ est la vitesse du son associée à l'équation d'état $\varepsilon(\tau, P)$ (puisque $\varepsilon(\tau, P)$ admet une entropie thermodynamique strictement convexe, la vitesse du son c est définie dans $\mathbb{R}^+$). Lorsque $\varepsilon(\tau, P) = \frac{\tau P}{\gamma - 1}$ où $\gamma > 1$ pour assurer la stricte positivité de $\varepsilon(\tau, P)$, la condition (5.15) s'écrit simplement⁹

$$\gamma \in]1, \gamma_1]. \quad (5.16)$$

Notons que le cas $\gamma = \gamma_1$ correspond au cas trivial $\varepsilon_1(\tau, P) = \varepsilon(\tau, P)$ pour lequel $\varepsilon_2 = 0$ et $\zeta = s$;

iii) le schéma (5.8) est entropique pour l'entropie $\zeta(\tau, \varepsilon_1, \varepsilon_2)$ (on précise ce caractère entropique ci-dessous).

Ces propriétés entropiques associées au schéma de relaxation (5.11)(5.12) sont caractérisées par la Proposition 4.1, le Théorème 4.3 et le Théorème 4.7 dans [18] :

i) la Proposition 4.1 établit le caractère entropique du schéma de relaxation (5.11)(5.12) au sens où, sous un critère CFL, on a

$$(\rho s)_j^{n+1} \leq (\rho s)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (h_{j+1/2}^n - h_{j-1/2}^n) \quad (5.17)$$

où h est une discrétisation du flux entropique ρs lorsque le schéma (5.8) est entropique au sens où

$$(\rho \zeta)_j^{n+1/2} \leq (\rho \zeta)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (h_{j+1/2}^n - h_{j-1/2}^n); \quad (5.18)$$

ii) le Théorème 4.3 est similaire à la Proposition 4.1 sauf qu'il concerne les schémas de type Godunov introduit par Harten, Lax et Van Leer (HLV)¹⁰. Plus précisément, le Théorème 4.3 montre que lorsque le schéma (5.8) est un schéma de type HLV pour l'entropie ζ , le schéma de relaxation (5.11)(5.12) vérifie (5.17);

iii) le Théorème 4.7 établit le caractère entropique du schéma de relaxation (5.11)(5.12) au sens où, sous un critère CFL, l'inégalité (5.17) est vérifiée lorsque le schéma (5.8) est un schéma de type Godunov basé sur un solveur de Riemann exact qui est donc entropique au sens de (5.18). Le Théorème 4.7 montre également que le principe du maximum entropique

$$s_j^{n+1} \leq \max(s_{j-1}^n, s_i^n, s_{j+1}^n) \quad (5.19)$$

est satisfait.

Schéma cinétique lorsque le fluide n'est pas un gaz parfait caractérisé par $\gamma = 3$

On suppose que $\varepsilon(\tau, P)$ vérifie les conditions (5.13).

Construction du schéma cinétique :

On choisit $\varepsilon_1(\tau, P) = \frac{\tau P}{2}$ (i.e. $\gamma_1 = 3$). Donc, $\varepsilon_1(\tau, P)$ vérifie les conditions (5.13). On choisit le schéma (5.8) de telle sorte que (5.8)(a) soit le schéma cinétique (5.1) - $f_1 := (\mathfrak{S}_1, \emptyset_1, \mathfrak{N}_1)^T$ est donc défini avec (5.2)(5.3)(5.4) - et de telle sorte que (5.8)(b) soit tel que

$$g_{2,j+1/2} = \varepsilon_{2,j} \cdot \mathfrak{S}_{1,j+1/2}^+ + \varepsilon_{2,j+1} \cdot \mathfrak{S}_{1,j+1/2}^-. \quad (5.20)$$

⁹Voir la remarque 2 dans [18] p. 2228.

¹⁰Un schéma de type HLV est un schéma de type Godunov dont le solveur de Riemann approché vérifie des conditions particulières. Ces conditions sont caractérisées par les relations (4.19)(4.20) dans [18]. Celles-ci sont exactement les relations (3.7)(a,b) introduites par Harten, Lax et Van Leer dans [49]. Une conséquence de ces conditions est qu'un schéma HLV est entropique au sens de (5.18) pour l'entropie ζ associée au système de loi de conservation considéré : voir le Théorème 3.1 dans [49]. Le Théorème 4.3 est donc un corollaire de la Proposition 4.1.

On vérifie par ailleurs que

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathfrak{S}_1^\pm = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{P}{\rho}} \mathcal{F}(\pm x) \rho, & (a) \\ \wp_1^\pm = \frac{P}{2} \mathcal{G}(\pm x) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{P}{\rho}} \mathcal{F}(\pm x) \rho u, & (b) \\ \mathfrak{N}_1^\pm = \frac{Pu}{4} \mathcal{G}(\pm x) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{P}{\rho}} \mathcal{F}(\pm x) (\rho E_1 + P) & (c) \end{array} \right. \quad (5.21)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} x = -\frac{u}{\sqrt{2P/\rho}}, \\ \mathcal{F}(x) = \exp(-x^2) - \sqrt{\pi} x \operatorname{erfc}(x), \\ \mathcal{G}(x) = \operatorname{erfc}(x), \end{array} \right. \quad (5.22)$$

$\operatorname{erfc}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{+\infty} \exp(-y^2) dy$ étant la fonction d'erreur complémentaire¹¹. De (5.12)(5.20)(5.21)(5.22), on obtient que le flux $f := (\mathfrak{S}, \wp, \mathfrak{N})^T$ dans (5.11) est simplement défini avec (5.21)(5.22) en remplaçant E_1 par $E = E_1 + \varepsilon_2$ dans (5.21)(c). Les formules donnant en fonction de (ρ, u, P) les flux cinétiques $f := (\mathfrak{S}, \wp, \mathfrak{N})^T$ dans (5.11) pour l'équation d'état $\varepsilon(\tau, P)$ sont donc exactement celles obtenues pour l'équation d'état d'un gaz parfait caractérisé par $\gamma = 3$ c'est à dire celles données par les formules (5.2)(5.3)(5.4).

Positivité du schéma cinétique :

Ici, (5.8)(a) est le schéma cinétique (5.1)(5.2)(5.3)(5.4) (avec $\gamma = \gamma_1 = 3$) qui est positif sous un critère CFL (voir le Théorème 3.1 dans [32]). Il est par ailleurs aisé de montrer que $\varepsilon_2^{n+1/2}$ déduit de l'étape *hydrodynamique* (5.8)(b) couplée à (5.20) est positif sous un critère CFL (cette propriété se déduit de la structure cinétique du flux (5.20)). Donc, lorsque $F(\tau, \varepsilon_1)$ est strictement positive sur $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$ – ce qui est en particulier le cas sous les conditions (5.15) avec $\gamma_1 = 3$ –, on obtient également que ε_1^{n+1} et ε_2^{n+1} déduits de l'étape *de projection* (5.10) sont strictement positifs, d'où la stricte positivité du schéma cinétique sous un critère CFL. Cette propriété est mentionnée au §3.1.2 dans [Dellacherie, 2003a] ; elle est également mentionnée au §2.2.4 dans [56]. Enfin, rappelons que la condition (5.15) avec $\varepsilon(\tau, P) = \frac{\tau P}{\gamma-1}$ et $\gamma_1 = 3$ s'écrit $\gamma \in]1, 3]$.

Caractère entropique du schéma cinétique :

Le schéma cinétique proposé ci-dessus vérifie la propriété entropique (5.17) sous la condition (5.18). Mais, cette condition n'est pas nécessairement assurée. Cependant, en particulierisant l'équation d'état $\varepsilon(\tau, P)$, il est possible d'établir (5.17) sans passer par la condition (5.18) : c'est en particulier le cas lorsque $\varepsilon(\tau, P)$ est défini avec (5.23), (5.24) et $\gamma = 5/3$: voir le §IV.3 dans [99]. La preuve de ce résultat n'utilise pas la notion de schéma de relaxation. Aussi, en modifiant le flux (5.20), nous montrons plus loin – voir le Théorème 5.6.1 au §5.6 – qu'il est possible de construire une classe de schémas entropiques pour ce type d'équation d'état dont le caractère entropique est une conséquence *directe* du découplage (5.8) et (5.10).

¹¹Voir l'annexe dans [Dellacherie, 2003a].

Schéma cinétique dans le cas de l'équation d'état de l'uranium ou du fer

On explicite les formules donnant le flux cinétique $f := (\mathfrak{S}, \mathfrak{N}, \wp)^T$ du schéma (5.11) lorsque l'équation d'état $\varepsilon(\tau, P)$ est donnée par (2.36) avec $\bar{k} = 1$ (i.e. cas mono-espèce) c'est à dire

$$\begin{cases} \tau P = \frac{T}{m}, & \text{(a)} \\ \mathcal{E}(T) = \mathcal{E}^{cl}(T) + \mathcal{E}^{ncl}(T) & \text{(b)} \end{cases} \quad (5.23)$$

où

$$\begin{cases} \mathcal{E}^{cl}(T) = \frac{1}{\gamma - 1} \cdot \frac{T}{m}, & \text{(a)} \\ \mathcal{E}^{ncl}(T) = \frac{\sum_i g_i \epsilon_i \exp\left(-\frac{m\epsilon_i}{T}\right)}{\mathcal{Z}(T)} & \text{(b)} \end{cases} \quad (5.24)$$

avec $\gamma = 5/3$. Rappelons que dans (5.23)(5.24), $\tau := 1/\rho$ est le volume spécifique, T est la température, m est la masse atomique, g_i est le niveau de dégénérescence du niveau d'énergie métastable ϵ_i et $\mathcal{Z}(T) := \sum_i g_i \exp\left(-\frac{m\epsilon_i}{T}\right)$ est la fonction de partition. Avec cette équation d'état, on vérifie que le flux cinétique $f := (\mathfrak{S}, \mathfrak{N}, \wp)^T$ du schéma cinétique (5.11)(5.12) construit précédemment est donné par les formules

$$\begin{pmatrix} \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2} = \begin{pmatrix} \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2}^+ + \begin{pmatrix} \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2}^- \quad (5.25)$$

où les demi-flux positif et négatif sont donnés par

$$\begin{pmatrix} \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2}^+ = \sum_i \int \int \int_{v_x > 0} m v \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ v^2 + \epsilon_i \end{pmatrix} \mathcal{M}_i(\rho_j, u_j, T_j)(v) dv \quad (5.26)$$

et

$$\begin{pmatrix} \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2}^- = \sum_i \int \int \int_{v_x < 0} m v \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ v^2 + \epsilon_i \end{pmatrix} \mathcal{M}_i(\rho_{j+1}, u_{j+1}, T_{j+1})(v) dv, \quad (5.27)$$

$\mathcal{M}_i(\rho, u, T)(v)$ étant la maxwellienne

$$\mathcal{M}_i(\rho, u, T)(v) = \frac{\rho/m}{(2\pi \frac{T}{m})^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{g_i}{\mathcal{Z}(T)} \exp\left\{-\frac{\frac{1}{2}[(v_x - u)^2 + v_y^2 + v_z^2] + \epsilon_i}{T/m}\right\} \quad (5.28)$$

qui correspond à la maxwellienne (2.32) dans le cas mono-espèce et lorsque la vitesse macroscopique a une unique composante dans la direction x . Nous utiliserons ces formules de flux dans l'algorithme de couplage cinétique-fluide. Sous critère CFL, ce schéma cinétique est positif et entropique au sens de (5.17) pour l'entropie s définie avec

$$\begin{cases} s(\tau, T) = s^{cl}(\tau, T) + s^{ncl}(T), \\ s^{cl}(\tau, T) = -\frac{1}{m} \left[\log(m\tau) + \frac{3}{2} \log\left(\frac{T}{m}\right) \right], \\ s^{ncl}(T) = -\frac{1}{m} \left[\log(\mathcal{Z}(T)) + \frac{\varepsilon^{ncl}(T)}{\frac{T}{m}} \right] \end{cases} \quad (5.29)$$

(voir (2.37) avec $\bar{k} = 1$) ; ce résultat se déduit des travaux réalisés dans [99].

5.2.3 Schéma cinétique adapté au mélange uranium-fer

Le schéma cinétique pour le mélange uranium-fer est construit à partir de la notion de schéma de relaxation pour un mélange binaire de gaz. D'après les formules (5.12), (5.13) et (5.14) du Chapitre 5 dans [Del10], celui-ci s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{lcl} (Y_1 \rho)_j^{n+1} & = & (Y_1 \rho)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathfrak{S}_{1,j+1/2}^n - \mathfrak{S}_{1,j-1/2}^n), \\ \rho_j^{n+1} & = & \rho_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathfrak{S}_{j+1/2}^n - \mathfrak{S}_{j-1/2}^n), \\ (\rho u)_j^{n+1} & = & (\rho u)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\wp_{j+1/2}^n - \wp_{j-1/2}^n), \\ (\rho E)_j^{n+1} & = & (\rho E)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathfrak{N}_{j+1/2}^n - \mathfrak{N}_{j-1/2}^n) \end{array} \right. \quad (5.30)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{S} = \mathfrak{S}_1 + \mathfrak{S}_2, \\ \wp = \wp_1 + \wp_2, \\ \mathfrak{N} = \mathfrak{N}_1 + \mathfrak{N}_2 \end{array} \right. \quad (5.31)$$

où les flux numériques $(\mathfrak{S}_k, \wp_k, \mathfrak{N}_k)$ sont les flux cinétiques (5.25)(5.26)(5.27) maintenant définis avec la maxwellienne de l'espèce k ($k \in \{1, 2\}$ puisque le mélange est binaire)

$$\mathcal{M}_i^k(Y_k, \rho, u, T)(v) = \frac{Y_k}{m_k} \cdot \frac{\rho}{\left(2\pi \frac{T}{m_k}\right)^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{g_i^k}{\mathcal{Z}_k(T)} \exp \left\{ -\frac{\frac{1}{2}[(v_x - u)^2 + v_y^2 + v_z^2] + \epsilon_i^k}{T/m_k} \right\}, \quad (5.32)$$

$\mathcal{Z}_k(T) := \sum_i g_i^k \exp \left(-\frac{\epsilon_i^k}{T/m_k} \right)$ étant la fonction de partition de l'espèce k (la maxwellienne (5.32) correspond à la maxwellienne (5.28) en multi-espèces). Autrement dit, le flux cinétique $(\mathfrak{S}_1, \mathfrak{S}, \wp, \mathfrak{N})^T$ s'écrit dans le cas du mélange uranium-fer

$$\begin{pmatrix} \mathfrak{S}_1 \\ \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2} = \begin{pmatrix} \mathfrak{S}_1 \\ \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2}^+ + \begin{pmatrix} \mathfrak{S}_1 \\ \mathfrak{S} \\ \wp \\ \mathfrak{N} \end{pmatrix}_{j+1/2}^- \quad (5.33)$$

où les demi-flux positif et négatif sont donnés par

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \mathfrak{S}_{1,j+1/2}^+ & = & \sum_i \int \int \int_{v_x > 0} m_1 v_x \mathcal{M}_i^1(Y_{1,j}, \rho_j, u_j, T_j)(v) dv, \\ \mathfrak{S}_{j+1/2}^+ & = & \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x \mathcal{M}_i^k(Y_{k,j}, \rho_j, u_j, T_j)(v) dv, \\ \wp_{j+1/2}^+ & = & \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x^2 \mathcal{M}_i^k(Y_{k,j}, \rho_j, u_j, T_j)(v) dv, \\ \mathfrak{N}_{j+1/2}^+ & = & \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x \left(\frac{v^2}{2} + \epsilon_i^k \right) \mathcal{M}_i^k(Y_{k,j}, \rho_j, u_j, T_j)(v) dv \end{array} \right. \quad (5.34)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \mathfrak{S}_{1,j+1/2}^- & = & \sum_i \int \int \int_{v_x < 0} m_1 v_x \mathcal{M}_i^1(Y_{1,j+1}, \rho_{j+1}, u_{j+1}, T_{j+1})(v) dv, \\ \mathfrak{S}_{j+1/2}^- & = & \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x < 0} m_k v_x \mathcal{M}_i^k(Y_{k,j+1}, \rho_{j+1}, u_{j+1}, T_{j+1})(v) dv, \\ \mathfrak{Q}_{j+1/2}^- & = & \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x < 0} m_k v_x^2 \mathcal{M}_i^k(Y_{k,j+1}, \rho_{j+1}, u_{j+1}, T_{j+1})(v) dv, \\ \mathfrak{N}_{j+1/2}^- & = & \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x < 0} m_k v_x \left(\frac{v^2}{2} + \epsilon_i^k \right) \mathcal{M}_i^k(Y_{k,j+1}, \rho_{j+1}, u_{j+1}, T_{j+1})(v) dv \end{array} \right. \quad (5.35)$$

(on rappelle que $Y_2 = 1 - Y_1$).

En appliquant le Théorème 5.2.1 du Chapitre 5 dans [Del10], on obtient :

Proposition 5.2.1. *Sous un critère CFL, le schéma cinétique (5.30) est entropique au sens de (5.17) pour l'entropie s définie avec (2.37).*

Soulignons que le caractère entropique du schéma numérique n'est pas une propriété essentielle ici puisqu'il n'y a aucune onde de choc dans le séparateur. En revanche, le caractère positif du schéma (qui est aussi une conséquence du caractère entropique¹²) est une propriété intéressante. En effet, la détente de la vapeur d' $U-Fe$ dans le cratère diminue d'un facteur 10 environ la densité entre la zone d'émission et la sortie du cratère. Préserver la positivité est donc un gage de robustesse du schéma numérique utilisé dans la zone fluide¹³. C'est pourquoi nous utiliserons ce schéma cinétique dans toute la zone fluide : nous entendons par là que l'utilisation du schéma cinétique ne sera pas restreinte au voisinage immédiat de l'interface cinétique-fluide, ce schéma cinétique permettant en effet de définir de bonnes conditions de raccord à l'interface cinétique-fluide comme nous le verrons dans la sous-section suivante.

5.2.4 Conditions aux limites à l'interface cinétique-fluide

Supposons que l'interface cinétique-fluide est telle que

$$\left\{ \begin{array}{l} x_j \leq x_{\mathcal{I}} \rightarrow \text{zone cinétique}, \\ x_j > x_{\mathcal{I}+1} \rightarrow \text{zone fluide}. \end{array} \right.$$

L'interface cinétique-fluide est donc indicée par $\mathcal{I} + 1/2$. On rappelle que le mélange est supposé binaire puisque celui-ci est constitué d'uranium et de fer. Donc, $k \in \{1, 2\}$, et on choisit par convention $k = 1$ pour l'uranium (U) et $k = 2$ pour le fer (Fe).

Condition aux limites cinétique $\rightarrow$ fluide

Le flux cinétique à l'interface indicée par $j + 1/2$ est la somme d'un demi-flux positif et d'un demi-flux négatif : voir la décomposition (5.33)(5.34)(5.35). Le demi-flux positif indicé par $j + 1/2$ est le flux entrant dans la maille x_{j+1} et sortant de la maille x_j via l'interface $x_{j+1/2}$ (et réciproquement pour le flux négatif indicé par $j + 1/2$). Cette décomposition par demi-flux positif et négatif permet d'imposer au flux macroscopique entrant dans la maille fluide $x_{\mathcal{I}+1}$ via l'interface cinétique-fluide placée en $x_{\mathcal{I}+1/2}$ d'être

¹²Notons cependant qu'il n'est pas nécessaire d'avoir le caractère entropique pour avoir le caractère positif.

¹³La méthode de Monte-Carlo utilisée pour résoudre les équations de Wang-Chang & Uhlenbeck dans la zone cinétique préserve par construction la positivité de la densité et de la température de la vapeur d' $U-Fe$.

exactement égal au flux macroscopique sortant de la zone cinétique *via* cette même interface cinétique-fluide par l'intermédiaire de la condition aux limites en $x = x_{\mathcal{I}+1/2}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathfrak{S}_{1,\mathcal{I}+1/2}^+ = \sum_i \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x f_i^1(t, x_{\mathcal{I}}, v) dv, \\ \mathfrak{S}_{\mathcal{I}+1/2}^+ = \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x f_i^k(t, x_{\mathcal{I}}, v) dv, \\ \wp_{\mathcal{I}+1/2}^+ = \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x^2 f_i^k(t, x_{\mathcal{I}}, v) dv, \\ \mathfrak{N}_{\mathcal{I}+1/2}^+ = \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x \left(\frac{v^2}{2} + \epsilon_i^k \right) f_i^k(t, x_{\mathcal{I}}, v) dv. \end{array} \right. \quad (5.36)$$

Cette condition aux limites définit à l'interface indicée par $\mathcal{I}+1/2$ le demi-flux positif $(\mathfrak{S}_1^+, \mathfrak{S}^+, \wp^+, \mathfrak{N}^+)_{\mathcal{I}+1/2}$ du schéma cinétique à deux espèces (5.30)(5.31).

Condition aux limites fluide $\rightarrow$ cinétique

L'uranium et le fer sont supposés être à l'équilibre thermodynamique dans la maille fluide indicée par $\mathcal{I} + 1$. Pour la zone cinétique, on impose donc en $x = x_{\mathcal{I}+1/2}$ la condition aux limites

$$f_i^k(t, x_{\mathcal{I}+1/2}, v_x \leq 0) = \mathcal{M}_i^k(Y_{k,\mathcal{I}+1}, \rho_{\mathcal{I}+1}, u_{\mathcal{I}+1}, T_{\mathcal{I}+1})(v) \quad (5.37)$$

où $\mathcal{M}_i^k(Y_k, \rho, u, T)(v)$ est la maxwellienne définie avec (5.32).

Les conditions aux limites (5.36) et (5.37) couplent les zones cinétique et fluide, et assure à ce couplage le caractère *conservatif*. Soulignons qu'il est tout à fait possible d'appliquer la condition aux limites de couplage (5.36)(5.37) tout en appliquant des flux autres que cinétiques en dehors de l'interface cinétique-fluide. Nous utilisons cependant le schéma cinétique dans l'ensemble de la zone fluide du fait de sa robustesse : celui-ci préserve en effet la positivité de la densité et de la température de la vapeur d'*U-Fe* en raison de son caractère entropique (voir la Proposition 5.2.1).

5.3 Couche de Knudsen et raccordement à la surface d'émission du cratère

Dans le cas du procédé de séparation SILVA, la zone où la détente d'*U-Fe* peut être modélisée par le système d'Euler compressible (2.40) est localisée dans et à proximité immédiate de la surface d'émission du cratère (appelée également *source*) : voir les figures 2-3. Définir la zone fluide ne pose donc pas de problème particulier pour une forme du cratère et pour des conditions d'émission plus ou moins fixées.

5.3.1 Couche de Knudsen au voisinage de la surface d'émission du cratère

À la surface d'émission du cratère localisée en $x = x_{source}$ (en 1D, la surface d'émission du cratère dégénère en un seul point), la condition aux limites d'émission est donnée par

$$f_i^k(t, x_{source}, v_x \geq 0) = \phi_i^k(v) \quad (5.38)$$

où $\phi_i^k(v)$ définit la distribution de l'uranium ($k = 1$) et du fer ($k = 2$) à la surface du cratère. La distribution $\phi_i^k(v)$ est imposée et caractérise les conditions d'émission induites par l'impact du faisceau d'électrons à la surface du cratère.

La condition aux limites (5.38) se traduit par la création au voisinage immédiat de la surface d'émission du cratère d'une couche limite de quelques millimètres d'épaisseur à la fois dense et hors équilibre thermodynamique – appelée *couche de Knudsen* – dans laquelle la détente ne peut être modélisée par le système d'Euler compressible (2.40) malgré la forte densité et donc le nombre important de collisions entre atomes. En théorie, cette couche limite doit être traitée avec les équations cinétiques de Wang-Chang & Uhlenbeck (2.11)(2.12)(2.17), ce qui limite *a priori* le gain potentiel sur le temps de calcul et sur la mémoire RAM découlant de l'algorithme de couplage (5.36)(5.37).

5.3.2 Raccordement du schéma cinétique à la surface d'émission du cratère

Malgré l'existence de la couche de Knudsen au voisinage de la surface d'émission du cratère, il est possible de définir une condition aux limites à la surface d'émission pour le système d'Euler compressible (2.40) de telle sorte que la zone fluide soit raccordée totalement ou en partie à la surface d'émission sans que cela ne nuise à la précision de l'algorithme de couplage cinétique-fluide. La surface d'émission du cratère raccordée à la zone fluide est localisée en $x = x_{source\ raccordée}$ (en 1D, on a bien sûr $x_{source\ raccordée} = x_{source}$). Cette condition aux limites consiste à appliquer la condition de Dirichlet

$$(Y_1, \rho, u, T)_{x=x_{source\ raccordée}} = (Y_{1,Dir}, \rho_{Dir}, u_{Dir}, T_{Dir}) \quad (5.39)$$

de telle sorte que la maxwellienne $\mathcal{M}_i^k(Y_{k,Dir}, \rho_{Dir}, u_{Dir}, T_{Dir})$ vérifie

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_i \int \int \int_{v_x > 0} m_1 v_x \mathcal{M}_i^1(Y_{1,Dir}, \rho_{Dir}, u_{Dir}, T_{Dir})(v) dv \\ \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x \mathcal{M}_i^k(Y_{k,Dir}, \rho_{Dir}, u_{Dir}, T_{Dir})(v) dv \\ \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x^2 \mathcal{M}_i^k(Y_{k,Dir}, \rho_{Dir}, u_{Dir}, T_{Dir})(v) dv \\ \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x \left(\frac{v^2}{2} + \epsilon_i^k \right) \mathcal{M}_i^k(Y_{k,Dir}, \rho_{Dir}, u_{Dir}, T_{Dir})(v) dv \end{array} \right. = \left\{ \begin{array}{l} \sum_i \int \int \int_{v_x > 0} m_1 v_x \phi_i^1(v) dv, \\ \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x \phi_i^k(v) dv, \\ \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x^2 \phi_i^k(v) dv, \\ \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x \left(\frac{v^2}{2} + \epsilon_i^k \right) \phi_i^k(v) dv \end{array} \right. \quad (5.40)$$

($k \in \{1, 2\}$ et $Y_{2,Dir} = 1 - Y_{1,Dir}$). Le système (5.40) définit un système non-linéaire de quatre équations à quatre inconnues¹⁴.

