



HAL
open science

Sur la modélisation physique et numérique du changement de phase interfacial lors d'impacts de vagues

Matthieu Ancellin

► **To cite this version:**

Matthieu Ancellin. Sur la modélisation physique et numérique du changement de phase interfacial lors d'impacts de vagues. Mathématiques générales [math.GM]. Université Paris Saclay (COmUE), 2017. Français. NNT : 2017SACLN010 . tel-01512951

HAL Id: tel-01512951

<https://theses.hal.science/tel-01512951>

Submitted on 24 Apr 2017

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.

NNT : 2017SACLN010

THÈSE DE DOCTORAT
DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY
PRÉPARÉE À
L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE CACHAN
(ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE PARIS-SACLAY)

Ecole doctorale n° 574
École doctorale de mathématiques Hadamard
Spécialité de doctorat : Mathématiques appliquées

par

M. MATTHIEU ANCELLIN

Sur la modélisation physique et numérique du
changement de phase interfacial lors d'impacts de vagues

Thèse présentée et soutenue à Cachan, le 30 mars 2017.

Composition du Jury :

M. BARRY KOREN	Professeur, TU Eindhoven	(Président du jury)
M. FAYSSAL BENKHALDOUN	Professeur, Université Paris 13	(Rapporteur)
M. DOMINIQUE LEGENDRE	Professeur, IMFT	(Rapporteur)
Mme LAURE QUIVY	Maitre de conférence, ENS Paris-Saclay	(Examinatrice)
M. DEVARAJ VAN DER MEER	Professeur, Universiteit Twente	(Examineur)
M. JEAN-MICHEL GHIDAGLIA	Professeur, ENS Paris-Saclay	(Directeur de thèse)
M. LAURENT BROSSET	Ingénieur, Gaztransport & Technigaz	(Co-encadrant)

« Oh, tu fais un drôle de métier, toi. »

À mes grands-parents.

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mes encadrants, Jean-Michel Ghidaglia et Laurent Brosset. Ils ont permis la réalisation de ce travail à la fois par leurs compétences techniques, leur rigueur scientifique et leur soutien bienveillant durant cette thèse.

Je remercie également les membres du jury d'avoir accepté d'évaluer ma thèse, et notamment ceux venus de loin pour ma soutenance.

Cette thèse a été co-financée par Gaztransport & Technigaz (GTT) et l'Association Nationale de la Recherche et de la Technologie (ANRT) dans le cadre de la convention CIFRE n° 2013/1301. Je remercie ces deux structures, ainsi que mes supérieurs, notamment Frédéric Lormier et Florent Ouvrard, pour m'avoir laissé une grande liberté pour mener mon travail de recherche.

Je remercie également tout l'entourage professionnel auprès de qui j'ai passé ces trois années : toute l'équipe des mouvements de liquide chez GTT ainsi que l'équipe du CMLA à l'ENS de Cachan.

Merci à Olivier Teboul et Florian de Vuyst par l'intermédiaire de qui j'ai mis un pied au CMLA en 2011. Merci à Virginie, Micheline, Alina, Véronique et Sandra pour leur efficacité en toutes circonstances. Merci à Atman pour la soutenance en cinémascope.

Merci aussi à tous les collègues de bureau et de travail que j'ai côtoyé et avec qui j'ai échangé pendant cette thèse : Suzanne, Michaël, Joris, Amine, toute l'équipe d'Eurobios, Thibault, Marie, Maxime, Lei, Mohammed, Vivien, Arthur, Emmanuel, John, Ali, les nouveaux embauchés au CEA qui sont passés bien trop vite au LRC et enfin ceux à qui je demande de m'excuser de les avoir oubliés dans cette liste.

Bonne continuation à Hannes, Rien, Rainer et les autres pour la suite de l'étude des impacts de vagues.

Je remercie les membres de ma famille et les amis qui m'ont accompagné pendant ces trois ans. Merci à Nicolas pour le soutien et l'amitié constante. Merci enfin à Prisca.

Table des matières

0	Introduction	5
0.1	Contexte	5
0.2	Quelques travaux sur les impacts de vague causés par le ballotement	7
0.2.1	Expérimental	7
0.2.2	Numérique	9
0.3	Cadre de cette thèse et hypothèses	9
0.3.1	Changement de phase et composition du gaz naturel.	9
0.3.2	Où et quand attendre du changement de phase?	10
0.3.3	Simulation numérique de l'impact	11
0.4	Plan de la thèse	11
1	Le changement de phase en mécanique des fluides numérique	13
1.1	Changement de phase et lois d'état	13
1.1.1	Une loi d'état cubique	13
1.1.2	Loi d'état d'équilibre	18
1.1.3	Deux lois d'état	18
1.2	Échelles spatiales	20
1.2.1	Modèles microscopiques	21
1.2.2	Modèles mésoscopiques	21
1.2.3	Modèles macroscopiques directs	22
1.2.4	Modèles macroscopiques moyennés	26
1.2.5	Échelles multiples	28
1.3	Échelles temporelles	28
1.3.1	Hors-équilibre	29
1.3.2	Équilibre thermodynamique interfacial	30
1.3.3	Modèles quasi-statique	30
1.4	Synthèse	31
2	Modélisation du changement de phase à une interface franche	33
2.1	Conditions d'interface	33
2.1.1	Équations de conservation monofluide	34
2.1.2	Bilan de masse	35
2.1.3	Bilan de quantité de mouvement	35
2.1.4	Bilan d'énergie	35
2.1.5	Bilan d'entropie	36
2.1.6	Courbe de Hugoniot	37
2.2	Relations de fermeture	38
2.2.1	Généralités	38
2.2.2	Thermodynamique hors équilibre à l'interface	39
2.2.3	Lien avec la relation de Hertz-Knudsen	41
2.3	Équations de conservation	43
2.3.1	Le modèle	43
2.3.2	Interprétation du terme non-conservatif	44
2.3.3	Conditions aux limites	45
2.3.4	Forme lagrangienne 1D	46
2.4	Problème de Riemann pour $J = \text{cst.}$	46
2.5	Équations de conservation moyennées	49

2.5.1	Modèle bivitesse	50
2.5.2	Modèle monovitesse isotherme	53
2.6	Conclusion	57
3	Méthodes volumes finis	61
3.1	Généralités	61
3.1.1	Système hyperbolique	61
3.1.2	Volumes finis	62
3.1.3	Notations 1D	63
3.2	Le schéma VFFC	64
3.2.1	VFFC « μ moyen »	64
3.2.2	VFFC « l amont »	64
3.3	Termes non-conservatifs	65
3.3.1	Schéma général	66
3.3.2	Application au changement de phase	69
3.4	Principe du maximum	70
3.4.1	Sans changement de phase	70
3.4.2	Avec changement de phase	73
3.5	Schéma à reconstruction d'interface	74
3.5.1	Présentation	74
3.5.2	Condition d'entropie	76
3.5.3	Généralisation	76
4	Implémentation du modèle de changement de phase	79
4.1	Implémentation du modèle moyenné	79
4.2	Implémentation dans le schéma à reconstruction d'interface	82
4.2.1	Flux numérique et schéma	82
4.2.2	Bilan d'entropie	84
4.3	Diffusion thermique implicite 1D	85
4.4	Cas tests isothermes	86
4.4.1	Changement de phase forcé isotherme 1D	86
4.4.2	Changement de phase forcé isotherme 2D	91
4.4.3	Problème de Riemann isotherme avec changement de phase	94
4.5	Cas tests de retour à l'équilibre liquide-vapeur	98
4.5.1	Diffusion numérique seule	98
4.5.2	Convergence avec diffusion thermique	102
4.5.3	Effet de la conductivité thermique	105
4.6	Conclusion	108
5	Application au problème du piston	109
5.1	Quelques modèles de Bagnold 0D	109
5.1.1	Le modèle de Bagnold original (adiabatique)	109
5.1.2	Préliminaires à l'extension du modèle de Bagnold	112
5.1.3	Le modèle de Bagnold avec échange thermique	114
5.1.4	Le modèle de Bagnold avec changement de phase	119
5.2	Le problème du piston (Bagnold 1D)	130
5.2.1	Présentation	130
5.2.2	Adimensionnement	130
5.2.3	Oscillations sans changement de phase	132
5.2.4	Changement de phase	136
6	Conclusion	139
6.1	Bilan	139
6.2	Perspectives	141
A	Conditions interfaciales avec viscosité	145

B Étude de la matrice jacobienne pour le modèle eulérien	147
B.1 Résultats thermodynamiques préliminaires	147
B.2 Étude de la matrice jacobienne	149
B.2.1 Calcul de la matrice jacobienne	149
B.2.2 Éléments propres	150
C Étude de la matrice jacobienne pour le modèle lagrangien	153
D Inversion de la loi d'état pour un mélange de deux gaz raidis	155
Table des notations	157
Bibliographie	158

Chapitre 0

Introduction

0.1 Contexte

Le stockage et le transport du gaz naturel est un enjeu économique et énergétique majeur. Pour optimiser la quantité de gaz stockée dans un volume limité, le gaz naturel peut être refroidi jusqu'à sa température de condensation 111 K (voir Figure 0.1). À cette température, le changement de phase liquide-vapeur permet de transformer le gaz sous forme liquide et d'augmenter ainsi 600 fois sa densité ($\rho \simeq 430 \text{ kg m}^{-3}$).

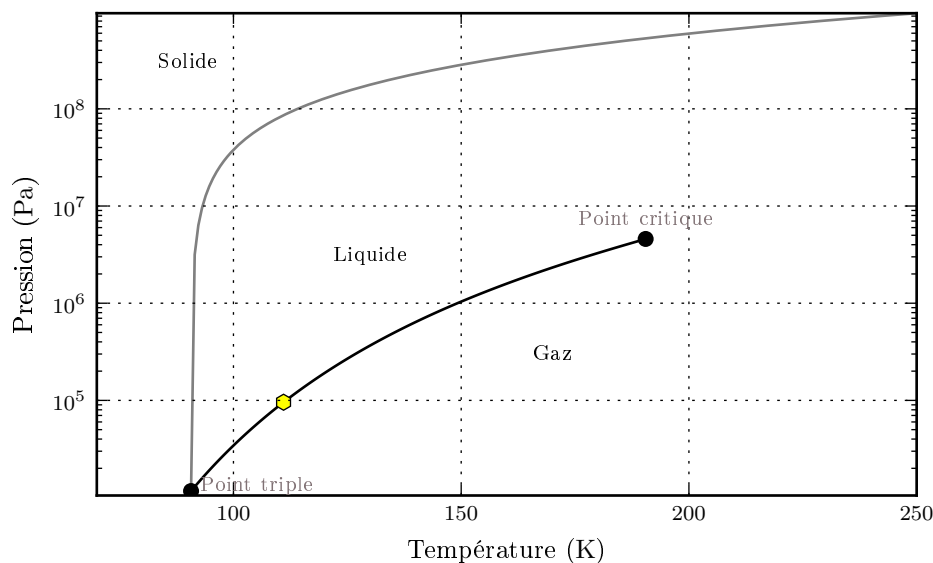


FIGURE 0.1 – Diagramme des phases du méthane d'après l'équation d'état *Quickmethane* [LGRF17]. Le point noir en bas à gauche est le point triple (90.7 K, 0.11 bar) où cohabitent les trois phases, celui en haut à droite est le point critique (190.5 K, 45.8 bar) (voir aussi le Paragraphe 1.1.1). La courbe noire les reliant est la courbe d'équilibre liquide-vapeur, ou courbe de saturation. Le point jaune (111 K, 1 bar) le long de la courbe de saturation correspond aux conditions de transport du gaz naturel liquéfié.

Pour son transport maritime, le Gaz Naturel Liquéfié (GNL ou en anglais LNG) est confiné par une membrane fixée à la coque du navire. Celle-ci assure l'étanchéité et l'isolation thermique de la cuve. Un méthanier se compose typiquement de quatre à cinq cuves d'une taille d'environ $40 \text{ m} \times 40 \text{ m} \times 27 \text{ m}$ (voir Figure 0.2).

En cas de mer agitée, le liquide à l'intérieur des cuves peut heurter violemment la membrane. L'entreprise GTT (*Gaztransport & Technigaz*), qui conçoit et dimensionne les membranes, doit donc pouvoir estimer ces contraintes sur la paroi pour garantir l'intégrité de la cuve. Le ballotement du liquide (en



FIGURE 0.2 – À gauche : méthanier. À droite : inspection d’une cuve équipée de la technologie *Mark III* développée par GTT. Les corrugations permettent à la membrane métallique en inox de se déformer légèrement avec la dilatation thermique.



FIGURE 0.3 – Modèle de cuve à l’échelle 1/40 (environ 1 m^3) sur un hexapode simulant les mouvements du navire. Des capteurs mesurent les pressions maximales à la paroi lors des impacts de liquide.

anglais *sloshing*) est donc un sujet d’étude majeur pour GTT. Aujourd’hui, la seule méthode reconnue par les industriels et les sociétés de classification pour la prédiction des contraintes à la paroi est la modélisation expérimentale à petite échelle [GSM09]. Pendant la conception de chaque nouveau navire, les mouvements qui seront imposés au liquide par le bateau sont calculés et imposés à un modèle de cuve à l’échelle 1/40 (voir Figure 0.3).

L’enjeu scientifique principal est alors l’extrapolation du comportement du liquide à grande échelle à partir des essais à petite échelle. L’accélération de la pesanteur étant la même dans l’expérience à petite échelle et dans la cuve à grande échelle, le rythme des mouvements imposés à la cuve par l’hexapode est augmenté d’un facteur $\sqrt{\lambda}$, où λ est le facteur d’échelle [KBGK14]. Par ailleurs, les essais sont effectués avec pour gaz un mélange d’hexafluorure de soufre (SF_6) et d’azote (N_2) afin d’avoir le même rapport de densité qu’à grande échelle, le rapport de densité étant défini par

$$\text{DR} = \frac{\rho_g}{\rho_l},$$

où ρ_g est la densité du gaz et ρ_l est la densité du liquide. Ces invariances permettent une bonne reproduction à petite échelle des mouvements du liquide à grande échelle [KBGK15].

Cependant, lors d'un impact, d'autres grandeurs, comme la compressibilité du gaz ou la tension de surface entre le liquide et le gaz jouent un rôle important sur la valeur de la pression maximale à la paroi. Ces grandeurs ne peuvent pas être mise à l'échelle et des biais sont donc introduits dans la modélisation. La compréhension de ces biais et leur quantification est un sujet de recherche actif.

Cette thèse s'intéresse en particulier à un de ces biais : le changement de phase liquide-vapeur. Comme évoqué précédemment, le GNL est à l'équilibre thermodynamique avec sa vapeur dans la cuve du méthanier. Des perturbations peuvent donc causer le changement de phase du fluide par condensation ou évaporation. Lors d'un impact, d'importantes variations de pression peuvent avoir lieu localement et causer un changement de phase. Celui-ci va influencer les pressions d'impact et les contraintes à la paroi.

0.2 Quelques travaux sur les impacts de vague causés par le balotement

Dans cette section, quelques études expérimentales et numériques pour la description de l'impact d'une vague à une paroi sont passées en revue.

0.2.1 Expérimental

De nombreuses études expérimentales ont été menées, notamment par GTT et ses partenaires, pour comprendre la physique de l'impact d'une vague sur une paroi. Dans ce paragraphe, on prendra comme exemple le projet *Sloshel*, organisé par un consortium industriel et mené à bien par l'institut de recherche néerlandais MARIN. Les tests effectués et leurs résultats sont présentés dans [BLBK10].

Dans un canal, un batteur à houle a été utilisé pour générer par focalisation une vague déferlante. Les impacts de ces vagues sur une paroi ont été filmés et mesurés par des capteurs de pression. Un exemple d'un tel impact est présenté à la Figure 0.4. Le contrôle précis des mouvements du batteur permet une répétabilité de la forme globale de la vague.

Cette étude a conduit à la décomposition d'un impact en trois chargements élémentaires (en anglais *Elementary Loading Processes* ou *ELP*) [LBB12]. Le premier est l'impact direct du liquide sur la paroi. Il est régi notamment par la compressibilité du liquide et l'élasticité de la paroi. Le second correspond au changement de direction du liquide à la paroi et en particulier à la formation d'un jet. Enfin le troisième chargement élémentaire correspond à la compression de poches de gaz, comme celle visible sur la Figure 0.4. Ce chargement dépend notamment de la compressibilité du gaz.

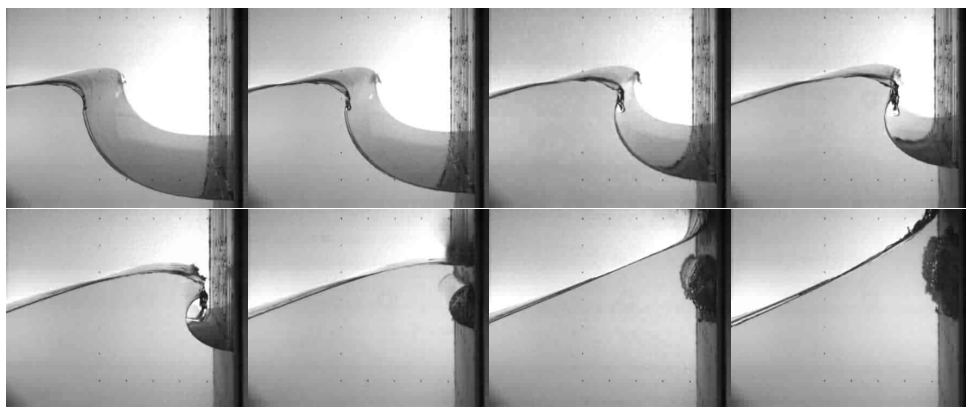


FIGURE 0.4 – Impact d'une vague déferlante sur une paroi, à l'échelle 1/6, étudié par le projet *Sloshel* [BLBK10].

Cependant, cette étude a été réalisée avec de l'eau et de l'air et ne prend donc pas en compte la possibilité du changement de phase liquide-vapeur. A ce jour, cet effet n'a été mesuré que par une seule étude expérimentale, réalisée en 2007 par GTT en partenariat avec ExxonMobil et l'institut de recherche norvégien Marintek. Les conclusions de cette étude ont été publiées dans [MB09].

Des tests de ballotement d'une cuve parallélépipédique ont été menés avec plusieurs gaz. Les mêmes tests ont été réalisés avec de l'eau et de l'air, et avec de l'eau et sa vapeur à saturation. Les conditions de température et de pression ont été choisies de manière à étudier plusieurs rapports de densité gaz-liquide et évaluer son influence. En comparant les signaux de pression avec et sans changement de phase pour le même rapport de densité, deux phénomènes ont été remarqués : d'une part une diminution statistique des pressions maximales et d'autre part un amortissement des oscillations des poches de gaz. Cet amortissement est illustré par l'exemple donné à la Figure 0.5.

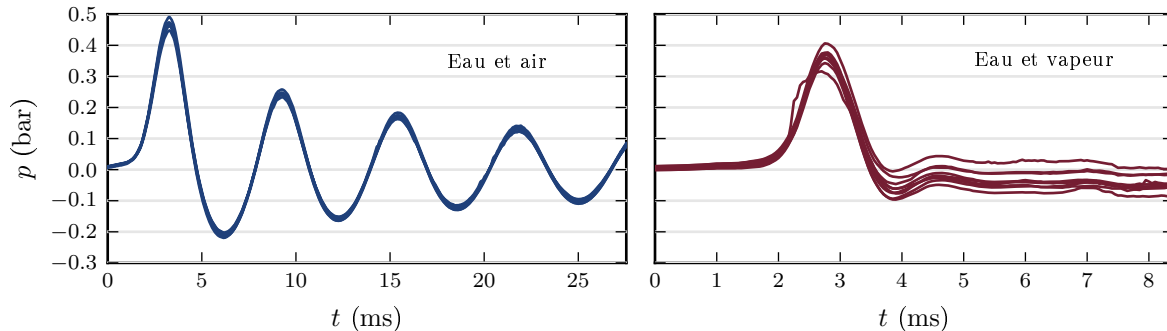


FIGURE 0.5 – Évolution de la pression sur les neuf capteurs pour un impact avec poche de gaz typique avec de l'eau et de l'air (à gauche) et de l'eau et sa vapeur (à droite). La présence d'une poche de gaz se reconnaît grâce à l'homogénéité de la pression sur les neuf capteurs [MB09]. Ces deux mesures ne correspondent pas exactement aux mêmes conditions (la forme de la vague n'est pas connue) et ne peuvent être comparées que qualitativement.

Il est remarquable que ce phénomène d'amortissement concerne tous les signaux de pression mesurés lors des tests. L'amortissement peut être quantifié en introduisant la *variation totale* TV d'un signal $p(t)$ comme

$$TV[p] = \int \left| \frac{dp}{dt} \right| dt.$$

Pour un pic de pression sans oscillation, la variation totale vaut deux fois la hauteur du pic. Sur la Figure 0.6, la variation totale du signal a été comparée à son amplitude $\max(p) - \min(p)$ pour un grand nombre d'impacts générés dans des conditions similaires avec d'une part de l'eau et de l'air, et d'autre part de l'eau et sa vapeur. Tous les impacts avec changement de phase sont plus proches de la ligne discontinue grise qui est caractéristique d'un seul pic sans oscillation.

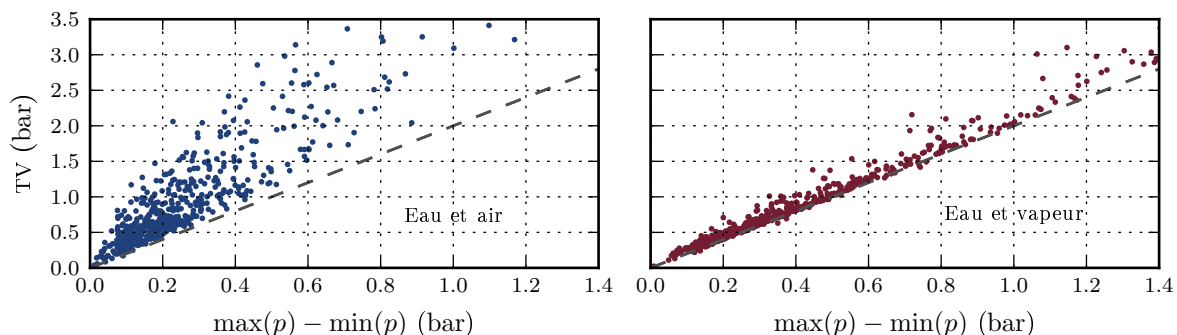


FIGURE 0.6 – Variation totale et amplitude du signal de pression sur le capteur n° 5 pour tous les impacts (environ 2×500) de plusieurs tests avec le même ratio de densité et le même remplissage, pour de l'eau et de l'air (à gauche) et de l'eau et sa vapeur (à droite). La ligne discontinue grise est la droite $y = 2x$.

Remarque 0.1. La variation totale pour un signal oscillant (comme celui mesuré à la Figure 0.5 pour l'eau et l'air) dépend de la durée d'enregistrement du signal. Le résultat quantitatif dépend donc fortement

du critère choisi pour identifier et enregistrer un impact pendant l'expérience. Cependant, il permet de faire qualitativement la différence entre un signal oscillant et un signal non-oscillant. <

Le problème de l'impact avec poche de gaz peut être étudié avec le scénario simplifié d'un piston comprimant une poche de gaz en 1D. Dans [ABG12], ce problème simple a été simulé par un modèle de Bagnold enrichi d'une modélisation du changement de phase. Avec ce petit modèle, un amortissement des oscillations est observé (voir aussi la Section 5.1). Le changement de phase est donc un bon candidat pour expliquer le phénomène observé par [MB09].

0.2.2 Numérique

Le modèle de Bagnold est néanmoins trop simple pour décrire la physique de l'ensemble de l'impact. Il ne prend, par exemple, pas en compte la compressibilité du liquide. Cette simplification a été levée dans [BGGL13], où un scénario de piston compressible a été simulé numériquement. Un effet de la compressibilité du liquide sur les pressions a été observé dans les cas les plus extrêmes.