Le problème (5.40) est difficile à résoudre. Néanmoins, lorsque le schéma numérique appliqué au voisinage de la surface d'émission du cratère pour résoudre le système d'Euler compressible (2.40) est le schéma cinétique (5.30)(5.31), il est possible d'appliquer la condition de Dirichlet (5.39) sans avoir à résoudre (5.40). Cette propriété est directement liée à la décomposition par demi-flux cinétiques (5.33), (5.34) et (5.35). En effet, en tenant compte de (5.40), le demi-flux positif (5.34) calculé en $j+1/2 = source\ raccordée$

¹⁴Les quatre inconnues sont $Y_{1,Dir}$, ρ_{Dir} , u_{Dir} , et T_{Dir} . Via (5.32) (et la relation $Y_{2,Dir} = 1 - Y_{1,Dir}$), ces grandeurs macroscopiques caractérisent complètement la distribution $\mathcal{M}_i^k(Y_{k,Dir}, \rho_{Dir}, u_{Dir}, T_{Dir})$.

s'écrit simplement

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \mathfrak{S}_{1,source \text{ raccordée}}^+ & = & \sum_i \int \int \int_{v_x > 0} m_1 v_x \phi_i^1(v) dv, \\ \mathfrak{S}_{source \text{ raccordée}}^+ & = & \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x \phi_i^k(v) dv, \\ \wp_{source \text{ raccordée}}^+ & = & \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x^2 \phi_i^k(v) dv, \\ \mathfrak{N}_{source \text{ raccordée}}^+ & = & \sum_{k,i} \int \int \int_{v_x > 0} m_k v_x \left(\frac{v^2}{2} + \epsilon_i^k \right) \phi_i^k(v) dv. \end{array} \right. \quad (5.41)$$

La condition aux limites (5.41) – qui est issue de (5.40) – correspond à la condition aux limites de Dirichlet (5.39) imposée dans le cadre du schéma cinétique à deux espèces (5.30)(5.31), et définit le *raccordement du schéma cinétique à la surface d'émission du cratère*. Elle peut être vue comme une condition de type Marshak appliquée dans le cadre du système d'Euler compressible : voir (2) dans [39] pour le cas du système de Navier-Stokes compressible. La condition de Marshak a initialement été proposée pour des problèmes de transfert radiatif. Remarquons que la condition aux limites (5.36)(5.37) de couplage à l'interface cinétique fluide peut être aussi vue comme une condition de type Marshak.

La condition aux limites (5.41) permet de raccorder le schéma cinétique à deux espèces (5.30)(5.31) à la surface d'émission du cratère. Ainsi, le gain sur le temps de calcul et sur la mémoire RAM induit par le couplage est considérablement augmenté, la couche de Knudsen n'étant pas résolue. Notons que l'interface cinétique-fluide sur la Figure 3 n'est pas du tout raccordée à la surface d'émission verticale du cratère : le raccordement a été volontairement limité pour tester la robustesse de la condition aux limites (5.41) au niveau de l'interface cinétique-fluide verticale.

5.4 Algorithme de couplage cinétique-fluide

On suppose ici que le domaine de calcul Ω (Ω est le séparateur décrit à la Figure 2) est tel que

$$\Omega = \Omega_{cinétique} \cup \Omega_{fluide} \cup \Gamma_{cinétique-fluide}$$

où $\Omega_{cinétique}$ est la zone cinétique, où Ω_{fluide} est la zone fluide et où

$$\Gamma_{cinétique-fluide} = \overline{\Omega}_{cinétique} \cap \overline{\Omega}_{fluide}$$

est l'interface cinétique-fluide (le couplage cinétique-fluide se faisant sans recouvrement des zones cinétique et fluide, on a $\Omega_{cinétique} \cap \Omega_{fluide} = \emptyset$). De plus, on définit Γ_{source} comme étant la surface d'émission du cratère (donc, la zone d'émission d' $U-Fe$). En 1D, on a simplement $\Gamma_{source} = \{x_{source}\}$ (voir le §5.3.1). En 2D ou 3D, Γ_{source} est une courbe ou une surface, et v est remplacé par $v \cdot \mathbf{n} \geq 0$ dans (5.38) où $\mathbf{n}$ est la normale intérieure à Ω en $x = x_{source}$ où $x_{source} \in \Gamma_{source}$. De plus, les conditions d'émission sur Γ_{source} ne sont pas homogènes puisque le faisceau d'électrons n'impacte la surface du cratère que sur une surface limitée. Cet inhomogénéité crée un gradient de température à la surface d'émission du cratère (voir la Figure 3). La distribution ϕ_i^k dépend alors de $x_{source} \in \Gamma_{source}$. La zone fluide Ω_{fluide} étant en partie ou totalement raccordée à la surface d'émission du cratère (voir la Figure 3 et le §5.3.2), on définit $\Gamma_{source \text{ raccordée}}$ et $\Gamma_{source \text{ non raccordée}}$ comme étant les parties de Γ_{source} respectivement raccordée et non raccordée à la zone fluide Ω_{fluide} (on a donc $\Gamma_{source} = \Gamma_{source \text{ raccordée}} \cup \Gamma_{source \text{ non raccordée}}$).

L'algorithme de couplage cinétique-fluide (exprimé ci-dessous en 1D) est itératif. Il se décompose de la façon suivante :

- **Itération $k = 0$** : on émet quelques particules dans Ω à partir de la source Γ_{source} en imposant la condition (5.38) sur Γ_{source} . Ce premier calcul grossier initialise les grandeurs macroscopiques dans Ω_{fluide} nécessaires à la condition aux limites *fluide* $\rightarrow$ *cinétique* (5.37) pour l'itération $k = 1$.
- **Itération $k = 1$** :
 - **Traitement de la zone cinétique $\Omega_{cinétique}$** : on fige la zone fluide Ω_{fluide} et on émet des particules à l'interface cinétique-fluide $\Gamma_{cinétique-fluide}$ via la condition aux limites *fluide* $\rightarrow$ *cinétique* (5.37) ainsi qu'à la source non raccordée $\Gamma_{source \text{ non raccordée}}$ via la condition aux limites (5.38).
 - **Traitement de la zone fluide Ω_{fluide}** : on fige la zone cinétique $\Omega_{cinétique}$ et on applique le schéma cinétique à deux espèces (5.30)(5.31) muni de la condition aux limites *cinétique* $\rightarrow$ *fluide* (5.36) à l'interface cinétique-fluide $\Gamma_{cinétique-fluide}$ et de la condition aux limites (5.41) à la source raccordée $\Gamma_{source \text{ raccordée}}$.
- **Itérations $k \geq 2$** : l'algorithme est identique à celui de l'itération $k = 1$. On poursuit ainsi jusqu'au niveau de convergence souhaité.

Notons que pour que cet algorithme de couplage soit extrêmement précis¹⁵, l'interface cinétique-fluide doit *idéalement* se trouver dans une zone où l'utilisation du système d'Euler compressible est justifiée, ce qui sous-entend que l'on connaît plus ou moins l'étendue de la zone fluide avant même d'avoir effectué tout calcul. Soulignons cependant que le caractère conservatif du couplage ne dépend pas de l'endroit où l'interface cinétique-fluide est placée ; d'autre part, les résultats numériques loin de l'interface cinétique-fluide peuvent demeurer corrects même lorsque celle-ci est placée dans une zone où l'utilisation du système d'Euler compressible n'est pas justifiée. En ce sens, on peut dire que l'algorithme de couplage cinétique-fluide proposé est robuste.

5.5 Simulation d'une détente d'uranium-fer

On se propose de montrer quelques résultats numériques validant l'algorithme de couplage cinétique-fluide et montrant également le gain sur le temps de calcul et sur la mémoire RAM induit par celui-ci. Le séparateur, le cratère, la source (*i.e.* la surface d'émission du cratère), le maillage (2D axisymétrique) et l'interface cinétique-fluide sont décrits sur les figures 2-3.

5.5.1 Modélisation des atomes d'uranium et de fer

On ne considère ici que 3 et 2 niveaux d'énergie métastables pour respectivement l'uranium ($k = 1$) et le fer ($k = 2$). D'autre part, on définit l'énergie métastable ϵ_i^k par l'intermédiaire de la relation de de Broglie

$$m_k \epsilon_i^k = h c \nu_i^k \quad (5.42)$$

où ν_i^k est le nombre d'onde du niveau d'énergie métastable i de l'espèce k (h est la constante de Planck et c est la vitesse de la lumière)¹⁶. Les niveaux de dégénérescence g_i^k et les fréquences ν_i^k sont donnés par :

- Pour l'uranium ($k = 1$) :

$$\left\{ \begin{array}{l} g_1^1 = 13, \\ g_2^1 = 11, \\ g_3^1 = 514 \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} \nu_1^1 = 0, \\ \nu_2^1 = 620 \text{ cm}^{-1}, \\ \nu_3^1 = 8338 \text{ cm}^{-1}. \end{array} \right.$$

¹⁵Par *extrêmement précis*, on entend par là que la résolution de l'équation cinétique dans tout le domaine Ω n'apporterait pas plus d'information que la résolution basée sur cet algorithme de couplage cinétique-fluide.

¹⁶La quantité $c \nu_i^k$ est la fréquence du niveau d'énergie métastable i de l'espèce k .

– Pour le fer ($k = 2$) :

$$\left\{ \begin{array}{l} g_1^2 = 9, \\ g_2^2 = 26 \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} \nu_1^2 = 0, \\ \nu_2^2 = 1466 \text{ cm}^{-1}. \end{array} \right.$$

5.5.2 Modélisation de la surface d'émission du cratère

Le séparateur et le cratère sont décrits sur les figures 2-3. Le gradient de température induit par l'impact du faisceau d'électrons à la surface d'émission du cratère est simplement modélisé avec

$$\left\{ \begin{array}{ll} 0 \leq r \leq R_1 : T_s(r) = 3400 \text{ K} & (R_1 = 0,85 \cdot 10^{-2} \text{ m}); \\ R_1 < r < R_2 : T_s(r) = 3200 \text{ K} & (R_2 = 1,7 \cdot 10^{-2} \text{ m}); \\ r = R_2 : T_s(r) = 3000 \text{ K} & (\text{paroi verticale du cratère}). \end{array} \right. \quad (5.43)$$

Le rayon R_1 est une estimation du rayon du faisceau d'électrons. Quant à l'émission elle même, elle est modélisée avec :

– Pour l'uranium ($k = 1$) :

$$\phi_i^1(v) = C_i^1(T_s) n_s^1(T_s) \exp \left[-\frac{m_1 v^2}{2T_s(r)} \right] g_i^1 \exp \left(-\frac{m_1 \epsilon_i^1}{T_s(r)} \right) \quad \begin{array}{l} \text{lorsque } i \in \{1, 2\} \text{ et } r \geq 0 \\ \text{ou lorsque } i = 3 \text{ et } r > R_1; \end{array} \quad (\text{a})$$

$$= C_i^1(T_s, T_*) n_s^1(T_s) \exp \left[-\frac{m_1 v^2}{2T_s(r)} \right] g_i^1 \exp \left(-\frac{m_1 \epsilon_i^1}{T_*} \right) \quad \text{lorsque } i = 3 \text{ et } 0 \leq r \leq R_1. \quad (\text{b}) \quad (5.44)$$

La température T_* dans (5.44)(b) est définie avec

$$T_* = C_* \cdot T_s(0 \leq r \leq R_1) \quad (5.45)$$

où $C_* = 1,7$ est un paramètre déduit de diverses expériences de laboratoire. Ce paramètre caractérise le fait que le troisième niveau d'énergie de l'uranium est directement excité par le faisceau d'électrons. Ce troisième niveau d'énergie est donc un réservoir d'énergie pour la détente d'uranium-fer.

– Pour le fer ($k = 2$) :

$$\phi_i^2(v) = C_i^2(T_s) n_s^2(T_s) \exp \left[-\frac{m_2 v^2}{2T_s(r)} \right] g_i^2 \exp \left(-\frac{m \epsilon_i^2}{T_s(r)} \right) \quad \text{lorsque } i \in \{1, 2\} \text{ et } r \geq 0. \quad (5.46)$$

Contrairement à l'uranium, on suppose qu'aucun niveau d'énergie métastable du fer n'est directement excité par le faisceau d'électrons.

La densité $n_s^1(T_s)$ dans (5.44) est la densité de vapeur saturante à la température $T_s(r)$ de l'uranium ; on suppose par ailleurs que $n_s^2(T_s)$ dans (5.46) est tel que $n_s^2(T_s)/n_s^1(T_s) = 11,25\%$. Les constantes C_i^k dans (5.44) et (5.46) sont des constantes de normalisation que l'on peut facilement déduire de (2.32).

5.5.3 Résultats numériques

Nous présentons ci-dessous des résultats numériques dans et loin du cratère (le cratère est décrit sur la Figure 2). Ces résultats valident l'algorithme de couplage cinétique-fluide. Nous présentons également un résultat numérique qui met en évidence l'effet catalyseur décrit au §2.2.3 du Chapitre 2.

Résultats numériques dans le cratère

Les figures 4-5 et 6-7 représentent les vitesses respectivement axiale et radiale du mélange d' $U-Fe$ sans et avec couplage dans le cratère. Les figures 8-9 représentent une coupe en $r = 5 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ de la densité et de la température de l'uranium dans le cratère. Les figures 4-9 montrent une très bonne concordance entre les résultats obtenus sans et avec couplage cinétique-fluide. En particulier, ces figures montrent que la transition à l'interface cinétique-fluide entre les modèles cinétique et fluide est excellente. Notons que la couche de Knudsen au voisinage de la surface d'émission du cratère (voir le §5.3.1) apparaît sur la Figure 9 (le déséquilibre thermodynamique dans la couche de Knudsen est en particulier caractérisé par le fait que la température axiale T_x y est supérieure à la température radiale T_r). Les figures 8-9 valident également le raccordement de la zone fluide à la surface d'émission horizontale du cratère.

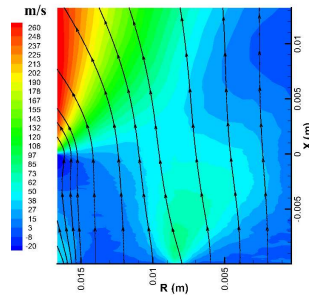


Figure 4

Vitesse radiale sans couplage

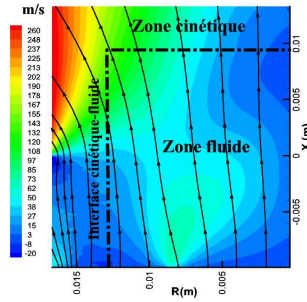


Figure 5

Vitesse radiale avec couplage

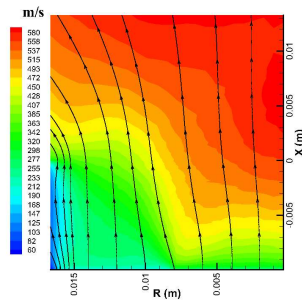


Figure 6

Vitesse axiale sans couplage

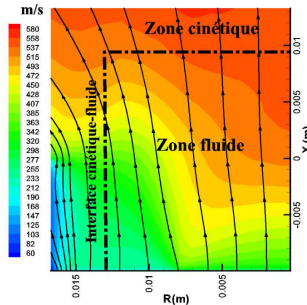


Figure 7

Vitesse axiale avec couplage

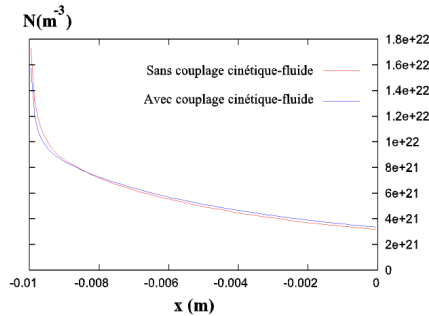


Figure 8

*Densité de l'uranium
avec et sans couplage*

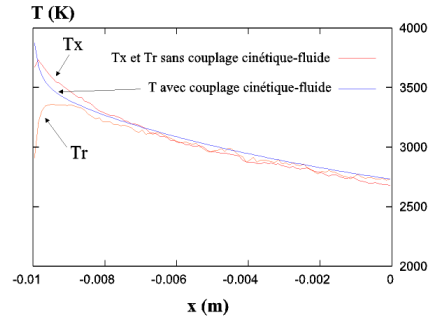


Figure 9

*Température de l'uranium
avec et sans couplage*

Résultats numériques dans la zone raréfiée

La Figure 10 représente les lobes en densité de l'uranium et du fer en fonction de θ dans la zone raréfiée *i.e.* loin du cratère (voir les pointillots verts sur la Figure 2). La Figure 11 représente le taux $\rho_{U_{620 \text{ cm}^{-1}}} / \rho_{U_0 \text{ cm}^{-1}}$ – qui est défini par le rapport entre les densités d'uranium au premier niveau d'énergie métastable ($\nu_2^1 = 620 \text{ cm}^{-1}$) et à l'état fondamental ($\nu_1^1 = 0 \text{ cm}^{-1}$) – dans les deux zones de mesure par absorption laser (voir les pointillots noirs sur la Figure 2). Les figures 10-11 valident l'algorithme de couplage cinétique-fluide dans la zone raréfiée, donc loin de la zone fluide.

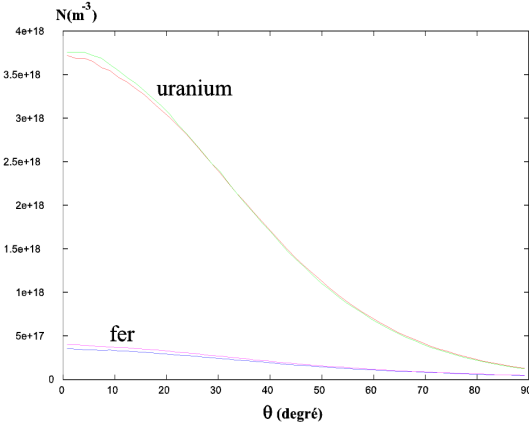


Figure 10
Lobes en densité de l'uranium et du fer
avec et sans couplage

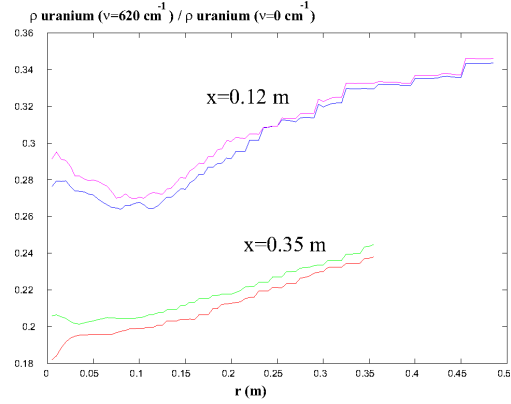


Figure 11
 $\rho_{U_{620 \text{ cm}^{-1}}} / \rho_{U_0 \text{ cm}^{-1}}$
avec et sans couplage

Remarquons que la Figure 10 montre l'existence d'une séparation entre l'uranium et le fer dans la zone raréfiée. En effet, la Figure 10 montre que l'uranium reste concentré au niveau de l'axe du séparateur alors que le fer a tendance à migrer dans l'ensemble du séparateur. Cet effet de séparation entre l'uranium et le fer est purement aérodynamique et est provoqué par le gradient de pression radial, les espèces lourde (l'uranium ici) et légère (le fer ici) ayant tendance à migrer dans les zones respectivement de haute et basse pression. Autrement dit, ce phénomène de séparation correspond à la barodiffusion en atmosphère raréfiée. On consultera à ce sujet le §3.3 du Chapitre 3 dans [Del10] (voir aussi la note de bas de page 4) pour une description de la barodiffusion lorsque l'écoulement est fluide (*i.e.* non raréfié). Par ailleurs, la Figure 11 souligne que l'uranium dans la partie haute du séparateur est plus proche de l'état fondamental que dans la partie basse du séparateur : cet effet montre que les collisions entre atomes favorisent le retour à l'état fondamental.

Gain induit par l'algorithme de couplage cinétique-fluide

Pour le cas-test présenté dans cette section, grâce à l'algorithme de couplage cinétique-fluide, le temps de calcul est divisé par environ 3 et le gain sur la mémoire RAM est de l'ordre de 30 %. Ce gain pourrait être augmenté en raccordant *complètement* la zone fluide à la surface d'émission du cratère. Rappelons que la zone fluide est ici seulement raccordée en partie à la surface d'émission horizontale du cratère et n'est pas du tout raccordée à la surface d'émission verticale du cratère : voir la Figure 3. Nous avons limité le raccordement à la surface d'émission du cratère pour tester la robustesse de celui-ci au niveau de l'interface cinétique-fluide verticale.

Mise en évidence de l'effet catalyseur du fer

Le gain sur le temps de calcul et sur la mémoire RAM induit par l'algorithme de couplage cinétique-fluide permet de réaliser un plus grand nombre de calculs numériques. Il est alors possible de mieux comprendre la physique de la détente d'uranium-fer en modifiant tel ou tel paramètre de modélisation.

5.6. UN SECOND SCHÉMA ENTROPIQUE DANS LE CAS DE L'ÉQUATION D'ÉTAT DE L'URANIUM OU DU FER

Par exemple, l'influence de la présence du fer dans la physique de la détente de l'uranium peut être étudiée de façon plus systématique. Pour illustrer cet aspect, on représente sur la Figure 12 le taux $\rho_{U_{620} \text{ cm}^{-1}} / \rho_{U_0 \text{ cm}^{-1}}$ avec et sans fer obtenu avec couplage cinétique-fluide dans les deux zones de mesure par absorption laser (voir les pointillets noirs sur la Figure 2).

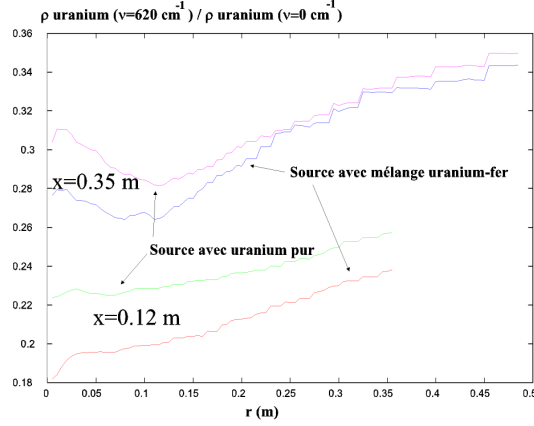


Figure 12

$\rho_{U_{620} \text{ cm}^{-1}} / \rho_{U_0 \text{ cm}^{-1}}$
avec et sans fer, avec couplage

La Figure 12 montre que la présence du fer favorise le retour à l'état fondamental des atomes d'uranium. Le fer joue donc un rôle de catalyseur vis à vis de la vitesse de retour à l'état fondamental de l'uranium. Ce point est une application directe de la notion de catalyseur introduite au §2.2.3 du Chapitre 2.

Mais, il peut aussi être intéressant d'affiner la modélisation de la surface d'émission du cratère en modifiant le profil de température de surface (5.43) ou les distributions d'émission de l'uranium et du fer ici définies avec (5.44)(5.45)(5.46). Ce type d'études nécessite beaucoup de calculs numériques pour caler ces modèles physiques aux résultats expérimentaux : le gain sur le temps de calcul et sur la mémoire RAM induit par l'algorithme de couplage cinétique-fluide facilite ces études.

5.6 Un second schéma entropique dans le cas de l'équation d'état de l'uranium ou du fer

Cette section est indépendante de la construction de l'algorithme de couplage cinétique-fluide et résume la note [Dellacherie, 2001]. En nous plaçant dans le cas particulier de l'équation d'état de l'uranium ou du fer définie avec (5.23)(5.24), nous montrons qu'il est très facile de construire une large classe de schémas de relaxation entropiques (pas nécessairement cinétiques) pour cette équation d'état avec $\gamma > 1$.

Rappelons que l'on associe à l'équation d'état (5.23)(5.24) l'entropie

$$s(\tau, T) = s^{cl}(\tau, T) + s^{ncl}(T) \quad (5.47)$$

où

$$\begin{cases} s^{cl}(\tau, T) = -\frac{1}{m} \left[\log(m\tau) + \frac{1}{\gamma-1} \log\left(\frac{T}{m}\right) \right], & (a) \\ s^{ncl}(T) = -\frac{1}{m} \left[\log(\mathcal{Z}(T)) + \frac{\varepsilon^{ncl}(T)}{\frac{T}{m}} \right] & (b) \end{cases} \quad (5.48)$$

avec $\gamma > 1$. Supposons maintenant que le flux numérique g dans (5.8)(b) n'est pas défini avec (5.20) mais avec

$$\begin{aligned} g_{2,i+1/2} &= \varepsilon_{2,i} \cdot \mathfrak{S}_{1,i+1/2} & \text{si } \mathfrak{S}_{1,i+1/2} \geq 0, \\ &= \varepsilon_{2,i+1} \cdot \mathfrak{S}_{1,i+1/2} & \text{si } \mathfrak{S}_{1,i+1/2} < 0 \end{aligned} \quad (5.49)$$

où $\mathfrak{S}_1$ est le flux de masse dans $f_1 := (\mathfrak{S}_1, \wp_1, \aleph_1)^T$ du schéma (5.8)(a) (qui n'est pas nécessairement un schéma cinétique). Alors, on montre dans [Dellacherie, 2001] :

Théorème 5.6.1. *Supposons que sous un critère CFL, le schéma numérique (5.8)(a) est entropique pour l'équation d'état $\varepsilon_1(\tau, P) = \frac{\tau P}{\gamma_1 - 1}$ au sens où*

$$(\rho s)_{1,j}^{n+1} \leq (\rho s)_{1,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (h_{1,j+1/2}^n - h_{1,j-1/2}^n)$$

où $s_1 = -\frac{1}{m} \left[\log(m\tau) + \frac{1}{\gamma_1 - 1} \log\left(\frac{\tau}{m}\right) \right]$ et où h_1 est une discrétisation du flux d'entropie ρs_1 . Alors, sous un critère CFL et lorsque $\gamma \in]1, \gamma_1]$, le schéma numérique de relaxation (5.11)(5.12)(5.49) est entropique au sens de (5.17) pour l'équation d'état (5.23)(5.24) associée à l'entropie (5.47)(5.48).

La preuve de ce théorème repose directement sur le découplage (5.8) et (5.10) ainsi que sur le choix (5.49) pour définir le flux dans (5.8)(b). Mais, elle repose aussi sur le fait que l'entropie s définie avec (5.47)(5.48) est la somme d'une entropie classique s^{cl} (liée aux degrés de liberté *classiques* de l'atome) et d'une entropie non-classique s^{ncl} (liée aux degrés de liberté *non-classiques* de l'atome). On pourra aussi consulter le Chapitre 2 dans [Del1b] pour l'établissement de la preuve du Théorème 5.6.1 (voir le Théorème 2.3.1 dans [Del1b] p. 32).

Troisième partie

Modèles fluides
à bas nombre de Mach

Chapitre 6

Un modèle diphasique à bas nombre de Mach

CE chapitre résume les travaux publiés dans [DV03], [Dellacherie, 2005] et [Dellacherie, 2007]. Dans ces travaux, nous nous intéressons à la modélisation et à la simulation numérique de la déformation de l'interface de bulles constituées de fluide 1 plongées dans un fluide 2 lorsque le nombre de Mach est petit et lorsque les transferts thermiques entre les deux fluides sont importants. Ces travaux sont motivés par l'étude d'écoulements diphasiques dans un cœur de Réacteur à Eau sous Pression (REP) ou à Eau Bouillante (REB). Ces études concernent aussi les réacteurs à neutrons rapides dont le fluide caloporteur est du sodium liquide.