Un cas test 2D étendant le problème du piston a été proposé par [BBDG09]. Un bloc de liquide rectangulaire est soumis à la gravité et tombe dans une cuve rectangulaire (voir aussi p. 141). L'étude de la pression à la paroi inférieure de la cuve permet de retrouver les principaux phénomènes physiques de l'impact d'une vague, malgré la géométrie simplifiée du problème. Dans [BBDG09], ce problème est résolu par un code volumes finis avec reconstruction de l'interface liquide-vapeur. (Celui-ci est décrit plus en détails à la section 3.5.)

Les simulations numériques les plus fines ont été réalisées par la méthode SPH [GBCL12] [GJC+14] sur le cas test simplifié de référence et sur des formes plus réalistes d'impacts de vagues. Elles ont permis de remettre en évidence les trois chargements élémentaires discutés précédemment.

À ce jour, les seules simulations numériques d'impacts de vagues avec changement de phase sont celles réalisées par Airbus Defense and Space avec le code FLOW-3D [BKRS14] [BGHB16]. Elles prédisent une augmentation du chargement maximal lors de l'impact du liquide ainsi qu'un amortissement des oscillations.

0.3 Cadre de cette thèse et hypothèses

Les derniers paragraphes de cette introduction seront consacrés à la présentation du cadre choisi pour cette thèse et des hypothèses qui seront faites.

0.3.1 Changement de phase et composition du gaz naturel.

Le gaz naturel est un mélange de plusieurs espèces chimiques : principalement du méthane, mais aussi de l'azote, de l'éthane, et quelques autres hydrocarbures. La composition varie d'un site d'extraction à l'autre. Un exemple de composition est donné dans la Table 1.

Pendant le voyage du méthanier, un faible flux de chaleur franchit l'isolation thermique et fait s'évaporer lentement le liquide. Les composés les plus volatils sont les plus présents dans le gaz qui s'évapore (ou en anglais *boil-off gas*). Cette évaporation cause un changement de la composition du GNL (aussi appelé *viellissement* du GNL) au cours du temps.

Espèce		Liquide	Vapeur
Méthane	CH ₄	96 %	90 %
Azote	N ₂	2 %	10 %
Éthane	C ₂ H ₆	1 %	0 %
Propane	C ₃ H ₈	0.5 %	0 %
Butane	C ₄ H ₁₀	0.5 %	0 %

TABLE 1 – Exemple de composition du GNL et du gaz s'évaporant dans un méthanier.

La thermodynamique du changement de phase d'un mélange est complexe. Par soucis de simplicité, on a choisi dans cette thèse de ne traiter que le cas d'une seule espèce chimique. Dans la suite, on supposera toujours que les fluides étudiés sont du méthane pur, gazeux ou liquide (ou éventuellement de l'eau pure et sa vapeur).

0.3.2 Où et quand attendre du changement de phase ?

En première approximation, l'impact d'une vague sur une paroi peut être considéré comme étant une compression adiabatique (sans transfert de chaleur). En effet, pour une diffusivité thermique de l'ordre de $10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, le temps caractéristique de retour à l'équilibre thermique dans un domaine de taille 10^{-1} m est de l'ordre de 10^3 s . La diffusion thermique est donc négligeable pour un impact d'une durée de quelques millisecondes (voir aussi la Section 5.1.3).

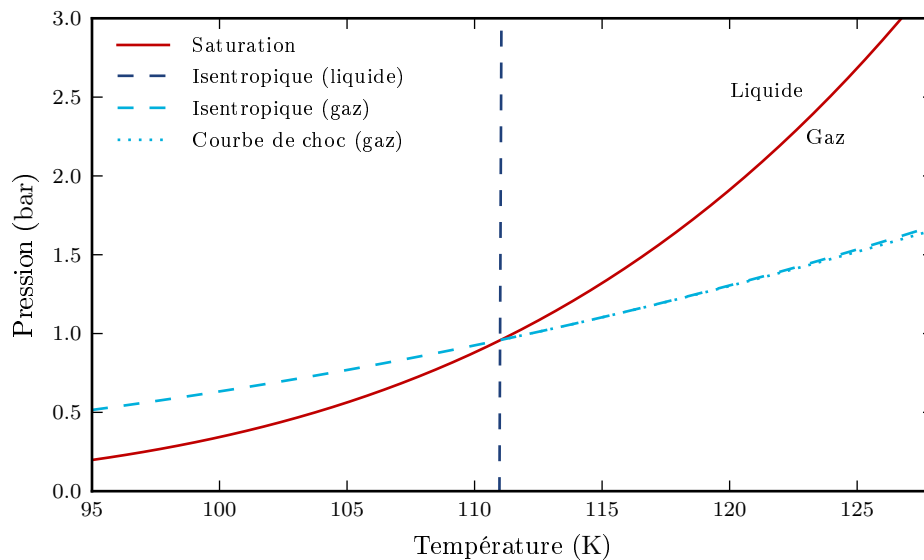


FIGURE 0.7 – Courbe de saturation, courbes isentropiques du gaz et du liquide et courbe de choc du gaz dans un diagramme (T, p) autour de 1 bar et 111 K pour le méthane, d'après l'équation d'état *Quickmethane*.

Sur la Figure 0.7, la courbe de saturation du méthane ainsi que les courbes isentropiques du gaz et du liquide autour de 111 K ont été tracées dans un diagramme (T, p) . Durant une compression isentropique, chacune des deux phases reste dans son domaine de stabilité (le gaz sous la courbe de saturation, le liquide au-dessus). Le passage d'une onde de choc, même si elle n'est pas isentropique, conduit au même résultat. (Ce résultat est étudié mathématiquement dans [HT14].) Il n'y a donc aucune raison d'attendre du changement de phase au sein des phases pures durant l'impact.

Cependant, les températures du gaz et du liquide évoluent différemment durant la compression. Dans une certaine couche limite à l'interface, des déséquilibres thermiques et thermodynamiques peuvent conduire à du changement de phase. Pour cette raison, cette thèse se focalisera uniquement sur la modélisation du changement de phase à une interface.

Lors d'un impact avec une poche de gaz (comme sur la Figure 0.4), la phase de compression peut être suivie par un rebond de la poche de gaz. Lors de ce rebond, la pression du gaz peut devenir inférieure à la pression ambiante. Sur la Figure 0.7, une décompression isentropique conduit chacune des deux phases hors de leurs domaines de stabilité. Il est imaginable de voir du changement de phase au sein des phases pures par nucléation durant ce rebond de la poche de gaz. Ce phénomène ne sera évoqué que brièvement dans cette thèse à la Section 6.2.

Remarque 0.2. Le comportement décrit dans les paragraphes précédents n'est pas propre au méthane. Le même comportement peut être attendu pour l'eau. Les fluides, comme le dodécane, pour lesquels la courbe isentropique du gaz est au-dessus de la courbe de saturation du gaz sont appelés *rétrogrades* [SS99]. <

0.3.3 Simulation numérique de l'impact

Toutes les études numériques évoquées précédemment à la Section 0.2.2 se placent dans le même cadre d'un écoulement de deux phases pures séparées par une interface franche relativement régulière. Après avoir passé en revue les différentes échelles de modélisation du changement de phase dans le premier chapitre, les chapitres suivants reprendront cette hypothèse d'une interface franche à l'échelle macroscopique. Comme évoqué au paragraphe précédent, le changement de phase ne produira pas l'apparition de gouttes ou de bulles, au moins pendant les phases de compression.

Lors d'un impact réel, les instabilités de surface libre, les gouttelettes à la paroi et l'aération du liquide ont sans aucun doute un effet non négligeable sur le changement de phase. Ces phénomènes sont encore mal connus et peu modélisés, même sans changement de phase. Leur couplage avec le changement de phase est donc hors du cadre de cette thèse.

0.4 Plan de la thèse

La suite de ce mémoire s'organise en cinq chapitres de la façon suivante :

Chapitre 1 Le premier chapitre est consacré à l'introduction de concepts généraux pour la description du changement de phase, via un état de l'art des principaux modèles existants en mécanique des fluides numérique. Ce chapitre permet de situer le problème dans la littérature et de choisir parmi les approches existantes la plus appropriée.

Chapitre 2 Dans le second chapitre, l'approche choisie est développée pour obtenir un modèle mathématique d'écoulement bifluide incluant le changement de phase interfacial. Une version moyennée du modèle est proposée.

Chapitre 3 Le troisième chapitre est consacré à une présentation générale des schémas volumes finis qui sont utilisés pour la simulation numérique du problème. La discrétisation des termes non-conservatifs est discutée, ainsi que le respect par le code du principe du maximum sur la fraction massique. Enfin, la reconstruction d'interface du code Flux-IC est présentée plus en détails.

Chapitre 4 Le quatrième chapitre est une présentation de l'implémentation du modèle de changement de phase décrit au chapitre 2 avec les schémas numériques décrits au chapitre 3. Quelques cas tests simples viennent valider la modélisation et la discrétisation du changement de phase.

Chapitre 5 Enfin, le cinquième chapitre est consacré à l'application au problème de l'impact. Dans un premier temps, le petit modèle [ABG12] est présenté sous une nouvelle forme et une étude plus large de l'influence des différents paramètres. Le problème de piston est ensuite résolu en 1D avec le code décrit au Chapitre 4 et ces résultats sont comparés à ceux du petit modèle.

Chapitre 1

Le changement de phase en mécanique des fluides numérique

Les problèmes multiphasiques représentent une part importante de la mécanique des fluides, que ce soit du point de vue théorique, expérimental ou numérique. Dans cette section, une revue de quelques modèles mathématiques utilisés pour ce type de problèmes est présentée, en se focalisant sur la description du changement de phase liquide-vapeur. Pour cela, ces modèles seront ordonnés selon trois critères : le type de loi d'état décrivant les deux phases, l'échelle spatiale du problème et enfin son échelle temporelle. L'introduction de ces modèles servira à présenter un certain nombre de concepts importants pour la compréhension du changement de phase.

De nombreux travaux consacrés au changement de phase mais sans lien direct avec la mécanique des fluides numérique ne seront pas évoqués, ainsi que de nombreux travaux majeurs en mécanique des fluides multiphasique sans changement de phase.

1.1 Changement de phase et lois d'état

D'un point de vue thermodynamique, deux approches existent pour décrire les deux phases d'une même espèce :

Une loi d'état. Les deux phases sont considérées comme deux états d'un même fluide, ayant des densités et des énergies différentes mais ne présentant pas de différence de nature.

Deux lois d'état. Les deux phases sont considérées comme deux espèces distinctes.

Ces deux approches impliquent des descriptions légèrement différentes du changement de phase. Dans la suite de cette section, elles seront développées et comparées.

1.1.1 Une loi d'état cubique

Dans cette partie, la description des deux phases comme deux états d'une seule loi d'état dite cubique sera présentée plus en détails. Pour cela, on s'appuiera sur l'exemple de la loi d'état de van der Waals. L'étude de cette loi permettra d'introduire plusieurs concepts importants relatifs au changement de phase.

La loi d'état de van der Waals

La loi d'état de van der Waals peut être écrite par l'intermédiaire de l'énergie libre f fonction de la densité ρ et de la température T :

$$f(\rho, T) = -rT \left(1 + \log \left(\frac{1}{\rho} - b \right) + \log \left(T^{\frac{3}{2}} \right) \right) - s_0 T - a\rho, \quad (1.1)$$

où $r = \frac{R}{\mathcal{M}}$ avec R la constante des gaz parfaits et \mathcal{M} la masse molaire de l'espèce, a et b sont deux paramètres constants, appelés respectivement le *terme de cohésion* et le *covolume massique*, et s_0 est une entropie de référence.

Grâce à la relation thermodynamique

$$p = \rho^2 \left(\frac{\partial f}{\partial \rho} \right)_T,$$

on peut en déduire la forme $p(\rho, T)$ sous laquelle cette loi d'état est plus connue :

$$p = \frac{rT}{\frac{1}{\rho} - b} - a\rho^2 \iff (p + a\rho^2) \left(\frac{1}{\rho} - b \right) = rT. \quad (1.2)$$

La loi d'état de van der Waals est particulièrement pertinente au voisinage du point critique. Pour cette raison, les coefficients a et b sont souvent exprimés en fonction de la pression critique p_c et de la température critique T_c du fluide :

$$a = \frac{27r^2T_c^2}{64p_c}, \quad b = \frac{rT_c}{8p_c}.$$

Définition 1.1. On appelle loi d'état cubique une loi d'état telle que le volume massique

$$\tau = \frac{1}{\rho}$$

est solution d'un polynôme de degré trois.

Lemme 1.2. *L'équation de van der Waals est une loi d'état cubique.*

Démonstration. La relation (1.2) se réécrit comme

$$\frac{p}{rT}\tau^3 - \left(\frac{p}{rT}b + 1 \right)\tau^2 + \frac{a}{rT}\tau - \frac{ab}{rT} = 0,$$

qui est bien un polynôme de degré trois en τ . □

Il existe un grand nombre de lois d'état cubiques, plus ou moins complexes. Les lois d'état de *Redlich-Kwong* ou *Peng-Robinson* en sont des exemples (voir aussi [FZ06, Section 2.4.3]). Elles décrivent, plus précisément que l'équation de van der Waals, l'état d'un fluide avec changement de phase loin du point critique. Bien que cette dernière soit peu précise pour des calculs quantitatifs, elle sera utilisée comme illustration qualitative dans ce chapitre. Pour cela, les paramètres du point critique du méthane $T_c = 190$ K et $p_c = 46$ bar ont été choisis.

Point critique et courbes spinodales

Sur la Figure 1.1, les isothermes $\rho \mapsto p(\rho, T)$ ont été représentées pour plusieurs températures autour du point critique. Pour des températures inférieures à la température critique T_c , certaines pressions p peuvent être associées à trois valeurs de ρ . La valeur la plus basse correspond à l'état gaz à cette température et à cette pression ; la valeur la plus haute correspond à l'état liquide. La valeur intermédiaire est telle que

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T < 0,$$

ce qui ne correspond pas à un état physique stable thermodynamiquement [MP89], [Car04, p.17].

Les points où

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T = 0,$$

séparent la courbe isotherme en deux domaines stable et un domaine intermédiaire instable. Ils sont appelés points *spinodaux*. Ils sont représentés par des carrés sur l'isotherme $T = 170$ K de la Figure 1.1.

L'ensemble des points spinodaux quand la température varie est appelé *courbe spinodale*. Sur la Figure 1.3, on a représenté en trait discontinu ces courbes dans un diagramme (T, p) . Les deux courbes convergent au point critique. On peut vérifier sur la Figure 1.1 qu'au delà du point critique, les isothermes sont strictement croissantes et qu'il n'existe donc plus ni de domaine instable ni de points spinodaux.

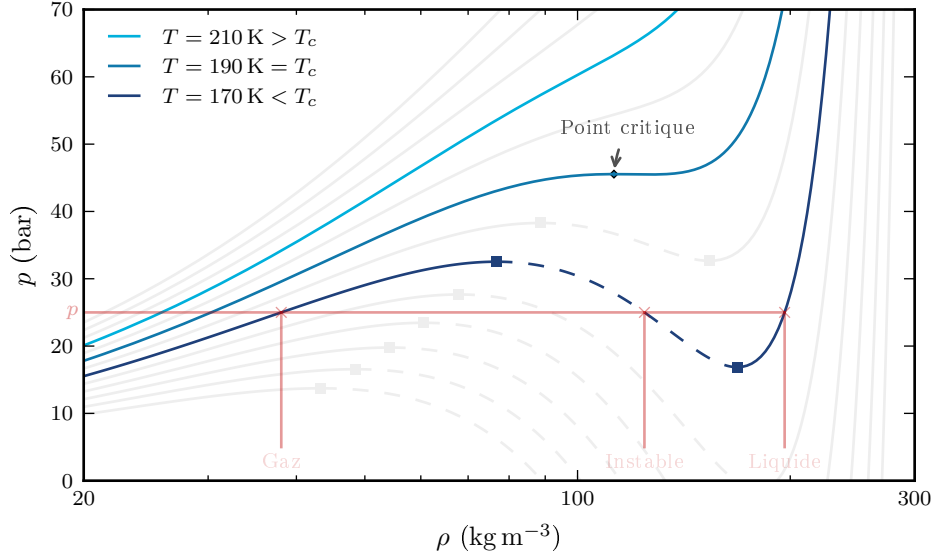


FIGURE 1.1 – Isothermes dans un diagramme (ρ, p) pour l'équation d'état de van der Waals autour du point critique du méthane. La zone instable a été représentée en ligne discontinues. Les marqueurs carrés sont les points spinodaux. En rouge : pour un exemple de pression donnée, les trois densités associées

Équilibre et courbe de saturation

Pour toute température inférieure à la température critique, il y a donc toujours deux états stables (gaz et liquide). L'un de ces deux états peut être plus stable que l'autre, au sens où son potentiel chimique μ serait inférieur.

Remarque 1.3. Pour un corps pur, le potentiel chimique μ , qui peut être défini comme

$$\mu = \left(\frac{\partial \rho e}{\partial \rho} \right)_{\rho s},$$

où e est l'énergie interne spécifique et s l'entropie spécifique, est égal à l'enthalpie libre spécifique g , définie par

$$g = e + p\tau - Ts.$$

Dans cette thèse, les deux grandeurs seront utilisées sans distinction. Cependant, l'extension du modèle au cas d'un mélange de plusieurs espèces demanderait une distinction rigoureuse des deux. \triangleleft

Définition 1.4. On appelle densités de saturation du gaz et du liquide à la température T les densités $\rho_g^{\text{sat}}(T)$ et $\rho_l^{\text{sat}}(T)$ telles que

$$p(\rho_g^{\text{sat}}, T) = p(\rho_l^{\text{sat}}, T), \quad (1.3a)$$

$$\mu(\rho_g^{\text{sat}}, T) = \mu(\rho_l^{\text{sat}}, T). \quad (1.3b)$$

On appelle pression de saturation et on note $p^{\text{sat}}(T)$ la pression associée à ces états. On appelle courbe de saturation l'ensemble des points $(T, p^{\text{sat}}(T))$.

Lemme 1.5. La pente de la courbe de saturation à T est donnée par la formule de Clapeyron :

$$\frac{dp^{\text{sat}}}{dT} = \frac{h_l^{\text{sat}} - h_g^{\text{sat}}}{T \left(\frac{1}{\rho_l^{\text{sat}}} - \frac{1}{\rho_g^{\text{sat}}} \right)}, \quad (1.4)$$

où h_k^{sat} est l'enthalpie spécifique de la phase k à la température T et à la densité de saturation $\rho_k^{\text{sat}}(T)$.

Démonstration. Pour une phase pure, le potentiel chimique μ s'identifie à l'enthalpie libre spécifique g . On a donc l'identité thermodynamique

$$d\mu = \tau dp - s dT.$$

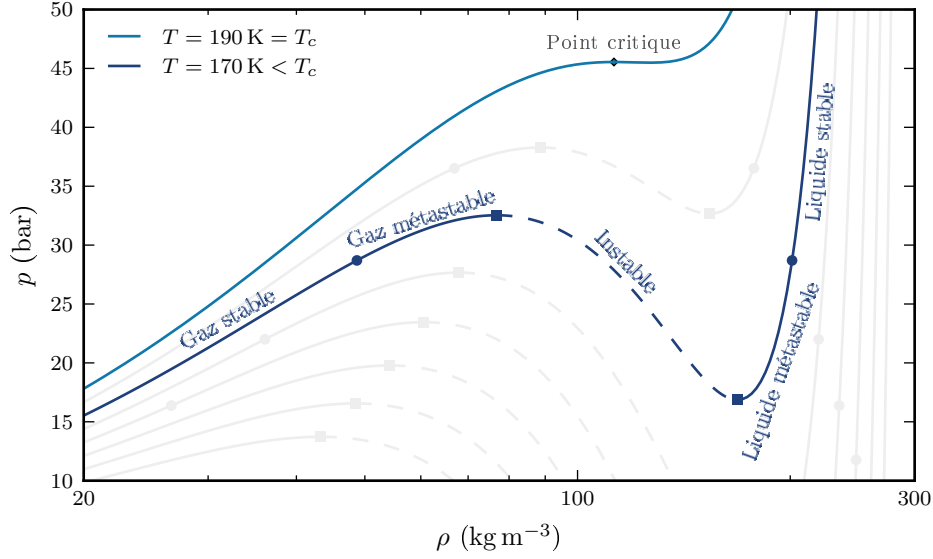


FIGURE 1.2 – Isothermes dans un diagramme (ρ, p) pour l'équation d'état de van der Waals en dessous du point critique du méthane. Les marqueurs carrés sont les points spinodaux. Les marqueurs circulaires sont les densités et pressions de saturation.

Par ailleurs l'égalité des potentiels chimiques le long de la courbe de saturation s'écrit

$$\mu_g(p^{\text{sat}}(T), T) = \mu_l(p^{\text{sat}}(T), T).$$

En différenciant cette dernière équation avec l'aide de l'identité précédente, on obtient

$$\tau_g \frac{dp^{\text{sat}}}{dT} dT - s_g dT = \tau_l \frac{dp^{\text{sat}}}{dT} dT - s_l dT,$$

c'est-à-dire

$$\frac{dp^{\text{sat}}}{dT} = \frac{s_l - s_g}{\tau_l - \tau_g}.$$

Or, par définition de l'enthalpie libre $\mu = g = h - Ts$, l'égalité des potentiels chimiques donne

$$s_l - s_g = \frac{h_l - h_g}{T},$$

ce qui permet de conclure. □

Remarque 1.6. La relation de Clapeyron (1.4) implique que la forme de la courbe de saturation dépend du rapport de la chaleur latente sur le ratio de densité. En définissant les nombres sans dimension

$$\Lambda = \frac{h_g^{\text{sat}} - h_l^{\text{sat}}}{p^{\text{sat}} \tau_g^{\text{sat}}}, \quad \text{DR} = \frac{\rho_g^{\text{sat}}}{\rho_l^{\text{sat}}},$$

qui sont la *chaleur latente adimensionnée* et le *rapport de densité à saturation*, la formule de Clapeyron (1.4) se réécrit

$$\frac{dp^{\text{sat}}}{dT} \frac{T}{p^{\text{sat}}} = \frac{\Lambda}{1 - \text{DR}}. \quad (1.5)$$

Dans le cas limite $1 - \text{DR} \ll \Lambda$, la pente de la courbe de saturation tend vers l'infini. Le problème du changement de phase ne dépend alors plus de la pression, mais seulement de la thermique. C'est le cas pour le changement de phase liquide-solide (voir aussi Figure 0.1).

Dans le cas limite contraire $1 - \text{DR} \gg \Lambda$, la pente de la courbe de saturation tend vers zéro. Le problème ne dépend plus de la température mais seulement de la pression. C'est le cas de certaines transitions de phase solide-solide.

Le cas du changement de phase liquide-vapeur est un cas intermédiaire où la pression et la température entrent toutes les deux en jeu. À titre d'illustration, on a pour le méthane à 111 K : $1 - \text{DR} \simeq 1$ et $\Lambda \simeq 7$, et pour l'eau à 373 K : $1 - \text{DR} \simeq 1$ et $\Lambda \simeq 20$. ◁

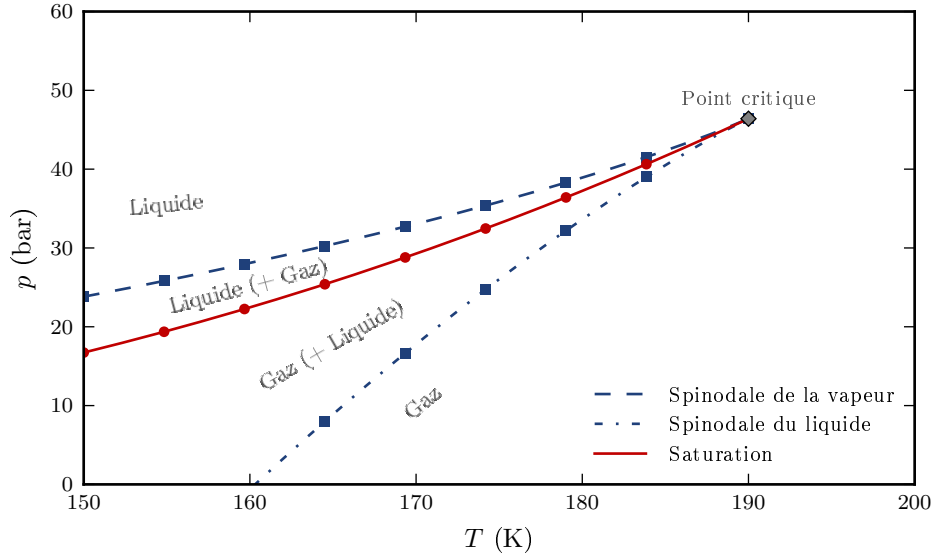


FIGURE 1.3 – Courbe de saturation et courbes spinodales dans un diagramme (T, p) pour l'équation d'état de van der Waals autour du point critique du méthane. La courbe de saturation a été calculée par la résolution numérique de (1.3).

Remarque 1.7. De manière plus anecdotique, [Mor14] montre que pour certaines lois d'état (dont la loi d'état de van der Waals), l'égalité thermodynamique suivante, obtenue à partir des dérivées secondes croisées de g ,

$$\frac{\partial \tau}{\partial T} + \frac{\partial s}{\partial p} = 0,$$

peut être réécrite comme une équation aux dérivées partielles hyperbolique sur $\tau(p, T)$. La courbe de saturation est une discontinuité de densité qui s'interprète comme un choc dans le diagramme (T, p) . Le point critique peut être vu comme une catastrophe de gradient et la formule de Clapeyron comme une condition de Rankine-Hugoniot. \triangleleft

La densité de saturation du gaz (respectivement du liquide) sépare la branche de l'isotherme correspondant au gaz (respectivement du liquide) en deux domaines : un domaine stable et un domaine métastable. Contrairement aux états instables entre les points spinodaux, les états métastables ont du sens thermodynamiquement et un fluide dans un tel état peut être observé expérimentalement (bien que brièvement).

Cependant, le fluide dans cet état tendra, si il en a l'occasion, à changer de phase pour rejoindre un état de plus faible potentiel chimique. Dans la suite de cette thèse, c'est le passage à travers l'interface liquide-vapeur qui permettra cette minimisation du potentiel chimique.

Les perturbations microscopiques de densité du fluide peuvent fournir au fluide une autre opportunité de changer de phase en formant localement de nouvelles interfaces liquide-vapeur. La formation d'une bulle (respectivement d'une goutte) dans le fluide métastable est alors observée. On appelle *nucléation* un tel processus de changement de phase.

Expérimentalement, on observe [FZ06, Table 2.7, p. 171] que le taux de nucléation est faible pour un fluide métastable proche de la courbe de saturation. Il augmente quand l'état s'éloigne de la courbe de saturation et diverge à l'approche de la courbe spinodale.

Application des lois cubiques à la mécanique des fluides

Les lois d'état cubiques décrivent qualitativement très bien le changement de phase liquide-vapeur. Cependant elles sont complexes à manipuler. Leur utilisation avec les équation d'Euler est difficile, que ce

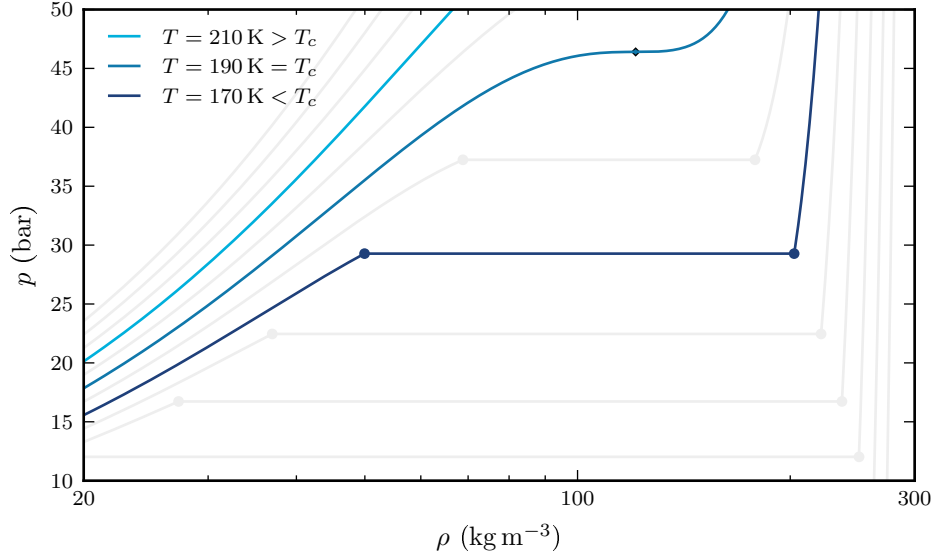


FIGURE 1.4 – Isothermes pour l'équation d'état quasi-statique autour du point critique du méthane. Les cercles sont les mêmes états de saturation qu'à la Figure 1.2.

soit en théorie ou en pratique. Une des difficultés est d'éviter le domaine instable, où certaines propriétés du fluide dont la vitesse du son ne sont pas définies. Ce sujet est abordé plus en détails dans, par exemple, [MP89], [MV06] et [MR07].

1.1.2 Loi d'état d'équilibre

Physiquement, si des valeurs de densité et de température qui correspondent au domaine instable sont imposées au fluide, on observera après un certain temps la séparation du fluide en un mélange de gaz et de liquide stables. Ce fait peut être utilisé pour régulariser une loi d'état cubique en une loi d'état qu'on appellera *quasi-statique* ou *d'équilibre*.

Pour cela, chaque état instable ou métastable va être remplacé par un mélange de liquide et de vapeur à l'équilibre mécanique, thermique et thermodynamique. Sur la Figure 1.4 les isothermes de la loi d'état d'équilibre ont été représentés. La théorie mathématique de l'obtention d'une telle équation à partir des équations d'états de chacune des deux phases est développée par exemple dans [FKA12] et [Mat10].

Une loi d'état d'équilibre est plus régulière thermodynamiquement qu'une loi d'état cubique (les isothermes sont monotones), Cependant, elle présente encore des difficultés pratiques. Plusieurs grandeurs thermodynamiques, dont la vitesse du son, sont discontinues aux densités de saturation.

Bien que le calcul de solutions au problème de Riemann pour cette loi d'état reste complexe, comme le montre [MP89], elle peut néanmoins être appliquée à certains problèmes pour des écoulements modérés [Tou92] [BDF+14].

1.1.3 Deux lois d'état

Dans les paragraphes précédents, on a étudié une description des deux phases comme des états différents d'une même équation d'état. Dans cette section, une autre approche sera exposée. Elle consiste à décrire les deux phases comme deux espèces distinctes. Cette approche, utilisée dans tous les codes industriels de thermohydraulique, sera mise en pratique dans la suite de cette thèse.

Cette approche généralise la description habituelle des écoulements multi-fluides où un paramètre d'ordre est utilisé pour décrire le fluide local. Le changement de phase est alors un changement de ce paramètre d'ordre. Contrairement à l'approche à une loi d'état, ce modèle ne permet pas de décrire la transition continue entre les phases qui existe physiquement au-delà du point critique. Cependant, elle

présente l'avantage de dégénérer naturellement au cas usuel de deux espèces sans changement de phase. Les cas avec et sans changement de phase pourront être aisément simulés avec le même code.

Couple gaz parfait et gaz raidi

Plusieurs variantes sont possibles pour décrire les lois d'états des deux phases. La plus simple est de prendre des lois d'états analytiques simples pour chacune des phases. Typiquement une loi d'état de *gaz parfait* modélise la vapeur et une loi d'état de *gaz raidi* (en anglais *stiffened gas*) modélise le liquide. Concrètement, on écrit :

$$\rho_g(p, T) = \frac{p}{(\gamma_g - 1)\mathcal{C}_{vg}T}, \quad \rho_l(p, T) = \frac{p + p_l^\infty}{(\gamma_l - 1)\mathcal{C}_{vl}T}, \quad (1.6a)$$

$$h_g(T) = \gamma_g \mathcal{C}_{vg}(T - T_0) + \mathcal{L}, \quad h_l(T) = \gamma_l \mathcal{C}_{vl}(T - T_0), \quad (1.6b)$$

où ρ_k est la densité de la phase k ($k = g$ ou l), $h_k = e_k + p/\rho_k$ est son enthalpie spécifique, T_0 est une température de référence, \mathcal{L} est la chaleur latente de la substance à T_0 , et enfin p^∞ , γ et \mathcal{C}_v sont des constantes qui dépendent du fluide considéré. La référence des enthalpies a été choisie telle que

$$h_g(T_0) - h_l(T_0) = \mathcal{L}.$$

Dans [LMS04], des paramètres sont recherchés afin d'ajuster un tel couple de lois d'état à des données expérimentales de l'eau sur un grand intervalle de température. Dans cette thèse, les valeurs expérimentales ne seront approchées que localement autour d'un état (p_0, T_0) donné. Des valeurs simples pour les coefficients thermodynamiques γ_k , p_k^∞ et \mathcal{C}_{vk} sont présentées dans la Table 1.1 pour la modélisation du méthane vers 111 K et 1 bar.

	Unité	Gaz (g)	Liquide (l)
γ		1.4	3.3
p^∞	Pa	0	$2.55 \cdot 10^8$
\mathcal{C}_v	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	1500	2000
\mathcal{L}	J kg^{-1}	$5 \cdot 10^5$	
p_0	Pa	$1 \cdot 10^5$	
T_0	K	111	

TABLE 1.1 – Coefficients thermodynamiques simples approchant le méthane à 111 K pour le couple d'équations d'état (1.6).

Lemme 1.8. *Pour un équilibre liquide-vapeur entre un gaz supposé parfait et un liquide de densité grande devant celle du gaz, la formule de Clapeyron (1.4) s'intègre au voisinage d'un état $(p_0 = p^{\text{sat}}(T_0), T_0)$ sur la courbe de saturation :*

$$p^{\text{sat}}(T) = p_0 \exp\left(\frac{\mathcal{L}}{(\gamma_g - 1)\mathcal{C}_{vg}} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right) \quad (1.7)$$

où γ_g et \mathcal{C}_{vg} sont les paramètres de la loi d'état du gaz parfait.

Démonstration. La forme exacte de la formule de Clapeyron (1.4) s'écrit

$$\frac{dp^{\text{sat}}}{dT} = \frac{h_l - h_g}{T\left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g}\right)}.$$

On suppose $DR \ll 1$, c'est-à-dire

$$\frac{1}{\rho_l} \ll \frac{1}{\rho_g},$$

ainsi que, au voisinage de T_0

$$h_g(T) - h_l(T) \simeq h_g(T_0) - h_l(T_0) =: \mathcal{L}.$$

En introduisant l'expression de ρ_g donnée par la loi d'état du gaz, on obtient l'équation

$$\frac{dp^{\text{sat}}}{dT} = \frac{\mathcal{L}}{(\gamma_g - 1)\mathcal{C}_{vg}T^2} p^{\text{sat}},$$

que l'on réécrit

$$\frac{dp^{\text{sat}}}{p^{\text{sat}}} = \frac{\mathcal{L}}{(\gamma_g - 1)\mathcal{C}_{vg}} \frac{dT}{T^2}.$$

L'intégration de cette équation entre T_0 et T donne le résultat voulu. \square

Autres couples de lois d'état

En dessous du point critique, toutes les équations cubiques peuvent être utilisées comme deux lois d'états en séparant les deux domaines (méta-)stables disjointes. Par exemple,

$$p_g = p_{\text{van der Waals}}|_{\{(\rho, T) | \rho < \rho_g^{\text{sat}}(T)\}},$$

$$p_l = p_{\text{van der Waals}}|_{\{(\rho, T) | \rho > \rho_l^{\text{sat}}(T)\}},$$

où $p_{\text{van der Waals}}$ est la pression définie par (1.2) et $|$ représente la restriction d'une fonction.

La loi d'état *Quickmethane* [LGRF17] basée sur les données de [SW91] se présente aussi sous la forme d'une unique fonction $f(\rho, T)$ décrivant les deux phases. Elle pourra être utilisée comme un couple de lois d'état en séparant les domaines du gaz et du liquide comme présenté précédemment.

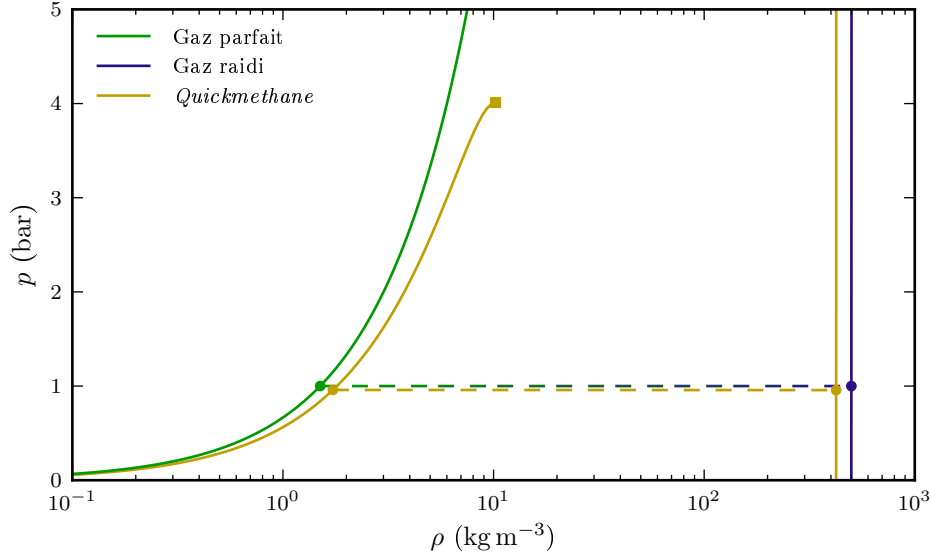


FIGURE 1.5 – Isotherme 111 K pour la loi d'état *Quickmethane* et le couple de lois d'état analytiques (1.6) avec les coefficients de la Table 1.1. Le marqueur carré est le point spinodal du gaz d'après *Quickmethane* ; le gaz parfait n'a pas de point spinodal. Les lignes discontinues relient les états de saturations des deux phases, représentés par des marqueurs circulaires.

1.2 Échelles spatiales

Les modèles de mécanique monofluide peuvent se ranger en trois grandes familles selon l'échelle spatiale du phénomène étudié.

- Pour les phénomènes à l'échelle microscopique, les modèles de dynamique moléculaire ou de théorie cinétique des gaz pourront par exemple être utilisés.
- À l'échelle supérieure, plus précisément à une échelle grande devant le libre parcours moyen d'une molécule, on fera l'hypothèse des milieux continus et on utilisera par exemple les équations d'Euler ou de Navier-Stokes.
- Pour les écoulements de très grande échelle, au sens du nombre de Reynolds, on résout des versions moyennées de ces équations, qui doivent être complétées par un modèle de turbulence.

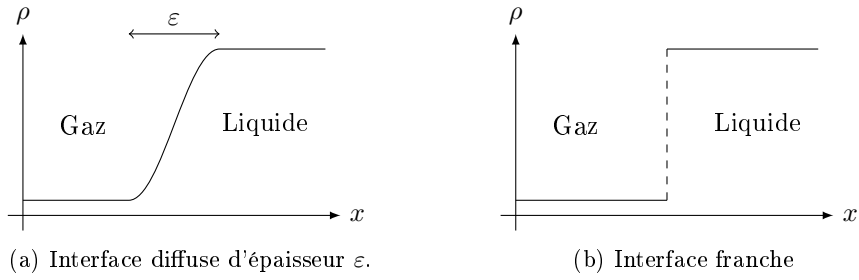


FIGURE 1.6 – Représentations schématiques des deux descriptions possibles de l'interface liquide-vapeur. L'axe x est la direction normale à l'interface localement.

Parallèlement à cette hiérarchie de modèle, une hiérarchie de modèle semblable caractérise la description de l'interface dans les écoulements de deux fluides non-miscibles, et en particulier les interfaces liquide-vapeur. Dans cette section, les descriptions du changement de phase à ces différentes échelles seront discutées.

1.2.1 Modèles microscopiques

Les modèles à l'échelle microscopique n'ont pas été étudiés dans le cadre de cette thèse. On pourra néanmoins mentionner à titre d'exemple l'existence de travaux de simulation de dynamique moléculaire décrivant une interface liquide-vapeur comme par exemple [SBK+06].

1.2.2 Modèles mésoscopiques

On suppose que l'on étudie un écoulement à une échelle grande devant le libre parcours moyen des molécules (hypothèse des milieux continus) mais petite devant l'épaisseur de la zone de transition entre les phases. L'interface va être représentée par une variation continue entre les deux phases comme illustré par la Figure 1.6a. La difficulté est de modéliser le comportement physique de la matière à l'intérieur de l'interface. Celui-ci est mal connu que ce soit théoriquement ou expérimentalement.

Dans la suite de ce paragraphe, deux approches vont être distinguées selon le type de loi d'état choisi pour décrire le fluide (voir Section 1.1).

Modèles mésoscopiques à une équation d'état

Les états instables des équations cubiques sont de bons candidats pour décrire le fluide dans la zone de transition entre les phases pures. Les forces capillaires qui s'exercent dans l'interface peuvent les stabiliser. Cette approche est étudiée par exemple par [JLCD01] et [Car04, Partie I].

Modèles mésoscopiques à deux équations d'état

Quand deux équations d'état sont utilisées pour décrire le fluide, le changement de phase est modélisé dans l'équation d'évolution du paramètre d'ordre. Cette évolution prend souvent la forme d'une équation de réaction-diffusion, dont la forme la plus simple est l'équation de Fisher.

Équation de Fisher Cette équation de réaction-diffusion, introduite par [Fis37], décrit un phénomène de propagation. Elle s'écrit

$$\partial_t \alpha = M\alpha(1 - \alpha) + D\Delta\alpha, \quad (1.8)$$

où $\alpha \in [0, 1]$ est le paramètre décrivant la phase locale, M un coefficient associé au taux de réaction et D le coefficient de diffusion.

La Figure 1.7 présente un exemple de solution pour cette équation. Ici l'espèce décrite par $\alpha = 0$ se change en $\alpha = 1$ au voisinage de l'interface. Après quelques pas de temps, un régime stationnaire se met en place où l'interface se déplace de la gauche vers la droite à vitesse constante en raison du changement de phase. Cette onde progressive dépend à la fois de M et de D .

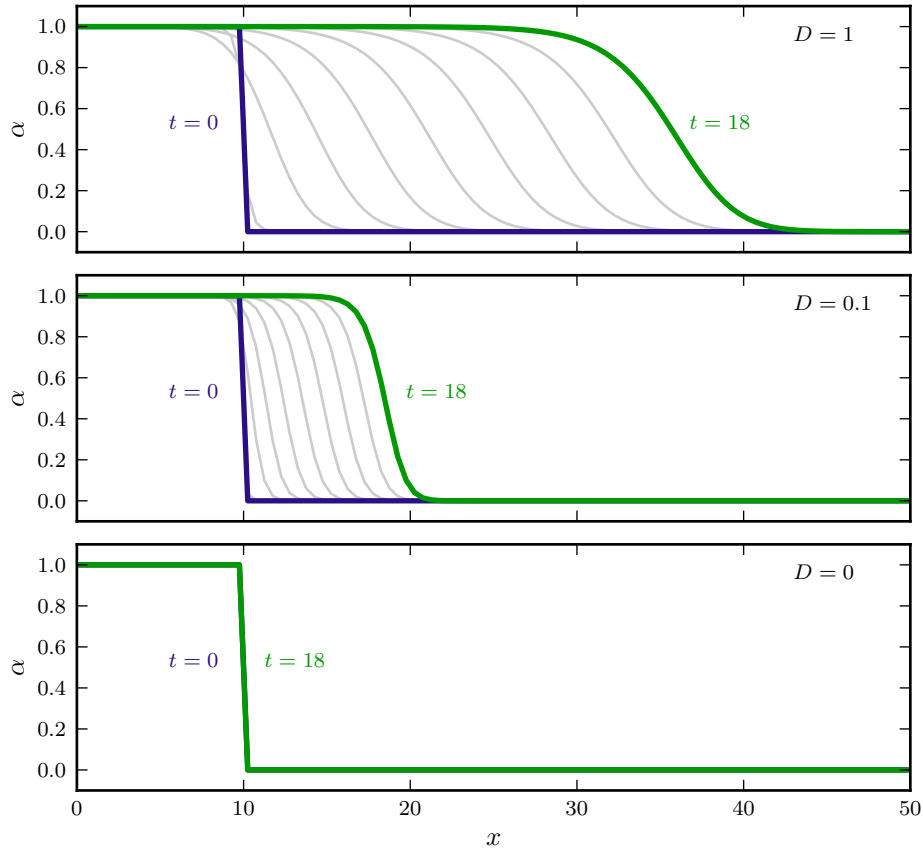


FIGURE 1.7 – Exemple de solution de l'équation de réaction-diffusion (1.8) pour $M = 1$ et trois valeurs de D . Ce résultat a été calculé numériquement avec la bibliothèque *Fipy* [GWW09].

Les modèles de changement de phase de type *Allen-Cahn* sont une description plus complexe du même type d'évolution. Une modélisation précise de l'épaisseur de l'interface et de sa diffusion est nécessaire pour décrire quantitativement le changement de phase. Ces modèles peuvent être couplés aux équations de la mécanique des fluides, comme par exemple dans [Wit10]. L'existence d'ondes progressives a été étudiée théoriquement par [Fan00]. La limite macroscopique (c'est-à-dire pour une interface d'épaisseur nulle) de ce type de description a été étudiée par exemple par [Cag89] et [Wit10].

1.2.3 Modèles macroscopiques directs

On considère maintenant une échelle grande devant l'épaisseur de l'interface liquide-vapeur. L'interface est représentée comme une discontinuité entre deux phases pures, comme illustré à la Figure 1.6b. On appelle cette échelle « macroscopique directe » en référence à la simulation numérique directe (ou en anglais *DNS*) par opposition aux modèles moyennés qui suivent.

Problème de Stefan

À cette échelle le modèle typique de changement de phase est le problème de Stefan. Il a été introduit à la fin du XIX^e siècle dans [Ste90] pour décrire la formation et la fonte des glaces sous l'effet de changements de température.

On considère deux phases incompressibles et de même densité (solide et liquide dans [Ste90]) séparées par une interface franche. En 1D, la position de l'interface peut être notée par son abscisse $\sigma(t)$ (voir aussi la Figure 1.8).

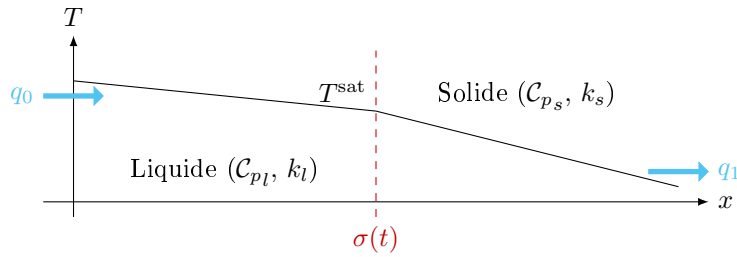


FIGURE 1.8 – Schéma d’une solution du problème de Stefan à un instant t .

Les équations de la chaleur dans chacune des deux phases s’écrivent :

$$\begin{cases} \rho C_{pl} \partial_t T = k_l \Delta T & \text{si } x < \sigma(t), \\ \rho C_{ps} \partial_t T = k_s \Delta T & \text{si } \sigma(t) < x, \end{cases} \quad (1.9a)$$

où C_{p_i} est la capacité thermique isobare de la phase i ($i = l, s$), k_i sa conductivité thermique et ρ la densité des fluides (supposée constante et uniforme).