Pour simuler l'écoulement diphasique dans un cœur de réacteur à eau, on a recourt à des modèles *moyennés* de type Navier-Stokes diphasique compressible pour lesquelles l'échelle caractéristique de la modélisation est bien supérieure aux échelles caractéristiques des bulles de vapeur d'eau (le fluide 1) plongées dans l'eau liquide (le fluide 2). Il est en effet impossible de simuler le fonctionnement *entier* d'un cœur de REP ou de REB à l'échelle des bulles pour des raisons de coût en temps de calcul et en place mémoire¹. Par modèle *moyenné*, on entend par là qu'en un point x de l'espace, la présence des fluides 1 et 2 est caractérisée par la *fraction massique* $Y_k(t, x)$ ($k \in \{0, 1\}$) qui prend ses valeurs dans $[0, 1]$ et non dans $\{0, 1\}$, et qui est telle que

$$Y_1 + Y_2 = 1 \quad (6.1)$$

et

$$\frac{Y_1}{\rho_1} + \frac{Y_2}{\rho_2} = \frac{1}{\rho}. \quad (6.2)$$

Dans (6.2), ρ et ρ_k sont respectivement les densités volumiques du mélange et du fluide k au sein du mélange. La relation (6.2) est une *loi de mélange* qui prend en compte le caractère *non-miscible* à l'échelle mésoscopique du mélange binaire (voir (4.8)(a)). En définissant la *fraction volumique* $\alpha_k := Y_k \rho / \rho_k$, on vérifie aisément que (6.1) et (6.2) sont respectivement équivalentes à

$$\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2 = \rho \quad (6.3)$$

et

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1. \quad (6.4)$$

Dans un modèle moyenné, l'interface entre les fluides 1 et 2 n'est donc pas *explicitement* décrite ; celle-ci le serait si $Y_k(t, x)$ (ou $\alpha_k(t, x)$) appartenait à $\{0, 1\}$ et non à $[0, 1]$, la discontinuité de $Y_k(t, x)$ (ou de $\alpha_k(t, x)$) représentant dans ce cas l'interface $\Sigma(t)$ des bulles de fluide 1 (lorsque $Y_k \in \{0, 1\}$, on a d'ailleurs $\alpha_k = Y_k$, et réciproquement). Les modèles diphasiques à sept équations (4.15)(4.18) ou à quatre équations

¹Le diamètre d'une bulle de vapeur peut être inférieur au millimètre alors que la hauteur et la largeur d'un cœur de réacteur est de plusieurs mètres. On pourra donc parler d'échelle *mésoscopique* pour les bulles et d'échelle *macroscopique* (ou *moyennée*) pour le réacteur nucléaire.

(4.29) sont deux exemples de modèle moyenné. Cependant, pour compenser le fait que ce type de modèle ne décrit pas *explicitement* l'interface $\Sigma(t)$ entre les deux fluides non-miscibles, il est nécessaire d'enrichir la modélisation *via* des relations de fermeture *ad hoc*. Par exemple, dans (4.29)(a), le modèle d'écart de vitesse (4.34) couplé à (4.32)(4.33) modélise à l'échelle moyennée la remontée de bulles constituées de fluide 1 supposé plus léger que le fluide 2 (*i.e.* $\Delta\rho := \rho_2 - \rho_1 > 0$) *via* la poussée d'Archimède. Notons que lorsque le fluide 1 est de l'air ou de la vapeur d'eau et que le fluide 2 est de l'eau liquide, α_1 est aussi appelé *taux de vide*.

Or, pour justifier ou améliorer des relations de fermeture moyennées du type (4.34), et ce, pour différents régimes d'écoulement, des simulations numériques à l'échelle des bulles réalisées *sur des domaines de calcul de volume bien inférieur au volume du cœur du réacteur* peuvent être très utiles. Par exemple, on peut envisager simuler la remontée de plusieurs centaines de bulles sur de courtes distances et pour des temps physiques limités, moyenner l'écoulement obtenu en espace et en temps, en déduire des taux de vide et des écarts de vitesse entre les deux fluides *moyens* pour ainsi proposer des relations de fermeture moyennées du type (4.34). Ce type de simulations numériques peut être vu comme un complément (voire une alternative) à des bancs d'essais expérimentaux pour lesquels il peut être techniquement difficile ou coûteux d'étudier avec précision la sensibilité des modèles à tel ou tel paramètre physique (comme, par exemple, le paramètre κ ou la tension de surface σ dans (4.34)).

Bien qu'effectuées sur des domaines de calcul et des temps physiques limités, de telles simulations – dites *simulations numériques directes* d'écoulements diphasiques (ou à bulles) – restent coûteuses en temps de calcul et en place mémoire. Aussi, pour limiter le coût du calcul, il peut être utile d'adapter le modèle d'évolution des bulles au régime d'écoulement d'intérêt. Dans ce chapitre, nous nous intéressons à des écoulements diphasiques *à bas nombre de Mach* et *à forts gradients thermiques*. Ce type d'écoulement se caractérise par le fait que, bien que la vitesse du son soit grande par rapport à la vitesse des fluides 1 et 2, et bien que l'un des deux fluides soit éventuellement peu compressible², l'hypothèse d'incompressibilité n'est pas nécessairement satisfaite partout du fait des transferts de chaleur au sein de chaque fluide et entre les deux fluides à l'interface $\Sigma(t)$. Dans ce cas, l'écoulement doit *a priori* être modélisé avec un système de Navier-Stokes diphasique *compressible*. Cependant, l'utilisation de ce système compressible à bas nombre de Mach n'est pas simple pour les deux raisons suivantes :

- les solveurs de type Godunov sont fréquemment utilisés pour discrétiser la partie convective du système de Navier-Stokes compressible. Or, ces solveurs se comportent très mal à bas nombre de Mach en terme de précision. Sauf à changer complètement la stratégie de discrétisation de la partie convective, il est dès lors nécessaire de modifier les solveurs de type Godunov pour récupérer une bonne précision à bas nombre de Mach. Cet aspect est étudié en détail au Chapitre 8 ;
- le système de Navier-Stokes compressible comporte deux échelles de temps *distinctes* à bas nombre de Mach : l'échelle de temps acoustique τ_{ac} liée aux ondes acoustiques et l'échelle de temps matière τ_{mat} liée au déplacement du fluide. Ces deux échelles de temps sont distinctes puisque $\tau_{ac}/\tau_{mat} = \mathcal{O}(M)$ où M est le nombre de Mach. Autrement dit, on a $\tau_{ac} \ll \tau_{mat}$ à bas nombre de Mach, ce qui rend délicate la discrétisation en temps du système de Navier-Stokes compressible avec un pas de temps Δt de l'ordre de τ_{mat} . Pour s'affranchir de ce problème, il est légitime de tenter de filtrer les ondes acoustiques dans le système de Navier-Stokes compressible pour obtenir un système dont l'échelle de temps caractéristique est unique et est égale à l'échelle de temps matière τ_{mat} . Un tel système est dit *bas Mach*, *dilatable* ou *quasi-isobare*. Cette technique a été appliquée avec succès en monophasique par Paolucci [82] et en combustion lente par Majda [73, 75] dans le cas de gaz parfaits.

Le travail présenté ici s'intéresse au second point. En nous inspirant des travaux de Majda [73, 75], nous proposerons au §6.1 un système *bas Mach* dérivé du système de Navier-Stokes diphasique compressible. Ce système ne sera pas limité au cas des gaz parfaits. Dans la suite, celui-ci sera nommé *système diphasique à bas nombre de Mach* soit en anglais *Diphasic Low Mach Number system* ; nous utiliserons donc l'acronyme

²L'eau liquide est beaucoup moins compressible que la vapeur d'eau ou l'air.

DLMN pour faire référence à ce système. Nous décrirons les propriétés de base du système DLMN au §6.2. Puis, nous montrerons numériquement en 1D au §6.3 le mauvais comportement du système DLMN lorsque la vitesse du son d'un des deux fluides est imaginaire pure. Enfin, nous nous intéresserons au §6.4 à la résolution numérique en 2D du système DLMN dans le cas d'un champ de vitesse potentiel.

6.1 Dérivation formelle du système DLMN

Nous résumons le principe de construction du système DLMN tel que proposé dans [Dellacherie, 2005]. On pourra aussi consulter [DV03] et [Del04].

6.1.1 Le système de Navier-Stokes diphasique compressible

Le modèle de départ correspond au système de Navier-Stokes diphasique compressible

$$\left\{ \begin{array}{ll} D_t Y_1 = 0, & (a) \\ \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, & (b) \\ \rho D_t u = -\nabla P + \nabla \cdot \sigma - \rho g, & (c) \\ \rho C_p D_t T = \alpha T D_t P + \nabla \cdot q + \sigma : \nabla u & (d) \end{array} \right. \quad (6.5)$$

écrit sous forme non-conservative et résolu dans un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d \in \{1, 2, 3\}$) de frontière supposée régulière $\partial\Omega$. Dans (6.5), D_t est la dérivée lagrangienne $\partial_t + u \cdot \nabla$. Puisque l'on cherche à décrire explicitement l'interface $\Sigma(t)$ des bulles de fluide 1 plongées dans un fluide 2, la fraction massique $Y_1(t, x)$ dans (6.5) appartient à $\{0, 1\}$ (voir l'introduction ci-dessus), ce qui impose de choisir la condition initiale

$$Y_1(t=0, x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \Omega_1(t=0) & (i.e. \text{ fluide 1}), \\ 0 & \text{si } x \in \Omega_2(t=0) & (i.e. \text{ fluide 2}). \end{cases} \quad (6.6)$$

Dans (6.6), $\Omega_k(t)$ définit le domaine constitué de fluide k , et on a

$$\Omega_1(t) \cup \Omega_2(t) \cup \Sigma(t) = \Omega \quad \text{où} \quad \Sigma(t) = \partial\Omega_1(t)$$

(par convention, le domaine $\Omega_1(t)$ correspond aux bulles). Le vecteur $g = g_* z$ est la gravité ($g_* = 9,81 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$ et z est le vecteur unitaire normal orienté dans la direction verticale). Les quantités $\rho(Y_1, T, P)$, T , P et u sont respectivement la masse volumique, la température, la pression, et la vitesse au point $(t, x) \in \Omega \times \mathbb{R}^+$. Le tenseur σ et le vecteur q sont respectivement le tenseur de viscosité et le flux de chaleur, et sont définis avec

$$\left\{ \begin{array}{ll} \sigma &= \mu [\nabla u + (\nabla u)^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot u)I], & (a) \\ q &= \lambda \nabla T & (b) \end{array} \right. \quad (6.7)$$

(I est la matrice identité dans $\mathbb{R}^d$) où $\mu(Y_1, T, P)$ et $\lambda(Y_1, T, P)$ sont respectivement la viscosité dynamique et la conductivité thermique du fluide. Les quantités $C_p(Y_1, T, P)$ et $\alpha(Y_1, T, P)$ sont respectivement la capacité calorifique à pression constante et le coefficient de compressibilité à pression constante, et sont définis avec

$$C_p(Y_1, T, P) = \frac{\partial h}{\partial T}(Y_1, T, P) \quad (6.8)$$

et

$$\alpha(Y_1, T, P) = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial T}(Y_1, T, P) \quad (6.9)$$

où $h := \varepsilon + P/\rho$ est l'enthalpie, $\varepsilon(Y_1, T, P)$ étant l'énergie interne du fluide. Dans la suite, on utilisera également les fonctions (qui sont sans dimension)

$$\beta(Y_1, T, P) = \frac{\alpha P}{\rho C_p}(Y_1, T, P) \quad (6.10)$$

et

$$\Gamma(Y_1, T, P) = \frac{\rho c^2}{P}(Y_1, T, P). \quad (6.11)$$

Dans (6.11), c est la vitesse du son que l'on peut définir avec la relation

$$c(Y_1, T, P) = \sqrt{\frac{\partial \rho}{\partial P} - \frac{\alpha^2 T}{C_p}}^{-1}(Y_1, T, P). \quad (6.12)$$

Le caractère non-miscible du fluide diphasique est ici pris en compte *via*

$$\xi(Y_1, T, P) = Y_1 \xi_1(T, P) + (1 - Y_1) \xi_2(T, P) \quad \text{avec} \quad \xi \in \{\mu, \lambda, C_p, \alpha, \beta, \Gamma, c, \rho, \varepsilon\} \quad (6.13)$$

sachant que $Y_1(t, x) \in \{0, 1\}$. La viscosité dynamique $\mu_k(T, P)$ et la conductivité thermique $\lambda_k(T, P)$ du fluide k sont supposées connues. De même, les équations d'état $\rho_k(T, P)$ et $\varepsilon_k(T, P)$ du fluide k sont supposées connues ; elles définissent les fonctions $C_p, \alpha, \beta, \Gamma, c, \rho$ et ε *via* (6.8)-(6.13). Ces deux équations d'état sont définies sous l'hypothèse :

Hypothèse 6.1.1. *On peut associer aux équations d'état $\tau_k(T, P) := 1/\rho_k(T, P)$ et $\varepsilon_k(T, P)$ une entropie thermodynamique $s_k(\tau_k, \varepsilon_k)$. En d'autres termes, l'entropie $s_k(\tau_k, \varepsilon_k)$ est strictement convexe et vérifie le second principe de la thermodynamique*

$$-T ds_k = d\varepsilon_k + P d\tau_k. \quad (6.14)$$

L'Hypothèse 6.1.1 est équivalente à l'Hypothèse 4.1.1. Enfin, l'on applique au système (6.5) la condition aux limites

$$\forall x \in \partial\Omega : \quad \begin{cases} u = 0, & \text{(a)} \\ \nabla T \cdot n|_{\partial\Omega} = 0 & \text{(b)} \end{cases} \quad (6.15)$$

où $n|_{\partial\Omega}$ est le vecteur unitaire normal à $\partial\Omega$. Le domaine borné Ω est donc isolé. Remarquons que l'on suppose que la solution du système (6.5) est régulière ce qui sous-entend que la condition aux limites

$$\forall x \in \Sigma(t) : \quad \begin{cases} [u]_{\Sigma(t)} = 0, \\ [\sigma - PI]_{\Sigma(t)} \cdot n_{\Sigma(t)} = 0, \\ [T]_{\Sigma(t)} = 0, \\ [\lambda \nabla T]_{\Sigma(t)} \cdot n_{\Sigma(t)} = 0 \end{cases} \quad (6.16)$$

est implicitement satisfaite sur l'interface $\Sigma(t)$, la notation $[f]_{\Sigma(t)}$ dans (6.16) correspondant au saut de f au travers de $\Sigma(t)$ et $n_{\Sigma(t)}$ étant le vecteur unitaire normal à $\Sigma(t)$.

6.1.2 Hypothèses de modélisation et adimensionnalisation

On se place sous les hypothèses de modélisation suivantes :

Hypothèse 6.1.2. *Il est possible de définir une longueur caractéristique L_* et une vitesse caractéristique u_* communes aux deux fluides. Donc, on peut définir le temps caractéristique commun $t_* = L_*/u_*$. De même, il est possible de définir les grandeurs caractéristiques $(T_*, P_*, \rho_*, C_{p*}, \alpha_*, \mu_*, \lambda_*)$ qui soient communes aux deux fluides.*

Hypothèse 6.1.3. On peut définir C_{p*} et c_* avec $C_{p*} = \frac{P_*}{\rho_* T_*}$ et $c_* = \sqrt{P_*/\rho_*}$, ce qui est en particulier le cas lorsque les deux fluides sont des gaz parfaits.

Sous les hypothèses 6.1.2 et 6.1.3, le système (6.5) adimensionné s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{ll} D_t Y_1 = 0, & (a) \\ \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, & (b) \\ \rho D_t u = -\frac{\nabla P}{M_*^2} + \frac{\nabla \cdot \sigma}{Re_*} - \frac{\rho}{Fr_*^2} z, & (c) \\ \rho C_p D_t T = \beta_* \cdot \alpha T D_t P + \frac{\nabla \cdot (\lambda \nabla T)}{Re_* Pr_*} + \frac{M_*^2}{Re_*} \sigma : \nabla u & (d) \end{array} \right. \quad (6.17)$$

avec les nombres sans dimension

$$\left\{ \begin{array}{ll} M_* = \frac{u_*}{c_*} & \text{(nombre de Mach),} \\ Re_* = \frac{u_* L_* \rho_*}{\mu_*} & \text{(nombre de Reynolds),} \\ Pr_* = \frac{\mu_* C_{p*}}{\lambda_*} & \text{(nombre de Prandtl),} \\ Fr_* = \frac{u_*}{\sqrt{g_* L_*}} & \text{(nombre de Froude),} \\ \beta_* = \frac{\alpha_* P_*}{\rho_* C_{p*}}. \end{array} \right. \quad (6.18)$$

Notons que sous l'Hypothèse 6.1.3, on a $\beta_* = \alpha_* T_*$. Or, dans le cas d'un gaz parfait, on a $\alpha = 1/T$. Donc, lorsque les deux fluides sont des gaz parfaits, on peut choisir $\alpha_* = 1/T_*$ et $\beta_* = 1$.

On se place maintenant dans le cadre suivant :

Hypothèse 6.1.4. L'écoulement est à bas nombre de Mach. Autrement dit, on a $M_* \ll 1$. On suppose par ailleurs que $\mathcal{O}(Re_*) = \mathcal{O}(Pr_*) = \mathcal{O}(Fr_*) = 1$.

6.1.3 Le système DLMN

Dans cette section, on dérive le système DLMN³ en filtrant les ondes acoustiques dans le système de Navier-Stokes diphasique compressible (6.17). L'approche proposée s'inspire directement des travaux de Majda en combustion lente [73, 75]. Le filtrage de l'acoustique dans (6.17) est obtenu en posant

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_1(t, x) = Y_1^0(t, x) + Y_1^1(t, x, M_*), \\ \Phi(t, x) = \Phi^0(t, x) + M_* \Phi^1(t, x, M_*) + M_*^2 \Phi^2(t, x, M_*) + \mathcal{O}(M_*^3) \end{array} \right. \quad (6.19)$$

où $\Phi := (u, \rho, T, P)$ et où $Y_1^1 \in \{0, 1\}$ est une fonction dont la mesure du support converge vers zéro avec M_* . En injectant le développement (6.19) dans (6.17), en séparant les termes d'ordre différent et en appliquant la décomposition de Hodge⁴ au terme d'ordre zéro, on obtient *formellement* que (Y_1^0, Φ^0)

³On rappelle que DLMN est l'acronyme de *Diphasic Low Mach Number*.

⁴La décomposition de Hodge est définie au Lemme 8.1.1 du Chapitre 8.

dans (6.19) est solution du système

$$\begin{cases} D_t Y_1 = 0, & (a) \\ \rho C_p D_t T = \alpha T P'(t) + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) & (b) \end{cases} \quad (6.20)$$

couplé à

$$\begin{cases} \nabla \cdot u = G, & (a) \\ \rho D_t u = -\nabla \Pi + \nabla \cdot \sigma - \rho g & (b) \end{cases} \quad (6.21)$$

sachant que la fonction $G(t, x)$ est donnée par

$$G(t, x) = -\frac{1}{\Gamma} \cdot \frac{P'(t)}{P(t)} + \frac{\beta}{P(t)} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (6.22)$$

et que la pression $P(t)$ est solution de l'équation intégrale-différentielle

$$\begin{aligned} P'(t) &= \frac{\int_{\Omega(t)} \beta(Y_1, T, P) \nabla \cdot \lambda \nabla T dx}{\int_{\Omega} \frac{dx}{\Gamma(Y_1, T, P)}} \\ &= \frac{\int_{\Sigma(t)} [\beta]_{\Sigma(t)}(T, P) \lambda \nabla T \cdot n_{1 \rightarrow 2} d\Sigma}{\int_{\Omega} \frac{dx}{\Gamma(Y_1, T, P)}} - \frac{\int_{\Omega} \frac{\partial \beta}{\partial T}(Y_1, T, P) \lambda(Y_1, T, P) (\nabla T)^2 dx}{\int_{\Omega} \frac{dx}{\Gamma(Y_1, T, P)}}. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Le système (6.20)-(6.23) correspond au *système DLMN*. Notons que le système (6.20)-(6.23) est écrit sous forme dimensionnée et sans les indices ⁰ pour simplifier les notations. On rappelle par ailleurs que $[\beta]_{\Sigma(t)} := \beta_1|_{\Sigma(t)} - \beta_2|_{\Sigma(t)}$, et que les fonctions α , β et Γ sont respectivement définies avec (6.9), (6.10) et (6.11). Notons que, sous les conditions aux limites (6.15)(6.16), l'équation (6.23) est équivalente à la condition de compatibilité de Neumann

$$\int_{\Omega} G(t, x) dx = 0 \quad (6.24)$$

qui assure l'existence et l'unicité d'une solution de (6.21) à un champ à divergence nulle près. En fait, il serait plus honnête d'écrire que c'est l'imposition de la condition de compatibilité de Neumann (6.24) couplée à (6.15)(6.16) qui donne l'équation (6.23).

Soulignons que le système DLMN (6.20)-(6.23) a été obtenu sous l'Hypothèse 6.1.2. Or, l'Hypothèse 6.1.2 revient à supposer, d'une part, que les domaines $\Omega_1(t)$ et $\Omega_2(t)$ ont des volumes comparables et, d'autre part, que les deux fluides ont des comportements similaires dans leur domaine respectif. Dans [Del04], on tente de s'affranchir de la seconde partie de l'Hypothèse 6.1.2 de telle sorte qu'il soit possible de dériver un système DLMN lorsque les deux fluides sont très différents (par exemple, de l'air et de l'eau liquide).

Le système DLMN (6.20)-(6.23) couple l'équation hyperbolique (6.20)(a) et l'équation parabolique (6.20)(b) au système (6.21) qui diffère du système de Navier-Stokes incompressible par le fait que la contrainte sur la divergence de u n'est pas nulle. Cette inhomogénéité de la contrainte de divergence (6.21)(b) caractérise la dilatation thermique (on a en effet $G = 0$ lorsque $\lambda := 0$ ou $\nabla T := 0$). D'autre part, la pression $P(t)$ correspond à la *pression thermodynamique* (car elle est reliée à T et ρ via l'équation d'état) et la pression Π dans (6.21)(b) correspond à la *pression dynamique* (car celle-ci ne dépend pas directement de l'équation d'état; elle est d'ailleurs définie à une constante près). Autrement dit, la pression Π est la pression intervenant dans le système de Navier-Stokes incompressible. Enfin, notons qu'il est possible d'écrire le système DLMN sous des formes différentes de (6.20)-(6.23) [Del04]. Par exemple, l'équation (6.21)(a) est équivalente à l'équation de conservation de la masse (6.5)(b). Ici, nous avons préféré écrire (6.5)(b) sous la forme (6.21)(a) pour mettre en avant les liens du système DLMN avec le système de Navier-Stokes incompressible pour lequel (6.21)(a) est remplacé par $\nabla \cdot u = 0$.

6.2 Propriétés du système DLMN

On présente dans cette section les propriétés de base du système DLMN introduites dans [Dellacherie, 2005] (on pourra aussi consulter [Del04]).

6.2.1 Conservation de la masse et de l'énergie

Le système DLMN est conservatif au sens où :

Lemme 6.2.1. *Le système DLMN (6.20)-(6.23) vérifie*

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \int_{\Omega_k(t)} \rho_k(t, x) dx = 0 \quad \text{avec } k \in \{1, 2\}, \quad (a) \\ \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho(t, x) \varepsilon(t, x) dx = 0. \quad (b) \end{array} \right. \quad (6.25)$$

Les relations (6.25)(a) et (6.25)(b) caractérisent respectivement la conservation de la masse et de l'énergie dans Ω . Notons que la relation (6.25)(b) correspond à la conservation de l'énergie totale $\int_{\Omega} \rho(t, x) E(t, x) dx$ ($E = \frac{u^2}{2} + \varepsilon$) mais à l'énergie cinétique près $\int_{\Omega} \rho(t, x) \frac{u^2}{2}(t, x) dx$. Cette dernière n'intervient pas dans le système DLMN et est donc négligée ce qui se justifie par le fait qu'à bas nombre de Mach, $\frac{u^2}{\varepsilon}$ est de l'ordre de M_*^2 .

6.2.2 Décroissance de l'entropie

Le système DLMN vérifie un théorème H au sens où :

Lemme 6.2.2. *Sous l'Hypothèse 6.1.1, pour toute solution du système DLMN (6.20)-(6.23), l'entropie totale $\mathcal{S}(T, P)$ définie avec*

$$\mathcal{S}(T, P)(t) = \int_{\Omega} \rho(Y_1, T, P) s(Y_1, T, P) dx \quad (6.26)$$

où $s(Y_1, T, P) = Y_1 s_1(T, P) + (1 - Y_1) s_2(T, P)$ vérifie $\frac{d}{dt} \mathcal{S}(T, P)(t) \leq 0$. Et, tout équilibre caractérisé par l'interface d'équilibre Σ^∞ est solution du problème de minimisation

$$\mathcal{S}(T^\infty, P^\infty) = \min_{T(x), P} \mathcal{S}(T, P) \quad (6.27)$$

sous les contraintes

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega_k} \rho_k[T(x), P] dx = \mathcal{M}_k \quad \text{avec } k \in \{1, 2\}, \quad (a) \\ \sum_k \int_{\Omega_k} \rho_k[T(x), P] \varepsilon_k[T(x), P] dx = \mathcal{E}, \quad (b) \\ T(x) > 0 \quad \text{et } P > 0, \quad (c) \\ \Omega_1 \text{ fixé tel que } \partial\Omega_1 = \Sigma^\infty, \quad (d) \end{array} \right. \quad (6.28)$$

$\mathcal{M}_k$ et $\mathcal{E}$ étant des constantes strictement positives obtenues via les conditions initiales. De plus, l'équilibre $(T^\infty(x), P^\infty)$ est unique, et $T^\infty(x)$ est une constante T^∞ strictement positive.

La preuve de ce lemme est classique. Elle utilise le fait que $\frac{d}{dt} \mathcal{S}(T, P)(t) = - \int_{\Omega} \lambda(Y_1) (\nabla \log T)^2 dx \leq 0$ ainsi que la stricte convexité de s_1 et s_2 (voir la preuve du Lemme 4 pp. 58-60 dans [Del04]).