À l’interface entre les phases, on suppose la température continue et égale à la température de saturation, supposée constante.

$$T(\sigma(t), t) = T^{\text{sat}}. \quad (1.9b)$$

Le flux de chaleur n’est pas continu à l’interface. De l’énergie est captée ou libérée par le changement de phase sous forme de chaleur latente. Un bilan d’énergie à l’interface donne la relation suivante :

$$\rho \mathcal{L} \frac{d\sigma}{dt} = k_l (\partial_x T)(\sigma(t)^-, t) - k_s (\partial_x T)(\sigma(t)^+, t), \quad (1.9c)$$

où \mathcal{L} est la chaleur latente. C’est cette équation qui gouverne l’évolution de la position de l’interface.

Les autres conditions aux limites peuvent par exemple être choisies comme des flux de chaleur q_0 et q_1 constants. Enfin, on se donne une condition initiale $T(x, t = 0)$.

Sous l’effet du flux de chaleur, l’interface se déplace à mesure que la glace fond ou que le liquide gèle. L’existence et l’unicité d’une solution à ce problème ainsi que son calcul est un problème classique en analyse mathématique.

Généralisation du problème de Stefan

À l’échelle macroscopique directe, tous les modèles auront cette forme : deux domaines variables disjoints sur lesquels des équations aux dérivées partielles seront résolues avec une certaine condition limite à l’interface. Cependant, plusieurs difficultés peuvent être rencontrées lors de la généralisation du problème de Stefan.

- Comment écrire la condition à l’interface pour généraliser (1.9b) et (1.9c), notamment dans le cas où on ne veut pas faire d’hypothèse sur l’équilibre thermodynamique à l’interface ? Ce point sera discuté dans la Section 1.3.
- Comment décrire numériquement la géométrie de l’interface, en particulier en dimensions 2 ou 3 ? Comment la faire évoluer dans le temps quand le changement de phase a lieu ?

Le problème de description d’une interface avec une géométrie complexe n’est pas propre au changement de phase. Dans les prochains paragraphes on discutera de quelques unes des méthodes existantes pour ce problème avec ou sans changement de phase.

Description d’une interface franche comme franche

Les méthodes de suivi d’interface (en anglais *interface tracking*) permettent de suivre exactement la position de l’interface. Ses coordonnées (ou ceux d’un nombre discret de marqueurs le long de l’interface) sont stockées explicitement en mémoire. Ce type de méthode est appliqué au changement de phase par exemple par [Wel95] et [JT96] pour des écoulements incompressibles.

La position de l'interface peut aussi être gardée en mémoire implicitement à l'aide d'une fonction level-set [GCNB07] ou bien d'une fraction volumique de fluide comme dans les méthodes Volume-Of-Fluid (VOF) [WW00]. À partir de ces fonctions implicites, la position exacte de l'interface pourra être reconstruite. Les équations aux dérivées partielles seront alors résolues dans les phases pures, assorties de conditions aux limites appropriées décrivant l'évolution de l'interface.

La description d'une interface liquide-vapeur perméable n'est cependant pas toujours facile à implémenter dans de tels modèles. En général, les deux phases ont des densités très différentes. La conséquence du rapport de densité est la nécessité d'une contraction ou d'une expansion brutale de la masse changeant de phase. Par exemple, un liquide ayant nouvellement changé de phase aura une pression infime si il conserve sa densité de gaz. Ce phénomène peut être décrit comme une solution à un problème de Riemann.

Problème de Riemann La Figure 1.9 présente schématiquement une telle solution. Sur ce schéma, l'interface de changement de phase en rouge ne suit pas la discontinuité de contact évoluant à la vitesse du fluide et représentée en ligne discontinue. Le fluide entre ces deux points est le fluide ayant nouvellement changé de phase. Les ondes soniques à droite et à gauche sont la conséquence du changement de pression causé par le changement de densité lors du changement de phase.

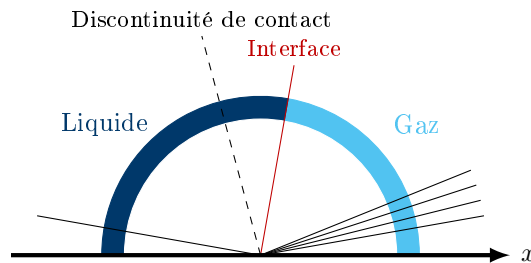


FIGURE 1.9 – Schéma d'une solution au problème de Riemann avec changement de phase. Ici un flux de masse constant de gaz se condense à travers l'interface.

Selon l'idée fondatrice des solveurs de Riemann, la connaissance de la solution au problème de Riemann est suffisante pour construire un schéma numérique approchant les solutions de tous les problèmes. Cette philosophie, appliquée au domaine de la combustion, par exemple par [TCL82], a été utilisée pour la description de changement de phase solide-solide par [AK91]. De nombreux travaux ont poursuivi le développement de cette méthode, jusqu'aux études plus récentes consacrées au changement de phase liquide-vapeur (isotherme) de [MR07], [HDW13] et [RZ14]. Cependant, des difficultés empêchent l'extension de cette approche au cas non-isotherme. Le modèle développé dans cette thèse étant similaire sur de nombreux aspects, plus de détails seront donnés dans les chapitres suivants.

Ce type de modèle permet également de décrire la nucléation. Celle-ci prend la forme d'une solution ad hoc pour le problème de Riemann au sein d'une phase pure. Un exemple de solution est présenté à la Figure 1.10.

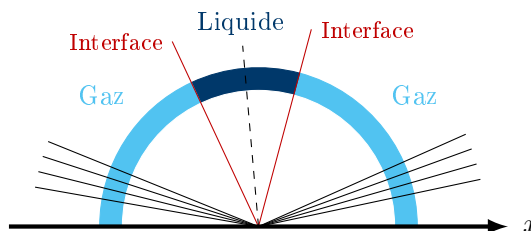


FIGURE 1.10 – Schéma d'une solution au problème de Riemann pour la description de la nucléation. Ici, une goutte de liquide se condense dans du gaz pur.

Termes source diffus Une autre approche, proposée notamment par [HW08] et [Kun11] permet de simplifier le problème à résoudre à l'interface. Le transfert de masse entre les phases est modélisé par des termes sources répartis de part et d'autre de l'interface (voir Figure 1.11). De la masse est prélevée d'un côté de l'interface et restituée de l'autre côté. L'advection de l'interface se produit mécaniquement en raison des gradients de pression créés par cet échange de masse. Cette construction numérique permet de faciliter la discrétisation de l'échange de masse à l'interface. Cependant, une approche plus directe sera préférée dans cette thèse.

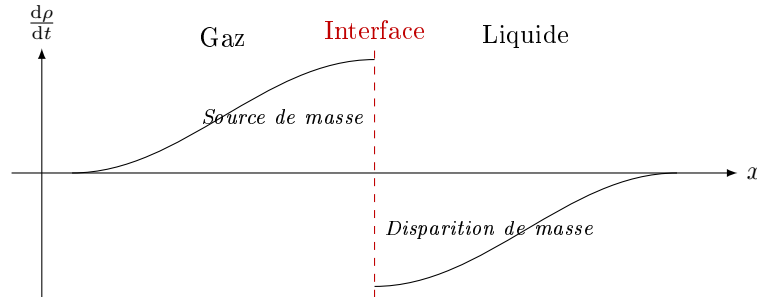


FIGURE 1.11 – Exemple de terme source diffus, inspiré de [HW08], pour l'évaporation. De la masse disparaît du côté liquide. La même quantité apparaît du côté gaz.

Description d'une interface franche comme diffuse

Dans les paragraphes précédents, quelques exemples d'interfaces franches représentées numériquement comme des discontinuités ont été présentées. Alternativement, certains codes numériques choisissent une représentation localement moyennée de l'interface. Cette approche demande la définition du modèle de mélange pour décrire les mailles mixtes au voisinage de l'interface. Contrairement aux modèles mésoscopiques évoqués précédemment, la représentation continue de l'interface n'est qu'un biais numérique qui doit disparaître lors de la convergence en maillage du schéma numérique (ce qui n'empêche pas de respecter la physique dans la façon de la décrire).

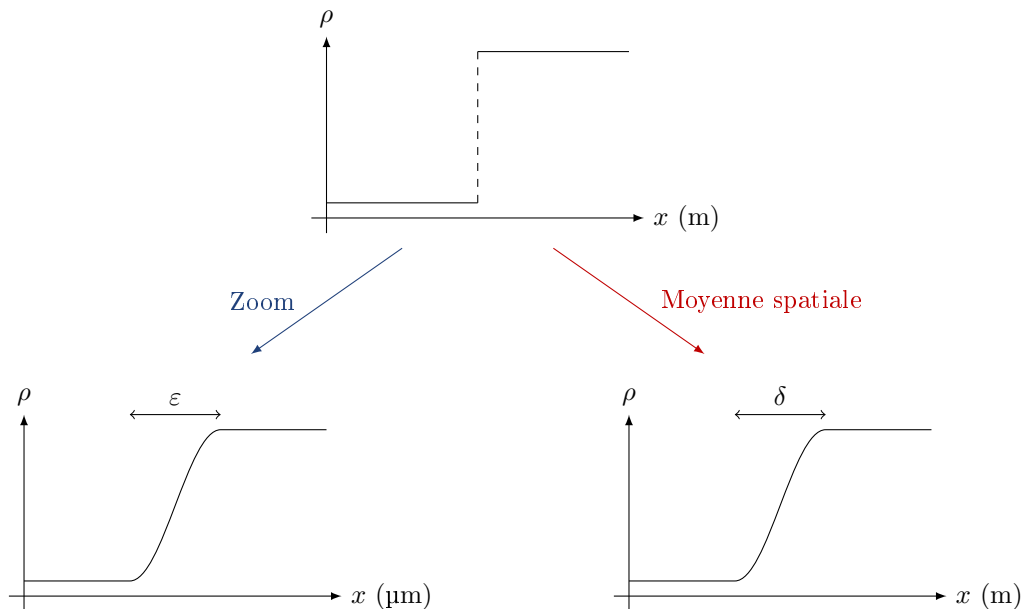


FIGURE 1.12 – Les interfaces diffuses apparaissent à la fois dans les modèles mésoscopiques (à gauche) et les modèles macroscopiques moyennés (à droite). Malgré leurs similitudes, un modèle physique pertinent pour l'un n'est pas nécessairement pertinent pour l'autre.

Parmi les nombreux exemples de ce type d'approche, on peut citer [ACK02], [KK10], [KL10], ou encore [BD14]. Preuve que les mailles de mélanges ne sont ici qu'un artefact numérique, la plupart de ces travaux

cherchent le schéma numérique qui en génère le moins possible (schémas MUSCL ou anti-diffusifs, par exemple).

Ces modèles sont un cas particulier des modèles moyennés discutés à la section suivante. Les représentations typiques du changement de phase avec cette approche seront donc décrites plus en détails ci-après.

1.2.4 Modèles macroscopiques moyennés

Finalement, on considère un problème de grande dimension, par exemple au sens des nombres de Reynolds et de Weber. Si la viscosité et la tension de surface ne sont pas suffisantes pour régulariser l'interface liquide-vapeur, celle-ci peut prendre des formes complexes. Le suivi numérique précis de l'interface n'est alors ni facile, ni nécessairement utile. Un processus de moyenne des équations va être utilisé pour simplifier le problème. On pourra se rapporter aux travaux de références [SW84] et [IH11].

Plusieurs formes moyennées existent. Il n'y a pas de consensus sur le choix des hypothèses simplificatrices pertinentes et des relations de fermetures. Le système de lois de conservation suivant peut cependant être pris comme exemple typique :

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k u_k) = \Gamma_k, \quad (1.10a)$$

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k u_k) + \nabla \cdot (\alpha_k (\rho_k u_k \otimes u_k + p_k \mathbb{I})) = -p_k \nabla \alpha_k + M_k, \quad (1.10b)$$

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k E_k) + \nabla \cdot (\alpha_k (\rho_k E_k + p_k) u_k) = p_k \partial_t \alpha_k + \mathcal{E}_k, \quad (1.10c)$$

pour $k \in \{g, l\}$, soit au total six équations. La fraction volumique de la phase k est notée α_k . Elle est telle que

$$\alpha_g + \alpha_l = 1.$$

Les grandeurs ρ_k , u_k , p_k et E_k sont respectivement la densité, la vitesse, la pression et l'énergie totale spécifique du fluide dans la phase k . Chacune des phases est dotée d'une loi d'état, par exemple $p_k(\rho_k, e_k)$. Les termes sources Γ_k , M_k et \mathcal{E}_k sont des termes d'échanges moyennés entre les phases, respectivement de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Les conservations totales impliquent que

$$\sum_k \Gamma_k = 0, \quad \sum_k M_k = 0, \quad \sum_k \mathcal{E}_k = 0.$$

Enfin, le système peut être fermé par l'hypothèse isobare

$$p_g = p_l.$$

D'autres hypothèses peuvent être choisies. Par exemple, [Zei10] remplace l'hypothèse isobare par une autre équation aux dérivées partielles. A l'autre extrémité du spectre des modèles possibles, l'hypothèse d'équilibre complet entre les phases réduit le modèle aux équations d'Euler pour une loi d'état d'équilibre (voir Section 1.1.2) comme par exemple dans [BDF+14]. Une telle hiérarchie de modèles est aussi décrite par [LF10].

Remarque 1.9. Le sigle *HEM* pour *Homogeneous Equilibrium Model* se rencontre dans la littérature pour désigner :

- d'une part, les modèles où deux fluides de deux espèces distinctes sont à l'équilibre des pressions, vitesses et températures (par exemple [BPMG14]),
- d'autre part les modèles à une seule espèce à l'équilibre liquide-vapeur (par exemple [DBBF96] ou [FL11]).

Même si la philosophie à l'origine de ces modèles est la même, ils sont assez différents mathématiquement. Le modèle développé dans la suite de ce mémoire s'approche des premiers, mais le sigle HEM ne sera pas utilisé pour éviter la confusion avec les seconds. \triangleleft

Dans de tel modèles, le changement de phase sera habituellement décrit comme un terme source Γ_k faisant évoluer la composition locale du mélange $\alpha \in [0, 1]$. Il s'écrira typiquement sous la forme

$$\Gamma_g = \mathcal{A}_i J_{g \rightarrow l},$$

où $\mathcal{A}_i(\alpha, p, T)$ estime l'aire interfaciale moyenne locale (en $\text{m}^2 \text{m}^{-3} = \text{m}^{-1}$) et $J_{g \rightarrow l}(p, T)$ est le flux de masse surfacique moyen à l'interface (en $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$).

Le modèle du code CATHARE [Bes90] qui décrit l'écoulement bifluide dans le circuit hydraulique d'une centrale thermique, s'écrit par exemple sous cette forme. Une corrélation expérimentale complexe y est proposée pour l'expression de \mathcal{A}_i . Dans d'autres codes, quand aucune donnée expérimentale n'est disponible, la corrélation

$$\mathcal{A}_i \propto \alpha(1 - \alpha)$$

est souvent utilisée pour estimer l'aire interfaciale. Elle possède les propriétés minimales souhaitables : l'aire interfaciale est nulle dans les phases pures et maximale dans un mélange à parts égales. Un tel modèle est alors mathématiquement très similaire à l'équation de réaction-diffusion étudiée à l'échelle mésoscopique, bien que les problèmes traités soient différents.

D'autres approches existent pour tenter de quantifier l'aire interfaciale, comme par exemple dans [SR05].

Le terme $J_{g \rightarrow l}$ d'échange de masse doit relaxer le système vers l'équilibre liquide-vapeur local. Il peut s'étudier expérimentalement ([BKM96], [DBBF96]) ainsi que de manière plus théorique à partir de la thermodynamique hors équilibre ([BGK02], [Lhu03]). La Section 1.3 discutera plus en détail ce point.

Tube à choc

En réalité, la solution au problème du tube à choc avec changement de phase n'est pas aussi idéale que la solution au problème de Riemann décrite à la Figure 1.9. (Cette dernière n'est de toute façon pas physique dans le cas non-isotherme comme discuté au Chapitre 2.) Un exemple d'expérience de tube à choc est décrit dans [SS99]. Ces expériences ne peuvent s'expliquer sans prendre en compte d'autres phénomènes que le changement de phase interfacial comme la diffusion thermique, la nucléation et les instabilités de surface libre.

Il est cependant remarquable que ces expériences puissent encore être décrites comme solution d'un problème de Riemann pour un modèle moyenné, comme représenté sur la Figure 1.13. Une solution au problème de Riemann de ce type est appliquée à un code numérique par [LMS05].

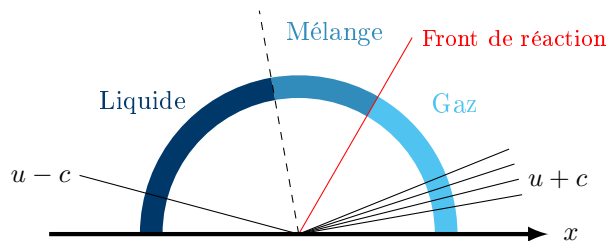


FIGURE 1.13 – Schéma d'une solution au problème de Riemann avec changement de phase partiel, tel qu'observé par exemple par [SS99]. Le mélange entre la discontinuité de contact en ligne discontinue et le front de changement de phase en rouge est à l'équilibre liquide-vapeur.

Nucléation et cavitation

La description moyennée de la nucléation passe par des termes sources moyens du même type que ceux présentés précédemment. Le phénomène de cavitation (évaporation puis reliquéfaction d'un liquide sous l'effet de variations de pression au voisinage par exemple d'une turbine) en est une application très étudiée. Quelques modèles de cette catégorie vont être évoqués dans la suite de ce paragraphe.

Un modèle de nucléation moyenné doit décrire l'apparition aléatoire de germes de nucléation comme celui schématisé sur la Figure 1.10. C'est ce que fait par exemple le modèle de *Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov*, décrit dans [FT98] et [BCP06] et schématisé à la Figure 1.14. Ce modèle donne une fraction volumique moyenne à un temps t étant donnés une probabilité d'apparence d'un germe de nucléation et un taux de croissance (qui peut être écrit comme un flux de masse $J_{g \rightarrow l}$). Ce modèle, dédié au changement de phase solide-solide, ne prend cependant pas en compte la possibilité de mouvement des bulles/gouttes, ni leur fusion ou séparation sous l'effet de phénomènes comme la tension de surface.

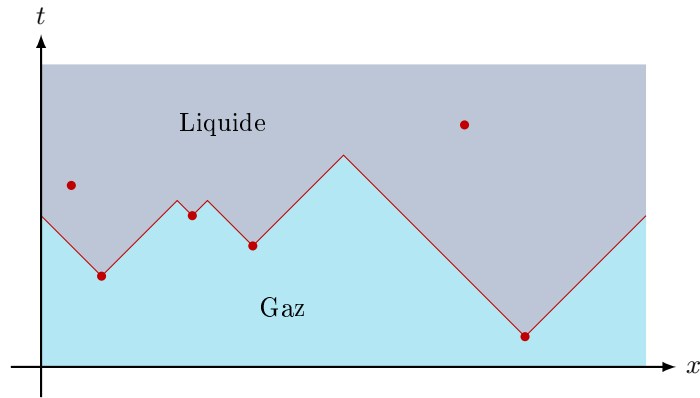


FIGURE 1.14 – Représentation schématique d’un modèle de nucléation à la façon de *Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov* en 1D. Initialement, tout le domaine est occupé par un gaz métastable. Quand un germe de nucléation (symbolisé par un point rouge) apparaît aléatoirement, une goutte se forme et grossit. Ici, quatre gouttes ont grossi (à une vitesse supposée constante) pour occuper tout l’espace. Les germes de nucléation suivants apparaissent dans un liquide stable et sont sans conséquence.

Ce modèle, exprimé sous la forme d’une équation intégrale, a été plus tard reformulé sous forme d’équation différentielle. Ce nouveau modèle, dit de Schneider, a été appliqué à un écoulement solide-liquide par [Hüt01]. Le modèle de *Schnerr-Sauer* [YSS01] développé pour la description de la cavitation se base sur le même type de modèle de croissance de bulle. Le modèle moyenné à l’équilibre liquide-vapeur, déjà évoqué précédemment, est bien sûr aussi utilisable pour la description de la cavitation, comme par exemple par [BH05]. Enfin, d’un point de vue plus appliqué, [UWWS05] présente un éventail de modèles de cavitation, qui ont tous la forme d’un terme source similaire à ceux déjà évoqués dans cette section.

1.2.5 Échelles multiples

Avant de conclure cette section consacrée aux différentes échelles spatiales de modélisation des écoulements multiphasiques, il est utile de rappeler que la plupart des cas pratiques impliquent plusieurs échelles en même temps.

L’article de Bear et Nunziato [BN86] est un bon exemple de modèle difficile à classer à une seule échelle. Ce travail traite de la modélisation de la combustion d’un mélange de poudre et d’air. Un modèle moyenné de deux phases (gaz et particules solides) est donc introduit et réagit au passage d’une onde de déflagration. Cette déflagration peut être vue comme une interface de changement de phase entre une phase « brulée » et une phase « non-brulée », décrite comme une interface diffuse à une échelle mésoscopique.

Des problèmes de changement de phase impliquant un front de changement de phase comme celui représenté à la Figure 1.13 ou celui étudié par [DGL05] peuvent impliquer la description d’une interface franche entre deux mélanges liquide-vapeur. L’impact d’un bloc de liquide aéré comme simulé par [DDG10] ou le modèle numérique d’interface entre une phase pure et un mélange développé par [Cos15] entrent aussi dans cette catégorie hybride. C’est aussi le cas du problème de l’impact de vague, comme déjà évoqué dans l’introduction.

1.3 Échelles temporelles

La partie précédente a été consacrée à la description des différentes échelles spatiales de la modélisation du changement de phase. Dans cette partie, c’est l’aspect temporel de la dynamique du changement de phase qui sera discuté. Celui-ci étant un processus de retour à l’équilibre, l’échelle temporelle peut se confondre avec l’état d’équilibre local du système.

Les différentes échelles de temps évoquées dans cette section sont schématisées à la Figure 1.15.

1.3.1 Hors-équilibre

On considère un système composé de liquide dans l'état thermodynamique (p_l, T_l) en contact avec sa vapeur dans l'état (p_g, T_g) . Leurs températures, leurs pressions et leurs potentiels chimiques $\mu_k(p_k, T_k)$ étant en général différent, il n'y a pas d'équilibre thermodynamique entre ces deux phases.

Remarque 1.10. Cette situation est appelée ici « hors-équilibre ». Il convient de remarquer que la définition de pressions et de températures pour chacune des deux phases implique déjà une forme d'équilibre local, c'est-à-dire de régularité de la distribution statistique des particules qui composent le fluide. Des cas de déséquilibre total relèveraient de la dynamique moléculaire et de la physique statistique et sont hors du cadre de cette thèse. \triangleleft

Ce retour à l'équilibre peut se faire par échange entre les phases, les masses et énergies totales étant conservées. Dans le cas du changement de phase, c'est notamment l'échange de masse entre les phases qui va permettre le retour à l'équilibre. L'enjeu est de décrire mathématiquement quel taux d'échange de masse va être causé par un déséquilibre donné et à quelle vitesse le système va donc revenir à l'équilibre.

Les travaux de [BS04], [BKDD07] et [CS11] synthétisent les principaux modèles décrivant l'échange de masse à une interface franche hors-équilibre. Le modèle de ce type le plus emblématique est le modèle de Hertz-Knudsen.

Ce modèle développé originellement par Hertz et Knudsen à la fin du XIX^e siècle [Her82] décrit le flux de masse interfacial en fonction des conditions thermodynamiques locales comme

$$J_{g \rightarrow l} = A \sqrt{\frac{\mathcal{M}}{2\pi RT}} (p - p^{\text{sat}}(T)), \quad (1.11)$$

où \mathcal{M} est la masse molaire de l'espèce chimique considérée, R la constante des gaz parfaits et A un coefficient supposé constant appelé *coefficient d'accommodation* (souvent noté α , mais rebaptisé dans ce mémoire pour éviter toute confusion avec la fraction volumique).

Remarque 1.11. Bien qu'il puisse être utilisé pour décrire une situation de déséquilibre à l'interface, la démonstration originale de ce modèle repose sur l'hypothèse d'un état d'équilibre au sein de l'interface. En théorie cinétique des gaz $\sqrt{\frac{\mathcal{M}}{2\pi RT}} p$ est la masse totale de particules traversant une surface imaginaire dans un gaz à température T et pression p . En supposant l'existence à l'échelle microscopique d'un point à l'équilibre ($p = p^{\text{sat}}(T)$) au sein de l'interface, le bilan de flux de masse entre ce point et un point de la phase gaz peut s'écrire comme $\sqrt{\frac{\mathcal{M}}{2\pi RT}} (p - p^{\text{sat}}(T))$. \triangleleft

Le coefficient A a été ajouté a posteriori pour expliquer le désaccord du modèle avec l'expérience. À l'échelle microscopique, il peut s'interpréter comme une probabilité pour une molécule de réagir avec l'interface, diminuant ainsi le flux de masse totale à l'interface. À une échelle supérieure, il peut s'interpréter comme une vitesse adimensionnée de retour à l'équilibre. Dans [MS01] quelques résultats concernant l'évaluation de A sont passés en revue. Aucun consensus n'a été trouvé dans la littérature pour donner une valeur précise à ce coefficient.

Ce modèle a été amélioré par Schrage [Sch53] pour prendre en compte la vitesse du gaz au voisinage de l'interface et le débit maximal imposé par le point de Chapman-Jouguet (voir aussi Section 2.1.6).

Les modèles concurrents prennent une forme similaire d'un flux de masse fonction du déséquilibre entre les phases. La thermodynamique hors équilibre [BK99] permet de proposer une expression pour le flux de masse à l'interface sous la forme

$$J_{g \rightarrow l} \propto \frac{\mu_g - \mu_l}{T}.$$

Comme dans le cas du modèle de Hertz-Knudsen, la vitesse de relaxation est proportionnelle au déséquilibre entre les phases, via un coefficient de proportionnalité mal connu. Cette approche sera présentée plus en détails dans le chapitre suivant au Paragraphe 2.2.2. Le modèle obtenu sera linéarisé pour obtenir une forme similaire à celle du modèle de Hertz-Knudsen (1.11).

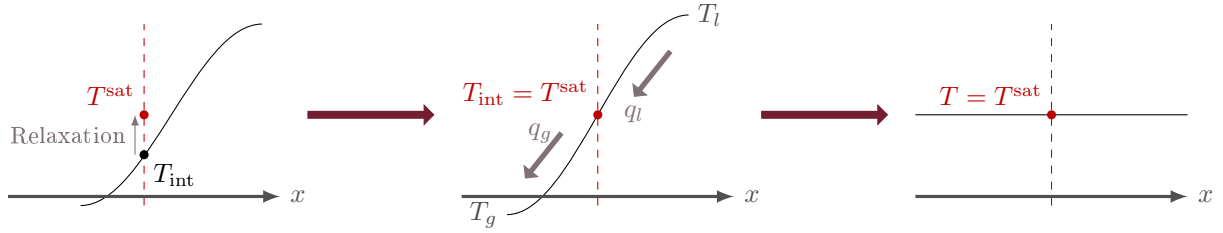


FIGURE 1.15 – Schémas des différents régimes temporels pour une interface franche (ligne rouge discontinue). À gauche, l’interface n’est pas à l’équilibre local, mais tend à y revenir. À une échelle de temps grande devant le temps de relaxation, l’interface est toujours à l’équilibre mais du changement de phase a lieu pour compenser le déséquilibre engendré par l’environnement. Enfin, à une échelle de temps grande devant le temps caractéristique de la diffusion thermique, tout le système est à l’équilibre. Cet exemple simple ne prend pas en compte l’effet de la pression ni la possibilité d’une discontinuité de température à l’interface.

La SRT (*Statistical Rate Theory*) proposée par [FW99] utilise des arguments légèrement différents pour arriver à une formulation similaire. Elle a été appliquée à un modèle bifluide moyenné dans [LA12].

1.3.2 Équilibre thermodynamique interfacial

Dans les paragraphes précédents, on a supposé une relaxation vers l’équilibre liquide-vapeur entre les phases à une vitesse finie (par exemple proportionnelle à A dans (1.11)). Supposons maintenant que le problème étudié soit lent par rapport à cette vitesse de relaxation. Formellement, ce cas peut être vu comme le cas limite $A \rightarrow \infty$. À tout instant les phases en contact seront à l’équilibre, c’est-à-dire

$$p = p^{\text{sat}}(T).$$

Le flux de masse $J_{g \rightarrow l}$ joue alors le rôle d’un multiplicateur de Lagrange pour cette condition d’équilibre.

Il s’agit de l’hypothèse d’équilibre présente dans le modèle de Stefan sous la forme de l’équation (1.9b). Dans un cas plus général où l’équilibre thermique entre les phases (c’est-à-dire la continuité de T dans le modèle de Stefan) n’est pas supposée, la forme que doit prendre ce cas limite n’est pas claire. Ce point est discuté par exemple dans [JT98].

Dans un cas comme le problème de Stefan, c’est le temps caractéristique de transport de la chaleur (par diffusion ou convection) dans l’environnement qui devient le phénomène limitant. (Le taux de *boil-off*, c’est-à-dire la vitesse d’évaporation du liquide cryogénique dans la cuve, est utilisé par GTT comme une forme de mesure de la qualité de l’isolation de la membrane.)

Le bilan d’énergie (par exemple (1.9c)) permet d’extraire une expression de $J_{g \rightarrow l}$. Par exemple, si l’apport de chaleur de la phase k à l’interface est noté q_k et est estimé par

$$q_k = B_k(T_k - T^{\text{sat}}),$$

où T_k est la température de la phase k et B_k un coefficient de conductivité thermique, alors, le flux de masse peut s’écrire comme

$$J_{g \rightarrow l} = -\frac{q_g + q_l}{\mathcal{L}} = -\frac{B_g(T_g - T^{\text{sat}}) + B_l(T_l - T^{\text{sat}})}{\mathcal{L}}. \quad (1.12)$$

C’est le type d’expression utilisée par exemple dans le modèle moyenné de CATHARE [Bes90]. En pratique, ce type de modèle macroscopique moyenné est très similaire au modèle hors-équilibre décrit à la section précédente.

1.3.3 Modèles quasi-statique

Enfin on considère un problème très lent devant le temps de retour à l’équilibre de l’interface et le temps de diffusion thermique au voisinage de l’interface. L’ensemble des deux phases peut être décrit par une loi d’état de mélange à l’équilibre, comme évoqué à la Section 1.1.2.

1.4 Synthèse

Sur la Figure 1.16 quelques unes des références citées précédemment ont été positionnées du point de vue de l'échelle spatiale et de l'échelle temporelle du modèle utilisé.

Il a été choisi à la Section 0.3 de restreindre ce travail à l'étude de deux phases séparées par une interface de forme simple, c'est-à-dire à un modèle de type macroscopique direct. Par ailleurs, l'impact étant un évènement bref et violent, aucune hypothèse quant à l'équilibre thermodynamique du système ne sera faite.

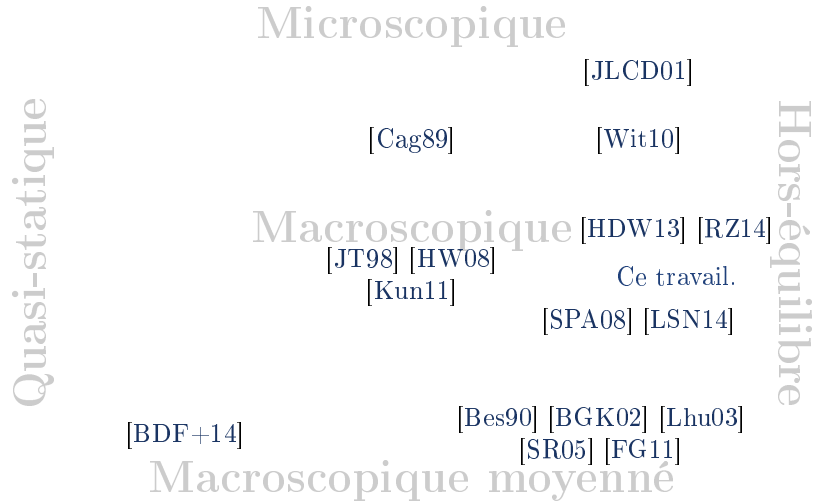


FIGURE 1.16 – Schéma synthétique positionnant quelques références par rapport au modèle développé dans la suite de cette thèse, du point de vue des échelles spatiales (axe vertical) et temporelles (axe horizontal).

Chapitre 2

Modélisation du changement de phase à une interface franche

Dans le chapitre précédent, un panorama général de modèles de changement de phase a été présenté. Dans ce chapitre, le modèle mis en œuvre dans cette thèse sera développé avec plus de détails.

On considère deux phases pures séparées par une interface franche, supposée assez régulière, comme illustré par exemple sur la Figure 2.1. Dans un premier temps, les conditions aux limites à cette interface en présence de changement de phase vont être explicitées. Dans un second temps, le système d'équation aux dérivées partielles correspondant sera présenté. C'est ce système qui sera résolu numériquement dans la suite de la thèse. Pour cela, une version moyennée localement sera proposée.

2.1 Conditions d'interface

Dans cette section, les conditions aux limites à l'interface liquide-vapeur en cas de changement de phase sont étudiées dans le cas d'un fluide non-visqueux avec diffusion thermique. L'importance de cette dernière sera illustrée à la Remarque 2.7. Le cas plus général d'un fluide visqueux est présenté en Annexe A.

L'interface est supposée ne stocker ni masse ni quantité de mouvement ni énergie surfacique. Le travail de Delhaye [Del74] présente un cas plus général. On trouvera aussi une présentation plus détaillée dans les ouvrages [IH11, Chapitre 2] et [FZ06, § 3.3.6].

Notation Pour toute grandeur X , on notera le saut de X à l'interface entre un fluide d'indice g et un fluide d'indice l comme

$$[X] := [X]_l^g = X_g - X_l.$$

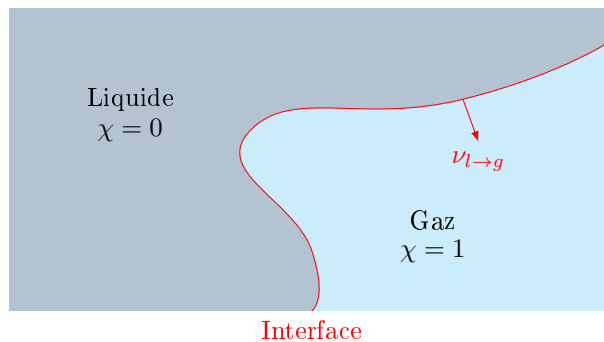


FIGURE 2.1 – Représentation schématique d'une interface franche entre un gaz (identifié par $\chi(x, t) = 1$) et un liquide (identifié par $\chi(x, t) = 0$). La normale à l'interface $\nu_{l \rightarrow g}$ est orientée du liquide vers le gaz.

La valeur moyenne à l'interface sera notée \bar{X} :

$$\bar{X} := \frac{X_g + X_l}{2}.$$

Ici, les indices g et l font bien sûr référence au gaz et au liquide, mais les résultats qui suivent valent pour n'importe quel couple de fluides non-miscibles.

Lemme 2.1. *Si $*$ est bilinéaire, on a la loi de Leibniz :*

$$[X * Y] = \bar{X} * [Y] + [X] * \bar{Y}. \quad (2.1)$$

2.1.1 Équations de conservation monofluide

Pour un fluide non-visqueux avec diffusion thermique, les équations de conservations s'écrivent :

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \quad (2.2a)$$

$$\partial_t (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u + p\mathbb{I}) = 0, \quad (2.2b)$$

$$\partial_t (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E u + p u + q) = 0. \quad (2.2c)$$

où ρ désigne la masse volumique, u la vitesse, p la pression, $E = e + \frac{1}{2}|u|^2$ l'énergie totale spécifique et q le flux de chaleur.

Remarque 2.2. Dans ce chapitre comme dans le reste de la thèse, la gravité n'a pas été prise en compte. Elle apparaîtrait sous la forme de termes sources dans les équations (2.2) et n'aurait aucune influence sur les calculs présentés ci-après. Par simplicité, elle ne sera pas représentée. (Voir aussi la Remarque 5.14.) \triangleleft

Le fluide est doté d'une loi d'état, qui peut par exemple être écrite sous la forme

$$\rho = \rho(p, T), \quad (2.3a)$$

$$e = e(p, T). \quad (2.3b)$$

Le flux de chaleur q est usuellement calculé à partir de la loi de Fourier :

$$q = -k(T)\nabla T, \quad (2.4)$$

où k est le coefficient de diffusion thermique du fluide.

Par ailleurs, le Second Principe de la Thermodynamique impose pour l'entropie s :

$$\partial_t (\rho s) + \nabla \cdot (\rho s u) \geq -\frac{1}{T} \nabla \cdot q. \quad (2.5)$$

La nature de l'espèce locale en un point (x, t) est codée par le champ χ . Il vaut par exemple $\chi = 1$ dans le gaz et $\chi = 0$ dans le liquide (voir Figure 2.1). L'indice l (respectivement g) est associé au fluide $\chi = 0$ (respectivement $\chi = 1$).

On suppose qu'il existe un champ de vitesse ω tel que l'évolution de χ respecte

$$\partial_t \chi + \omega \cdot \nabla \chi = 0. \quad (2.6)$$

À l'interface, ω est la vitesse de déplacement de l'interface. Sans changement de phase, la vitesse ω peut être choisi égale à u_l ou u_g (la conservation de la masse impliquera alors l'égalité des composantes normales de ces deux vitesses). En cas de changement de phase, ω , u_l et u_g sont en général différentes.

Le vecteur normal à l'interface orienté de $\chi = 0$ vers $\chi = 1$ est noté $\nu_{l \rightarrow g}$. Formellement, il s'écrit comme

$$\nu_{l \rightarrow g} = \frac{\nabla \chi}{|\nabla \chi|}.$$

Le vecteur opposé est noté $\nu_{g \rightarrow l} = -\nu_{l \rightarrow g}$.

2.1.2 Bilan de masse

De (2.2) et (2.6), on déduit

$$[\rho]\omega \cdot \nu_{l \rightarrow g} = [\rho u] \cdot \nu_{l \rightarrow g}. \quad (2.7)$$

Cette relation va être reformulée sous la forme de la définition d'une nouvelle grandeur.

Définition 2.3. Le flux de masse surfacique local à travers l'interface, noté J , est défini par

$$J_{l \rightarrow g} := \rho_l(u_l - \omega) \cdot \nu_{l \rightarrow g} = \rho_g(u_g - \omega) \cdot \nu_{l \rightarrow g}. \quad (2.8)$$

L'indice $l \rightarrow g$ signifie que le flux est compté positivement quand la masse va de la phase l à la phase g (c'est-à-dire de l'évaporation).

En l'absence de changement de phase, c'est-à-dire si on suppose $\omega = u_l$ ou $\omega = u_g$, il se vérifie aisément que

$$[u] = 0, \quad \text{et} \quad J_{l \rightarrow g} = 0.$$

Remarque 2.4. En introduisant le volume spécifique

$$\tau = \frac{1}{\rho}$$

la relation (2.7) peut être reformulée comme

$$J_{l \rightarrow g}[\tau] = [u] \cdot \nu_{l \rightarrow g}. \quad (2.9)$$

◁

2.1.3 Bilan de quantité de mouvement

De (2.2) et (2.6), on déduit

$$[\rho u \otimes (u - \omega)] \cdot \nu_{l \rightarrow g} + [p]\nu_{l \rightarrow g} = 0, \quad (2.10)$$

qui peut être réécrite avec l'aide du flux de masse comme

$$J_{l \rightarrow g}[u] + [p]\nu_{l \rightarrow g} = 0. \quad (2.11)$$

En séparant la relation (2.11) selon les directions normale et tangentes à l'interface, on obtient

$$[p] = -J_{l \rightarrow g}^2[\tau], \quad (2.12)$$

ainsi que

$$J_{l \rightarrow g}[u] \cdot \nu^\perp = 0, \quad (2.13)$$

pour tout vecteur tangent à l'interface ν^\perp .

Remarque 2.5. En l'absence de changement de phase ($J_{l \rightarrow g} = 0$) la pression est continue à l'interface. Le saut de pression en cas de changement de phase peut s'interpréter comme un effet Venturi : le flux de masse est le même des deux cotés de l'interface mais les densités sont différentes. ◁

Remarque 2.6. La tension de surface a été négligée dans cette thèse par souci de simplicité. Si elle avait été prise en compte, elle serait apparue dans l'équation (2.12) sous la forme de la loi de Laplace :

$$[p] = 2\sigma\kappa - J_{l \rightarrow g}^2[\tau], \quad (2.14)$$

où σ est le coefficient de tension de surface et κ est la courbure moyenne de l'interface. ◁

2.1.4 Bilan d'énergie

De (2.2) et (2.6), on déduit

$$[\rho E]\omega \cdot \nu_{l \rightarrow g} = [\rho H u + q] \cdot \nu_{l \rightarrow g}. \quad (2.15)$$

Grâce à la relation (2.1) et à la définition du flux de masse (2.8), cette relation se réécrit comme

$$J_{l \rightarrow g}[E] + [p u] \cdot \nu_{l \rightarrow g} + [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0. \quad (2.16)$$

De cette expression on peut déduire quatre autres versions équivalentes. Tout d'abord, en utilisant (2.9), (2.11) et $E = e + \frac{|u|^2}{2}$, on obtient

$$J_{l \rightarrow g} ([e] + \bar{p}[\tau]) + [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0, \quad (2.17)$$

que l'on peut reformuler en termes d'enthalpie

$$J_{l \rightarrow g} ([h] - \bar{\tau}[p]) + [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0, \quad (2.18)$$

ou encore, grâce à l'équation (2.12)

$$J_{l \rightarrow g} [h] + \frac{J_{l \rightarrow g}^3}{2} [\tau^2] + [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0, \quad (2.19)$$

et finalement, en utilisant (2.9) et (2.13) pour revenir à une formulation en termes de vitesse

$$J_{l \rightarrow g} \left[h + \frac{|u - \omega|^2}{2} \right] + [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0. \quad (2.20)$$

Remarque 2.7. La relation (2.19) permet de justifier le rôle des termes d'échange thermique dans le changement de phase.

En effet, dans le cas adiabatique $q_l = q_g = 0$, elle peut être réécrite pour un flux de masse faible mais non nul comme

$$[h] \simeq 0.$$

Si l'enthalpie est linéarisée sous la forme $h - h_{\text{ref}} = C_p(T - T_{\text{ref}})$ où C_p est la capacité thermique isobare supposée constante, alors cette relation s'écrit

$$[C_p(T - T_{\text{ref}})] \simeq \mathcal{L},$$

où $\mathcal{L} = [h_{\text{ref}}]$ est la chaleur latente dans l'état de référence. Enfin, les capacités thermiques C_{pl} et C_{pg} étant du même ordre de grandeur, la relation se réécrit approximativement comme

$$\bar{C}_p[T] \simeq \mathcal{L}.$$

Pour le méthane au voisinage de 111 K, on a en ordre de grandeur $C_p = 2.5 \cdot 10^3 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et $\mathcal{L} = 0.5 \cdot 10^6 \text{ J kg}^{-1}$ d'où $[T] \simeq 200 \text{ K}$. La Figure 2.2 présente des valeurs de \mathcal{L}/C_{pg} et \mathcal{L}/C_{pl} obtenues par la loi d'état *Quickmethane* pour diverses températures le long de la courbe de saturation. Les mêmes ordres de grandeur se rencontrent pour l'eau vers 473 K, où on a environ $C_p = 4 \cdot 10^3 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et $\mathcal{L} = 2 \cdot 10^6 \text{ J kg}^{-1}$, soit $[T] \simeq 500 \text{ K}$. Avec de tels gradients de températures, il est peu raisonnable de négliger les échanges thermiques. \triangleleft

2.1.5 Bilan d'entropie

De (2.5) et (2.6), on déduit

$$J_{l \rightarrow g} [s]_l^g + \left[\frac{q}{T} \right]_l^g \cdot \nu_{l \rightarrow g} \geq 0. \quad (2.21)$$

Si on définit le flux d'énergie total échangé à l'interface Q à l'aide de (2.20) comme

$$\begin{aligned} Q_{l \rightarrow g} &= J_{l \rightarrow g} \left(h_g + \frac{|u_g - \omega|^2}{2} \right) + q_g \cdot \nu_{l \rightarrow g}, \\ &= J_{l \rightarrow g} \left(h_l + \frac{|u_l - \omega|^2}{2} \right) + q_l \cdot \nu_{l \rightarrow g}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

alors, la condition interfaciale pour l'entropie s'écrit :

$$- J_{l \rightarrow g} \left[\frac{\mu + \frac{1}{2}|u - \omega|^2}{T} \right]_l^g + Q_{l \rightarrow g} \left[\frac{1}{T} \right]_l^g \geq 0, \quad (2.23)$$

où μ est le potentiel chimique défini par $\mu = h - Ts$.

Remarque 2.8. Le flux Q tel que défini avec la relation (2.22) est défini à une constante près. Il est proportionnel à h_g (ou h_l) qui dépend du niveau zéro de l'énergie fixé arbitrairement. Le terme $[\mu/T]$ de l'équation (2.23) dépend aussi (d'une manière moins évidente) de cette référence. Ces deux dépendances s'annulent pour que l'entropie totale créée soit indépendante de toute référence arbitraire comme c'est le cas pour (2.21). \triangleleft

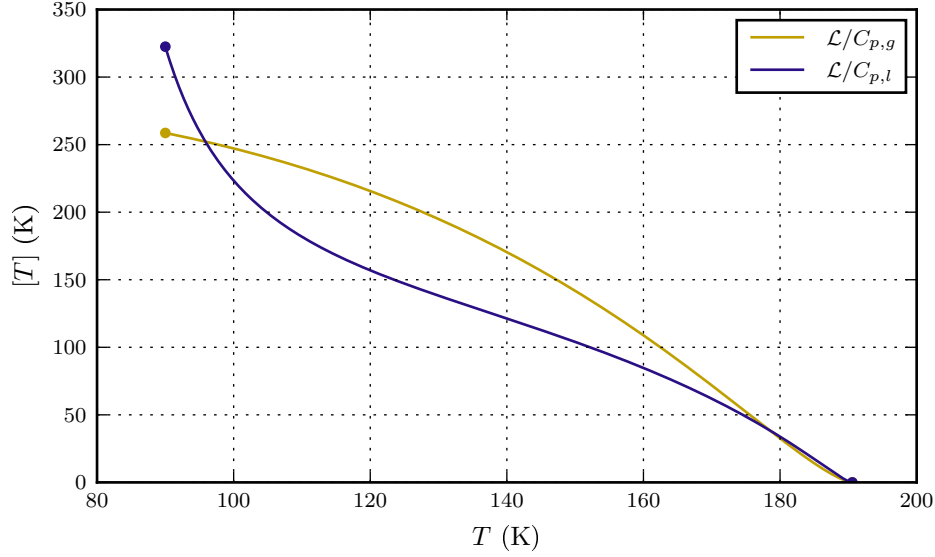


FIGURE 2.2 – Valeur approchée du saut de température à l’interface liquide-vapeur en l’absence de diffusion thermique pour différentes conditions de référence le long de la courbe de saturation du méthane d’après les données de *Quickmethane*. Voir aussi Remarque 2.7.

2.1.6 Courbe de Hugoniot

On peut remarquer que les relations qui précèdent ne sont pas spécifiques au changement de phase, mais peuvent décrire n’importe quelle interface perméable entre deux fluides. Elles sont similaires aux équations de Rankine-Hugoniot décrivant un choc dans un gaz (si ce n’est que pour un choc les lois d’état des deux cotés de l’interface sont les mêmes) [MP89]. Elles peuvent aussi décrire le front de flamme de certains modèles de combustion, les deux fluides étant alors le gaz brûlé et le gaz non brûlé.