6.2.3 Dilatation et compression thermique d'une bulle

Le système DLMN vérifie d'autre part :

Lemme 6.2.3. *La variation du volume du domaine $\Omega_1(t)$ solution du système DLMN (6.20)-(6.23) est donnée par*

$$\frac{d}{dt}|\Omega_1(t)| = \frac{1}{P(t)} \int_{\Sigma(t)} \bar{\beta}(\Omega_1, T, P) \lambda \nabla T \cdot n_{1 \rightarrow 2} d\Sigma + \frac{\mathcal{G}_1(\Omega_1, T, P)}{P(t)} \quad (6.29)$$

où

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\beta}(\Omega_1, T, P) = \frac{\beta_1(T, P)}{\bar{\Gamma}_2(\Omega_2, T, P)} + \frac{\beta_2(T, P)}{\bar{\Gamma}_1(\Omega_1, T, P)}, \\ \mathcal{G}_1(\Omega_1, T, P) = \int_{\Omega_2(t)} \frac{\frac{\partial \beta_2}{\partial T}(T, P)}{\bar{\Gamma}_1(\Omega_1, T, P)} \lambda_2 (\nabla T)^2 dx - \int_{\Omega_1(t)} \frac{\frac{\partial \beta_1}{\partial T}(T, P)}{\bar{\Gamma}_2(\Omega_2, T, P)} \lambda_1 (\nabla T)^2 dx, \\ \bar{\Gamma}_k(\Omega_k, T, P) = \frac{\int_{\Omega} \frac{dx}{\Gamma(Y_1, T, P)}}{\int_{\Omega_k(t)} \frac{dx}{\Gamma_k(T, P)}}. \end{array} \right. \quad (6.30)$$

Donc, lorsque les équations d'état sont telles que $\frac{\partial \beta_k}{\partial T}(T, P) = 0$, on obtient

$$\frac{d}{dt}|\Omega_1(t)| = \frac{1}{P(t)} \int_{\Sigma(t)} \bar{\beta}(\Omega_1, T, P) \lambda \nabla T \cdot n_{1 \rightarrow 2} d\Sigma. \quad (6.31)$$

Pour obtenir le Lemme 6.2.3, il suffit d'écrire que $\frac{d}{dt}|\Omega_1(t)| = \int_{\Omega_1(t)} G(t, x) dx$ et de tenir compte de (6.22) et (6.23). La relation (6.29) montre que la variation du volume de $\Omega_1(t)$ et de $\Omega_2(t)$ est uniquement pilotée par la thermique à bas nombre de Mach. Notons également que le premier terme du membre de droite dans (6.29) est surfacique et caractérise les échanges de chaleur à l'interface $\Sigma(t)$ des bulles alors que le second membre est volumique, ce dernier étant identiquement nul lorsque les deux fluides sont des gaz parfaits (puisque dans ce cas, on a $\beta_k = \frac{\gamma_k - 1}{\gamma_k}$ ou γ_k est la constante adiabatique). On déduit du Lemme 6.2.3 :

Corollaire 6.2.1. *Lorsque les équations d'état sont telles que*

$$\forall(T, P) : \quad \beta_k(T, P) > 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \beta_k}{\partial T}(T, P) = 0, \quad (6.32)$$

la variation du volume du domaine $\Omega_1(t)$ se caractérise par :

i) cas de bulles froides de fluide 1 (donc $\nabla T \cdot n_{1 \rightarrow 2}|_{\Sigma(t)} > 0$) : $\Omega_1(t)$ se dilate et $\Omega_2(t)$ se comprime ;

ii) cas de bulles chaudes de fluide 1 (donc $\nabla T \cdot n_{1 \rightarrow 2}|_{\Sigma(t)} < 0$) : $\Omega_1(t)$ se comprime et $\Omega_2(t)$ se dilate.

Il nous semble important de souligner que c'est parce que la pression thermodynamique P ne dépend pas de l'espace (voir (6.23)) qu'il est aisé d'obtenir le Lemme 6.2.3 puis le Corollaire 6.2.1 à partir du système DLMN (6.20)-(6.23). Il serait par contre plus délicat d'obtenir un résultat phénoménologique tel que celui du Corollaire 6.2.1 *directement* à partir du système de Navier-Stokes diphasique compressible (6.5) à bas nombre de Mach. Notons que la condition (6.32) est satisfaite dans le cas d'un gaz parfait. Lorsque la condition (6.32) n'est pas satisfaite, on ne peut rien dire *a priori*. D'autre part, lorsque le nombre de Mach n'est pas petit, la pression thermodynamique P n'est pas uniforme en espace (autrement dit, le système DLMN (6.20)-(6.23) n'est pas valable), et les ondes acoustiques peuvent aussi contribuer à la variation du volume de $\Omega_1(t)$. Dans ce cas, le Corollaire 6.2.1 n'est pas valable⁵.

⁵En écoulement supersonique, y compris sous la condition (6.32), une bulle froide (chaude) de fluide 1 plongée dans du fluide 2 peut se comprimer (dilater).

6.2.4 Dégénérescence lorsqu'un des fluides est incompressible

On peut également écrire le lemme *formel* suivant :

Lemme 6.2.4. *Supposons que les deux fluides sont tels que*

$$\begin{cases} \mathcal{O}(\lambda_1) = \mathcal{O}(\lambda_2), & (a) \\ \mathcal{O}(\beta_1) \gg \mathcal{O}(\beta_2) & (b) \\ \mathcal{O}(\Gamma_1) \ll \mathcal{O}(\Gamma_2). & (c) \end{cases} \quad (6.33)$$

Alors, la contrainte (6.21)(a) peut être approchée dans $\Omega_2(t)$ par

$$\forall x \in \Omega_2(t) : \nabla \cdot u = 0$$

ce qui implique, compte tenu de (6.24), que l'on a dans $\Omega_1(t)$

$$\int_{\Omega_1(t)} \nabla \cdot u \, dx = 0 \quad (\text{c'est à dire } \frac{d}{dt} |\Omega_1(t)| = 0)$$

bien que $\forall x \in \Omega_1(t) : \nabla \cdot u \neq 0$. Supposons de plus que le fluide 1 est tel que

$$\forall (T, P) : \beta_1(T, P) > 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \beta_1}{\partial T}(T, P) = 0. \quad (6.34)$$

Alors, l'équation de pression (6.23) peut être approchée par

$$P'(t) = \frac{\int_{\Sigma(t)} \beta_1(T, P) \lambda \nabla T \cdot n_{1 \rightarrow 2} d\Sigma}{\int_{\Omega_1(t)} \frac{dx}{\Gamma_1(Y_1, T, P)}} \quad (6.35)$$

ce qui implique que :

- i) cas de bulles froides de fluide 1 (donc $\nabla T \cdot n_{1 \rightarrow 2}|_{\Sigma(t)} > 0$) : la pression $P(t)$ augmente ;
- ii) cas de bulles chaudes de fluide 1 (donc $\nabla T \cdot n_{1 \rightarrow 2}|_{\Sigma(t)} < 0$) : la pression $P(t)$ diminue.
- iii) la pression thermodynamique $P(t)$ dépend (directement) uniquement des caractéristiques physiques du fluide 1 ;
- iv) plus le volume d'une bulle de fluide 1 est important, plus celle-ci impose la pression $P(t)$.

La condition (6.33)(a) restreint les résultats *formels* présentés dans ce lemme au cas de deux fluides dont les conductivités thermiques sont du même ordre de grandeur⁶. Les conditions (6.33)(b,c) sont en particulier satisfaites lorsque les fluides 1 et 2 sont respectivement du gaz parfait et de l'eau liquide⁷. La condition (6.34) est de son côté satisfaite lorsque le fluide 1 est un gaz parfait. Notons que le point *iv* est numériquement observé p. 645 dans [59] où il est écrit : “*It then appears that in the closed system considered here, the bigger bubble imposes its pressure in the liquid*”. Soulignons enfin que, sauf à imposer exactement $\lambda_2 \beta_2 = 0$ et $\Gamma_2 = +\infty$ au lieu de (6.33), la relation (6.35) est obtenue en supposant que les domaines $\Omega_k(t)$ sont tels que $\mathcal{O}(|\Omega_1(t)|) = \mathcal{O}(|\Omega_2(t)|)$, relation qui est une conséquence de l'existence d'une longueur caractéristique L_* commune à chaque domaine $\Omega_k(t)$ (voir l'Hypothèse 6.1.2). Autrement dit, lorsque le domaine $\Omega_1(t)$ est petit au sens où $\mathcal{O}(|\Omega_1(t)|) \ll \mathcal{O}(|\Omega_2(t)|)$, le Lemme 6.2.4 ne sera pas nécessairement valide.

⁶Lorsque la conductivité thermique du fluide 2 est très importante (comme dans le cas du sodium liquide) au sens où $\mathcal{O}(\beta_1 \lambda_1) = \mathcal{O}(\beta_2 \lambda_2)$ bien que $\mathcal{O}(\beta_1) \gg \mathcal{O}(\beta_2)$, le Lemme 6.2.4 n'est pas valable.

⁷Lorsque le fluide 1 est un gaz parfait, on a $\Gamma_1 = \gamma_1$ où $\mathcal{O}(\gamma_1) = 1$. Par contre, lorsque le fluide 2 est de l'eau liquide à pression et température ambiante, on a $\mathcal{O}(\rho_2) = 10^3 \, m \cdot s^{-1}$, $\mathcal{O}(P) = 10^5 \, Pa$ et $\mathcal{O}(c_2) = 1480 \, m \cdot s^{-1}$ soit donc $\mathcal{O}(\Gamma_2) = 2,2 \cdot 10^4$.

6.3 Importance de l'existence d'une entropie associée au système DLMN

Lorsque les deux fluides sont des gaz parfaits d'équations d'état $P = \rho_k R_k T$ ($R_k = k/m_k$ où k et m_k sont respectivement la constante de Boltzmann⁸ et la masse atomique) et de constantes adiabatiques $\gamma_k > 1$ ($k \in \{1, 2\}$), le système DLMN (6.20)-(6.23) s'écrit en variables lagrangiennes

$$\begin{cases} \partial_t Y_1 = 0, & (a) \\ C_p(m) \partial_t T = R(m) T \frac{P'(t)}{P(t)} + \partial_m [\eta(m, T, P) \partial_m T] & (b) \end{cases} \quad (6.36)$$

couplé à

$$\begin{cases} \partial_m u = \bar{G}(t, m), & (a) \\ \partial_t u = -\partial_m \Pi & (b) \end{cases} \quad (6.37)$$

sachant que

$$\bar{G}(t, m) = \frac{G}{\rho} = -\frac{R(m)T(t, m)}{\gamma(m)} \cdot \frac{P'(t)}{P(t)^2} + \frac{\gamma(m) - 1}{\gamma(m)P(t)} \partial_m [\eta(m, T, P) \partial_m T] \quad (6.38)$$

et que

$$P'(t) = \beta_2^1 \cdot P(t) \frac{[\eta \partial_m T]_{\Sigma^b} - [\eta \partial_m T]_{\Sigma^a}}{\frac{R_1}{\gamma_1} \int_{\Sigma^a} T(t, m) dm + \frac{R_2}{\gamma_2} \left(\int_{-L}^{\Sigma^a} T(t, m) dm + \int_{\Sigma^b}^L T(t, m) dm \right)}. \quad (6.39)$$

Dans (6.36), on a négligé la gravité, m est la variable de masse définie avec $dm = \rho^{-1} dx$, $\eta := \rho \lambda$ est la conductivité thermique dans l'espace lagrangien et $\beta_2^1 := \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1} - \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_2} = \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1 \gamma_2}$ est le saut de β au travers de l'interface $\Sigma(t)$. Par ailleurs, R et γ sont définis avec (6.13).

Nous avons proposé dans [Dellacherie, 2005] un schéma numérique lagrangien 1D *entropique sous constante CFL classique* résolvant le système DLMN (6.36)-(6.39) lorsque $\gamma_k > 1$. Les figures 1, 2 et 3 représentent la convergence de la densité, de la température et de la pression vers l'état d'équilibre⁹ $(\rho^\infty, T^\infty, P^\infty)$ défini au Lemme 6.2.2 pour une condition initiale vérifiant $\partial_m T(t=0) \neq 0$.

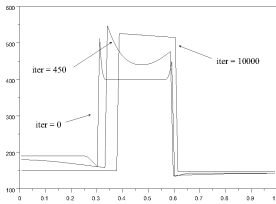


Figure 1
Densité

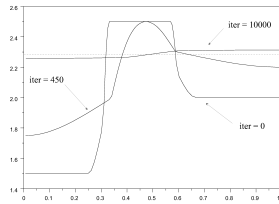


Figure 2
Température

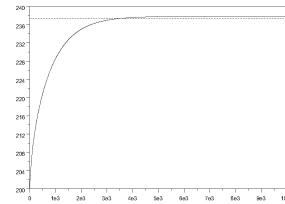


Figure 3
Pression

La Figure 4 montre le comportement *chaotique* du schéma numérique pour deux conditions initiales très proches lorsque $\gamma_2 = -3$, γ_1 restant strictement supérieur à 1. En choisissant $\gamma_2 < -1$, on conserve le caractère strictement positif de la capacité calorifique C_p mais la vitesse du son c_2 est imaginaire pure. Dans cette situation, l'entropie s n'est pas convexe et on perd bien sûr le caractère entropique du schéma. La Figure 4 semble indiquer que *le système DLMN est alors mal posé*. Notons que pour ce cas-test, on

⁸ $k = 1,380 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$.

⁹Lorsque les deux fluides sont des gaz parfaits, on peut calculer explicitement l'équilibre $(\rho^\infty, T^\infty, P^\infty)$ en fonction de la condition initiale en utilisant les trois relations de conservation (6.25). La pression d'équilibre P^∞ est d'ailleurs représentée sur la Figure 3 en pointillés.

vérifie numériquement que la pression $P(t)$ et la température $T(t, m)$ sont strictement positives bien que $\gamma_2 = -3$. Il est important de souligner que le schéma numérique reste défini lorsque la vitesse du son c_2 est imaginaire pure, le système DLMN ne faisant intervenir que le carré de la vitesse du son *via* la fonction thermodynamique Γ définie avec (6.11) (pour un gaz parfait, on a $\Gamma = \gamma$).

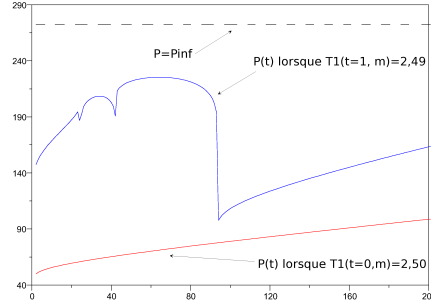


Figure 4

*Pression lorsque l'entropie n'est pas convexe
avec deux conditions initiales très proches dans la bulle $\Omega_1(t=0)$*

6.4 Résolution numérique 2D du système DLMN dans le cas potentiel

Cette section présente les travaux publiés dans [Dellacherie, 2007].

6.4.1 Le système DLMN potentiel

En appliquant la décomposition de Hodge

$$\begin{cases} u = w + \nabla \Phi & \text{où } \nabla \cdot w = 0, \\ \nabla \Phi \cdot n|_{\partial\Omega} = u \cdot n|_{\partial\Omega}, \\ w \cdot n|_{\partial\Omega} = 0, \end{cases} \quad (6.40)$$

on constate aisément que le système (6.21) couplé à la condition aux limites (6.15)(a) est équivalent au système

$$\begin{cases} \Delta \Phi = G, & \text{(a)} \\ \nabla \Phi \cdot n|_{\partial\Omega} = 0 & \text{(b)} \end{cases} \quad (6.41)$$

couplé au système de Navier-Stokes diphasique incompressible *non-homogène*

$$\begin{cases} \nabla \cdot w = 0, & \text{(a)} \\ \rho D_t w = -\nabla \Pi + \nabla \cdot \sigma - \rho g - \rho D_t \nabla \Phi, & \text{(b)} \\ w \cdot n|_{\partial\Omega} = 0, & \text{(c)} \\ w \cdot \tau|_{\partial\Omega} = -\nabla \Phi \cdot \tau|_{\partial\Omega} & \text{(d)} \end{cases} \quad (6.42)$$

où τ est le vecteur unitaire tangentiel à $\partial\Omega$ et où

$$D_t := \partial_t + (w + \nabla \Phi) \cdot \nabla.$$

On se place maintenant sous l'hypothèse :

Hypothèse 6.4.1. *Le champ de vitesse $u(t, x)$ est potentiel.*

Sous cette hypothèse, le système DLMN (6.20)-(6.23) s'écrit

$$\begin{cases} D_t Y_1 = 0, & (a) \\ \rho C_p D_t T = \alpha T P'(t) + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) & (b) \end{cases} \quad (6.43)$$

couplé à l'équation de Poisson

$$\begin{cases} \Delta \Phi = G, & (a) \\ \nabla \Phi \cdot n|_{\partial\Omega} = 0 & (b) \end{cases} \quad (6.44)$$

avec maintenant

$$D_t := \partial_t + \nabla \Phi \cdot \nabla$$

auquel on adjoint (6.22) et (6.23). On utilise l'acronyme DLMN-P pour faire référence à l'approximation potentielle (6.43)(6.44) du système DLMN. Soulignons que l'Hypothèse 6.4.1 n'est pas physique *a priori*. Elle permet par contre de découpler la partie dynamique (6.42) de la partie thermique (6.43)(6.44) du système DLMN (6.20)-(6.23), ce qui permettra de focaliser l'étude numérique sur la prise en compte de forts gradients de température.

6.4.2 Le schéma numérique 2D

Nous avons proposé un schéma *lagrangien* 1D entropique dans le cas de deux gaz parfaits pour résoudre le système DLMN (6.36)-(6.39) (voir le §6.3). Cependant, ce schéma lagrangien 1D ne permet pas d'étudier les cas 2D et 3D. Nous avons alors proposé dans [Dellacherie, 2007] un schéma numérique 2D *eulérien* sur maillage cartésien¹⁰ adapté à la résolution du système DLMN-P (6.43)(6.44). Ce schéma numérique est entropique sous certaines hypothèses.

Transport de l'interface $\Sigma(t)$

Le schéma numérique proposé transporte l'interface $\Sigma(t)$ *via* la résolution de l'équation de transport (6.43)(a) avec le schéma anti-dissipatif de Després & Lagoutière [25]. Ce schéma numérique est parfaitement adapté au transport sur maillage cartésien d'une fonction discontinue de type Heaviside telle que $Y_1(t, x)$. En effet, la diffusion numérique de ce schéma ne régularise la fonction $Y_1(t, x)$ que sur quelques mailles¹¹, et ce, quel que soit le temps d'intégration (la diffusion numérique est donc uniformément contrôlée en temps).

Traitement de la zone de mélange artificiel

La zone où $Y_1(t, x)$ est régularisée est appelée *zone de mélange artificiel*. Pour traiter cette zone de mélange, on suppose que les équations d'état du mélange sont définies avec

$$\begin{cases} \tau(Y, T, P) = Y_1 \tau_1(T, P) + (1 - Y_1) \tau_2(T, P), & (a) \\ \varepsilon(Y, T, P) = Y_1 \varepsilon_1(T, P) + (1 - Y_1) \varepsilon_2(T, P) & (b) \end{cases} \quad (6.45)$$

($\tau := 1/\rho$). Les paramètres thermodynamiques $\{C_p, \alpha, \beta, \Gamma, c\}$ dans la zone de mélange sont à nouveau définis avec (6.8)-(6.12). Soulignons que lorsque $Y_1 \in]0, 1[$, définir ainsi $\{C_p, \alpha, \beta, \Gamma, c, \rho\}$ ne revient pas à définir ces fonctions avec (6.13). Par contre, on définit la viscosité dynamique $\mu(Y_1, T, P)$ et la conductivité thermique $\lambda(Y, T, P)$ avec (6.13)¹². Le système DLMN est donc fermé dans la zone de mélange artificielle avec les hypothèses de fluides non-miscibles et d'équilibre isobare-isotherme (4.8)(4.11) étudiées au

¹⁰L'extension au 3D est immédiate.

¹¹Typiquement, sur environ 2 ou 3 mailles dans chaque direction de l'espace.

¹²On pourrait définir autrement ces deux coefficients en remplaçant par exemple (6.13) avec $\frac{1}{\xi(Y, T, P)} = \frac{Y_1}{\xi_1(T, P)} + \frac{(1-Y_1)}{\xi_2(T, P)}$.

Chapitre 4. En appliquant les arguments du §1.6 du Chapitre 1 dans [Del10], on montre que le système DLMN ainsi défini dans la zone de mélange admet une entropie thermodynamique. La vitesse du son $c(Y, T, P)$ définie avec (6.12) est donc réelle, ce qui permet d'être confiant quant au caractère bien posé du système DLMN dans la zone de mélange artificiel (voir le §6.3 et la Figure 4 pour un exemple de mauvais comportement du système DLMN lorsque la vitesse du son c est imaginaire pure¹³).

Correction entropique

Lorsque les deux fluides sont des gaz parfaits de même constante adiabatique γ , on obtient $P'(t) = 0$. On montre alors que :

Lemme 6.4.1. *Lorsque les deux fluides sont des gaz parfaits de même constante adiabatique γ , le système DLMN-P (6.43)(6.44) muni de la condition aux limites (6.15)(b) s'écrit*

$$\begin{cases} \partial_t Y + \kappa \lambda(Y, T, P^0) \nabla T \cdot \nabla Y = 0, & (a) \\ \partial_t T + \kappa \lambda(Y, T, P^0) (\nabla T)^2 = \kappa T \nabla \cdot [\lambda(Y, T, P^0) \nabla T], & (b) \\ \nabla T(t, x) \cdot n(x)|_{\partial\Omega} = 0 & (c) \end{cases} \quad (6.46)$$

où κ est une constante strictement positive et où P^0 est la pression initiale. D'autre part, le système (6.46) est équivalent au système

$$\begin{cases} \partial_t Y + \kappa \lambda(Y, \mu^{-1}, P^0) \nabla \mu^{-1} \cdot \nabla Y = 0, & (a) \\ \partial_t \mu = \kappa \nabla \cdot [\lambda(Y, \mu^{-1}, P^0) \nabla \log \mu], & (b) \\ \nabla \mu(t, x) \cdot n(x)|_{\partial\Omega} = 0 & (c) \end{cases} \quad (6.47)$$

où $\mu = \frac{1}{T}$.

Dans [DL05b], nous étudions l'existence de solutions auto-semblables 1D d'équations du type (6.47). Il est aisé de construire sur maillage cartésien un schéma numérique (semi-discret en temps) entropique pour l'équation (6.47)(b) et qui préserve la stricte positivité de $\mu(t, x)$. En rendant équivalentes les discrétisations de (6.47)(b) et (6.46)(b), on obtient alors un schéma numérique (semi-discret en temps) entropique pour l'équation (6.46)(b) et qui préserve la stricte positivité de $\mu(t, x)$ sur maillage cartésien. En 1D, on montre que le flux $\lambda \partial_x T$ dans le membre de droite de (6.46)(b) (et donc dans celui de (6.43)(b)) doit ainsi être discrétisé avec

$$\widehat{\mathcal{F}}_{\mathcal{D}_T}^x(Y, T)_{i+1/2}^i = \zeta(T)_{i+1/2}^i \cdot \mathcal{F}_{\mathcal{D}_T}^x(Y, T)_{i+1/2} \quad (6.48)$$

où $\zeta(T)$ est défini avec

$$\zeta(T)_{i+1/2}^i = \frac{T_{i+1} - T_i}{2T_i} + \frac{1}{\mu_{i+1/2} T_{i+1}}, \quad (6.49)$$

le terme $\kappa \lambda(Y, T, P^0) (\nabla T)^2$ dans (6.46)(b) étant de son côté discrétisé avec le schéma centré

$$\mathcal{T}_T^x(u, T)_i = \frac{1}{2} \left[u_{i+1/2} \cdot \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x} + u_{i-1/2} \cdot \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta x} \right] \quad (6.50)$$

où $u_{i+1/2} = \kappa \lambda_{i+1/2} \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x}$. De façon plus générale, (6.50) définit la discrétisation du terme $u \cdot \nabla T$ dans (6.43)(b). Dans (6.48), $\mathcal{F}_{\mathcal{D}_T}^x(Y, T)_{i+1/2}$ est la discrétisation centrée standard du flux $\lambda \partial_x T$ à l'interface $i + 1/2$, $\mu_{i+1/2}$ est une moyenne (arithmétique par exemple) de μ_i et μ_{i+1} . Le coefficient $\zeta(T)_{i+1/2}^i$ défini avec (6.49) est appelé *correction entropique* dans la maille i à l'interface $i + 1/2$. Remarquons que lorsque $T_i = T_{i+1}$, on a $\zeta(T)_{i+1/2}^i = 1$ (puisque l'on a alors $\mu_{i+1/2} = T_{i+1}$). Des résultats numériques montrent que ce schéma permet de préserver la positivité de la température $T(t, x)$, y compris lorsque les deux fluides sont des gaz parfaits de constantes adiabatiques γ_k différentes.

¹³Soulignons qu'au §6.3, le schéma numérique 1D est lagrangien. Il n'y a donc pas de zone de mélange artificiel. C'est pourquoi le paragraphe *Traitement de la zone de mélange artificiel* n'a pas été introduit au §6.3.

6.4.3 Résultats numériques 2D

On présente dans cette sous-section des résultats numériques obtenus avec le schéma numérique décrit succinctement au §6.4.2. La Figure 5 représente le domaine initial $\Omega_1(t = 0)$ qui est constitué de six bulles dont la température est initialement inférieure à la température dans $\Omega_2(t = 0)$ et proche de zéro au centre de deux de ces six bulles (le rapport entre la température dans ces deux bulles et la température dans $\Omega_2(t = 0)$ est de l'ordre de 10^{-2}) : il s'agit donc ici de six “bulles froides”, dont deux sont “très froides”, et qui vont se dilater d'après le point i du Corollaire 6.2.1. La Figure 6 représente ces six bulles au temps $t = 100$. La Figure 7 représente la densité aux temps $t = 12, 5$ s et $t = 100$ s. La Figure 8 représente l'erreur relative en masse¹⁴ en échelle log au temps $t = 50$ s pour les maillages 50×50 , 100×100 et 200×200 . Ces résultats numériques montrent la robustesse et la précision de l'algorithme proposé. Soulignons que ce cas-test ne peut être réalisé lorsque la correction entropique $\zeta(T)$ est définie avec $\zeta(T) := 1$ au lieu de (6.49), le schéma numérique ne préservant pas la positivité de la température $T(t, x)$ lorsque $\zeta(T) := 1$ dans les deux bulles “très froides” (lorsque $\zeta(T) := 1$, le schéma discrétisant $\nabla \cdot (\lambda \nabla T)$ est le schéma classique).

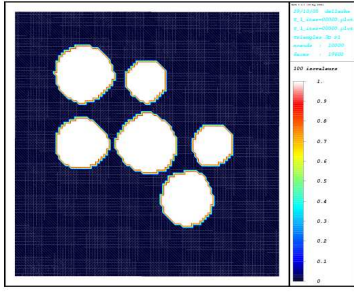


Figure 5
Domaine $\Omega_1(t = 0)$

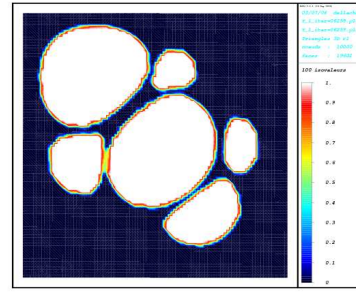


Figure 6
Domaine $\Omega_1(t = 100)$

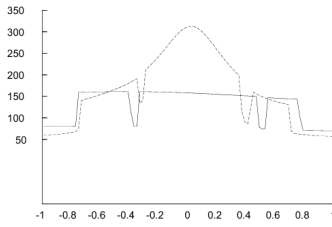


Figure 7
Densité aux temps
 $t = 12, 5$ s et $t = 100$ s

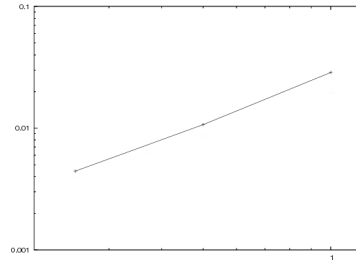


Figure 8
Erreur relative en masse à $t = 50$ s
pour les maillages 50×50 , 100×100 et 200×200

¹⁴Comme on résout l'équation de continuité (6.5)(b) sous la forme *non-conservative* (6.21)(a), le schéma n'est pas conservatif en masse (on peut tout de même être globalement conservatif en masse en estimant la pression $P(t)$ via la contrainte de conservation de la masse $\int_{\Omega} \rho(Y, T, P) dx = \int_{\Omega} \rho(Y^0, T^0, P^0) dx$; mais, dans [Dellacherie, 2007], on calcule $P(t)$ en résolvant l'EDO (6.23)). La Figure 8 montre que l'erreur est cependant faible : elle est de l'ordre de 1% sur un maillage de 100×100 . On peut faire une remarque similaire concernant la conservation de l'énergie.