Pour ces applications, il est courant de tracer dans un diagramme (typiquement (p, τ) ou (p, u)) l’ensemble des états joignables à partir d’un état donné à travers une discontinuité respectant les relations de saut. Pour l’étude des chocs en mécanique des fluides, on appelle *courbe de Hugoniot* une telle courbe. Dans le domaine de la combustion, elle est aussi nommée *courbe de Crussart*.

Comme déjà évoqué dans la Remarque 2.7, les conditions d’interface peuvent donner des valeurs non physiques en l’absence de diffusion thermique. Ceci est dû à la valeur élevée de la chaleur latente (qui n’est pas présente dans la même mesure ni dans le cas des chocs dans un gaz, ni dans le cas du front de flamme). La courbe de Hugoniot peut néanmoins être tracée en supposant une valeur constante pour les flux de chaleurs suffisante pour compenser la chaleur latente. Sur la Figure 2.3, la courbe de Hugoniot pour l’évaporation a été tracée en supposant arbitrairement

$$[q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = J_{l \rightarrow g} \times 6 \cdot 10^5 \text{ J kg}^{-1}.$$

Le point à gauche de la Figure 2.3 est l’état initial liquide ($\tau = 2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$ et $p = 1 \text{ bar}$). La courbe grise est la courbe de saturation (ensemble des marqueurs circulaires sur la Figure 1.2). La courbe bleue (pleine et discontinue) est l’ensemble des solutions de l’équation (2.18).

D’après la relation (2.12), on a

$$-J_{l \rightarrow g}^2 = \frac{[p]}{[\tau]},$$

donc la droite reliant un état final à droite à l’état initial à gauche a pour pente $-J_{l \rightarrow g}^2$. Ces droites sont aussi appelées *droites de Rayleigh*. Deux d’entre elles ont été tracées sur la Figure 2.3 en tirets violets.

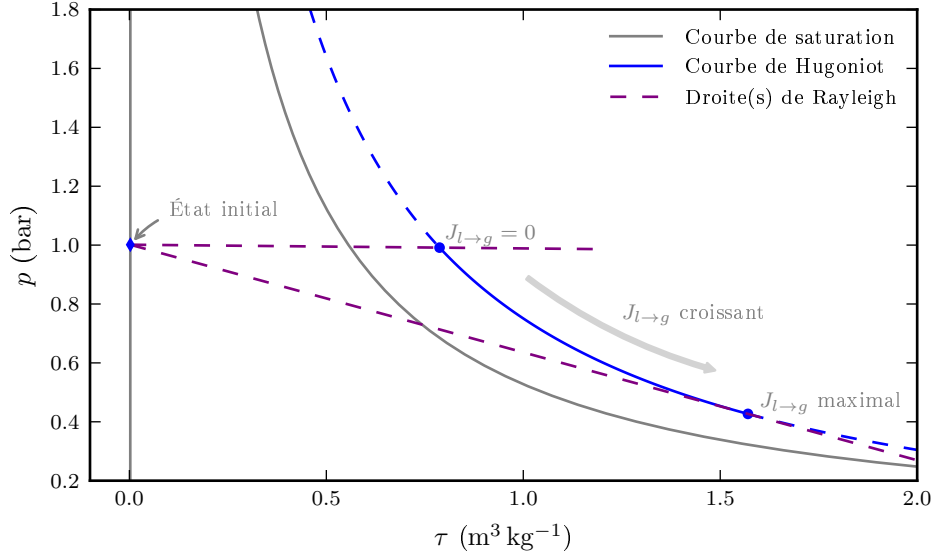


FIGURE 2.3 – Courbe de Hugoniot dans un diagramme (τ, p) pour l'évaporation avec un apport d'énergie $[q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = J_{l \rightarrow g} \times 6 \cdot 10^5 \text{ J kg}^{-1}$. Le point à gauche (liquide à $\tau \simeq 2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$) est l'état initial. La courbe bleu est l'ensemble des états solutions de (2.18). Seule la section en ligne pleine correspond à des transformations physiques subsoniques.

La section la plus à gauche de la courbe de Hugoniot a été tracée en ligne discontinue car elle ne correspond pas à une transformation physique. En effet, pour un tel état final : $p_g - p_l > 0$ et $\tau_g - \tau_l > 0$ ce qui impliquerait $J_{l \rightarrow g}^2 < 0$.

La droite de Rayleigh horizontale correspond au cas limite $J_{l \rightarrow g} \simeq 0$. Plus loin sur la courbe, pour des droites de Rayleigh de pente $-J_{l \rightarrow g}^2$ décroissante, on observe une diminution de la pression de l'état gazeux final.

La deuxième courbe de Rayleigh tracée sur la Figure 2.3 est tangente à la courbe de Hugoniot. Elle correspond au flux de masse maximal possible dans ces conditions. Ce régime est appelé point de Chapman-Jouguet dans le domaine de la combustion [TCL82]. La vitesse d'échappement du gaz de l'interface est alors la vitesse du son du gaz. Cette borne supérieure de $J_{l \rightarrow g}$ est aussi étudiée d'un point de vue plus théorique dans le cas isotherme par [HDW13].

Enfin, la dernière section de la courbe de Hugoniot à droite correspond à des écoulements de gaz supersoniques par rapport à l'interface. Ce régime, dit de *déflagration forte*, ne sera pas considéré pour notre modélisation du changement de phase. Par ailleurs, une autre section de la courbe de Hugoniot, dite de *détonation*, est étudiée dans le domaine de la combustion [TCL82, Fig. 3.1]. Elle correspond au domaine $p_g > p_l$ et $\tau_g < \tau_l$. Dans notre contexte, ce type de transformation ne correspond pas à un changement de phase et ne sera pas étudiée.

Enfin, une courbe de Hugoniot peut aussi être tracée pour la condensation. Celle-ci est cependant moins intéressante en raison de la quasi-incompressibilité du liquide.

2.2 Relations de fermeture

2.2.1 Généralités

Comme déjà mentionné précédemment, toutes les relations qui précèdent dans ce chapitre sont valables pour n'importe quelle interface perméable entre deux fluides non miscibles. La spécificité de la physique du changement de phase viendra des relations de fermeture manquantes. Outre les lois d'états des deux phases pures, il manque deux relations de fermeture.

La première relation de fermeture vient de la présence de termes d'ordre 2 dans l'expression de la diffusion thermique q . Sans changement de phase, on impose généralement la continuité de la température à l'interface.

$$[T] = 0. \quad (2.24)$$

Cependant, il n'est pas certain que cette hypothèse soit raisonnable pour la modélisation d'une interface avec changement de phase hors-équilibre. Dans ce travail, une forme plus générale sera considérée :

$$Q_{l \rightarrow g} = \mathcal{Q}(p_l, T_l, p_g, T_g), \quad (2.25)$$

où Q est le flux d'énergie défini par (2.22) et p_l, T_l, p_g et T_g sont les états thermodynamiques respectivement dans le liquide et dans le gaz.

Sans changement de phase, cette relation de fermeture peut par exemple prendre la forme

$$Q_{l \rightarrow g} = q_l \cdot \nu_{l \rightarrow g} = q_g \cdot \nu_{l \rightarrow g} = \frac{k_{\text{int}}}{\varepsilon} (T_l - T_g),$$

où l'interface a été modélisée par une couche d'épaisseur ε et de conductivité thermique moyenne k_{int} . (Ici, k_{int} est positif pour garantir un flux de chaleur orienté selon $\nu_{l \rightarrow g}$ quand la température T_l est supérieure à la température T_g .) L'hypothèse de continuité de la température (2.24) se retrouve comme cas limite de ce modèle quand $\varepsilon \rightarrow 0$.

La seconde relation de fermeture vient du terme de changement de phase. Comme précédemment, le flux de masse $J_{l \rightarrow g}$ va être relié aux conditions thermodynamiques de chaque côté de l'interface par une relation de la forme

$$J_{l \rightarrow g} = \mathcal{J}(p_l, T_l, p_g, T_g). \quad (2.26)$$

Cette relation sera aussi appelée *relation cinétique* du changement de phase. Elle décrit la manière dont l'interface va tendre vers l'équilibre liquide-vapeur, de la même manière que (2.25) décrit le retour à l'équilibre thermique. Ces deux relaxations peuvent être couplées et doivent respecter la condition d'entropie (2.23).

Le choix d'un modèle pour $J_{l \rightarrow g}$ (et du flux $Q_{l \rightarrow g}$ si il est couplé à $J_{l \rightarrow g}$) est un problème ouvert. Cette question a déjà été discutée dans la Section 1.3. La relation de Hertz-Knudsen (1.11) est un bon candidat pour une expression de $J_{l \rightarrow g}$. Comme dans le cas du flux d'énergie, le cas limite d'une relaxation infiniment rapide $A \rightarrow \infty$ correspond formellement à remplacer la relation de fermeture de la forme (2.26) par la condition d'équilibre à l'interface comme par exemple celle du problème de Stefan (1.9b).

Une approche possible pour trouver une expression pour $J_{l \rightarrow g}$ et $Q_{l \rightarrow g}$ qui satisfasse (2.23) est la thermodynamique hors équilibre que nous présenterons brièvement dans le paragraphe suivant.

2.2.2 Thermodynamique hors équilibre à l'interface

La principale référence sur le sujet de la thermodynamique hors-équilibre est [DM84]. On pourra aussi se rapporter à [BHY90], [BK04], [Bed10] (et autres travaux des mêmes auteurs) pour une discussion plus orientée vers la modélisation d'une interface avec changement de phase.

Le postulat de base de la thermodynamique hors équilibre est l'écriture des flux échangés entre deux systèmes comme dépendant directement des déséquilibres entre ces systèmes, c'est-à-dire

$$\text{Flux} = f(\text{Déséquilibres}),$$

avec une fonction f telle que $f(0) = 0$ afin que les flux soient nuls à l'équilibre. Au voisinage de l'équilibre, la fonction f sera linéarisée sous la forme

$$\text{Flux} = G \cdot \text{Déséquilibres},$$

où G est une matrice, que l'on supposera ici constante. La loi de Fourier (2.4) est l'exemple le plus connu de modèle sous cette forme.

Remarque 2.9. Cette forme n'est pas la seule approche possible. La *thermodynamique hors équilibre étendue* (ou EIT pour *Extended Irreversible Thermodynamics*) [BGK02] postule par exemple un temps de réaction τ sous la forme

$$\tau \frac{d\text{Flux}}{dt} + \text{Flux} = G \cdot \text{Déséquilibres}.$$

En pratique, aux échelles de temps que l'on considère, il peut être négligé. \triangleleft

Pour un problème donné, l'enjeu est de définir les flux et de quantifier les déséquilibres à qui ils seront reliés. Pour cela, le bilan d'entropie (par exemple (2.23)) sera réécrit sous la forme

$$\sum \text{Flux} \cdot \text{Déséquilibres} \geq 0.$$

Ainsi pour que le Second Principe soit respecté, il sera suffisant de prendre la matrice G positive, c'est-à-dire telle que

$$\forall x, \quad x \cdot Gx \geq 0.$$

Cependant, la décomposition sous cette forme n'est pas unique et des critères physiques vont devoir être utilisés.

Comme discuté à la Remarque 2.8, l'écriture du bilan d'entropie sous la forme (2.23) peut être problématique. En effet, l'utilisation de $J_{l \rightarrow g} \propto [\mu/T]$ donnerait un flux de masse dépendant de la référence arbitraire en énergie. Ceci peut être corrigé avec l'aide du résultat suivant.

Lemme 2.10. *Le potentiel chimique μ respecte la relation de Gibbs-Helmholtz :*

$$\left(\frac{\partial \frac{\mu}{T}}{\partial \frac{1}{T}} \right)_p = h. \quad (2.27)$$

Démonstration. En utilisant les propriétés usuelles de la dérivée, on a :

$$\left(\frac{\partial \frac{\mu}{T}}{\partial \frac{1}{T}} \right)_p = -T^2 \left(\frac{\partial \frac{\mu}{T}}{\partial T} \right)_p = \frac{T^2}{T^2} \mu - \frac{T^2}{T} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_p = \mu - T \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_p.$$

Or, la relation thermodynamique $d\mu = -sdT + \tau dp$ implique

$$s = - \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_p,$$

et par ailleurs, on a par définition de μ ,

$$h = \mu + Ts,$$

ce qui permet de conclure. \square

Corollaire 2.11. *La condition d'entropie (2.23) peut être réécrite au premier ordre comme*

$$- J_{l \rightarrow g} \left(\frac{\mu_g(p_g, T_l) - \mu_l(p_l, T_l)}{T_l} + \left[\frac{\frac{1}{2}|u - \omega|^2}{T} \right] \right) + (Q_{l \rightarrow g} - J_{l \rightarrow g} h_g) \left[\frac{1}{T} \right] \geq 0. \quad (2.28)$$

Démonstration. Par définition,

$$J_{l \rightarrow g} \left[\frac{\mu}{T} \right] = J_{l \rightarrow g} \left(\frac{\mu_g(p_g, T_g)}{T_g} - \frac{\mu_l(p_l, T_l)}{T_l} \right),$$

où p_k et T_k décrivent l'état du fluide $k \in \{g, l\}$ à l'interface et μ_k est la fonction potentiel chimique définie par la loi d'état du fluide. Par ailleurs, le Lemme 2.10 permet d'écrire, pour des différences de température suffisamment petites :

$$\frac{\mu(p, T)}{T} \simeq \frac{\mu(p, T_0)}{T_0} + h_g(p, T) \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right),$$

d'où

$$J_{l \rightarrow g} \left[\frac{\mu}{T} \right] = J_{l \rightarrow g} \left(\frac{\mu_g(p_g, T_l) - \mu_l(p_l, T_l)}{T_l} \right) + J_{l \rightarrow g} h_g(p_g, T_g) \left(\frac{1}{T_g} - \frac{1}{T_l} \right),$$

ce qui donne le résultat voulu. \square

Théorème 2.12. *Au voisinage de l'équilibre, si le flux de masse $J_{l \rightarrow g}$ est supposé suffisamment faible, alors les relations de fermeture*

$$Q_{l \rightarrow g} = G_q(T_l - T_g) + h_g(p_g, T_g)J_{l \rightarrow g}, \quad J_{l \rightarrow g} = G_m \frac{\mu_l(p_l, T_l) - \mu_g(p_g, T_l)}{T_l}, \quad (2.29)$$

avec $G_m \geq 0$ et $G_q \geq 0$, respectent la condition d'entropie.

Démonstration. Avec l'aide de la définition de $J_{l \rightarrow g}$ (2.8), la condition d'entropie (2.28) peut être réécrite comme

$$-J_{l \rightarrow g} \left(\frac{\mu_g(p_g, T_l) - \mu_l(p_l, T_l)}{T_l} + \frac{J_{l \rightarrow g}^2}{2} \left[\frac{\tau^2}{T} \right] \right) + (Q_{l \rightarrow g} - J_{l \rightarrow g} h_g) \left[\frac{1}{T} \right] \geq 0.$$

En insérant les expressions de (2.29) dans le bilan d'entropie, on obtient

$$-J_{l \rightarrow g} \left(-\frac{J_{l \rightarrow g}}{G_m} + \frac{J_{l \rightarrow g}^2}{2} \left[\frac{\tau^2}{T} \right] \right) - G_q [T] \left[\frac{1}{T} \right] \geq 0.$$

Pour un flux de masse suffisamment faible, on néglige le terme d'ordre 3 en $J_{l \rightarrow g}$

$$G_m \left(\frac{\mu_l(p_l, T_l) - \mu_g(p_g, T_l)}{T_l} \right)^2 + G_q \frac{[T]^2}{T_g T_l} \geq 0.$$

Cette condition est bien toujours respectée. □

Remarque 2.13. La relation (2.28) aurait pu être écrite symétriquement comme

$$-J_{l \rightarrow g} \left(\frac{\mu_g(p_g, T_g) - \mu_l(p_l, T_g)}{T_g} + \left[\frac{\frac{1}{2}|u - \omega|^2}{T} \right] \right) + (Q_{l \rightarrow g} - J_{l \rightarrow g} h_l) \left[\frac{1}{T} \right] \geq 0. \quad (2.30)$$

Le choix d'une asymétrie se base sur des considérations physiques : en considérant que le liquide à une meilleure diffusivité thermique que le gaz, il est généralement fait l'hypothèse que le changement de phase à l'interface a lieu à la température T_l . Voir aussi la Remarque 5.10. ◁

Remarque 2.14. La thermodynamique hors-équilibre fait l'hypothèse d'un petit déséquilibre à l'interface. Elle n'est pas compatible avec la condition de Chapman-Jouguet présentée à la Section 2.1.6 pour de grands écarts à l'équilibre. Certaines références [LMS05] [Per08] proposent dans ce cas de prendre comme relation de fermeture la valeur de $J_{l \rightarrow g}$ au point de Chapman-Jouguet, c'est-à-dire

$$J_{l \rightarrow g} = \mathcal{J}_{\text{Chapman-Jouguet}}(p_l, T_l, p_g, T_g).$$

◁

2.2.3 Lien avec la relation de Hertz-Knudsen

Lemme 2.15. *Pour toute température T_0 , pour toute pression p au voisinage de $p^{\text{sat}}(T_0)$ on a*

$$\mu_g(p, T_0) - \mu_l(p, T_0) \simeq \tau_g(p^{\text{sat}}(T_0), T_0) (p - p^{\text{sat}}(T_0)). \quad (2.31)$$

Démonstration. Par définition de p^{sat} , on a

$$\mu_g(p^{\text{sat}}(T_0), T_0) = \mu_l(p^{\text{sat}}(T_0), T_0).$$

En développant $\mu_g(\cdot, T_0)$ et $\mu_l(\cdot, T_0)$ au premier ordre au voisinage de $p^{\text{sat}}(T_0)$ on obtient :

$$\mu_g(p, T_0) - \mu_l(p, T_0) \simeq \left(\left(\frac{\partial \mu_g}{\partial p} \right)_T (p^{\text{sat}}(T_0), T_0) - \left(\frac{\partial \mu_l}{\partial p} \right)_T (p^{\text{sat}}(T_0), T_0) \right) (p - p^{\text{sat}}(T_0)).$$

Or

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial p} \right)_T = \tau.$$

En faisant l'approximation classique

$$\tau_l \ll \tau_g \quad \Rightarrow \quad \tau_g - \tau_l \simeq \tau_g,$$

on obtient le résultat voulu. □

Remarque 2.16. Pour un gaz parfait, l'expression exacte de $\mu_g(p, T)$ est connue. En négligeant comme précédemment la variation de μ_l , on obtient

$$\mu_g(p, T_0) - \mu_l(p, T_0) \simeq (\gamma - 1)\mathcal{C}_{vg}T_0 \ln\left(\frac{p}{p^{\text{sat}}(T_0)}\right).$$

La formule (2.31) se retrouve alors par l'approximation

$$\ln\left(\frac{p}{p^{\text{sat}}(T_0)}\right) = \ln\left(1 + \frac{p - p^{\text{sat}}(T_0)}{p^{\text{sat}}(T_0)}\right) \simeq \frac{p - p^{\text{sat}}(T_0)}{p^{\text{sat}}(T_0)}.$$

◁

On en déduit une expression pour $J_{l \rightarrow g}$ semblable à (1.11).

Corollaire 2.17. *Les relations de fermeture*

$$Q_{l \rightarrow g} = G_q(T_l - T_g) + h_g(p_g, T_g)J_{l \rightarrow g}, \quad J_{l \rightarrow g} = -G_m \frac{\tau_g(p^{\text{sat}}(T_l), T_l)}{T_l} (p_g - p^{\text{sat}}(T_l)), \quad (2.32)$$

respectent la condition d'entropie.

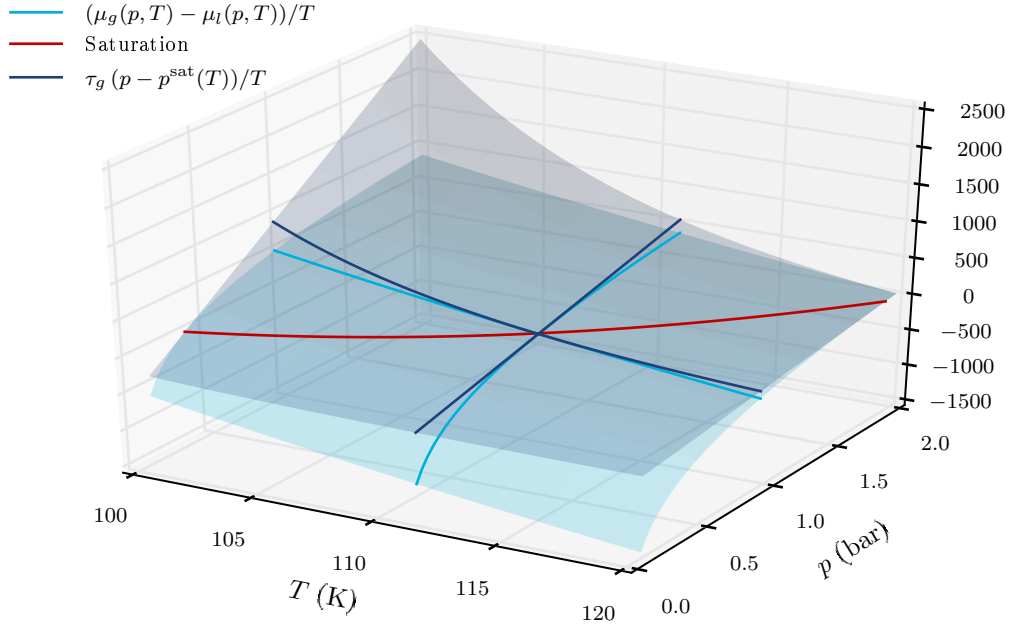


FIGURE 2.4 – Comparaison des valeurs (en $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$) de l'approximation (2.31) pour des températures T entre 100 K et 120 K et des pressions p entre 0.1 bar et 2 bar pour le méthane d'après la loi d'état *Quickmethane*. La courbe de saturation (en rouge) correspond à la ligne de niveau $0 \text{ J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$. Le déséquilibre $(\mu_g(p, T) - \mu_l(p, T))/T$ est négatif en dessous de la courbe de saturation (entraînant de l'évaporation) et positif au dessus (entraînant de la condensation). Comme attendu, les deux surfaces apparaissent tangentes au voisinage de la courbe de saturation.

La Figure 2.4 présente une comparaison des deux expressions en fonction de p et T . L'écart entre les deux surfaces loin de la courbe de saturation est à relativiser pour deux raisons principales.

D'une part, une des deux espèces est toujours dans un état métastable hors de la courbe de saturation. De ce fait, les mesures expérimentales de ses propriétés physiques sont difficiles voire impossibles. Les valeurs numériques de $\mu_g - \mu_l$ données par l'équation d'état tabulée *Quickmethane* relève autant de l'extrapolation que de la mesure.

D'autre part, l'expression (2.29) a été introduite ici pour des raisons théoriques mais n'a pas été validée expérimentalement avec plus de certitude que (2.32), et ceci faute de données expérimentales de changement de phase interfacial loin de l'équilibre.

Remarque 2.18. Enfin, avec l'aide de la relation de Clapeyron (1.4), la pression de saturation peut être linéarisée. Une forme simplifiée minimale peut ainsi être proposée, pour des pressions et températures proches de l'état d'équilibre ($p_0 = p^{\text{sat}}(T_0)$, T_0), sous la forme

$$J_{l \rightarrow g} = -\frac{G_m}{T_0}(\tau_g(p_0, T_0)(p_g - p_0) - \mathcal{L}(T_l - T_0)), \quad (2.33)$$

où \mathcal{L} est la chaleur latente. ◁

2.3 Équations de conservation

2.3.1 Le modèle

Dans les sections précédentes, le modèle a été écrit comme la combinaison des équations d'Euler mono-fluide sur deux domaines disjoints avec des conditions d'interface comme conditions aux limites. Dans la suite de ce chapitre, le modèle sera reformulé comme la résolution d'un seul système sur tout le domaine. Cela sera possible grâce à la fonction caractéristique $\chi(x, t) \in \{0, 1\}$, déjà introduite dans la section précédente. C'est elle qui décrira implicitement la position de l'interface.

L'équation d'évolution de χ donnée par (2.6) peut être reformulée avec l'aide de (2.8) comme

$$\partial_t \chi + \left(u - \frac{J}{\rho}\right) \cdot \nabla \chi = 0, \quad (2.34)$$

où J est le flux de masse porté par le vecteur normal à l'interface, tel que

$$J = J_{l \rightarrow g} \nu_{l \rightarrow g}. \quad (2.35)$$

En 1D, J est le flux de masse compté positivement de la phase de gauche vers la phase de droite.

Remarque 2.19. On a choisi $\omega = u - \frac{J}{\rho}$, mais n'importe quel champ ω satisfaisant

$$\omega \cdot \nu_{l \rightarrow g} = u \cdot \nu_{l \rightarrow g} - \frac{J_{l \rightarrow g}}{\rho}$$

aurait fait l'affaire. La composante de ω tangente à l'interface ne joue aucun rôle. Par ailleurs, l'équation (2.34) est bien définie à l'interface car $\omega \cdot \nu_{l \rightarrow g}$ est continue d'après (2.8) et ceci même si la composante tangente est discontinue. ◁

L'évolution de l'interface est décrite par l'évolution du champ χ . D'après cette équation, celui-ci est advecté avec la vitesse $u - \frac{J}{\rho}$. Même si la vitesse d'écoulement du fluide est nulle, l'interface peut évoluer en raison du flux de masse de changement de phase.

En joignant l'équation (2.34) aux équations de conservation d'Euler, on obtient le système :

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \quad (2.36a)$$

$$\partial_t (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u + p \mathbb{I}) = 0, \quad (2.36b)$$

$$\partial_t (\rho E) + \nabla \cdot ((\rho E + p) u + q) = 0, \quad (2.36c)$$

$$\partial_t (\chi \rho) + \nabla \cdot (\chi \rho u) - J \cdot \nabla \chi = 0, \quad (2.36d)$$

L'équation (2.34) a été combinée avec (2.36a) pour former l'équation de bilan de la masse de gaz (2.36d).

Si par exemple ρ et e sont les variables de base choisies pour la loi d'état, alors (2.36) se complète avec

$$p : \{0, 1\} \times \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^+$$

$$(\chi, \rho, e) \mapsto \begin{cases} p_l(\rho, e) & \text{si } \chi = 0, \\ p_g(\rho, e) & \text{si } \chi = 1, \end{cases}$$

où $p_g(\rho, e)$ et $p_l(\rho, e)$ sont les lois d'états des phases pures. La même approche vaut pour un autre choix de variables thermodynamiques de base, comme $\rho(\chi, p, T)$ ou $p(\chi, \rho, T)$.

Remarque 2.20. En écrivant formellement

$$J = J_{l \rightarrow g} \nu_{l \rightarrow g} = J_{l \rightarrow g} \frac{\nabla \chi}{|\nabla \chi|},$$

l'équation (2.36d) peut être reformulée comme

$$\partial_t(\chi \rho) + \nabla \cdot (\chi \rho u) - J_{l \rightarrow g} |\nabla \chi| = 0. \quad (2.37)$$

Sous cette forme, le terme de changement de phase peut être interprété comme un terme source pour cette équation de bilan du gaz. Le terme $|\nabla \chi|$ peut être vu comme un terme d'aire interfaciale localisant l'interface. L'équation (2.37) se retrouve par exemple dans [SR05] ou [BBDG10]. Dans cette thèse, la notation (2.36d) sera préférée car elle est plus proche de la forme d'une équation de conservation. \triangleleft

2.3.2 Interprétation du terme non-conservatif

Le système d'équations aux dérivées partielles (2.36) fait intervenir un terme de la forme $J(v) \cdot \nabla \chi$, où $v = (\rho, \rho u, \rho E, \chi \rho)$ symbolise l'état du système. En général, l'état du système v est discontinu à l'interface et donc $J(v)$ l'est aussi. Le produit de cette fonction discontinue par la distribution de Dirac $\nabla \chi$ n'est pas défini. Cependant, cette difficulté théorique n'est pas une limite du modèle. Dans les paragraphes qui suivent, le sens physique à donner à cette indétermination sera explicité.

Le formalisme proposé par [DLM95] peut permettre de donner un sens à ce terme. Pour cela, on introduit une fonction Φ suffisamment régulière telle que pour deux états v_G et v_D quelconques,

$$\Phi(\cdot, v_G, v_D) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^m$$

est un chemin reliant ces deux états dans l'espace des phases.

Une fonction v est alors solution de l'équation aux dérivées partielles avec le terme non-conservatif (2.36d), si elle respecte la condition de Rankine-Hugoniot généralisée suivante à l'interface [Tou92] :

$$- [\chi \rho] \omega \cdot \nu_{l \rightarrow g} + [\chi \rho u \cdot \nu_{l \rightarrow g}] - \int_0^1 J_{l \rightarrow g}(\Phi(s, v_G, v_D)) \frac{\partial \Phi}{\partial s} ds = 0. \quad (2.38)$$

Le dernier terme peut être réécrit de manière plus concise en définissant la fonction $\widehat{J}_{l \rightarrow g}(\cdot, \cdot)$ telle que

$$\int_0^1 J_{l \rightarrow g}(\Phi(s, v_G, v_D)) \frac{\partial \Phi}{\partial s} ds =: \widehat{J}_{l \rightarrow g}(v_G, v_D)[\chi].$$

La relation de saut (2.38) est alors un bilan de masse similaire à (2.8) :

$$\widehat{J}_{l \rightarrow g}(v_G, v_D)[\chi] = [\chi \rho(u - \omega)] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = \rho_g(u_g - \omega) \cdot \nu_{l \rightarrow g}.$$

À la Section 2.2, le besoin d'une relation de fermeture de la forme $\mathcal{J}(p_l, T_l, p_g, T_g)$ a été discuté. Dans le système non-conservatif (2.36) vu par ce formalisme, cette fermeture prend la forme de la définition de $J_{l \rightarrow g}(v)$ et de Φ , ou bien uniquement du $\widehat{J}_{l \rightarrow g}(v_G, v_D)$ en résultant.

Physiquement, la fonction Φ peut être interprétée comme une description régulière à l'échelle microscopique des gradients de densité et de température. Selon le profil de ces fonctions à travers l'interface, le changement de phase local $J_{l \rightarrow g}(p, T)$ aura lieu dans des conditions différentes. Il en résultera un changement de phase total à l'interface $\widehat{J}_{l \rightarrow g}(v_G, v_D)$ différent.

En pratique, on ne cherchera pas à exprimer $J(v)$ et Φ mais on complétera notre modèle par une relation $\widehat{J}(v_G, v_D)$. La fonction $J(v)$ elle-même n'apparaissant nulle part en dehors des interfaces, il n'y a pas d'ambiguïté à confondre les notations J et \widehat{J} .

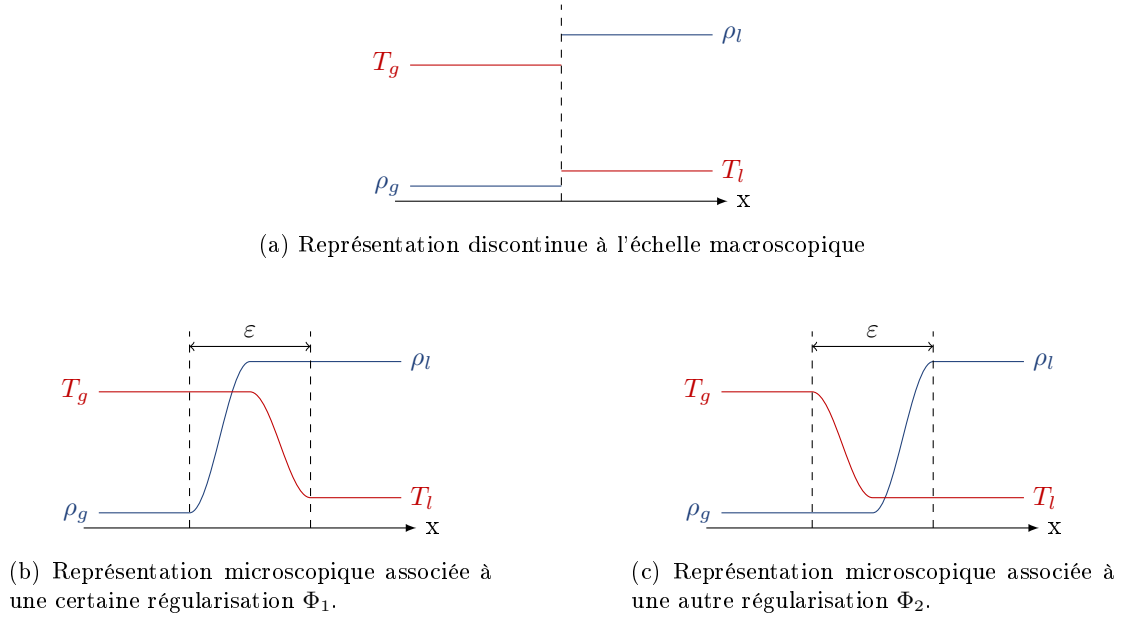


FIGURE 2.5 – Interprétation physique du chemin de régularisation Φ . Si on imagine que le changement de phase a lieu le long du gradient de ρ , alors la réaction a lieu à T_g à gauche et à T_l à droite. Selon la valeur de T_g et T_l par rapport à T^{sat} un cas peut correspondre à de la condensation et l'autre à l'évaporation. En pratique, on s'attend à ce que le cas de droite soit plus proche de la réalité microscopique.

Par ailleurs, le flux de chaleur, tel que donné par la loi de Fourier

$$q = -k(\chi, T)\nabla T,$$

peut aussi être mal défini à l'interface si T n'est pas continu. Ici aussi, une forme de régularisation devra être imposée qui pourra prendre la forme du flux d'énergie à l'interface $Q = \mathcal{Q}(\rho_l, T_l, \rho_g, T_g)$ évoqué dans la section précédente.

2.3.3 Conditions aux limites

En 1D, la définition des conditions aux limites associées au système de lois de conservation (2.36) ne pose pas de difficulté. Le bord du domaine n'est en contact qu'avec une phase pure (sauf peut-être en un nombre fini d'instantanés ponctuels).

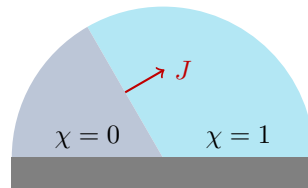


FIGURE 2.6 – Schéma d'un point de contact liquide-vapeur-paroi.

En dimensions supérieures, une difficulté peut apparaître au niveau des points de contact liquide-vapeur-paroi. Un exemple de tel point est représenté à la Figure 2.6.

D'un point de vue physique, la description de ce type de points fait intervenir des phénomènes particuliers, comme les angles de contacts (voir par exemple [Kun11, § 3.2.4]). La modélisation de ces phénomènes ainsi que la détermination de la physique du changement de phase dans cette situation sortent du cadre de cette thèse.

D'un point de vue mathématique, le choix de conditions aux limites associés à un système d'équations aux dérivées partielles pour obtenir un problème bien posé est une question complexe. L'analyse mathématique des conditions aux limites au point de contact n'a pas été étudiée dans cette thèse.

2.3.4 Forme lagrangienne 1D

Dans ce paragraphe, une autre formulation des mêmes équations de conservation va être présentée. Elle sera utilisée au Chapitre 4 pour la discrétisation du modèle par le code Flux-IC.

Lemme 2.21. *En 1D, les équations de conservation (2.36) peuvent être reformulées sous forme lagrangienne :*

$$d_t^u \tau - \partial_x u = 0, \quad (2.39a)$$

$$d_t^u u + \partial_x p = 0, \quad (2.39b)$$

$$d_t^u E + \partial_x p u = -\partial_x q, \quad (2.39c)$$

$$d_t^u \chi - J \partial_x \chi = 0, \quad (2.39d)$$

avec

$$d_t^u = \rho \partial_t + \rho u \cdot \partial_x \quad (2.40)$$

la dérivée temporelle dans le repère du fluide évoluant à la vitesse u .

En appliquant la définition de J en 1D

$$J = \rho(u - \omega),$$

les équations peuvent être reformulées de la façon suivante.

Corollaire 2.22. *Dans le référentiel de l'interface, qui évolue à la vitesse ω , ces mêmes équations peuvent se réécrire comme*

$$d_t^\omega \tau - \partial_x u + J \partial_x \tau = 0, \quad (2.41a)$$

$$d_t^\omega u + \partial_x p + J \partial_x u = 0, \quad (2.41b)$$

$$d_t^\omega E + \partial_x p u + J \partial_x E = -\partial_x q, \quad (2.41c)$$

$$d_t^\omega \chi = 0, \quad (2.41d)$$

avec

$$d_t^\omega = \rho \partial_t + \rho \omega \cdot \partial_x. \quad (2.42)$$

Les termes de la forme $J \partial_x$ sont les flux de volume massique, quantité de mouvement massique et énergie massique portés par le flux de masse J changeant de phase.

2.4 Problème de Riemann pour $J = \text{cst}$.

Le terme non-conservatif, même si il se justifie physiquement, rend l'étude théorique du système (2.36) assez complexe. Cependant, dans le cas particulier d'un flux de masse J constant (et sans flux de chaleur, $q = 0$), le système se réduit à un système de lois de conservation hyperbolique usuel. Dans cette section, nous allons étudier la solution au problème de Riemann de ce système simple.

Remarque 2.23. Pour résoudre le problème de Riemann pour (2.36), il est commode d'étendre le domaine de définition du paramètre d'ordre $\chi \in \{0, 1\}$, qui n'est pas convexe, à l'intervalle $[0, 1]$ en définissant un modèle de mélange.

Concrètement, cela revient à étendre la fonction

$$p : \{0, 1\} \times \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^+,$$

à une fonction régulière définie sur le domaine convexe

$$p : [0, 1] \times \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^+$$

(ou tout autre fonction thermodynamique selon les variables de base choisies). Dans cette thèse, le choix a été fait de changer la notation du paramètre d'ordre χ en ξ pour différencier les deux fonctions et indiquer qu'un modèle de mélange est employé. Par exemple, une solution naïve consiste à prendre la combinaison linéaire

$$\forall \xi \in [0, 1], \quad p(\xi, \cdot, \cdot) = \xi p(\chi = 1, \cdot, \cdot) + (1 - \xi) p(\chi = 0, \cdot, \cdot).$$

Un modèle de mélange plus physique sera proposé dans la section suivante.

Cependant, pour des conditions initiales dans $\{0, 1\}$, la solution au problème de Riemann reste dans $\{0, 1\}$ sans que le modèle de mélange défini pour $]0, 1[$ n'ait de conséquence sur la solution. \triangleleft

Hypothèse Pour simplifier les calculs qui suivent, l'hypothèse suivante sera faite :

$$|J| < \rho_k c_k, \quad (2.43)$$

pour tous les états k impliqués dans la solution au problème de Riemann.

Remarque 2.24. Cette hypothèse est légèrement plus forte que la limite au flux causée par le point de Chapman-Jouguet qui a été discutée à la Section 2.1.6. En effet, cette condition implique seulement que

$$|J| \leq \rho_k c_k,$$

pour les deux états k voisins de l'interface. \triangleleft

En 1D, le système de lois de conservation peut se réécrire comme le système

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \quad (2.44a)$$

$$\partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p) = 0, \quad (2.44b)$$

$$\partial_t(\rho E) + \partial_x((\rho E + p)u) = 0, \quad (2.44c)$$

$$\partial_t(\xi \rho) + \partial_x(\xi(\rho u - J)) = 0, \quad (2.44d)$$

associé à la loi d'état (partielle) $p(\xi, \rho, e)$.

Pour ce système, la jacobienne des flux s'écrit

$$A := \frac{\partial F}{\partial v} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ c^2 - u^2 + \Gamma(u^2 - H) - p_\xi \xi & (2 - \Gamma)u & \Gamma & p_\xi \\ (c^2 - H + \Gamma(u^2 - H) - p_\xi \xi)u & H - \Gamma u^2 & (1 + \Gamma)u & p_\xi u \\ -\xi \left(u - \frac{J}{\rho}\right) & \xi & 0 & u - \frac{J}{\rho} \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

où Γ est le coefficient de Grüneisen et

$$p_\xi := \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \right)_{\rho, e}.$$

Le calcul détaillé de cette matrice est présenté à l'Annexe B.

Les valeurs propres de cette matrice sont $u - c$, u , $u - \frac{J}{\rho}$ et $u + c$. L'ordre de la deuxième et de la troisième valeur propre peut changer selon le signe de J .

Les vecteurs propres associés sont respectivement

$$\begin{pmatrix} 1 \\ u - c \\ H - uc \\ \xi \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ u \\ H - \frac{c^2}{\Gamma} \\ \xi \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{c^2} \begin{pmatrix} p_\xi \\ p_\xi \left(u - \frac{J}{\rho}\right) \\ p_\xi \left(H - u \frac{J}{\rho}\right) \\ \xi p_\xi + c^2 - \left(\frac{J}{\rho}\right)^2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ u + c \\ H + uc \\ \xi \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

Lemme 2.25. Les champs associés aux valeurs propres u et $u - \frac{J}{\rho}$ sont linéairement dégénérés.

Démonstration. Pour le champ associé à la valeur propre u ,

$$\frac{\partial u}{\partial v} = \frac{\partial u}{\partial v} \frac{v_2}{v_1} = \frac{1}{v_1} \begin{pmatrix} -\frac{v_2}{v_1} \\ v_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\rho} \begin{pmatrix} -u \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Grâce à l'expression du deuxième vecteur propre à droite r donné en (2.46), on trouve $\frac{\partial \lambda}{\partial v} \cdot r = 0$.

De même pour le champ associé à la valeur propre $u - \frac{J}{\rho}$

$$\frac{\partial}{\partial v} \left(u - \frac{J}{\rho}\right) = \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{v_2 - J}{v_1}\right) = \frac{1}{v_1} \begin{pmatrix} -\frac{v_2 - J}{v_1} \\ v_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\rho} \begin{pmatrix} -u - \frac{J}{\rho} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

d'où on trouve $\frac{\partial \lambda}{\partial v} \cdot r = 0$. \square

Remarque 2.26. Le fait que le champ $u - \frac{J}{\rho}$ soit linéairement dégénéré n'est pas un cas particulier dû à l'hypothèse $J = \text{cst}$. C'est la condition d'interface (2.8) qui impose que

$$\left(u - \frac{J}{\rho}\right)_g = \left(u - \frac{J}{\rho}\right)_l,$$

c'est à dire la continuité de la vitesse des caractéristiques au travers de l'interface. Si l'interface avec changement de phase peut être vue physiquement comme un choc (elle a les mêmes conditions de Rankine-Hugoniot que les chocs des équations d'Euler), il s'agit du point de vue mathématique d'une discontinuité de contact. \triangleleft

Lemme 2.27. *Le paramètre d'ordre ξ est constant au travers des ondes associées aux valeurs propres $u - c$, u et $u + c$.*

Démonstration. Soit un choc associé à la valeur propre $u \pm c$. La condition de Rankine-Hugoniot appliquée à la variable conservative $\xi\rho$ s'écrit

$$[\xi(\rho u - J)] = \sigma[\xi\rho] \iff [\xi(\rho(u - \sigma) - J)] = 0,$$

où σ est la vitesse du choc.

À l'aide du Lemme 2.1, on en déduit

$$[\xi](\overline{\rho(u - \sigma) - J}) + \bar{\xi}[\rho(u - \sigma)] = 0.$$

Or la condition de Rankine-Hugoniot sur ρ s'écrit

$$[\rho u] = \sigma[\rho] \iff [\rho(u - \sigma)] = 0,$$

d'où

$$[\xi](\rho_D(u_D - \sigma) - J) = 0,$$

où l'indice D indique l'état à droite du choc.

Supposons que le facteur de droite soit nul, c'est-à-dire :

$$\rho_D(u_D - \sigma) = J.$$

La condition d'entropie de Lax sur le choc (voir par exemple [Tor09, p. 72]) implique que

$$u_D + c_D \leq \sigma \leq u_G + c_G.$$

On a donc

$$\rho_D c_D \leq -J,$$

ce qui est contradictoire avec l'hypothèse (2.43). D'où

$$[\xi] = 0.$$

Soit une onde de raréfaction associée à la valeur propre $u \pm c$ ou une discontinuité de contact associée à la valeur propre u . La conservation des invariants de Riemann implique à travers l'interface [Tor09, p.81]

$$\frac{d\rho}{1} = \frac{d\rho\xi}{\xi},$$

d'où on déduit

$$\rho d\xi = 0,$$

qui est le résultat voulu. \square

Corollaire 2.28. *Les ondes associées aux valeurs propres $u - c$, u et $u + c$ sont identiques aux ondes rencontrées pour les équations d'Euler dans un fluide pur.*

La solution peut être schématisée comme à la Figure 2.7 dans le cas $J_{l \rightarrow g} < 0$ et $\nu_{l \rightarrow g} = 1$, d'où $J < 0$. Ce schéma est similaire à celui présenté au Chapitre 1 pour décrire les modèles utilisant une solution ad-hoc au problème de Riemann. Par construction, l'interface respecte les conditions interfaciales décrites dans la Section 2.1. Cependant, comme discuté à la fin de cette section, ce problème n'a pas de sens physique en l'absence de diffusion thermique en raison de la valeur élevée de la chaleur latente. Les résultats présentés n'ont d'intérêt que d'un point de vue mathématique.

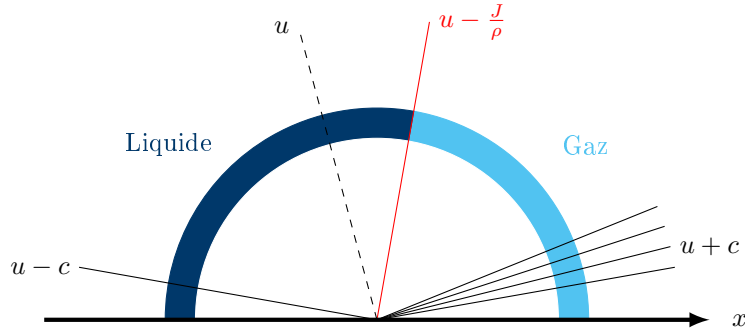


FIGURE 2.7 – Représentation schématique d’une solution au problème de Riemann. Ici $\nu_{l \rightarrow g} = 1$, le liquide est à droite, et $J_{l \rightarrow g} < 0$, le gaz se condense.

2.5 Équations de conservation moyennées

Pour des écoulements de grande dimension (cf. Section 1.2.4) ou bien simplement dans le cadre de certaines méthodes numériques de type volumes finis, l’écoulement sera moyenné. Dans cette section, nous discuterons en particulier de la moyenne du terme de changement de phase introduit précédemment. Pour une discussion plus approfondie sur ce type de moyenne, on pourra se référer par exemple à l’ouvrage de référence de Ishii et Hibiki [IH11].

Lemme 2.29. *Des équations (2.36) on déduit*

$$\partial_t \chi \rho + \nabla \cdot \chi \rho u - J \cdot \nabla \chi = 0, \quad (2.47a)$$

$$\partial_t \chi \rho u + \nabla \cdot \chi (\rho u \otimes u + p \mathbb{I}) - (u \otimes J + p \mathbb{I}) \nabla \chi = 0, \quad (2.47b)$$

$$\partial_t \chi \rho E + \nabla \cdot \chi ((\rho E + p)u + q) - (JE + pu + q) \cdot \nabla \chi = 0, \quad (2.47c)$$

qui sont les équations de bilan de la masse de gaz, de la quantité de mouvement du gaz et de l’énergie du gaz. Les équations correspondantes pour le liquide se déduisent en retranchant (2.47) de (2.36).

Remarque 2.30. Les termes non-conservatifs sont bien définis car $J \cdot \nu_{l \rightarrow g}$, $(u \otimes J + p \mathbb{I}) \nu_{l \rightarrow g}$ et $(JE + pu + q) \cdot \nu_{l \rightarrow g}$ sont continus à travers l’interface (voir la Section 2.1). \triangleleft

Démonstration.