6.4.4 Lien avec le schéma entropique appliqué à l'opérateur de Fokker-Planck

Le schéma numérique entropique pour l'équation (6.46)(b) est obtenu en rendant équivalent au niveau discret (6.46)(b) et (6.47)(b). Cette approche s'inspire de celle proposée dans [Dellacherie *et al.*, 1998, Dellacherie et Buet, 2010] et résumée au Chapitre 1. En effet, nous avons construit le schéma entropique dans [Dellacherie *et al.*, 1998, Dellacherie et Buet, 2010] pour l'équation de Fokker-Planck (1.4) ou (1.29) de telle sorte que les formulations de Fokker-Planck (1.5) et de Landau logarithmique (1.9) ou non-logarithmique (1.38) soient équivalentes au niveau discret, l'obtention d'un schéma numérique entropique à partir de la formulation de Landau (1.9) ou (1.38) étant aisée.

Chapitre 7

Un modèle abstrait de vibration de bulle et simulations AMR

CE chapitre présente les résultats établis dans [DL05a] et [PMD⁺09]. Dans ces travaux, nous proposons, étudions et résolvons sur une structure dynamique de maillages cartésiens de type AMR¹ un modèle non-linéaire couplant une équation hyperbolique à une équation elliptique. Ce modèle permet de modéliser des déformations rapides et importantes d'une interface $\Sigma(t)$. C'est pourquoi nous qualifions ce modèle de *modèle abstrait de vibration de bulle* ou, en anglais, de *abstract bubble vibration model*; nous utiliserons donc l'acronyme ABV pour faire référence à ce modèle.

Le modèle ABV est intéressant. En effet, d'une part, il possède une structure mathématique proche de celle du système DLMN-P (6.43)(6.44) présenté au Chapitre 6. D'autre part, il est possible d'établir une formule donnant explicitement l'évolution du volume du domaine $\Omega_1(t)$ intérieur à l'interface $\Sigma(t)$, ce qui fait de ce modèle un bon outil pour tester la robustesse et la précision de tout algorithme de capture d'interface.

7.1 Modèle abstrait de vibration de bulle

Nous présentons dans cette section les résultats de la note [DL05a].

7.1.1 Le modèle ABV

Le modèle ABV est défini par le système

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial_t Y + \nabla \Phi \cdot \nabla Y = 0, & \text{(a)} \\ Y(t = 0, x) = Y^0(x), & \text{(b)} \\ \Delta \Phi = \psi(t) \cdot \mathcal{P}(Y), & \text{(c)} \\ \nabla \Phi \cdot n|_{\partial\Omega} = 0 & \text{(d)} \end{array} \right. \quad (7.1)$$

résolu sur le domaine borné Ω de frontière régulière $\partial\Omega$. La fonctionnelle $\mathcal{P}(Y)$ est définie par

$$\mathcal{P}(Y) = Y - \frac{\int_{\Omega} Y dx}{\int_{\Omega} dx}.$$

¹AMR est l'acronyme de *Adaptative Mesh Refinement*.

La fonction $\psi(t) \in \mathcal{C}([0, +\infty[))$ est une donnée dont la dimension physique est celle d'une fréquence. Le modèle ABV est une version simplifiée du système DLMN-P (6.43)(6.44).

7.1.2 Calcul explicite du volume des bulles

On s'intéresse ici aux solutions faibles du modèle ABV (7.1) du type

$$Y(t, x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \Omega_1(t), \\ 0 & \text{si } x \in \Omega_2(t) \end{cases} \quad (7.2)$$

obtenues lorsque la condition initiale est du type

$$Y(t=0, x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \Omega_1(t=0), \\ 0 & \text{si } x \in \Omega_2(t=0). \end{cases} \quad (7.3)$$

À l'instar du Chapitre 6, les bulles d'interface $\Sigma(t)$ correspondent au domaine $\Omega_1(t)$ et on a

$$\Omega_1(t) \cup \Omega_2(t) \cup \Sigma(t) = \Omega \quad \text{où} \quad \Sigma(t) = \partial\Omega_1(t).$$

On suppose ici l'existence d'une telle solution².

Le modèle ABV est intéressant car, bien qu'il soit non-linéaire, il est possible de calculer explicitement le volume des bulles $\Omega_1(t)$ en fonction de la condition initiale (7.3) et de la donnée $\psi(t)$:

Lemme 7.1.1. *Supposons qu'il existe $Y(t, x)$ du type (7.2), solution faible du système (7.1)(7.3) où $\Omega_1(t)$ est un ouvert régulier inclus dans Ω . On définit les volumes $|\Omega| := \int_{\Omega} dx$ et $|\Omega_1(t)| := \int_{\Omega_1(t)} dx$.*

Alors, lorsque le signal $\psi(t)$ est dans $\mathcal{C}([0, +\infty[)$, le volume des bulles $\Omega_1(t)$ est donné par

$$|\Omega_1(t)| = |\Omega| \cdot \frac{|\Omega_1(t=0)| \exp\left(\int_0^t \psi(\tau) d\tau\right)}{(|\Omega| - |\Omega_1(t=0)|) + |\Omega_1(t=0)| \exp\left(\int_0^t \psi(\tau) d\tau\right)}. \quad (7.4)$$

Le Lemme 7.1.1 est intéressant du point de vue algorithmique. En effet, en comparant (7.4) avec l'approximation numérique

$$|\Omega_1(t)| = \sum_{i,j} Y_{i,j} \Delta x_1 \Delta x_2, \quad (7.5)$$

on peut tester la *précision* et la *robustesse* de tout algorithme numérique de capture d'interface en choisissant par exemple des fonctions $\psi(t)$ oscillantes à haute fréquence et d'amplitude importante³. Nous validerons ainsi le transport de l'interface $\Sigma(t)$ au §7.2 via la résolution de (7.1)(a) avec le schéma anti-dissipatif de Després & Lagoutière [25], la fonction $\psi(t)$ étant choisie de telle sorte que la déformation de la bulle $\Omega_1(t)$ s'apparente à un phénomène de résonance.

7.1.3 Analyse théorique

On s'intéresse maintenant aux solutions régulières du modèle ABV. En appliquant les techniques développées par Embid [29, 30], on montre le résultat suivant :

Théorème 7.1.1. *On suppose Y^0 élément de l'espace de Sobolev $H^s(\Omega)$ où s est un entier strictement supérieur à s_0 avec $s_0 = E(d/2) + 1$, l'entier $E(d/2)$ correspondant à la partie entière de $d/2$. Alors, il existe $\mathcal{T} > 0$ dépendant de Y^0 tel que le système (7.1) admette une unique solution classique.*

²En 1D, cette solution faible se construit aisément.

³La formule (7.5) est écrite en 2D, i et j étant les indices du maillage structuré cartésien, Δx_k étant le pas du maillage en espace dans la direction x_k .

Soulignons que ce résultat est minimal. En effet, d'une part c'est un résultat d'existence et d'unicité en temps petit. D'autre part, on ne peut déduire du Théorème 7.1.1 l'existence d'une solution faible du type (7.2) lorsque la condition initiale est du type (7.3)⁴. Or, c'est ce type de solution qui nous intéresse et que l'on va numériquement exhiber aux §7.2 et §7.3.

7.2 Résolution numérique sur maillage cartésien fixe

Les résultats numériques présentés dans cette section ont été publiés dans [Dellacherie, 2007]. On s'intéresse ici à la simulation numérique de solutions faibles de type bulle (7.2) du modèle ABV (7.1). L'algorithme de capture de l'interface $\Sigma(t)$ des bulles $\Omega_1(t)$ est basé sur la résolution de l'équation de transport (7.1)(a) avec le schéma anti-dissipatif de Després & Lagoutière [25], la fonction $\psi(t)$ étant choisie de telle sorte que la déformation de la bulle $\Omega_1(t)$ s'apparente à un phénomène de résonance. La Figure 1 (obtenue sur un maillage cartésien de 100×100) montre que le schéma anti-dissipatif est précis et robuste.

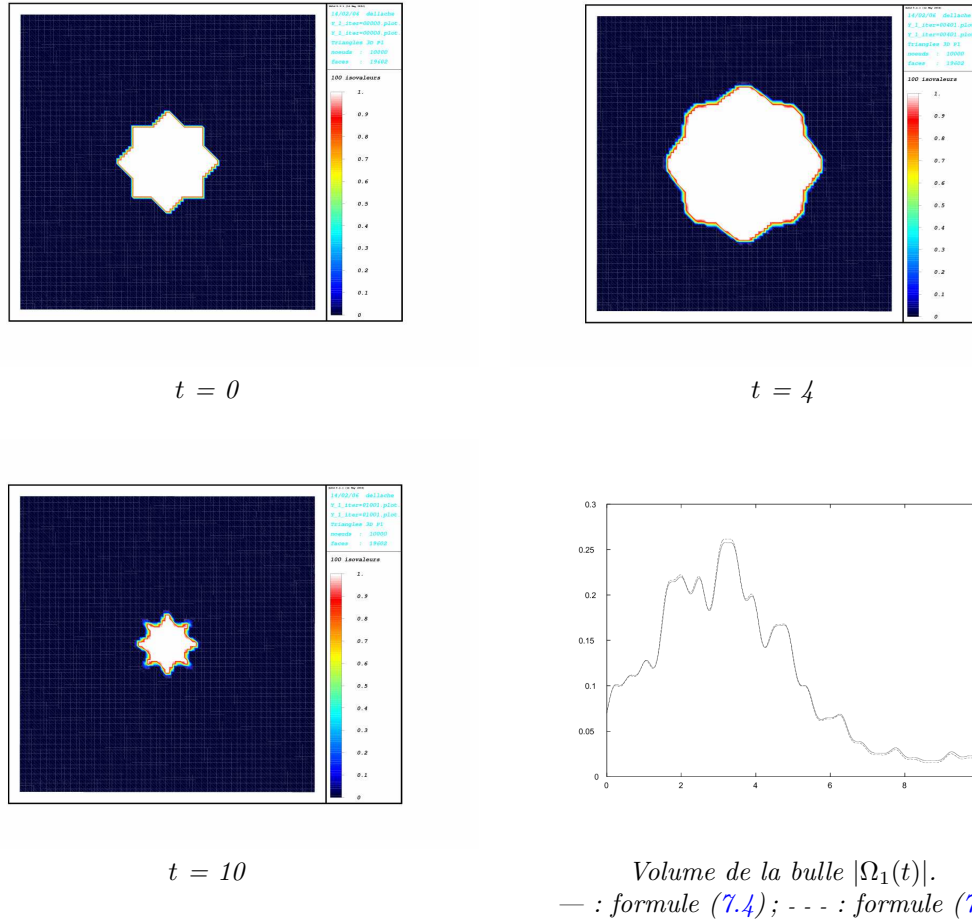


Figure 1
Modèle ABV sur maillage cartésien fixe.
Pseudo résonance

⁴Le temps d'existence $\mathcal{T}$ obtenu au Théorème 7.1.1 tend vers zéro lorsque la condition initiale Y^0 est de moins en moins régulière.

7.3 Résolution numérique sur maillage cartésien avec AMR

Nous présentons dans cette section les résultats publiés dans [PMD⁺09]. On s'intéresse à nouveau à la simulation numérique de solutions faibles de type bulle (7.2) du modèle ABV (7.1), l'interface $\Sigma(t)$ des bulles $\Omega_1(t)$ étant également capturée avec le schéma anti-dissipatif de Després & Lagoutière [25]. Mais, pour améliorer la précision des résultats numériques obtenus avec le schéma numérique utilisé au §7.2 pour un coût du calcul donné ou pour diminuer ce coût du calcul pour une précision donnée, nous couplons à ce schéma numérique un algorithme de raffinement automatique de maillage cartésien de type AMR. Si le domaine d'application concerne ici uniquement le modèle ABV, le but de l'algorithme proposé est de construire un algorithme AMR pour résoudre le système DLMN (6.20)-(6.23)⁵.

Ce travail a été réalisé dans le cadre d'une collaboration CEA-ONERA qui nous a permis de profiter d'outils développés par l'ONERA dans le domaine de l'AMR. La mise en œuvre informatique est à mettre à l'actif d'A. Mekkas.

7.3.1 Pourquoi un algorithme AMR ?

Lorsque le pas en espace du maillage est trop petit par rapport aux échelles de grandeur des bulles, il peut apparaître des phénomènes de fragmentation ou de coalescence artificielle. Les figures 2-3 montrent l'apparition de ce phénomène de fragmentation artificielle pour les cas-tests 2D et 3D de Kothe & Rider [88]. Ce cas-test consiste à déformer une interface $\Sigma(t)$ initialement circulaire (cas 2D) ou sphérique (cas 3D) en imposant un champ de vitesse $u(t, x)$ égal à $\nabla \times \Psi(t, x)$ où $\Psi(t, x)$ est une donnée périodique en temps. La déformation de $\Sigma(t)$ est donc linéaire et réversible. On doit alors retrouver la condition initiale au temps $t = t_5$ (t_5 est égal à $\mathcal{T}/2$ où $\mathcal{T}$ est la période de $\Psi(t, x)$). Le cas-test 2D (cf. Figure 2) est obtenu sur un maillage cartésien de 100×100 ; le cas-test 3D (cf. Figure 3) est obtenu sur un maillage cartésien de $101 \times 101 \times 101$. On notera que les figures 2-3 montrent néanmoins la grande robustesse du schéma anti-dissipatif de Després & Lagoutière : en effet, la structure au temps $t = t_5$ est proche d'une structure connexe bien qu'aux temps $t = t_2$ et $t = t_3$, la perte de connexité soit importante.

Pour supprimer la fragmentation artificielle (ou la coalescence artificielle dont un exemple est donné plus loin au §7.3.4 sur la Figure 7), on peut augmenter le nombre de mailles c'est à dire diminuer le pas en espace du maillage sur l'ensemble du domaine Ω . Dans ce cas, le coût en temps de calcul, en place mémoire et en stockage du calcul augmente. Sachant qu'il n'est peut-être pas utile de mailler finement l'ensemble du domaine Ω , on peut aussi tenter de ne mailler finement qu'une partie du domaine Ω *via* l'utilisation d'un critère *ad hoc* (donné par exemple par la physique), le reste du domaine Ω étant maillé plus ou moins grossièrement. Un algorithme de type AMR – *pour lequel le maillage évolue dynamiquement* – entre dans ce cadre là. Nous nous proposons donc de coupler ce type d'algorithme à la résolution numérique du modèle ABV (7.1) pour lequel l'interface $\Sigma(t)$ des bulles est transportée *via* le schéma anti-dissipatif de Després & Lagoutière. Après avoir rapidement introduit au §7.3.2 les deux classes possibles d'algorithme de type AMR sur maillage cartésien, nous montrerons au §7.3.3 les résultats obtenus dans le cas du transport linéaire. Puis, nous montrerons au §7.3.4 les résultats obtenus en 2D dans le cas du modèle ABV (7.1).

7.3.2 Algorithme AMR sur maillage cartésien

Le rôle d'un algorithme AMR est de créer et de gérer une structure hiérarchisée de groupes de mailles emboîtés les uns dans les autres. Cette structure est *hiérarchisée* au sens où l'ensemble de ces groupes de mailles est classé selon des niveaux de raffinement en espace. Plus précisément, en fonction d'un critère de raffinement *ad hoc*, une partie d'un groupe de mailles de niveau de raffinement donné sera éventuellement raffinée pour ainsi donner naissance à un nouveau groupe de mailles de niveau de raffinement plus élevé. Ce critère de raffinement peut être physique (c'est à dire basé sur des raisonnements qualitatifs) ou mathématique (au sens où des estimations d'erreur *a posteriori* sont disponibles pour le schéma numérique considéré). Il existe deux grandes classes d'algorithme AMR sur maillage cartésien :

⁵On rappelle que le modèle ABV (7.1) possède une structure mathématique proche de celle de l'approximation potentielle (6.43)(6.44) du système DLMN.

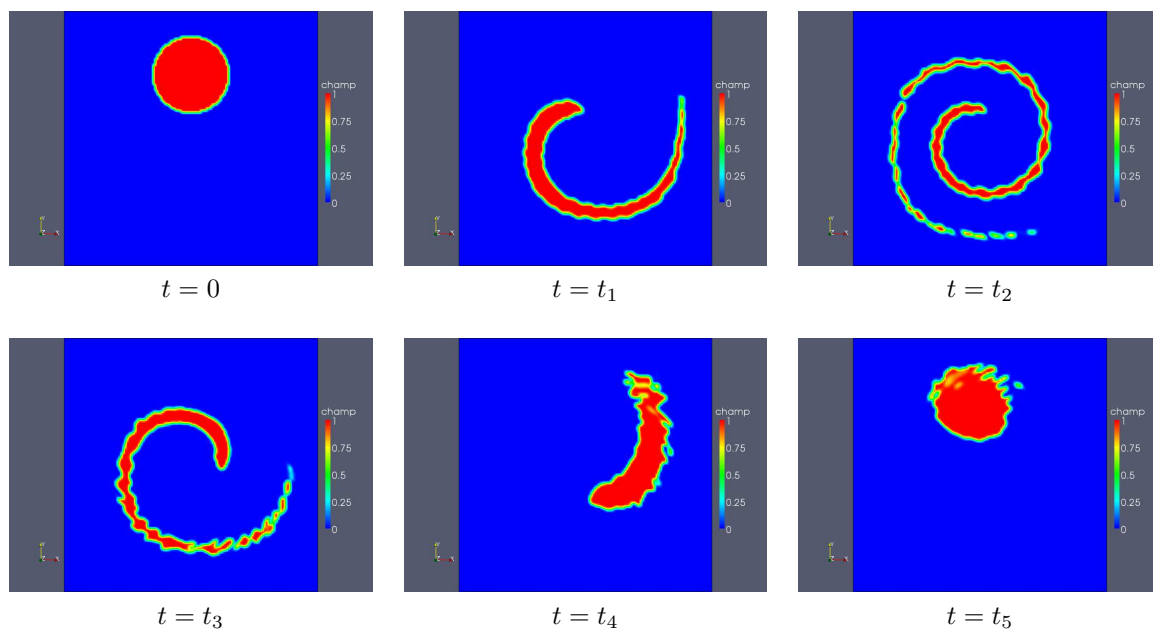


Figure 2
Cas-test de Kothe & Rider 2D sans AMR.
Apparition de la fragmentation artificielle

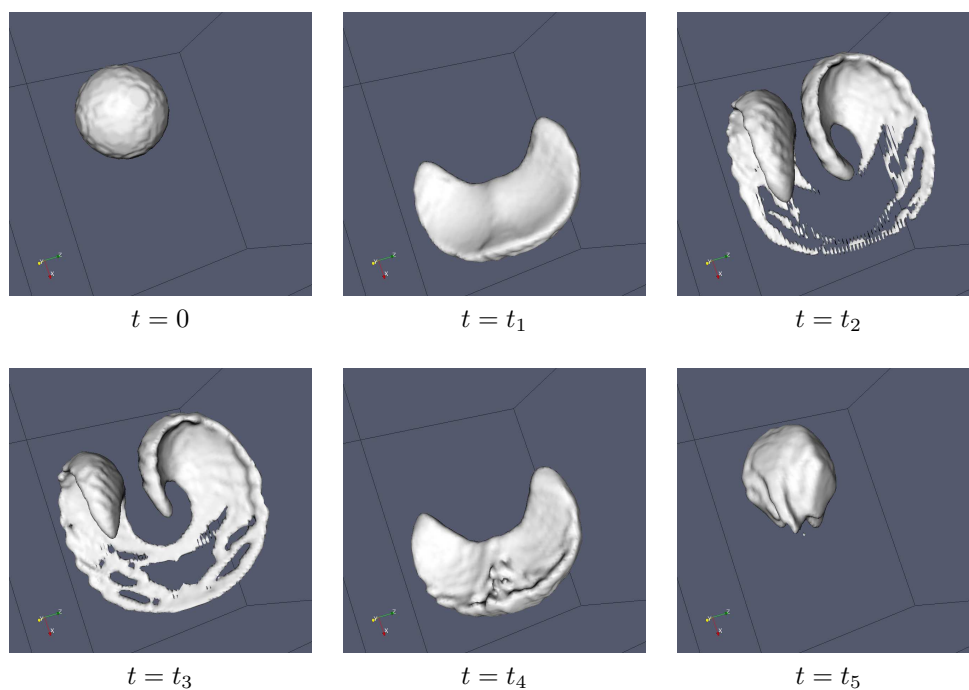


Figure 3
Cas-test de Kothe & Rider 3D sans AMR.
Apparition de la fragmentation artificielle

- l’algorithme AMR dont la structure de données est gérée *via* un *arbre*. Pour ce type d’algorithme AMR – dit de type *tree-based* –, chaque maille raffinée est issue d’une maille “mère” qui a donné “naissance” à, par exemple, quatre (ou huit) mailles en 2D (ou 3D). Dans ce cas, on parle de *quad-tree* (ou d’*oct-tree*). Cet algorithme est historiquement le premier algorithme de type AMR. La Figure 4 décrit une structure de données de type *tree-based* constituée de quatre niveaux de raffinement. On pourra par exemple consulter [78, 86] pour un exemple d’application de cet algorithme dans le cas du système de Navier-Stokes incompressible ;
- l’algorithme AMR dont la structure de données est gérée *via* des groupes de mailles s’apparentant localement, pour un niveau de raffinement donné, à des maillages cartésiens rectangulaires dit *patch*. Cet algorithme est dit de type *patch-based*. La Figure 4 décrit également une structure de données de type *patch-based* constituée de 2 niveaux de raffinement, chacun de ces niveaux étant ici constitués de 2 patches. Contrairement à l’algorithme AMR de type *tree-based*, cet algorithme ne raffine pas maille par maille mais raffine un groupe de mailles pour donner naissance à un ensemble de patches. L’algorithme de création des patches a été proposé par Berger & Rigoutsos [8]. On pourra consulter [76] pour une application de cet algorithme AMR dans le cas du système de Navier-Stokes incompressible.

L’algorithme AMR de type *tree-based* nous semblant plus délicat à gérer au niveau informatique qu’un algorithme de type *patch-based*, nous nous sommes orientés vers ce dernier. En effet, le maillage cartésien raffiné est structuré dans chacun des patches de l’algorithme AMR de type *patch-based* alors que ce n’est pas le cas pour l’algorithme de type *tree-based* dont le maillage raffiné est non-structuré (*cf.* Figure 4). En conséquence, si un algorithme AMR de type *tree-based* optimise sans doute beaucoup mieux le nombre de mailles raffinées qu’un algorithme AMR de type *patch-based* pour un critère de raffinement donné, il est sans doute techniquement plus simple de paralléliser un algorithme AMR de type *patch-based* puisque le regroupement des mailles raffinées en *patches* incite à traiter sur un processeur donné un ou plusieurs de ces patches⁶ ; par contre, le regroupement des mailles dans un algorithme de type *tree-based* en groupe de mailles à traiter sur un processeur donné reste à faire au niveau informatique⁷.

Les tests numériques présentés plus loin n’ont été réalisés qu’avec un seul niveau de raffinement. D’autre part, le critère de raffinement choisi utilise la norme du gradient de $Y(t, x)$ pour localiser les zones à raffiner : la zone raffinée se situe donc au niveau de l’interface $\Sigma(t)$ des bulles. Dans la suite, on appellera *maillage équivalent* le maillage sans AMR pour lequel le pas en espace correspond au pas du maillage le plus fin de la structure AMR.

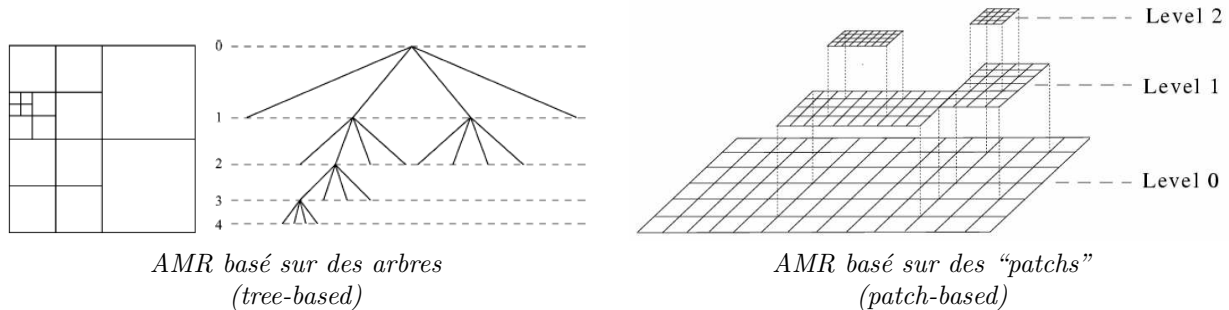


Figure 4
Structures AMR possibles

⁶Le problème de la répartition de la charge de calcul pour un algorithme de type *patch-based* est cependant posé.

⁷Le problème de la répartition de la charge de calcul pour un algorithme de type *tree-based* est géré en utilisant des outils issus de la théorie des graphes.

7.3.3 Résultats avec AMR cartésien dans le cas du transport linéaire

Les figures 5-6 représentent les résultats obtenus avec l'AMR pour le cas-test de Kothe & Rider décrit au §7.3.1. Le cas-test 2D (*cf.* Figure 5) est obtenu avec un coefficient de raffinement de 5 ; le cas-test 3D (*cf.* Figure 6) est obtenu avec un coefficient de raffinement de 10. Les patches apparaissent en noir sur ces deux figures. On constate que la fragmentation artificielle a totalement disparu et que la solution au temps $t = t_5$ est très proche de la condition initiale.

Le gain sur le temps de calcul, sur la mémoire RAM et sur le stockage du calcul apparaît de façon évidente sur le cas-test 3D (*cf.* Figure 6). En effet, puisque le coefficient de raffinement est de 10 et que le maillage sans AMR est de $101 \times 101 \times 101$, le maillage équivalent est de $1010 \times 1010 \times 1010$ soit un nombre de mailles de l'ordre de 1,03 milliard. Ainsi, le calcul 3D avec AMR a nécessité de l'ordre 10 jours de calcul sur un seul CPU, la mémoire RAM mobilisée étant de l'ordre de 8,6 Gigas et le stockage du calcul nécessitant de l'ordre de 25 Gigas. Sans AMR, avec un maillage de 1,03 milliard de mailles, le calcul aurait nécessité de l'ordre de 200 jours de calcul, 172 Gigas de RAM et 500 Gigas pour le stockage des résultats, soit un gain d'un facteur de l'ordre de 20.

Soulignons enfin une propriété remarquable du schéma anti-dissipatif de Després & Lagoutière couplé à l'AMR dans le cas du transport linéaire. Le schéma anti-dissipatif de Després & Lagoutière ne diffuse $Y(t, x)$ que sur environ 2 ou 3 mailles dans chaque direction de l'espace. Ainsi, lorsque les patches sont de taille suffisamment importante pour que la zone de diffusion de $Y(t, x)$ ne traverse jamais une frontière d'un patch non commune à un autre patch⁸, la solution obtenue avec AMR est *exactement* identique à celle obtenue sur le maillage équivalent. Cette propriété n'est valable que dans le cas du transport linéaire, et ne le sera pas dans le cas du modèle ABV (7.1) à cause de l'équation de Poisson (7.1)(c,d).

7.3.4 Résultats avec AMR cartésien dans le cas du modèle ABV

L'équation de Poisson (7.1)(c,d) est résolue avec la méthode LDC⁹ [5]. L'algorithme LDC est itératif. Il consiste à résoudre successivement l'équation de Poisson (7.1)(c,d) sur le maillage grossier, puis sur le maillage fin, puis sur le maillage grossier, Le couplage entre le maillage grossier et le maillage fin se fait de la façon suivante : la condition aux limites sur le maillage fin est déduite de la solution obtenue sur le maillage grossier à l'itération précédente ; le second membre $G(t, x)$ de l'équation de Poisson (7.1)(c,d) sur le maillage grossier est alors corrigé pour tenir compte de la solution obtenue sur le maillage fin, ce qui améliore la solution obtenue sur le maillage grossier à l'itération suivante. L'algorithme itératif est poursuivi jusqu'au niveau de convergence souhaité.

La Figure 7 représente la solution obtenue sans AMR sur un maillage de 100×100 . Les deux bulles se dilatent car $\psi(t) = 1$. La Figure 7 montre que les deux bulles tendent à coalescer au temps $t = t_2$. Cette coalescence est purement artificielle. Remarquons que ce phénomène de coalescence artificielle est également visible sur la Figure 6 du Chapitre 6. La Figure 8 représente la solution obtenue sur ce même maillage avec l'algorithme AMR et un coefficient de raffinement de 6. Le phénomène de coalescence artificielle a disparu sur la Figure 8 au temps $t = t_2$. La Figure 9 représente l'évolution du volume des deux bulles avec ou sans AMR évalué avec la formule exacte (7.4) ou avec l'approximation numérique (7.5). La Figure 9 montre le gain obtenu en précision grâce à l'AMR. Puisque le raffinement est de 6, le maillage équivalent est ici de 600×600 , ce qui explique ce gain en précision. La solution obtenue avec l'AMR sur les figures 8-9 est en effet comparable à celle qui serait obtenue sur le maillage équivalent¹⁰. Mais, le coût en temps de calcul, en place mémoire et en stockage du calcul induit par l'AMR est beaucoup moins important que celui qui serait induit par le calcul sur le maillage équivalent.

⁸Il suffit pour cela d'imposer une taille minimale aux patches dans l'algorithme AMR.

⁹LDC est l'acronyme de *Local Defect Correction*.

¹⁰Contrairement au cas du transport linéaire, les solutions obtenues sans AMR sur le maillage équivalent et avec AMR ne sont pas exactement identiques à cause de l'équation de Poisson (7.1)(c,d). Voir à ce sujet la fin du §7.3.3.

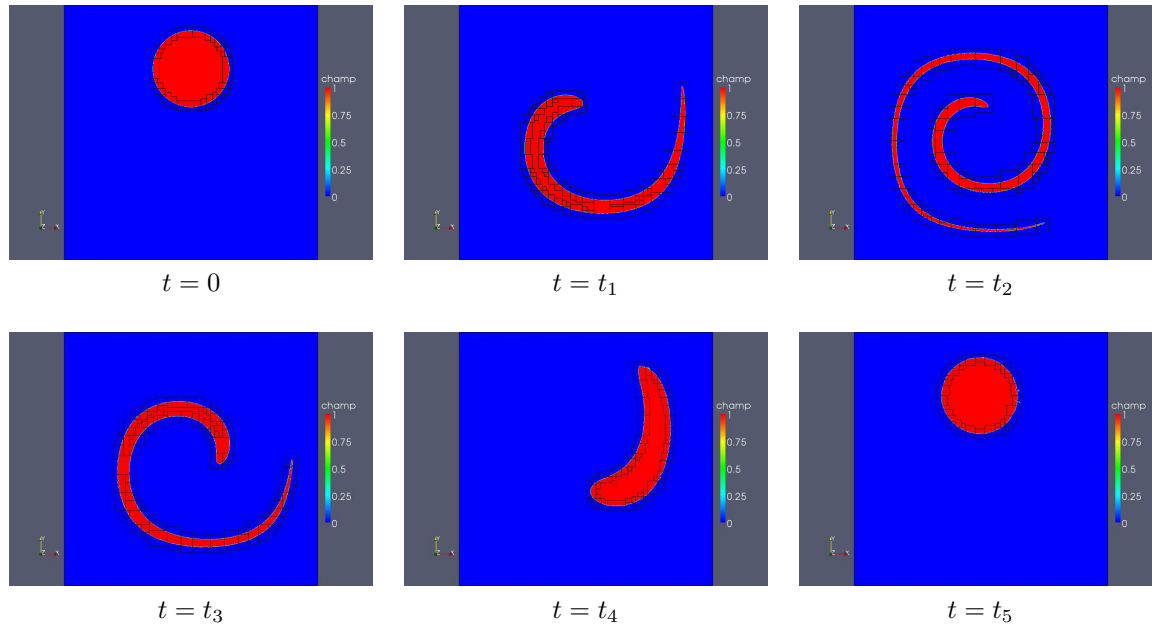


Figure 5
Cas-test de Kothe & Rider 2D avec AMR.
Disparition de la fragmentation artificielle

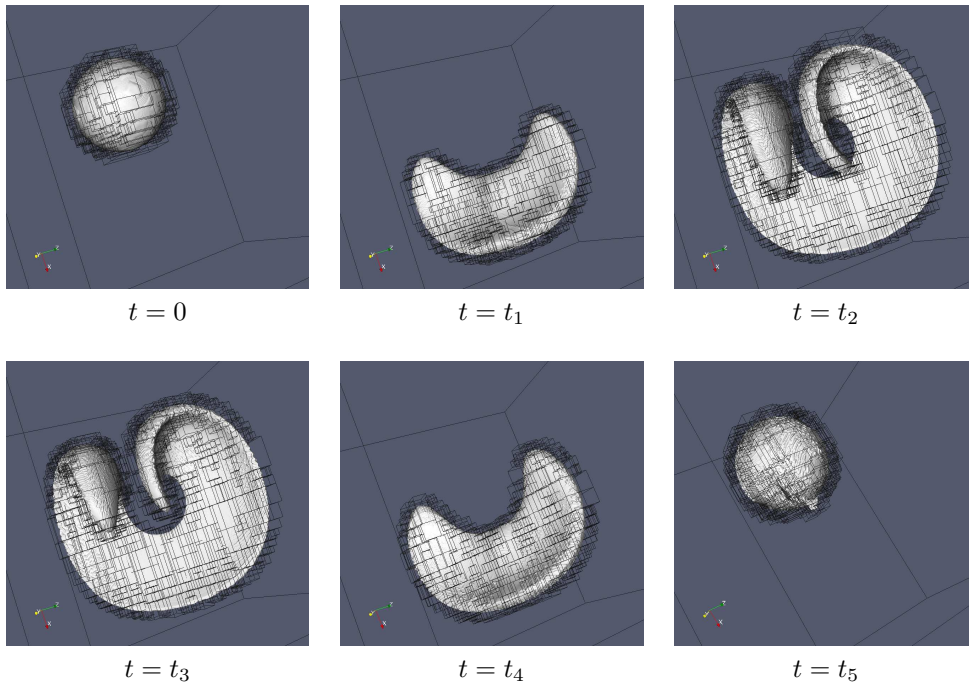


Figure 6
Cas-test de Kothe & Rider 3D avec AMR.
Disparition de la fragmentation artificielle

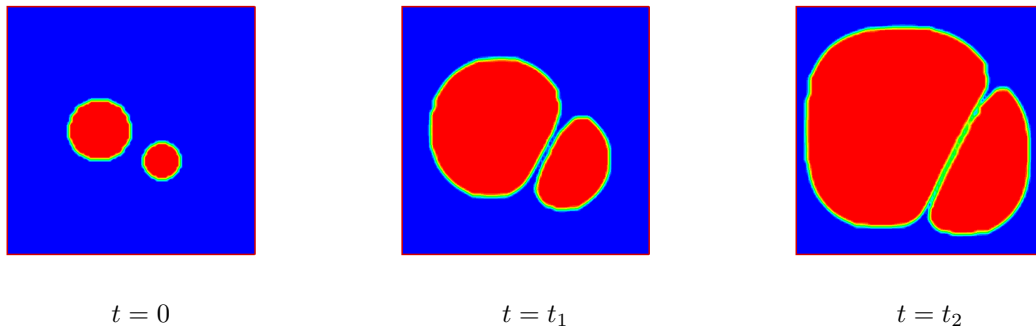


Figure 7
Modèle ABV et $\psi(t) = 1$ sans AMR.
Apparition de la coalescence artificielle

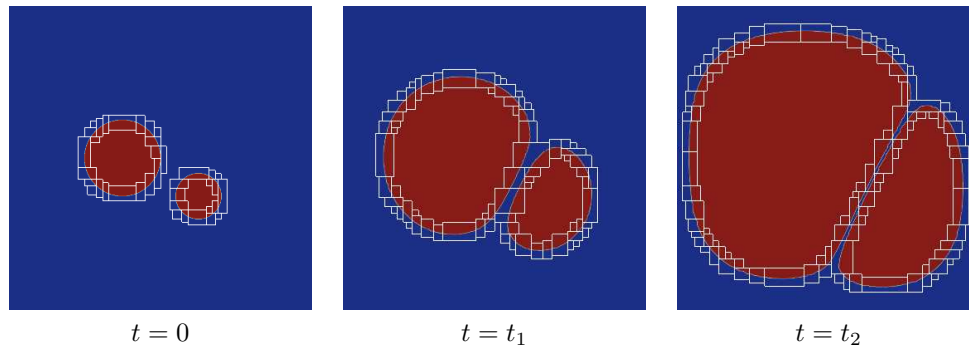


Figure 8
Modèle ABV et $\psi(t) = 1$ avec AMR.
Disparition de la coalescence artificielle

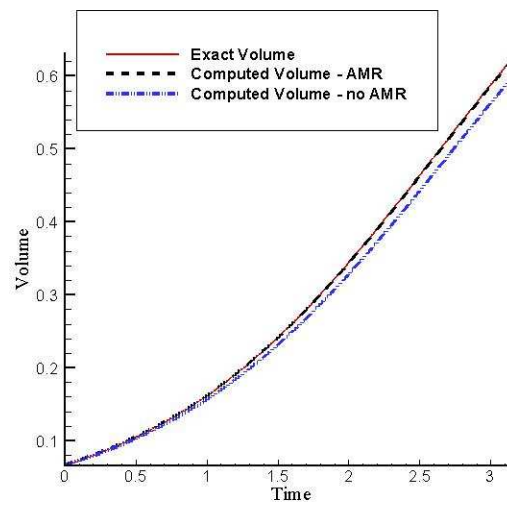


Figure 9
Volume des bulles $|\Omega_1(t)|$

Chapitre 8

Analyse des schémas de type Godunov à bas nombre de Mach

E chapitre rassemble les résultats publiés dans [Dellacherie, 2010]. Dans cet article, nous nous sommes attachés à proposer un cadre théorique simple pour expliquer et corriger la perte de précision des schémas de type Godunov à bas nombre de Mach dans le cas du système d'Euler compressible. Il est en effet connu depuis longtemps que la solution discrète obtenue avec ces schémas ne converge pas vers une solution incompressible lorsque le nombre de Mach tend vers zéro sur un maillage donné [45, 44]. Notons que cette perte de précision ne concerne pas uniquement les schémas de type Godunov mais concerne également d'autres schémas colocalisés¹ [100, 72]. Guillard *et al* ont analysé en non-linéaire dans [45, 44] l'origine de l'erreur *via* une analyse asymptotique formelle. Pour retrouver une bonne précision à bas nombre de Mach, Guillard & Viozat ont proposé de modifier le schéma de Roe [91] – qui est un schéma de type Godunov – en multipliant la matrice de décentrement par une matrice construite à partir de la matrice de préconditionnement de Turkel [95, 96]. Le schéma de Roe-Turkel ainsi obtenu donne de bons résultats à bas nombre de Mach.

Nous nous proposons ici de montrer que l'origine de cette perte de précision est essentiellement d'origine linéaire et peut être expliquée en analysant le comportement du schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes linéaires. Cette analyse nous permettra de proposer dans le cas non-linéaire une classe de schémas colocalisés précis à bas nombre de Mach et de justifier clairement le schéma de Roe-Turkel. Cette analyse mettra aussi en avant le fait que la perte de précision des schémas de type Godunov à bas nombre de Mach ne concerne que les géométries 2D et 3D, les schémas de type Godunov 1D restant précis à bas nombre de Mach.

8.1 Convergence du compressible vers l'incompressible

Nous rappelons dans cette section le résultat de convergence du compressible vers l'incompressible obtenu par Schochet dans le cas du système d'Euler barotrope adimensionné

$$\partial_t q + \mathcal{H}(q) + \frac{\mathcal{L}}{M}(q) = 0 \quad (8.1)$$

¹On appelle *schéma colocalisé* un schéma numérique dont l'ensemble des inconnues est localisé aux mêmes nœuds du maillage, ce qui est en particulier le cas pour un schéma compressible de type Godunov. Le schéma incompressible de type MAC [48] n'est pas colocalisé puisque la pression et la vitesse sont définies sur des maillages décalés (*staggered mesh* en anglais).

où

$$\left\{ \begin{array}{l} q = \begin{pmatrix} r \\ u \end{pmatrix}, \quad (a) \\ \mathcal{H}(q) = \begin{pmatrix} u \cdot \nabla r \\ (u \cdot \nabla)u \end{pmatrix} := (u \cdot \nabla)q, \quad (b) \\ \mathcal{L}(q) = \begin{pmatrix} (a_* + Mr)\nabla \cdot u \\ \frac{p'[\rho_*(1 + \frac{M}{a_*}r)]}{a_*(1 + \frac{M}{a_*}r)} \nabla r \end{pmatrix}. \quad (c) \end{array} \right. \quad (8.2)$$

Puis, nous montrons comment établir le résultat de Schochet en linéaire. Comme l'on se place dans le cas périodique, le domaine de résolution Ω est le tore $\mathbb{T}^d := [a_1, b_1] \times \dots \times [a_d, b_d]$ dans $\mathbb{R}^d$ ($d \in \{1, 2, 3\}$). La variable $r \in \mathbb{R}$ est reliée à la densité *via* $\rho := \rho_*[1 + \frac{M}{a_*}r]$. La fonction $p(\rho)$ définit l'équation d'état du modèle barotrope. Les constantes ρ_* et a_* sont d'ordre 1. La constante M caractérise le nombre de Mach et est donc un petit paramètre à bas nombre de Mach. Lorsque $M \ll 1$, $r(t, x)$ est également une perturbation de pression puisque dans ce cas, on a $p = p(\rho_*) + \rho_* a_* M r + \mathcal{O}(M^2)$. Les opérateurs $\mathcal{H}$ et $\mathcal{L}/M$ sont respectivement l'opérateur de convection – dont l'échelle de temps est d'ordre 1 – et l'opérateur acoustique – dont l'échelle de temps est d'ordre M .

Dans la suite, nous utiliserons les espaces

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{E} = \left\{ q := \begin{pmatrix} r \\ u \end{pmatrix} \in (L^2(\mathbb{T}^d))^{1+d} \text{ tel que } \nabla r = 0 \text{ et } \nabla \cdot u = 0 \right\}, \\ \mathcal{E}^\perp = \left\{ q := \begin{pmatrix} r \\ u \end{pmatrix} \in (L^2(\mathbb{T}^d))^{1+d} \text{ tel que } \int_{\mathbb{T}^d} r dx = 0 \text{ et } \exists \phi \in H^1(\mathbb{T}^d), u = \nabla \phi \right\} \end{array} \right.$$

où l'espace de Hilbert $(L^2(\mathbb{T}^d))^{1+d} := \left\{ q := \begin{pmatrix} r \\ u \end{pmatrix} \text{ tel que } \int_{\mathbb{T}^d} r^2 dx + \int_{\mathbb{T}^d} \|u\|^2 dx < +\infty \right\}$ est muni du produit scalaire classique $\langle q_1, q_2 \rangle = \int_{\mathbb{T}^d} q_1 q_2 dx$. Nous utiliserons aussi la décomposition de Hodge définie dans le lemme suivant (voir par exemple le Théorème 1.1 dans [78]) :

Lemme 8.1.1.

$$\mathcal{E} \oplus \mathcal{E}^\perp = (L^2(\mathbb{T}^d))^{1+d} \quad \text{and} \quad \mathcal{E} \perp \mathcal{E}^\perp.$$

En d'autres termes, tout vecteur q élément de $(L^2(\mathbb{T}^d))^{1+d}$ peut être décomposé en

$$q = \widehat{q} + q^\perp \quad \text{où} \quad (\widehat{q}, q^\perp) \in \mathcal{E} \times \mathcal{E}^\perp \quad (8.3)$$

et cette décomposition – nommée décomposition de Hodge – est unique.

Enfin, on définit la projection de Hodge $\mathbb{P}$ avec $\mathbb{P}q := \widehat{q}$ ainsi que les énergies

$$\left\{ \begin{array}{lll} E & := & \|q\|^2 = \text{énergie totale,} \\ E_{inc} & := & \|\widehat{q}\|^2 = \text{énergie incompressible,} \\ E_{ac} & := & \|q^\perp\|^2 = \text{énergie acoustique (ou compressible).} \end{array} \right.$$

On a bien sûr $E = E_{inc} + E_{ac}$ puisque $\mathcal{E} \perp \mathcal{E}^\perp$.

8.1.1 Le cas non-linéaire

Une version simplifiée du résultat de convergence de Schochet s'écrit (*cf.* Théorème 2.1 et Théorème 3.1 dans [93]) :

Théorème 8.1.1. Soient $q(t, x)$ solution de

$$\begin{cases} \partial_t q + \mathcal{H}(q) + \frac{\mathcal{L}}{M}(q) = 0, \\ q(t = 0, x) = q^0(x) \end{cases} \quad (8.4)$$

et $\tilde{q}(t, x)$ solution de

$$\begin{cases} \partial_t \tilde{q} + \mathbb{P}\mathcal{H}(\tilde{q}) = 0, \\ \tilde{q}(t = 0, x) = \mathbb{P}q^0(x) \end{cases} \quad (8.5)$$

sur $\Omega = \mathbb{T}^{d \in \{1,2,3\}}$. Alors :

$$\begin{cases} \|q - \mathbb{P}q\|(t = 0) = \mathcal{O}(M), \\ M \ll 1 \end{cases} \implies \|q - \tilde{q}\|(t \geq 0) = \mathcal{O}(M). \quad (8.6)$$

Notons que l'estimation (8.6) est également écrite dans [74] (voir (2.127) dans [74]). Le système (8.5) est équivalent au système d'Euler incompressible. Le Théorème 8.1.1 caractérise donc la convergence du système d'Euler compressible (barotrope) (8.4) vers le système d'Euler incompressible (8.5) à bas nombre de Mach lorsque la condition initiale $q(t = 0)$ est *bien préparée* au sens de

$$\|q - \mathbb{P}q\|(t = 0) = \mathcal{O}(M). \quad (8.7)$$

La notion de condition initiale bien préparée (8.7) nous incite à appeler *sous-espace bien préparé* le sous-espace $\mathcal{E}$. Notons que la condition (8.7) s'écrit également

$$\begin{cases} p(t = 0, x) = p_* + \mathcal{O}(M^2)(x), \\ u(t = 0, x) = \hat{u}(x) + \mathcal{O}(M)(x) \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} p_* = C^{ste} = \mathcal{O}(1), \\ \nabla \cdot \hat{u} = 0. \end{cases} \quad (8.8)$$

8.1.2 Ondes parasites

Lorsque

$$\|q - \mathbb{P}q\| = \mathcal{O}(1), \quad (8.9)$$

(p, u) est de la forme

$$\begin{cases} p = p_* + \mathcal{O}(M)(x), \\ u = \hat{u}(x) + u^\perp(x) \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} p_* = C^{ste} = \mathcal{O}(1), \\ \nabla \cdot \hat{u} = 0 \quad \text{et} \quad \|u^\perp\| = \mathcal{O}(1). \end{cases} \quad (8.10)$$

La composante en $\mathcal{O}(M)$ de la pression et le champ de vitesse $u^\perp$ dans (8.10) correspondent aux *ondes parasites*² créées par les schémas de type Godunov à bas nombre de Mach ; celles-ci sont responsables de la perte de précision de ces schémas à bas nombre de Mach. En nous plaçant dans le cas linéaire, nous expliquerons pourquoi, lorsque le maillage est cartésien, de telles ondes parasites sont créées en 2D et 3D par le schéma de Godunov à bas nombre de Mach alors même que la condition initiale est bien préparée au sens de (8.7). Nous expliquerons également pourquoi ces ondes parasites ne sont pas créées en 1D.

8.1.3 Le cas linéaire

La version linéaire de (8.4) est donnée par

$$\begin{cases} \partial_t q + Hq + \frac{L}{M}q = 0, \\ q(t = 0, x) = q^0(x) \end{cases} \quad (8.11)$$

² *Spurious waves* en anglais.

où

$$\begin{cases} q = \begin{pmatrix} r \\ u \end{pmatrix}, \\ Hq = \begin{pmatrix} u_* \cdot \nabla r \\ (u_* \cdot \nabla)u \end{pmatrix} := (u_* \cdot \nabla)q, \\ Lq = a_* \begin{pmatrix} \nabla \cdot u \\ \nabla r \end{pmatrix}. \end{cases} \quad (8.12)$$

Une version linéaire du Théorème 8.1.1 peut s'écrire :

Proposition 8.1.1. *Soient $q(t, x)$ solution de*

$$\begin{cases} \partial_t q + Hq + \frac{L}{M}q = 0, \\ q(t = 0, x) = q^0(x), \end{cases} \quad (8.13)$$

et $\tilde{q}(t, x)$ solution de

$$\begin{cases} \partial_t \tilde{q} + H\tilde{q} = 0, \\ \tilde{q}(t = 0, x) = \mathbb{P}q^0(x) \end{cases} \quad (8.14)$$

sur $\Omega = \mathbb{T}^{d \in \{1,2,3\}}$. Définissons par ailleurs la décomposition de Hodge $(\hat{q}, q^\perp) \in \mathcal{E} \times \mathcal{E}^\perp$ de q . Alors, $\hat{q} = \tilde{q}$ et $q^\perp$ est solution de (8.13) muni de la condition initiale $q^{0\perp}$. De plus, on a $E_{inc}(t \geq 0) = E_{inc}(t = 0)$ et $E_{ac}(t \geq 0) = E_{ac}(t = 0)$. On peut donc écrire que

$$\|q - \mathbb{P}q\|(t = 0) = \mathcal{O}(M) \implies \|q - \tilde{q}\|(t \geq 0) = \mathcal{O}(M). \quad (8.15)$$

Ce résultat est une conséquence directe de :

Théorème 8.1.2. *Soit $q(t, x)$ solution de l'EDP linéaire*

$$\begin{cases} \partial_t q + \mathcal{F}_x q = 0, \\ q(t = 0) = q^0 \end{cases} \quad (8.16)$$

supposée bien posée dans $L^\infty([0, +\infty[; (L^2(\mathbb{T}^d))^{1+d})$, $\mathcal{F}_x$ étant un opérateur différentiel linéaire. Alors :

1) la solution $q(t, x)$ vérifie

$$\|q - \mathbb{P}q\|(t = 0) = \mathcal{O}(M) \implies \|q - \tilde{q}\|(t \geq 0) = \mathcal{O}(M) \quad (8.17)$$

où $\tilde{q}(t, x)$ est solution de (8.16) muni de la condition initiale $\tilde{q}(t = 0) = \mathbb{P}q^0$. Cependant, $q(t, x)$ ne vérifie pas a priori $\|q - \mathbb{P}q\|(t \geq 0) = \mathcal{O}(M)$;

2) lorsque $\mathcal{F}_x$ est tel que

$$\forall q^0 \in \mathcal{E} : q(t \geq 0) \in \mathcal{E}, \quad (8.18)$$

la solution $q(t, x)$ satisfait (8.17) et

$$\|q - \mathbb{P}q\|(t = 0) = \mathcal{O}(M) \implies \|q - \mathbb{P}q\|(t \geq 0) = \mathcal{O}(M). \quad (8.19)$$

Donc, on a $\|\tilde{q} - \mathbb{P}q\|(t \geq 0) = \mathcal{O}(M)$.

La condition (8.18) signifie que le sous-espace bien préparé $\mathcal{E}$ est invariant pour l'EDP (8.16) : l'introduction de cette notion est essentielle pour comprendre le comportement du schéma de Godunov à bas nombre de Mach. L'estimation (8.19) revient à écrire que la solution $q(t, x)$ de (8.16) reste proche du sous-espace bien préparé $\mathcal{E}$ lorsque la condition initiale q^0 est proche de ce sous-espace ou encore est bien préparée.

8.1.4 Une condition suffisante pour éviter la création d'ondes parasites

En utilisant le Théorème 8.1.2, il est dès lors possible de proposer un critère simple pour qu'un schéma compressible ne crée pas d'ondes parasites du type (8.9) (c'est à dire du type (8.10)) à bas nombre de Mach sur maillage cartésien. Intéressons-nous pour cela à la résolution numérique de l'équation des ondes linéaires

$$\begin{cases} \partial_t q + \frac{L}{M} q = 0, \\ q(t=0) = q^0. \end{cases} \quad (8.20)$$

On discrétise l'opérateur acoustique L/M avec le schéma X (X = Godunov par exemple). À ce schéma numérique, on lui associe l'équation modifiée du premier ordre

$$\begin{cases} \partial_t q + \mathcal{F}_x^{X, L/M} q = 0, \\ q(t=0) = q^0 \end{cases} \quad (8.21)$$

qui est obtenue en ajoutant à l'équation des ondes (8.20) l'erreur de troncature du schéma X . On peut alors analyser le comportement du schéma X à bas nombre de Mach en s'assurant que, pour l'équation modifiée du premier ordre (8.21), la *condition d'invariance* (8.18) est ou n'est pas satisfaite. Si cette condition est satisfaite, le schéma X ne créera pas d'ondes parasites; dans le cas contraire, des ondes parasites pourront apparaître.

Pour le cas où la condition (8.18) n'est pas satisfaite pour l'équation (8.21) et que des ondes parasites sont créées, on peut tenter de modifier le schéma X appliqué à l'équation des ondes (8.20) de telle sorte que la nouvelle équation modifiée du premier ordre

$$\begin{cases} \partial_t q + \mathcal{F}_x^{low\ Mach\ X, L/M} q = 0, \\ q(t=0) = q^0 \end{cases} \quad (8.22)$$

associée à ce schéma X modifié – que nous nommerons *schéma X bas Mach* – satisfasse la condition d'invariance (8.18).

8.2 Analyse du schéma de Godunov dans le cas de l'équation des ondes linéaire

On se place dans le cas d'un maillage cartésien. L'équation modifiée du premier ordre associée au schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes (8.20) est donnée en 2D par

$$\begin{cases} \partial_t q + \frac{L}{M} q = B_\kappa q, \\ q(t=0, x) = q^0(x) \end{cases} \quad (8.23)$$

avec

$$B_\kappa q = \mathcal{K} \begin{pmatrix} \frac{\Delta r}{\partial x_1^2} \\ \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \\ \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathcal{K} = \begin{pmatrix} \nu_r & 0 & 0 \\ 0 & \nu_{u_1} & 0 \\ 0 & 0 & \nu_{u_2} \end{pmatrix} \quad (8.24)$$

où $\nu_r = \nu_{u_k} = \nu_{num} := a_* \frac{\Delta x}{2M}$ (ν_{num} est la viscosité numérique, Δx étant le pas du maillage supposé constant dans les deux directions de l'espace). Les définitions dans (8.24) en 1D et en 3D sont similaires. On définit par ailleurs $\nu_u := (\nu_{u_1}, \dots, \nu_{u_d}) \in \mathbb{R}^d$ ($d \in \{1, 2, 3\}$). On montre que :

Lemme 8.2.1. *Pour tout $\mathcal{K}$, on a :*

- 1) lorsque $\Omega = \mathbb{T}^{d=1}$: les sous-espaces $\mathcal{E}$ et $\mathcal{E}^\perp$ sont invariants pour l'équation (8.23);
- 2) lorsque $\Omega = \mathbb{T}^{d \in \{2,3\}}$: le sous-espace $\mathcal{E}$ est invariant pour l'équation (8.23) si et seulement si $\nu_u = 0$;
- 3) lorsque $\Omega = \mathbb{T}^{d \in \{2,3\}}$: le sous-espace $\mathcal{E}^\perp$ est invariant pour l'équation (8.23) si et seulement si $\nu_u = 0$.

Le point 2 du Lemme 8.2.1 montre qu'en dimension 2 ou 3, le schéma de Godunov linéaire ne respecte pas la condition d'invariance (8.18); l'estimation (8.19) peut alors ne pas être satisfaite en 2D ou en 3D. Par contre, le point 2 du Lemme 8.2.1 souligne que la condition d'invariance (8.18) est satisfaite en 1D. L'invariance ou la non-invariance de $\mathcal{E}^\perp$ caractérisée par le point 3 du Lemme 8.2.1 n'est pas essentielle pour la suite.

Plus précisément, on a le résultat suivant :

Proposition 8.2.1. *Soit $q(t, x)$ solution de*

$$\begin{cases} \partial_t q + \frac{L}{M} q = B_\kappa q, \\ q(t = 0, x) = q^0(x) \end{cases} \quad (8.25)$$

sur $\Omega = \mathbb{T}^{d \in \{1,2,3\}}$. Alors :

- 1) lorsque $\Omega = \mathbb{T}^{d=1}$: $\forall \mathcal{K} \geq 0$, on a

$$\|q - \mathbb{P}q\|(t = 0) = \mathcal{O}(M) \implies \|q - \mathbb{P}q\|(t \geq 0) = \mathcal{O}(M); \quad (8.26)$$

- 2) lorsque $\Omega = \mathbb{T}^{d \in \{2,3\}}$ et $\Delta x \gg \mathcal{O}(M)$: $\forall \mathcal{K} \geq 0$ tel que $|\nu_u| = \mathcal{O}\left(\frac{a_* \Delta x}{M}\right)$, on a

$$\exists q^0 \in (L^2(\mathbb{T}^d))^{1+d} \quad \text{tel que} \quad \|q - \mathbb{P}q\|(t = 0) = \mathcal{O}(M) \quad \text{et} \quad \|q - \mathbb{P}q\|(\tau_{ac}) \gg \mathcal{O}(M) \quad (8.27)$$

où $\tau_{ac} = \mathcal{O}\left(\frac{ML_{\mathbb{T}^d}}{a_*}\right)$ ($L_{\mathbb{T}^d}$ est une longueur caractéristique de $\mathbb{T}^d$ d'ordre un et τ_{ac} est une échelle de temps acoustique). Néanmoins, lorsque $\Delta x = \mathcal{O}(M)$, on a $\|q - \mathbb{P}q\|(\tau_{ac}) = \mathcal{O}(M)$.

La Proposition 8.2.1 montre qu'en 1D, le schéma de Godunov linéaire est précis alors qu'en 2D et en 3D, il ne l'est pas lorsque $\Delta x \gg \mathcal{O}(M)$. Par contre, lorsque le maillage est suffisamment petit au sens où $\Delta x = \mathcal{O}(M)$, le schéma de Godunov linéaire est précis en 2D et en 3D à bas nombre de Mach. Cependant, la condition $\Delta x = \mathcal{O}(M)$ est trop coûteuse pour pouvoir être appliquée.

L'analyse précédente montre que le mauvais comportement des schémas de type Godunov appliqués au système d'Euler compressible à bas nombre de Mach peut au moins en partie être expliquée à partir d'une analyse linéaire. Cette analyse linéaire souligne également que ce mauvais comportement ne concerne pas le 1D mais concerne uniquement le 2D et le 3D.

8.3 Le schéma de Godunov bas Mach en linéaire

Le point 2 du Lemme 8.2.1 nous permet d'obtenir le résultat suivant :

Théorème 8.3.1. *Soit $q(t, x)$ solution de*

$$\begin{cases} \partial_t q + \frac{L}{M} q = \nu_r \begin{pmatrix} \Delta r \\ 0 \end{pmatrix}, \\ q(t = 0, x) = q^0(x) \end{cases} \quad (8.28)$$

sur $\Omega = \mathbb{T}^{d \in \{1,2,3\}}$. Alors, on a $\mathbb{P}q(t \geq 0) = \mathbb{P}q^0$ et

$$\forall q^0 \in (L^2(\mathbb{T}^d))^{1+d}, \forall \nu_r \geq 0 : \quad \begin{cases} E_{inc}(t \geq 0) = E_{inc}(t = 0), \\ E_{ac}(t \geq 0) \leq E_{ac}(t = 0), \end{cases}$$

ce qui permet d'écrire

$$\forall \nu_r \geq 0 : \quad \|q - \mathbb{P}q\|(t = 0) = \mathcal{O}(M) \implies \|q - \mathbb{P}q\|(t \geq 0) = \mathcal{O}(M). \quad (8.29)$$

Ainsi, en annulant la diffusion numérique sur l'équation de vitesse, on retrouve en 2D et en 3D l'estimation (8.19). Le schéma numérique 2D dont l'équation modifiée du premier ordre est l'équation (8.28) est donné par

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} r_{i,j} + \frac{a_*}{M} \cdot \left(\frac{u_{1,i+1,j} - u_{1,i-1,j}}{2\Delta x_1} + \frac{u_{2,i,j+1} - u_{2,i,j-1}}{2\Delta x_2} \right) = \frac{a_*}{2M} \cdot \left(\frac{r_{i+1,j} - 2r_{i,j} + r_{i-1,j}}{\Delta x_1} + \frac{r_{i,j+1} - 2r_{i,j} + r_{i,j-1}}{\Delta x_2} \right), \\ \frac{d}{dt} u_{1,i,j} + \frac{a_*}{M} \cdot \frac{r_{i+1,j} - r_{i-1,j}}{2\Delta x_1} = 0, \\ \frac{d}{dt} u_{2,i,j} + \frac{a_*}{M} \cdot \frac{r_{i,j+1} - r_{i,j-1}}{2\Delta x_2} = 0. \end{cases} \quad (8.30)$$

Le schéma (8.30) sera appelé *schéma de Godunov bas Mach*. Une analyse de stabilité de type Von Neumann montre que la version explicite de (8.30) vérifie la condition nécessaire de stabilité de von Neumann sous critère CFL classique, et que la version implicite de (8.30) vérifie cette même condition de façon inconditionnelle. Pour une analyse de stabilité en semi-discret du schéma (8.30) muni de conditions aux limites non-périodiques, on pourra consulter [Del09] (dans cet article, on s'intéresse à la notion de modes en échiquier dans le cas du schéma (8.30)).

8.4 Le schéma de Roe-Turkel en linéaire

On vérifie que l'équation modifiée du premier ordre associée au schéma de Roe-Turkel est donnée par

$$\begin{cases} \partial_t q + \frac{L}{M} q = a_* \frac{\Delta x}{2M} \left\{ \begin{pmatrix} \Delta r/M \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(M) \right\}, \\ q(t = 0, x) = q^0(x). \end{cases} \quad (8.31)$$

Le schéma de Roe-Turkel est donc similaire au schéma de Godunov bas Mach dans le cas linéaire au sens où celui-ci annule la diffusion numérique sur l'équation de vitesse lorsque $M \ll 1$. On peut cependant noter que la diffusion numérique sur l'équation de pression est multipliée par un facteur $1/M$, ce qui explique que le schéma de Roe-Turkel doit être implicitité y compris lorsque le pas de temps est de l'ordre de M .

8.5 Construction d'une classe de schémas colocalisés précis à bas nombre de Mach

Les résultats précédents nous incitent à proposer la conjecture suivante :

Conjecture 8.5.1. *Soit X un schéma colocalisé de type Godunov ou non appliqué au système d'Euler compressible sur un maillage 2D ou 3D. Supposons que le schéma X est stable à bas nombre de Mach. Modifions le schéma X en utilisant les différences centrées :*

- 1) pour discrétiser le flux de quantité de mouvement ;
- 2) ou pour discrétiser uniquement le gradient de pression.

Alors, à bas nombre de Mach :

- i) le schéma X ainsi modifié est stable ;
- ii) le schéma X ainsi modifié ne crée pas d'ondes parasites et est précis.

Ce schéma X modifié sera appelé “schéma X bas Mach”.

Cette conjecture – qui ne se limite pas *a priori* aux schémas de type Godunov – est directement inspirée du principe de construction du schéma de Godunov linéaire (8.30). Celle-ci est justifiée dans le cas du schéma de Roe *via* des tests numériques au §8.8.

Soulignons que bon nombre de schémas colocalisés construits pour être précis à bas nombre de Mach sont des *schémas bas Mach* au sens de la conjecture 8.5.1. C’est par exemple le cas des schémas proposés dans [77, 70, 71].

Enfin, il est important de rappeler que l’analyse linéaire menant à la conjecture 8.5.1 a été réalisée sans tenir compte de conditions aux limites. Cependant, les résultats numériques présentés au §8.8.2 semblent montrer que le *schéma de Roe bas Mach* reste précis lorsque l’on applique des conditions aux limites sur la frontière du domaine.

8.6 Le cas particulier des maillages triangulaires

L’analyse basée sur l’équation modifiée du premier ordre n’est plus valable lorsque le maillage n’est pas cartésien, et en particulier lorsque le maillage est triangulaire. D’autre part, il a été souligné dans [89, 90], *via* une analyse asymptotique formelle effectuée en non-linéaire, que le schéma de Roe avait un bon comportement à bas nombre de Mach dans le cas d’un maillage triangulaire particulier. Guillard a généralisé dans [43] ce résultat au cas de maillages triangulaires quelconques également *via* une analyse asymptotique formelle effectuée en non-linéaire. En collaboration avec P. Omnés et F. Rieper, nous avons rigoureusement établi ce résultat dans [Dellacherie *et al.*, 2010] en nous plaçant dans le cas linéaire.

Soulignons que les résultats établis dans [Dellacherie *et al.*, 2010] et [89, 90, 43] sont valables dans le cas périodique (ou en domaine infini). Lorsque des conditions aux limites sont imposées sur la frontière du domaine, le schéma de Roe sur maillage triangulaire semble ne pas être précis à bas nombre de Mach. Par contre, sur maillage triangulaire (voir les §7.1.2 et §7.2.2 dans [Dellacherie, 2010]) comme sur maillage quadrangulaire (voir le §8.8), le *schéma de Roe bas Mach* semble demeurer précis dans le cas non-périodique.

8.7 Lien formel avec un schéma incompressible colocalisé

Sur maillage cartésien, on peut établir un lien formel entre l’équation modifiée (8.28) du *schéma de Godunov bas Mach* linéaire (8.30) et l’équation modifiée du schéma incompressible colocalisé stabilisé avec une stabilisation de type Brezzi-Pitkäranta proposé par Eymard *et al.* dans [33] pour résoudre le système incompressible de Stokes. La stabilisation de Brezzi-Pitkäranta est ajoutée pour stabiliser les modes en échiquier qui sont une conséquence directe du caractère colocalisé du schéma incompressible. Ce point est cohérent avec les résultats présentés dans [Del09] où l’on établit dans le cas linéaire 1D que les modes en échiquier sont des modes stationnaires du *schéma de Godunov bas Mach* linéaire (8.30)³. Ces questions

³Dans [Del09], on montre que les modes en échiquier sont par contre diffusés avec une vitesse exponentielle par le schéma de Godunov standard.

sont rapidement abordées au §5.7 dans [Dellacherie, 2010].

8.8 Résultats numériques

On présente dans cette section quelques résultats numériques obtenus avec le schéma de Roe et avec le *schéma de Roe bas Mach* sur maillage quadrangulaire.

8.8.1 Le système d'Euler en domaine ouvert

Soit un écoulement allant de la gauche vers la droite dans un domaine ouvert dont la frontière du bas est constituée d'une bosse définie par la fonction

$$\begin{aligned} x_2^{bosse}(x_1) &= \frac{1}{10} \cdot [1 - \cos((x_1 - 1)\pi)] \text{ si } x_1 \in [1, 3], \\ &= 0 \text{ si } x_1 \notin [1, 3]. \end{aligned}$$

L'écoulement est modélisé par le système d'Euler compressible. Le fluide est un gaz parfait et le nombre de Mach à l'entrée est proche de zéro. L'écoulement est donc proche d'un écoulement incompressible. Cet écoulement est un cas-test classique pour les schémas incompressibles.

Les figures 1-2 représentent les iso-pressions obtenues respectivement avec le schéma de Roe et avec le *schéma de Roe bas Mach* lorsque le nombre de Mach en entrée est égal à 10^{-2} . Ces deux figures montrent que seule la solution obtenue avec le *schéma de Roe bas Mach* est correcte (voir par exemple la Figure 11 dans [98] pour une solution obtenue avec un schéma incompressible). La Figure 3 montre que la solution obtenue avec le *schéma de Roe bas Mach* ne dépend pas du nombre de Mach, propriété qui doit être satisfaite dans la limite des faibles nombres de Mach (cette propriété n'est pas vérifiée par le schéma de Roe). La Figure 4 montre que les perturbations de pression obtenues avec le schéma de Roe et avec le *schéma de Roe bas Mach* sont respectivement en $\mathcal{O}(M)$ et en $\mathcal{O}(M^2)$. La Figure 4 confirme donc qu'il existe des ondes parasites dans le cas du schéma de Roe mais pas dans le cas du *schéma de Roe bas Mach* (voir le §8.1.2 pour la notion d'ondes parasites).

8.8.2 Le système de Navier-Stokes en domaine fermé

On s'intéresse maintenant au cas d'un écoulement de type convection naturelle modélisé par le système de Navier-Stokes compressible auquel on adjoint un terme de gravité. Le domaine est une boîte fermée carrée. On applique sur les frontières du domaine une condition d'adhérence pour la vitesse u . On applique sur les parois du bas et du haut une condition de Neumann homogène pour le gradient de température et, sur les frontières gauche et droite, une condition de Dirichlet sur la température telle que $T_{gauche} > T_{droite}$. Ce cas-test est classique et peut être réalisé avec un schéma incompressible lorsque la différence entre T_{gauche} et T_{droite} n'est pas trop importante⁴. Ici, $(T_{gauche} - T_{droite})/(T_{gauche} + T_{droite})$ est de l'ordre de 10^{-2} , le nombre de Mach pour ce cas-test étant de l'ordre de 10^{-4} .

Les figures 5-6 représentent les iso-Mach obtenues sur un maillage cartésien respectivement avec le schéma de Roe et avec le *schéma de Roe bas Mach*. Seule la solution obtenue avec le *schéma de Roe bas Mach* est correcte (voir par exemple les figures 5(a) et 6(a) dans [21] pour une solution obtenue avec un schéma incompressible).

⁴Dans ce cas, le couplage entre le système de Navier-Stokes incompressible et l'équation d'évolution de la température se fait par l'intermédiaire du terme de gravité ρg dans l'équation de quantité de mouvement, la densité ρ dans ρg étant linéarisée autour de la température moyenne $(T_{gauche} + T_{droite})/2$. Le modèle ainsi obtenu correspond au modèle de Boussinesq. Lorsque la différence entre T_{gauche} et T_{droite} devient trop importante et que le nombre de Mach reste petit, le modèle de Boussinesq n'est plus valable et doit être remplacé par un modèle bas Mach tel que celui dérivé au Chapitre 6.

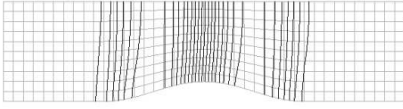


Figure 1
Schéma de Roe, iso-pressure, Mach=10⁻²

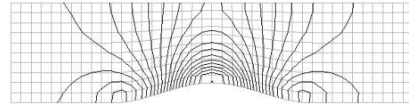


Figure 2
Schéma de Roe bas Mach, iso-pressure, Mach=10⁻²

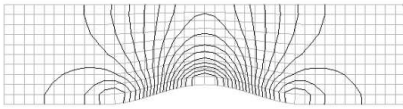


Figure 3
Schéma de Roe bas Mach, iso-pressure, Mach=10⁻³

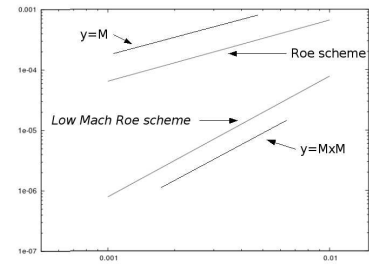


Figure 4
Fluctuations de pression $\frac{p_{\max} - p_{\min}}{p_{\max}}(M)$

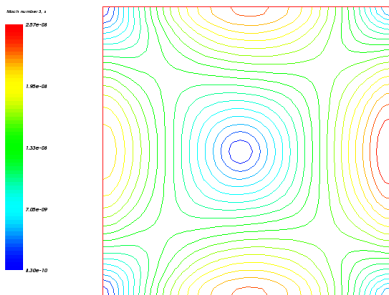


Figure 5
Schéma de Roe, iso-Mach

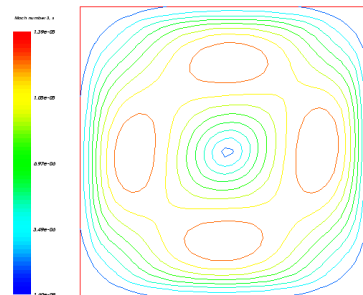


Figure 6
Schéma de Roe bas Mach, iso-Mach

Conclusion

E mémoire résume les travaux que nous avons réalisés de 1995 à 2010. Ces travaux ont eu pour thème l'étude et la discrétisation, d'une part, de modèles cinétiques de type Fokker-Planck ou de type Boltzmann semi-classiques et, d'autre part, de modèles fluides de type Euler ou de type Navier-Stokes à bas nombre de Mach.

L'équation de Fokker-Planck étudiée modélise les collisions entre ions et électrons dans un plasma chaud, et concerne ici la fusion par confinement inertiel. En introduisant la notion de *moyenne entropique*, nous avons proposé un schéma entropique pour cette équation dans le cas non-linéaire. Dans le cas linéaire, nous avons également établi le caractère entropique du schéma de Chang & Cooper. Les équations de Boltzmann semi-classiques étudiées sont de deux types. Le premier type modélise la réaction de fusion thermonucléaire entre un ion deutérium et un ion tritium donnant une particule α et un neutron, et concerne également ici la fusion par confinement inertiel. Le deuxième type – connu sous le nom d'équations de Wang-Chang & Uhlenbeck – modélise ici les transitions d'énergie quantique dans les couches électroniques d'atomes d'uranium et de fer provoquées par les collisions entre ces mêmes atomes au sein du procédé SILVA de *Séparation Isotopique par Laser sur Vapeur Atomique*. Nous avons étudié les propriétés de base de ces deux types d'équations de Boltzmann semi-classiques. Dans le cas des équations de Wang-Chang & Uhlenbeck, nous avons également proposé un algorithme de couplage cinétique-fluide basé sur une décomposition cinétique par demi-flux. Cet algorithme permet de diminuer le coût d'un calcul d'une détente d'uranium-fer dans le procédé SILVA de séparation isotopique par laser. L'étude de cet algorithme nous a incité à étudier la notion de relaxation dans un mélange binaire de gaz et à souligner les points communs de cette approche avec la théorie cinétique standard. Nous avons étudié ces mêmes questions dans le cas de mélanges de fluides non-miscibles. La notion de mélange de fluides non-miscibles concerne ici la modélisation d'écoulements diphasiques dans un cœur de réacteur nucléaire à eau à l'échelle moyennée pour laquelle on ne discerne pas l'interface entre les deux fluides.

L'étude de modèles moyennés pour des mélanges de fluides non-miscibles nous a amené à travailler à une échelle plus fine pour laquelle l'interface entre les deux fluides est modélisée. Souhaitant modéliser la déformation de cette interface provoquée par de forts gradients thermiques à bas nombre de Mach, nous avons proposé un modèle sans ondes acoustiques dit *modèle diphasique à bas nombre de Mach* que nous avons discrétisé en 2D avec une hypothèse de champ de vitesse potentiel. Puis, afin d'améliorer la précision des calculs tout en maîtrisant le coût, nous avons également étudié la possibilité de résoudre sur un maillage dynamique de type AMR un modèle simplifié de déformation d'interface dont la structure mathématique est proche de celle du *modèle diphasique à bas nombre de Mach*.

L'étude du *modèle diphasique à bas nombre de Mach* nous a incité à analyser sur maillage cartésien le mauvais comportement à bas nombre de Mach des schémas de type Godunov appliqués au système d'Euler compressible. Nous avons ainsi montré que ce problème peut être étudié sur l'équation des ondes linéaire et ne concerne que les géométries 2D et 3D. Nous avons ensuite proposé une modification très simple à appliquer aux schémas de type Godunov pour les rendre précis à bas Mach. L'approche proposée permet également de justifier des schémas colocalisés précis à bas Mach tels que le schéma de Roe-Turkel.

Enfin, nous avons justifié l'algorithme LBM dans le cas de l'équation de la chaleur.

Articles avec comité de lecture

- [Dellacherie, 1999] DELLACHERIE S. (1999). Sur un schéma numérique semi-discret appliqué à un opérateur de Fokker-Planck isotrope. *C. R. Acad. Sc. Paris (Série I)*, 328:1219–1224.
Disponible sur : [http://dx.doi.org/10.1016/S0764-4442\(99\)80443-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0764-4442(99)80443-1).
- [Dellacherie, 2001] DELLACHERIE S. (2001). Sur le caractère entropique des schémas de relaxation appliqués à une équation d'état non classique. *C. R. Acad. Sc. Paris (Série I)*, 332:765–770.
Disponible sur : [http://dx.doi.org/10.1016/S0764-4442\(01\)01934-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0764-4442(01)01934-6).
- [Dellacherie, 2002] DELLACHERIE S. (2002). Numerical resolution of an ion-electron collision operator in axisymmetrical geometry. *Transp. Theory and Stat. Phys.*, 31(4-6):397–429.
Disponible sur : <http://dx.doi.org/10.1081/TT-120015507>.
- [Dellacherie, 2003a] DELLACHERIE S. (2003a). Coupling of the Wang Chang-Uhlenbeck equations with the multispecies Euler system. *J. Comp. Phys.*, 189(1):239–276.
Disponible sur : [http://dx.doi.org/doi10.1016/S0021-9991\(03\)00210-9](http://dx.doi.org/doi10.1016/S0021-9991(03)00210-9).
- [Dellacherie, 2003b] DELLACHERIE S. (2003b). On the Wang Chang-Uhlenbeck equations. *Disc. and Cont. Dyn. Syst. series B*, 3(2):229–253.
Disponible sur : <http://dx.doi.org/10.3934/dcddb.2003.3.229>.
- [Dellacherie, 2003c] DELLACHERIE S. (2003c). Relaxation schemes for the multicomponent Euler system. *Math. Model. and Num. Anal.*, 37(6):909–936.
Disponible sur : <http://dx.doi.org/10.1051/m2an2003061>. 42
- [Dellacherie, 2005] DELLACHERIE S. (2005). On a diphasic low Mach number system. *Math. Model. and Num. Anal.*, 39(3):487–514.
Disponible sur : <http://dx.doi.org/10.1051/m2an2005020>.
- [Dellacherie, 2007] DELLACHERIE S. (2007). Numerical resolution of a potential diphasic low Mach number system. *J. Comp. Phys.*, 223(1):151–187.
Disponible sur : <http://dx.doi.org/doi10.1016/j.jcp.2006.09.009>.
- [Dellacherie, 2010] DELLACHERIE S. (2010). Analysis of Godunov type schemes applied to the compressible Euler system at low Mach number. *J. Comp. Phys.*, 229(4):978–1016.
Disponible sur : <http://dx.doi.org/doi10.1016/j.jcp.2009.09.044>.
- [Dellacherie et Buet, 2010] DELLACHERIE S. et BUET C. (2010). On the Chang and Cooper scheme applied to a linear Fokker-Planck equation. *Comm. in Math. Sc.*, 8(4):1079–1090.
Disponible sur : <http://projecteuclid.org/euclid.cms/1288725273>.
- [Dellacherie et al., 1998] DELLACHERIE S., BUET C. et SENTIS R. (1998). Résolution numérique d'une équation de Fokker-Planck ionique avec température électronique. *C. R. Acad. Sc. Paris (Série I)*, 327:93–98.
Disponible sur : [http://dx.doi.org/10.1016/S0764-4442\(98\)80109-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0764-4442(98)80109-2).
- [Dellacherie et al., 2001] DELLACHERIE S., BUET C. et SENTIS R. (2001). Numerical solution of an ionic Fokker-Planck equation with electronic temperature. *SIAM J. Numer. Anal.*, 39(4):1219–1253.
Disponible sur : <http://dx.doi.org/10.1137/S0036142999359669>.
- [Dellacherie et al., 2010] DELLACHERIE S., OMNES P. et RIEPER F. (2010). The influence of cell geometry on the Godunov scheme applied to the linear wave equation. *J. Comp. Phys.*, 229(14):5315–5338.
Disponible sur : <http://dx.doi.org/doi:10.1016/j.jcp.2010.03.012>.

- [Dellacherie et Sentis, 2000] DELLACHERIE S. et SENTIS R. (2000). Nuclear collisions models with Boltzmann operators. *Math. Mod. and Meth. in App. Sc.*, 10(4):479–505.
Disponible sur : <http://dx.doi.org/10.1142/S0218202500000276>.

Comptes rendus de congrès avec comité de lecture

- [DBS99] S. DELLACHERIE, C. BUET et R. SENTIS : On the numerical resolution of an ion/electron collision operator of the Fokker-Planck type coupled with an electronic equation. *In Proc. of the 21st International Symposium on Rarefied Gas Dynamics conference (July 26-31, 1998, Marseille, France)*, volume II, pages 481–488. Cépaduès-Éditions, Toulouse, 1999.
- [Del1a] S. DELLACHERIE : About kinetic schemes built in axisymmetrical and spherical geometries. *In* E.F. TORO, éditeur : *Proc. of the International Conference on Godunov Methods : Theory and Application (October, 1999, Oxford, England)*, pages 225–232. Kluwer Academic / Plenum Publishers, New York, 2001(a).
- [Del03] S. DELLACHERIE : Kinetic-fluid coupling in the field of the atomic vapor laser isotopic separation : Numerical results in the case of a monospecies perfect gas. *In* A.D. KETSDEVER et E.P. MUNTZ, éditeurs : *Proc. of the 23rd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (July 20-25, 2002, Whistler, British Columbia, Canada)*, pages 947–954. American Institute of Physics, New York, 2003.
Disponible sur : <http://dx.doi.org/doi10.1063/1.1581642>.
- [Del09] S. DELLACHERIE : Checkerboard modes and wave equation. *In Proc. of the Algoritmy 2009 Conference on Scientific Computing (March 15-20, 2009, Vysoke Tatry, Podbanske, Slovakia)*, pages 71–80. 2009.
- [DV03] S. DELLACHERIE et A. VINCENT : Zero Mach number diphasic equations for the simulation of water-vapor high pressure flows. *In Proc. of the 11th Annual Conference of the CFD Society of Canada (May 28-30, 2003, Vancouver, British Columbia, Canada)*, pages 248–255. 2003.
- [FCDK09] F. FILLION, A. CHANOINE, S. DELLACHERIE et A. KUMBARO : FLICA-OVAP : a new platform for core thermal-hydraulic studies. *In Proc. of the 13th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-13, September 27-October 2, 2009, Kanazawa City, Ishikawa Prefecture, Japan)*. 2009.
- [PMD⁺09] Y. PENEL, A. MEKKAS, S. DELLACHERIE, J. RYAN et M. BORREL : Application of an AMR strategy to an abstract bubble vibration model. *In Proc. of the 19th AIAA Computational Fluid Conference (June 22-25, 2009, San Antonio, Texas, USA)*. 2009.

Rapports

- [Del1b] S. DELLACHERIE : Schémas cinétiques de relaxation et résolution numérique du système d'Euler, limite fluide des équations de Boltzmann semi-classiques et mono-espèces. Rapport interne DEN/DM2S/SFME/LMPE/RT/01-003, CEA, 2001(b).
- [Del99] S. DELLACHERIE : Extension des schémas cinétiques en géométries axisymétrique et sphérique. Couplage des équations d'Euler et de Boltzmann. Rapport interne DCC/DPE/99-RT-148, CEA, 1999.
- [Del00a] S. DELLACHERIE : Couplage cinétique/fluide dans le cadre de la vapeur SILVA.
Partie 1 : Principe et validation à faible débit. Rapport interne CEN-Saclay/DCC/DPE/SPCP (Partie 1), CEA, 2000.
- [Del00b] S. DELLACHERIE : Couplage cinétique/fluide dans le cadre de la vapeur SILVA.
Partie 2 : Validation à fort débit et raccordement asymptotique. Rapport interne CEN-Saclay/DCC/DPE/SPCP (Partie 2), CEA, 2000.
- [Del02] S. DELLACHERIE : Couplage des équations de Wang Chang-Uhlenbeck avec le système d'Euler multi-espèces. Application au procédé SILVA de séparation isotopique. Rapport interne SFME/LMPE/RT/02-009/A, CEA, 2002.
- [Del04] S. DELLACHERIE : Dérivation du système diphasique bas mach : simulation numérique en géométrie monodimensionnelle. Rapport externe CEA-R-6046, CEA, 2004.
Disponible à la BnF sur <http://catalogue.bnf.fr/ark/12148/cb391674522/PUBLIC>.
- [Del10] S. DELLACHERIE : Relaxation et analogies avec la théorie cinétique. Rapport interne SFME/LETR/RT/10-002/A, CEA, 2010.
- [DL05a] S. DELLACHERIE et O. LAFITTE : Existence et unicité d'une solution classique à un modèle abstrait de vibration de bulles de type hyperbolique-elliptique. Rapport externe CRM-3200, Centre de Recherches Mathématiques (CRM, Montréal, Canada), 2005.
- [DL05b] S. DELLACHERIE et O. LAFITTE : Solutions auto-semblables pour des modèles avec conductivité thermique. Rapport externe CRM-3207, Centre de Recherches Mathématiques (CRM, Montréal, Canada), 2005.
- [DR01] S. DELLACHERIE et N. RENCY : Relations de fermeture pour le système des équations d'Euler multi-espèces. Construction et étude de schémas de relaxation en multi-espèces et en multi-constituants. Rapport externe CEA-R-5999, CEA, 2001.
Disponible à la BnF sur <http://catalogue.bnf.fr/ark/12148/cb38903869x/PUBLIC>.

Autres références

- [1] ALI Y.M. et ZHANG L.C. : Relativistic heat conduction. *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, 48(12):2397–2406, 2005.
- [2] AMBROSO A., CHALONS C., COQUEL F., GALIÉ T., GODLEWSKI E., RAVIART P.-A. et SEGUIN N. : The drift-flux asymptotic limit of barotropic two-phase two-pressure models. *Comm. in Math. Sc.*, 6(2):521–529, 2008.
- [3] ANCONA M.G. : Fully-lagrangian and lattice-Boltzmann methods for solving systems of conservation equations. *J. Comp. Phys.*, 115(1):107–120, 1994.
- [4] ANDERSON J.B., FOCH J.D., SHAW M.J., STERN R.C. et WU B.J. : Statistical theory of electronic energy relaxation. In V. BOFFI et C. CERCIGNANI, éditeurs : *Proc. of the 15th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics conference (June, 1986, Grado, Italy)*, volume I, pages 413–421. Teubner, Stuttgart, 1986.
- [5] ANTHONISSEN M.J.H. : Local defect correction techniques : Analysis and application to combustion. Thèse de l’Université Technologique d’Eindhoven. 2001.
- [6] BAER M.R. et NUNZIATO J.W. : A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *Int. J. Multiphase Flow*, 12(6):861–889, 1986.
- [7] BEREZIN Y.A., KHUDICK V.N. et PEKKER M.S. : Conservative finite-difference schemes for the Fokker-Planck equation not violating the law of an increasing entropy. *J. Comp. Phys.*, 69(1), 1987.
- [8] BERGER M. et RIGOUTSOS I. : An algorithm for point clustering and grid generation. *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics*, 21:1278–1286, 1991.
- [9] BOLTZMANN L.. In Jacques GABAY, éditeur : *Leçons sur la théorie des gaz*, Les Grands Classiques Gauthier-Villars. 1987. Réédition du livre de 1894.
- [10] BOOK D.L. : NRL plasma formulary. Rapport technique, Naval Research Laboratory, Washington DC 20375, 1980.
- [11] BOURGAT J.F., LE TALLEC P., PERTHAME B. et QIU Y. : Coupling Boltzmann and Euler equations without overlapping. In AMS, éditeur : *Proc. of the 6th conference IUTAM on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations (Como, Italy, june, 1992)*. Providence, 1992.
- [12] CERCIGNANI C.. In SPRINGER-VERLAG, éditeur : *The Boltzmann Equation and Its Applications*, volume 67 de *Applied Mathematical Sciences*. New York, 1987.
- [13] CHAN S. et DOOLEN G.D. : Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30:329–364, 1998.
- [14] CHANG J.S. et COOPER G. : A practical difference scheme for Fokker-Planck equations. *J. of Comp. Phys.*, 6:1–16, 1970.
- [15] CHAPMAN S. et COWLING T.G. : In *The mathematical theory of non uniform gases : An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*. Cambridge University Press, third edition, 1990.
- [16] CHEREMISSIN F.G. : Numerical methods for the direct solution of the kinetic Boltzmann equation. *USSR Comput. Maths. Math. Phys.*, 25(6):156–166, 1985.

- [17] CHEREMISSIN F.G. : Solution of the Wang-Chang-Uhlenbeck master equation. *Doklady Physics*, 47(12):872–875, 2002.
- [18] COQUEL F. et PERTHAME B. : Relaxation of energy and approximate Riemann solvers for general pressure laws in fluid dynamics. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35:2223–2249, 1998.
- [19] CROISILLE J.-P. : Contribution à l'étude théorique et à l'approximation par éléments finis du système hyperbolique de la dynamique des gaz multidimensionnelle et multiespèces. Thèse de l'Université Pierre et Marie Curie (Paris 6). 1990. Voir aussi : note technique ONERA 1991-3.
- [20] CSISZÁR I. : Eine informationstheoretische Ungleichung und ihre Anwendung auf den Beweis von markoffschen Ketten. *Magyar Tud. Akad. Mat. Kutató Int. Közl.*, 8:85–108, 1963.
- [21] DE VAHL DAVIS G. : Natural convection of air in a square cavity : A benchmark numerical solution. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 3:249–264, 1983.
- [22] DECK D. et SAMBA G. : Le code PROCIONS (programme cinétique ionique multi-espèces). Rapport technique DAM/CEL-V/DMA/MCN N° 2561, CEA, 1994.
- [23] DESHPANDE S. : Kinetic theory based on new upwind methods for inviscid compressible flows. *AIAA paper*, AIAA-1986-275, 1986.
- [24] DESPRÉS B. : Inégalité entropique pour un solveur conservatif du système de la dynamique des gaz en coordonnées de Lagrange. *C. R. Acad. Sci. Paris (Série I)*, 324:1301–1306, 1997.
- [25] DESPRÉS B. et LAGOUTIÈRE F. : Un schéma non-linéaire anti-dissipatif pour l'équation d'advection linéaire. *C. R. Acad. Sci. Paris (Série I)*, 328:939–944, 1999.
- [26] DU FORT E.C. et FRANKEL S.P. : Stability condition in the numerical treatment of parabolic differential equations. *Math. Tables and Other Aids to Comput.*, 7(43):135–152, 1953.
- [27] DUANE B.H. : Fusion cross-section theory. Rapport technique BNWL-1685, University of Michigan, Battelle Pacific Northwest Laboratory, Richland, WA, 1951. W.C. Wolkenhauer (Ed.).
- [28] DUBOIS F. : Third order equivalent equation of lattice Boltzmann scheme. *Discrete and Continuous Dynamical Systems*, 23:221–248, 2009.
- [29] EMBID P. : Well-posedness of the nonlinear equations for zero Mach number combustion. *Comm. in Partial Diff. Equ.*, 12(11):1227–1283, 1987.
- [30] EMBID P. : On the reactive and non-diffusive equations for zero Mach number flow. *Comm. in Partial Diff. Equ.*, 14(8,9):1249–1281, 1989.
- [31] EPPERLEIN E.M. : Implicit and conservative difference scheme for the Fokker-Planck equation. *J. of Comp. Phys.*, 112:291–297, 1994.
- [32] ESTIVALEZES J.L. et VILLEDIEU P. : High-order positivity-preserving kinetic schemes for the compressible Euler equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33(5):2050–2067, 1996.
- [33] EYMARD R., HERBIN R. et LATCHÉ J.-C. : On a stabilized colocated finite volume scheme for the Stokes problem. *Math. Model. and Num. Anal. (M2AN)*, 40(3):501–527, 2006.
- [34] FRISCH U. : Relation between the lattice Boltzmann equation and the Navier-Stokes equations. *Physica D*, 47:231–232, 1991.
- [35] FRISCH U., HASSLACHER B. et POMEAU Y. : Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Phys. R. Letters*, 56(14):1505–1508, 1986.
- [36] GALLOUËT T., HÉRARD J.M. et SEGUIN N. : Numerical modelling of two-phase flows using the two-fluid two-pressure approach. *Math. Mod. and Meth. in App. Sc. (M3AS)*, 14(5):663–700, 2004.
- [37] GARDNER M. : Mathematical games. The fantastic combinations of John Conway's new solitaire game "life". *Scientific American*, 223:120–123, 1970.
- [38] GODLEWSKI E. et RAVIART P.-A.. In J.E. MARDSEN, L. SIROVICH et F. JOHN, éditeurs : *Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws*, volume 118. Springer-Verlag, New York, 1996.
- [39] GOLSE F. : Applications of the boltzmann equation within the context of upper atmosphere vehicle aerodynamics. *Comp. Meth. in App. Mech. and Eng.*, 75:299–316, 1989.

- [40] GRÉGOIRE O. et MARTIN M. : Derivation of a well-posed and multidimensional drift-flux model for boiling flows. *C. R. Acad. Sci. Paris (Mécanique)*, 333(6):459–466, 2005.
- [41] GREW K.E. et IBBS T.L. : *In Thermal diffusion in gases*. Cambridge University Press, 1952.
- [42] GROPPi M., LICHTENBERGER P., SCHÜRRER F. et SPIGA G. : Conservative approximation schemes of kinetic equations for chemical reactions. *European J. of Mech. B/Fluids*, 27:202–217, 2008.
- [43] GUILLARD H. : On the behavior of upwind schemes in the low Mach number limit. IV : P0 approximation on triangular and tetrahedral cells. Rapport technique RR-6898, INRIA, 2009.
- [44] GUILLARD H. et MURRONE A. : On the behavior of upwind schemes in the low Mach number limit : II. Godunov type schemes. *Comput. Fluids*, 33:655–675, 2004.
- [45] GUILLARD H. et VIOZAT C. : On the behavior of upwind schemes in the low Mach number limit. *Comput. Fluids*, 28:63–86, 1999.
- [46] GUILLEMAUD V. : Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques par une approche bifluide à deux pressions. Thèse de l'Université de Provence (Aix-Marseille I). 2007.
- [47] GUO Z., ZHENG C. et SHI B. : Thermal lattice Boltzmann equation for low Mach number flows : decoupling model. *Phys. Rev. E*, 75:36704, 2007.
- [48] HARLOW F.H. et WELCH J.E. : Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, 27(8):2182–2189, 1965.
- [49] HARTEN A., LAX P.D. et VAN LEER B. : On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review*, 25(1):35–61, 1983.
- [50] HE X., CHEN S. et DOOLEN G. : A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit. *J. Comp. Phys.*, 146(1):282–300, 1998.
- [51] HE X. et LUO L.-S. : Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation. 88:927–944, 1997.
- [52] HELLUY P. et SEGUIN N. : Relaxation models of phase transition flows. *Math. Model. and Num. Anal. (M2AN)*, 40(2):331–352, 2006.
- [53] HIBIKI T. et ISHII M. : One-dimensional drift-flux model and constitutive equations for relative motion between phases in various two-phase flow regimes. *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, 46:4935–4948, 2003.
- [54] HIRSCHFELDER J.O., CURTISS C.F. et BIRD R.B.. *In* John Wiley & SONS, éditeur : *Molecular Theory of Gases and Liquids*. fourth edition, 1967.
- [55] HSIAO L. et LIU T.-P. : Convergence to nonlinear diffusion waves for solutions of a system of hyperbolic conservation laws with damping. *Comm. in Math. Phys.*, 143(3):599–605, 1992.
- [56] IN A. : Numerical evaluation of an energy relaxation method for inviscid real fluids. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(1):340–365, 1999.
- [57] INAMURO T. : A lattice kinetic scheme for incompressible viscous flows with heat transfer. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, 360:477–484, 2002.
- [58] ISHII M. et HIBIKI T. : *In Thermo-fluid Dynamics of Two-phase Flow*. Springer, 2006.
- [59] JAMET D., LEBAGUE O., COUTRIS N. et DELHAYE J.M. : The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid-vapor flows with phase change. *J. Comp. Phys.*, 169(2):624–651, 2001.
- [60] JIN S. et LEVERMORE C.D. : Numerical schemes for hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms. *J. Comp. Phys.*, 126(2):449–467, 1996.
- [61] JUNK M., KLAR A. et LUO L.-S. : Asymptotic analysis of the lattice Boltzmann equation. *J. Comp. Phys.*, 210(2):676–704, 2005.
- [62] JUNK M. et YANG Z. : Convergence of lattice Boltzmann methods for Navier-Stokes flows in periodic and bounded domains. *Numer. Math.*, 112:65–87, 2009.
- [63] JUNK M. et YONG W.-A. : Weighted l^2 -stability of the lattice Boltzmann method. *SIAM J. Numer. Anal.*, 47(3):1651–1665, 2009.

- [64] KARLIN I.V., ANSUMALI S., FROUZAKIS C.E. et CHIKATAMARLA S.S. : Elements of the lattice Boltzmann method I : linear advection equation. *Comm. in Comp. Phys.*, 1(4):616–655, 2006.
- [65] KARLIN I.V., CHIKATAMARLA S.S. et ANSUMALI S. : Elements of the lattice Boltzmann method II : kinetics and hydrodynamics in one dimension. *Comm. in Comp. Phys.*, 1(1):1–44, 2006.
- [66] KULLBACK S. : A lower bound for discrimination information in terms of variation. *IEEE Transactions On Information Theory*, pages 126–127, 1966.
- [67] LAGOUTIÈRE F. : Modélisation mathématique et résolution numérique de problèmes de fluides compressibles à plusieurs constituants. Thèse de l'Université Pierre et Marie Curie (Paris 6). 2000.
- [68] LALLEMAND P. : Ecoulement d'un gaz sur réseau dans un canal bidimensionnel : développement du profil de Poiseuille. *C. R. Acad. Sc. Paris (Série II)*, 302(16):983–988, 1986.
- [69] LARSEN E.W., LEVERMORE C.D., POMRANING G.C. et SANDERSON J.G. : Discretization methods for one-dimensional Fokker-Planck operators. *J. of Comp. Phys.*, 61:359–390, 1985.
- [70] LI X.-S. et GU C.-W. : An all-speed Roe-type scheme and its asymptotic analysis of low Mach number behaviour. *J. Comp. Phys.*, 227:5144–5159, 2008.
- [71] LI X.-S., GU C.-W. et XU J.-Z. : Development of Roe-type scheme for all-speed flows based on preconditioning method. *Computers and Fluids*, 38:810–817, 2009.
- [72] LIOU M.-S. : A sequel to AUSM : AUSM⁺, Part II : AUSM⁺-up for all speeds. *J. Comp. Phys.*, 214(1):137–170, 2006.
- [73] MAJDA A. : Equations for low mach number combustion. Rapport technique 112, Center of Pure and Applied Mathematics, University of California at Berkeley, 1982.
- [74] MAJDA A.. In SPRINGER-VERLAG, éditeur : *Compressible Fluid Flow and Systems of Conservation Laws in Several Space Variables*, Applied Mathematical Sciences Series, pages 30–80. Wiley, New York, 1984.
- [75] MAJDA A. et SETHIAN J.A. : The derivation and numerical solution of the equations for zero mach number combustion. *Combust. Sci. Tech.*, 42:185–205, 1985.
- [76] MARTIN D.F., COLELLA P. et GRAVESA D. : A cell-centered adaptive projection method for the incompressible Navier-Stokes equations in three dimensions. *J. Comp. Phys.*, 227:1863–1886, 2008.
- [77] MARY I. et SAGAUT P. : Large eddy simulation of flow around an airfoil near stall. *AIAA Journal*, 40(6):1139–1145, 2002.
- [78] MINION M.L. : A projection method for locally refined grids. *J. Comp. Phys.*, 127:158–178, 1996.
- [79] MISHRA S.C., LANKADASU A. et BERONOV K.N. : Application of the lattice Boltzmann method for solving the energy equation of a 2-d transient conduction-radiation problem. *Int. J. of heat and Mass transf.*, 48(17):3648–3659, 2005.
- [80] MOUSSEAU V.A. et KNOLL D.A. : Fully implicit kinetic solution of collisional plasmas. *J. of Comp. Phys.*, 136:308–323, 1997.
- [81] NOURGALIEV R.R., DINH T.N., THEOFANOUS T.G. et JOSEPH D. : The lattice Boltzmann equation method : theoretical interpretation, numerics and implications. *Int. J. of Multiphase Flow*, 29:117–169, 2003.
- [82] PAOLUCCI S. : On the filtering of sound from the Navier-Stokes equations. Rapport technique SAND82-8257, Sandia National Laboratories, 1982.
- [83] PERTHAME B. : Boltzmann type schemes for gas dynamics and the entropy property. *SIAM J. Numer. Anal.*, 27(6):1405–1421, 1990.
- [84] PERTHAME B. : Second-order Boltzmann schemes for compressible Euler equations in one and two space dimensions. *SIAM J. Numer. Anal.*, 29(1):1–19, 1992.
- [85] PERTHAME B. : Introduction to the collision models in Boltzmann's theory. In P.-A. RAVIART, éditeur : *Modeling Of Collisions*, Series in Applied Mathematics. Gauthier-Villars, Paris, France, 1998.
- [86] POUPINET S. : Gerris : a tree-based adaptive solver for the incompressible Euler equations in complex geometries. *J. Comp. Phys.*, 190(2):572–600, 2003.

- [87] QIU Y. : Etude des équations d'Euler et de Boltzmann et de leur couplage. Application à la simulation numérique d'écoulements hypersoniques raréfiés. Thèse de l'Université Pierre et Marie Curie (Paris 6). 1993.
- [88] RIDER W.J. et KOTHE D.B. : Reconstructing volume tracking. *J. Comp. Phys.*, 141(2):112–152, 1998.
- [89] RIEPER F. : Influence of cell geometry on the behaviour of the first-order Roe scheme in the low Mach number regime. In R. EYMARD et J.-M. HÉRARD, éditeurs : *Finite Volumes for Complex Applications V*, pages 625–632. Wiley, 2008.
- [90] RIEPER F. et BADER G. : The influence of cell geometry on the accuracy of upwind schemes in the low Mach number regime. *J. Comp. Phys.*, 228(8):2918–2933, 2009.
- [91] ROE P.L. : Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes. *J. Comp. Phys.*, 43:357–372, 1981.
- [92] SAUREL R. et ABGRALL R. : A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. *J. Comp. Phys.*, 150(2):425–467, 1999.
- [93] SCHOCHET S. : Fast singular limits of hyperbolic PDEs. *Journal of Differential Equation*, 114:476–512, 1994.
- [94] TOSCANI G. : Entropy production and the rate of convergence to equilibrium for the Fokker-Planck equation. *Quart. Appl. Math.*, 57(3):521–541, 1999.
- [95] TURKEL E. : Preconditioned methods for solving the incompressible and low speed compressible equations. *J. Comp. Phys.*, 72:277–298, 1987.
- [96] TURKEL E. : Review of preconditioning methods for fluid dynamics. *Applied Numerical Mathematics*, 12:257–284, 1993.
- [97] UHLENBECK G.E. et FORD G.W.. In American Mathematical SOCIETY, éditeur : *Lectures in Statistical Mechanics*. Providence, Rhode Island, 1963.
- [98] VIDOVIĆ D., SEGAL A. et WESSELING P. : A superlinearly convergent Mach-uniform finite volume method for the Euler equations on staggered unstructured grids. *J. Comp. Phys.*, 217:277–294, 2006.
- [99] VILLEDIEU P. et MAZET P.-A. : Schémas cinétiques pour les équations d'Euler hors équilibre thermochimique. *La Recherche Aéronautique*, édition Gauthier-Villars, 2:85–102, 1995.
- [100] VOLPE G. : Performance of compressible flow codes at low Mach number. *AIAA Journal*, 31(1):49–56, 1993.
- [101] VON WALDMANN L. et TRÜBENBACHER E. : Formale kinetische theorie von gasgemischen aus anregbaren molekülen. *Zeitschrift Für Naturforschung*, 17(a):363–376, 1962.
- [102] WANG-CHANG C.S. et UHLENBECK G.E. : Transport phenomena in polyatomic gases. Rapport technique CM-681, University of Michigan, 1951.
- [103] WOLF-GLADROW D. : A lattice Boltzmann equation for diffusion. *J. of Stat. Physics*, 79(5-6):1023–1032, 1995.

Résumé

Ce mémoire résume les travaux que nous avons réalisés de 1995 à 2010. Ces travaux ont eu pour thème l'étude et la discrétisation, d'une part, de modèles cinétiques de type Fokker-Planck ou de type Boltzmann semi-classiques et, d'autre part, de modèles fluides de type Euler ou de type Navier-Stokes à bas nombre de Mach. L'équation de Fokker-Planck étudiée modélise les collisions entre ions et électrons dans un plasma chaud, et concerne ici la fusion par confinement inertiel. Les équations de Boltzmann semi-classiques étudiées sont de deux types. Le premier type modélise la réaction de fusion thermonucléaire entre un ion deutérium et un ion tritium donnant une particule α et un neutron, et concerne également ici la fusion par confinement inertiel. Le deuxième type – connu sous le nom d'équations de Wang-Chang & Uhlenbeck – modélise ici les transitions d'énergie quantique dans les couches électroniques d'atomes d'uranium et de fer provoquées par les collisions entre ces mêmes atomes au sein du procédé SILVA de *Séparation Isotopique par Laser sur Vapeur Atomique*. Nous avons étudié les propriétés de base de ces deux types d'équations de Boltzmann semi-classiques, et, dans le cas des équations de Wang-Chang & Uhlenbeck, nous avons proposé un algorithme de couplage cinétique-fluide. L'étude de cet algorithme nous a incité à étudier la notion de relaxation dans un mélange binaire de gaz et de fluides non-miscibles, et à souligner les points communs de cette approche avec la théorie cinétique standard. L'étude de modèles moyennés pour des mélanges de fluides non-miscibles nous a amené à proposer et à discrétiser un modèle sans ondes acoustiques modélisant la déformation d'une interface entre deux fluides non-miscibles provoquée par de forts gradients thermiques à bas nombre de Mach. Puis, afin d'améliorer la précision des calculs tout en maîtrisant le coût, nous avons également étudié la possibilité de résoudre sur un maillage dynamique de type AMR un modèle simplifié de déformation d'interface. Ces études à bas nombre de Mach nous ont également incités à analyser sur maillage cartésien le mauvais comportement à bas nombre de Mach des schémas de type Godunov appliqués au système d'Euler compressible. Enfin, nous avons justifié l'algorithme LBM dans le cas de l'équation de la chaleur.

Mots clés : opérateur de Fokker-Planck-Landau, équation de Boltzmann, théorème H, entropie, schéma entropique, relaxation, développement de Chapman-Enskog, couplage cinétique-fluide, écoulement à bas nombre de Mach, algorithme AMR, schéma de Godunov à bas nombre de Mach, algorithme LBM.

Abstract

This thesis summarizes our work between 1995 and 2010. It concerns the analysis and the discretization of Fokker-Planck or semi-classical Boltzmann kinetic models and of Euler or Navier-Stokes fluid models at low Mach number. The studied Fokker-Planck equation models the collisions between ions and electrons in a hot plasma, and is here applied to the inertial confinement fusion. The studied semi-classical Boltzmann equations are of two types. The first one models the thermonuclear reaction between a deuterium ion and a tritium ion producing an α particle and a neutron particle, and is also in our case used to describe inertial confinement fusion. The second one – known as the Wang-Chang & Uhlenbeck equations – models the transitions between electronic quantified energy levels of uranium and iron atoms in the AVLIS isotopic separation process. We studied the basic properties of these two Boltzmann equations, and, for the Wang-Chang & Uhlenbeck equations, we proposed a kinetic-fluid coupling algorithm. This kinetic-fluid coupling algorithm incited us to study the relaxation concept for gas and immiscible fluids mixtures, and to underline connections with classical kinetic theory. Then, we proposed a diphasic low Mach number model without acoustic waves to model the deformation of the interface between two immiscible fluids induced by high heat transfers at low Mach number. And, to increase the accuracy of the results without increasing computational cost, we studied an AMR algorithm on a simplified interface deformation model. These low Mach number studies also incited us to analyse on cartesian meshes the inaccuracy at low Mach number of Godunov schemes. Finally, we justified the LBM algorithm applied to the heat equation.

Key words : Fokker-Planck-Landau operator, Boltzmann equation, H-theorem, entropy, entropic scheme, relaxation, Chapman-Enskog expansion, kinetic-fluid coupling, low Mach number flow, AMR algorithm, Godunov scheme at low Mach number, LBM algorithm.