— L’équation (2.47a) est exactement (2.36d).

— Bilan de quantité de mouvement (2.47b) :

On multiplie l’équation de bilan de quantité de mouvement par χ :

$$\chi (\partial_t \rho u + \nabla \cdot (\rho u \otimes u + p \mathbb{I})) = 0.$$

En intégrant χ dans les dérivées on obtient

$$\partial_t \chi \rho u + \nabla \cdot \chi (\rho u \otimes u + p \mathbb{I}) - \rho u \partial_t \chi - (\rho u \otimes u) \nabla \chi - p \nabla \chi = 0,$$

que l’on peut réécrire comme

$$\partial_t \chi \rho u + \nabla \cdot \chi (\rho u \otimes u + p \mathbb{I}) - \rho u \partial_t \chi - (\rho u \otimes \omega) \nabla \chi - (\rho u \otimes (u - \omega)) \nabla \chi - p \nabla \chi = 0.$$

En utilisant

$$(u \otimes \omega) \nabla \chi = u(\omega \cdot \nabla \chi),$$

on peut simplifier un des termes

$$\partial_t \chi \rho u + \nabla \cdot \chi (\rho u \otimes u + p \mathbb{I}) - \rho u \underbrace{(\partial_t \chi + \omega \cdot \nabla \chi)}_{=0} - (\rho u \otimes (u - \omega)) \nabla \chi - p \nabla \chi = 0,$$

et par ailleurs comme on a

$$\begin{aligned} (\rho u \otimes (u - \omega)) \nabla \chi &= u(\rho(u - \omega) \cdot \nabla \chi) \\ &= u(\rho(u - \omega) \cdot \nu_{l \rightarrow g}) |\nabla \chi| \\ &= u J_{l \rightarrow g} |\nabla \chi| \\ &= u(J \cdot \nabla \chi) \\ &= (u \otimes J) \nabla \chi, \end{aligned}$$

on peut écrire le résultat voulu

$$\partial_t \chi \rho u + \nabla \cdot \chi (\rho u \otimes u + p \mathbb{I}) - (u \otimes J + p \mathbb{I}) \nabla \chi = 0.$$

— Bilan d'énergie (2.47c) : Comme précédemment, on multiplie par χ le bilan d'énergie

$$\chi (\partial_t \rho E + \nabla \cdot ((\rho E + p)u + q)) = 0,$$

et on fait entrer χ dans les dérivées :

$$\partial_t \chi \rho E + \nabla \cdot \chi ((\rho E + p)u + q) - \rho E (\partial_t \chi + u \cdot \nabla \chi) - (pu + q) \cdot \nabla \chi = 0.$$

Grâce à la même simplification

$$\partial_t \chi \rho E + \nabla \cdot \chi ((\rho E + p)u + q) - \rho E \underbrace{(\partial_t \chi + u \cdot \nabla \chi)}_{=0} - (\rho E (u - \omega) + pu + q) \cdot \nabla \chi = 0,$$

on obtient le résultat voulu :

$$\partial_t \chi \rho E + \nabla \cdot \chi ((\rho E + p)u + q) - (JE + pu + q) \cdot \nabla \chi = 0,$$

ce qui achève la démonstration. □

2.5.1 Modèle bivitesse

Discussion préliminaire

Les équations (2.47) vont maintenant être moyennées. On pourra se rapporter à [IH11] pour une étude complète de l'obtention d'un modèle moyenné. D'autres références comme [Rov06] ou [SR05] présentent aussi cette opération de manière plus concise.

On se concentrera sur la moyenne des termes liés au changement de phase de la forme $J \cdot \nabla \chi$. Pour cela, une approche légèrement différente de celle de [IH11] et des autres références va être adoptée. Cette approche est motivée par la propriété suivante de consistance du modèle moyenné.

Définition 2.31. On appelle consistant un modèle bifluide moyenné si il converge formellement vers le modèle exact (2.36) et (2.47) quand la taille du domaine de moyenne tend vers 0.

Le manque de consistance d'un modèle moyenné n'est pas nécessairement un problème. Pour un écoulement complexe (comme par exemple dans [Bes90], [IH11] ou [FG11]), il n'est pas question d'augmenter la résolution du calcul pour tendre vers un problème à phases séparées. Il est plus important d'assurer que les corrélations entre les grandeurs moyennées sont pertinentes à l'échelle étudiée plutôt que valides asymptotiquement. Il en va autrement quand le modèle de mélange n'a pour but que de décrire la maille (ou les quelques mailles) d'une interface entre deux fluides comme dans [SPA08], [KK10] ou [BD14].

Avec changement de phase, l'approche habituelle consiste à moyenner les termes de la forme $J \cdot \nabla \chi$ comme

$$\overline{J_{l \rightarrow g} |\nabla \chi|} \simeq \overline{J_{l \rightarrow g} \mathcal{A}_i},$$

où $\overline{J_{l \rightarrow g}}$ est un flux de masse interfacial local moyen et \mathcal{A}_i est une densité locale d'aire interfaciale. Elle dépend typiquement de la fraction volumique α définie par

$$\alpha := \overline{\chi}.$$

Au voisinage d'une interface, ce terme d'ordre 0 assorti de termes diffusifs ressemble aux modèles de réaction-diffusion évoqués à la Section 1.2.2. Il n'est pas trivial d'écrire une équation de réaction-diffusion qui converge asymptotiquement vers un front d'onde discontinu. Ce problème est étudié mathématiquement par exemple par [Wit10], [AW11].

Remarque 2.32. La distribution de Dirac $\nabla \chi$ peut aussi être approchée grossièrement par des termes de relaxation raides, comme celui tiré de [SPA08] :

$$\mathcal{A}_i = \begin{cases} +\infty & \text{si } \epsilon < \alpha < 1 - \epsilon \\ 0 & \text{sinon} \end{cases},$$

où ϵ est un petit paramètre. ◁

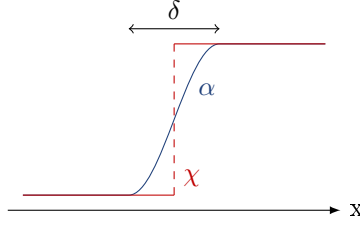


FIGURE 2.8 – Interface franche représentée implicitement par χ , moyennée spatialement sur un domaine de taille δ pour obtenir la fraction volumique moyenne α . Si on veut étudier la consistence asymptotique du modèle moyenné, on obtient toujours une moyenne au voisinage d'une seule interface pour δ assez petit.

Par ailleurs, le modèle moyenné « standard » (voir (1.10)) sans changement de phase est consistant. Le terme $p\nabla\chi$ qui peut être interprété comme une condition d'interface entre les deux fluides (force de pression de l'un sur l'autre) est moyenné habituellement en $p_i\nabla\alpha$ (plus d'autres termes sources), qui dégénère naturellement en $p\nabla\chi$.

Le changement de phase interfacial est lui aussi décrit par un terme d'ordre 1 similaire dans le modèle exact. Pour le moyenné de manière consistante, il paraît plus simple d'utiliser un terme d'ordre 1. Nous allons donc suivre l'exemple de $p\nabla\chi$ et moyenner le terme $J \cdot \nabla\chi$ sous la forme :

$$\overline{J_{l \rightarrow g} |\nabla\chi|} \simeq \overline{J_{l \rightarrow g}} (|\nabla\alpha| + \mathcal{A}_i),$$

où le terme source $\mathcal{A}_i \rightarrow 0$ quand le domaine de moyenne tend vers 0 (c'est à dire $\alpha \rightarrow 0$ ou 1). Tant que le modèle moyenné n'est utilisé que pour étudier un problème à phases séparées, \mathcal{A}_i pourra être négligé.

En notant la normale à l'interface moyennée

$$\nu_{l \rightarrow g} = \frac{\nabla\alpha}{|\nabla\alpha|}$$

le flux de masse interfacial moyenné orienté par $\nu_{l \rightarrow g}$ est défini comme

$$\overline{J} := \overline{J_{l \rightarrow g}} \nu_{l \rightarrow g}.$$

Le terme de changement de phase moyenné s'écrit alors

$$\overline{J \cdot \nabla\chi} \simeq \overline{J} \cdot \nabla\alpha.$$

Par la suite, on simplifiera les notations en écrivant simplement J .

Notations

On a déjà introduit la fraction volumique de gaz α , appelée aussi *taux de vide* :

$$\alpha = \alpha_g := \overline{\chi}.$$

On définit maintenant ρ_g, u_g, E_g les densité, vitesse et énergie totale spécifique moyennes du gaz dans le mélange :

$$\begin{aligned} \alpha_g \rho_g &:= \overline{\chi \rho}, \\ \alpha_g \rho_g u_g &:= \overline{\chi \rho u}, \\ \alpha_g \rho_g E_g &:= \overline{\chi \rho E}, \end{aligned}$$

et de même $\alpha_l, \rho_l, u_l, E_l$ pour la phase liquide.

$$\begin{aligned} \alpha_l &= \overline{1 - \chi}, \\ \alpha_l \rho_l &:= \overline{(1 - \chi) \rho}, \\ \alpha_l \rho_l u_l &:= \overline{(1 - \chi) \rho u}, \\ \alpha_l \rho_l E_l &:= \overline{(1 - \chi) \rho E}. \end{aligned}$$

Les fraction volumiques α_g et α_l respectent

$$\alpha_g + \alpha_l = 1. \quad (2.48)$$

Équations de bilan moyennées

On fait les hypothèses simplificatrices suivantes :

$$\overline{\chi(\rho u \otimes u + p)} \simeq \alpha_g(\rho_g u_g \otimes u_g + p_g),$$

$$\overline{\chi(\rho E + p)u} \simeq \alpha_g(\rho_g E_g + p_g)u_g.$$

où p_g est la pression du gaz, donnée par la loi d'état $p_g = p(\rho_g, e_g)$. Et de même pour la phase liquide.

Lemme 2.33. *Après moyenne des équations (2.36) et (2.47), en négligeant les termes sources et diffusifs, on obtient le système de six équations :*

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k u_k) - J \cdot \nabla \alpha_k = 0, \quad (2.49a)$$

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k u_k) + \nabla \cdot (\alpha_k (\rho_k u_k \otimes u_k + p_k \mathbb{I})) - P \nabla \alpha_k = 0, \quad (2.49b)$$

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k E_k) + \nabla \cdot (\alpha_k (\rho_k E_k + p_k)u_k + q_k) - Q \cdot \nabla \alpha_k = 0, \quad (2.49c)$$

pour $k = l, g$.

On a noté P le flux de quantité de mouvement entre les phases tel que

$$P \nabla \alpha = \overline{(u \otimes J + p \mathbb{I}) \nabla \chi},$$

et Q le flux d'énergie

$$Q \cdot \nabla \alpha = \overline{(J E + p u + q) \cdot \nabla \chi}.$$

Fermeture du système

Le système dépend de $9 + 6n$ variables ($\alpha_g, \rho_g, u_g, E_g, p_g, q_g, \alpha_l, \rho_l, u_l, E_l, p_l, q_l, J_{l \rightarrow g}, P \nabla \alpha, Q \cdot \nabla \alpha$). Le système (2.49), auquel on associe (2.48), deux lois d'état et les lois de Fourier dans chacune des phases, contient $7 + 4n$ équations. Il manque $2 + 2n$ relations de fermeture.

Les relations de fermeture sur le flux de masse et le flux d'énergie ont déjà été discutées à la Section 2.2 :

$$J_{l \rightarrow g} = \mathcal{J}(p_l, T_l, p_g, T_g), \quad Q = \mathcal{Q}(p_g, T_g, p_l, T_l).$$

On peut y ajouter la relation de fermeture sur P :

$$P \nabla \alpha = (u_g \otimes J + p_g \mathbb{I}) \nabla \alpha = (u_l \otimes J + p_l \mathbb{I}) \nabla \alpha,$$

qui généralise la fermeture isobare $p_g = p_l$ pour le système sans changement de phase. Cette expression pour $P \nabla \alpha$ assure la consistance du modèle moyenné.

Remarque 2.34. Dans le modèle à six équations standard sans changement de phase, une méthode permet de réécrire $pu \cdot \nabla \chi$ comme $p \partial_t \chi$ permettant d'éviter le besoin d'une expression pour $\overline{pu \cdot \nabla \chi}$. Avec changement de phase, cette astuce permet de réécrire (2.47c) comme

$$\partial_t \chi \rho E + \nabla \cdot \chi((\rho E + p)u + q) + p \partial_t \chi - (JH + q) \cdot \nabla \chi = 0,$$

ce qui ne dispense pas d'une relation de fermeture sur $\overline{JH + q}$. ◁

Ce système n'a pas été étudié plus en détails dans le cadre de cette thèse. Au lieu de cela, nous allons décrire dans les paragraphes suivants une simplification commode, pertinente dans le cadre de la modélisation de phases séparées.

2.5.2 Modèle monovitesse isotherme

L'hypothèse monovitesse $u_g = u_l$ est couramment utilisées pour la modélisation d'un écoulement à phase séparées quand la méthode numérique implique des mailles de mélange (par exemple [KK10], [BD14]). En effet, cette hypothèse correspond bien aux conditions limites autour d'une interface entre des fluides sans changement de phase. Cependant, comme nous l'avons vu au début de ce chapitre, ce n'est pas le cas avec changement de phase.

En utilisant les conditions déterminées au début de ce chapitre, une généralisation de l'hypothèse monovitesse peut être proposée sous la forme :

$$\left(u_g - \frac{J}{\rho_g}\right) \cdot \nu_{l \rightarrow g} = \left(u_l - \frac{J}{\rho_l}\right) \cdot \nu_{l \rightarrow g}, \quad (2.50a)$$

$$u_g \cdot \nu^\perp = u_l \cdot \nu^\perp. \quad (2.50b)$$

Remarque 2.35. En un sens, ce modèle se rapproche des modèles à « vitesse de drift », comme par exemple [BPMG14]. \triangleleft

Par simplicité, nous étudierons cette hypothèse monovitesse sur le système isotherme suivant :

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k) + \nabla(\alpha_k \rho_k u_k) - J \cdot \nabla \alpha_k = 0, \quad (2.51a)$$

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k u_k) + \nabla(\alpha_k(\rho_k u_k \otimes u_k + p_k \mathbb{I})) - (u_k \otimes J + p_k \mathbb{I}) \nabla \alpha_k = 0, \quad (2.51b)$$

avec la relation de fermeture isobare généralisée tirée de la condition de saut à l'interface (2.11) :

$$p_g + J \cdot u_g = p_l + J \cdot u_l. \quad (2.52)$$

On définit les grandeurs moyennes ρ_m et u_m telles que :

$$\rho_m = \sum \alpha_k \rho_k,$$

$$\rho_m u_m = \sum \alpha_k \rho_k u_k.$$

On définit la fraction massique ξ comme

$$\xi_k \rho_m = \alpha_k \rho_k.$$

Par définition de ρ_m , on a

$$\sum \xi_k = 1.$$

Comme précédemment, on allégera la notation en écrivant

$$\xi := \xi_g, \quad \alpha := \alpha_g.$$

Enfin, on définit les pressions moyennes \bar{p} et \underline{p} comme

$$\underline{p} = \sum \alpha_k p_k, \quad \bar{p} = \sum \xi_k p_k.$$

Lemme 2.36. Les hypothèses monovitesse (2.50) et monobare (2.52) impliquent pour $k \in \{l, g\}$,

$$u_m - \frac{J}{\rho_m} = u_k - \frac{J}{\rho_k}, \quad (2.53)$$

et

$$\bar{p} + J \cdot u_m = p_k + J \cdot u_k. \quad (2.54)$$

Démonstration. Direct, par définition des grandeurs moyennes ρ_m , u_m et \bar{p} . \square

Cas 1D

Par souci de lisibilité des calculs on étudiera d'abord le cas 1D. On écrit alors (2.51) comme :

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k) + \partial_x(\alpha_k \rho_k u_k) - J \cdot \partial_x \alpha_k = 0, \quad (2.55a)$$

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k u_k) + \partial_x(\alpha_k(\rho_k u_k \otimes u_k + p_k \mathbb{I})) - (u_k J + p_k) \partial_x \alpha_k = 0. \quad (2.55b)$$

Théorème 2.37. *Sous les hypothèses monovitesse (2.50) et monobare (2.52), le système (2.55) implique :*

$$\partial_t \rho_m + \partial_x(\rho_m u_m) = 0, \quad (2.56a)$$

$$\partial_t \rho_m u_m + \partial_x(\rho_m u_m^2 + \bar{p}) = 0, \quad (2.56b)$$

$$\partial_t \xi \rho_m + \partial_x(\xi \rho_m u_m + J(\alpha - \xi)) - J \cdot \partial_x \alpha = 0. \quad (2.56c)$$

Démonstration.

- On obtient directement (2.56a) en sommant (2.55a) pour tous k , par définition de ρ_m et u_m .
- Écrivons (2.55a) pour $k = g$ en introduisant u_m avec l'aide de (2.53) :

$$\partial_t(\alpha_g \rho_g) + \partial_x \left(\alpha_g \rho_g \left(u_m - J \left(\frac{1}{\rho_m} - \frac{1}{\rho_k} \right) \right) \right) - J \cdot \partial_x \alpha_g = 0.$$

En remplaçant $\alpha_g \rho_g$ par $\xi \rho_m$, on trouve :

$$\partial_t(\xi \rho_m) + \partial_x(\xi \rho_m u_m - J(\xi - \alpha)) - J \cdot \partial_x \alpha_g = 0.$$

- Avec les relations (2.53) et (2.54), on remplace u_k et p_k dans (2.55b) :

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k u_k) + \partial_x \left(\alpha_k \rho_k u_k \left(u_m - J \left(\frac{1}{\rho_m} - \frac{1}{\rho_k} \right) \right) + \alpha_k (\bar{p} + J(u_m - u_k)) \right) - (u_k J + p_k) \partial_x \alpha_k = 0,$$

d'où

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k u_k) + \partial_x \left(\alpha_k \rho_k u_k \left(u_m - \frac{J}{\rho_m} \right) + \alpha_k \bar{p} + \alpha J u_m \right) - (u_k J + p_k) \partial_x \alpha_k = 0.$$

On somme cette équation pour tous k . Les termes non-conservatifs disparaissent grâce à l'hypothèse monobare (2.52). On obtient :

$$\partial_t(\rho_m u_m) + \partial_x(\rho_m u_m u_m - u_m J + J u_m + \bar{p}) = 0,$$

qui est (2.56b). □

Remarque 2.38. Deux cas limites de (2.55) sont familiers :

- Dans le cas $J = 0$ (pas de changement de phase), on retrouve le système monovitesse habituel, utilisé par exemple par [BD14] :

$$\partial_t \rho_m + \partial_x(\rho_m u_m) = 0, \quad (2.57a)$$

$$\partial_t \rho_m u_m + \partial_x(\rho_m u_m^2 + p) = 0, \quad (2.57b)$$

$$\partial_t \xi \rho_m + \partial_x(\xi \rho_m u_m) = 0. \quad (2.57c)$$

- Dans le cas $\xi \in \{0, 1\}$ ($\Rightarrow \alpha \in \{0, 1\}$), on retrouve la version isotherme du système de lois de conservations pour des phases séparées (2.36). ◁

Fermeture du système (2.56)

On peut prendre comme variables indépendantes :

$$w = (\bar{p}, u_m, \xi).$$

À w donné, on trouve les variables supplémentaires (ρ_g, ρ_l, J) en résolvant le système :

$$\bar{p} = \xi p_g(\rho_g) + (1 - \xi) p_l(\rho_l), \quad (2.58a)$$

$$p_g(\rho_g) + \frac{J^2}{\rho_g} = p_l(\rho_l) + \frac{J^2}{\rho_l}, \quad (2.58b)$$

$$J = \mathcal{J}(p_g(\rho_g), p_l(\rho_l)), \quad (2.58c)$$

où p_g et p_l sont deux lois d'état données et \mathcal{J} est une cinétique de changement de phase.

On en déduit :

$$\rho_m = \frac{1}{\frac{\xi}{\rho_g} + \frac{1-\xi}{\rho_l}}, \quad (2.58d)$$

puis

$$\alpha = \frac{\xi \rho_m}{\rho_g}. \quad (2.58e)$$

Hyperbolicité pour un flux de masse constant

Dans ce paragraphe, l'hyperbolicité du système défini précédemment est étudiée. Par souci de lisibilité, les indices m de ρ_m et u_m ont été omis.

Théorème 2.39. *Pour $J = \text{cst.}$ avec $|J| < \min(\rho_k c_k)$, le modèle (2.56) \cup (2.58) est hyperbolique avec pour valeurs propres $u - c$, $u - \frac{J}{\rho}$, $u + c$ où*

$$c^2 := \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial \rho} \right)_\xi = \frac{\xi \rho_g^2 c_g^2 (\rho_l^2 c_l^2 - J^2) + (1 - \xi) \rho_l^2 c_l^2 (\rho_g^2 c_g^2 - J^2)}{\rho^2 ((1 - \xi) \rho_g^2 c_g^2 + \xi \rho_l^2 c_l^2 - J^2)}, \quad (2.59)$$

où

$$c_k^2 = \frac{dp_k}{d\rho_k}, \quad k = l, g.$$

Démonstration. La forme générale du système est la même que les cas présentés en Annexe B. Seule la dérivée de la loi d'état (2.58) a besoin d'être explicitée. En différentiant le système (2.58), on obtient

$$\begin{aligned} d\bar{p} &= (p_g - p_l)d\xi + \xi c_g^2 d\rho_g + (1 - \xi)c_l^2 d\rho_l \\ \frac{-1}{\rho_m^2} d\rho_m &= -\frac{\xi}{\rho_g^2} d\rho_g - \frac{1 - \xi}{\rho_l^2} d\rho_l \\ 0 &= \left(c_g^2 - \frac{J^2}{\rho_g^2} \right) d\rho_g - \left(c_l^2 - \frac{J^2}{\rho_l^2} \right) d\rho_l. \end{aligned}$$

En manipulant ces équations à l'aide d'un logiciel de calcul formel, on obtient (2.59). \square

Remarque 2.40. On vérifie que $c = c_l$ (resp. c_g) quand $\xi = 0$ (resp. 1). \triangleleft

Cas multidimensionnel

Le cas multidimensionnel est essentiellement le même, si ce n'est que la direction normale à l'interface, c'est-à-dire suivant

$$\nu_{l \rightarrow g} = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|},$$

et les directions tangentes seront traitées séparément.

Théorème 2.41. *Sous les hypothèses monovitesse (2.50) et monobare (2.52), le système (2.51) implique*

$$\partial_t \rho_m + \nabla \cdot (\rho_m u_m) = 0, \quad (2.60a)$$

$$\partial_t \rho_m u_m + \nabla \cdot (\rho_m u_m \otimes u_m + p \mathbb{I} + (\bar{p} - p) \nu_{l \rightarrow g} \otimes \nu_{l \rightarrow g}) = 0, \quad (2.60b)$$

$$\partial_t \xi \rho_m + \nabla \cdot (\xi \rho_m u_m + J(\alpha - \xi)) - J \cdot \nabla \alpha = 0. \quad (2.60c)$$

Démonstration. On note

$$\nabla \cdot X = \partial_\nu (X \cdot \nu_{l \rightarrow g}) + \nabla_\nu^\perp \cdot (X \cdot \nu^\perp),$$

où ∂_ν est la dérivée suivant la direction $\nu_{l \rightarrow g}$ et ∇_ν^\perp désigne la divergence dans l'hyperplan tangent.

Par définition de $\nu_{l \rightarrow g}$:

$$\nabla \alpha = \partial_\nu \alpha.$$

— Comme en 1D, l'équation (2.60a) se trouve directement en sommant (2.51a) sur k .

— On réécrit (2.51a) en séparant la dérivé selon la direction de la normale :

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k) + \partial_\nu(\alpha_k \rho_k u_k \cdot \nu_{l \rightarrow g}) + \nabla_\nu^\perp(\alpha_k \rho_k u_k \cdot \nu^\perp) - J \cdot \partial_\nu \alpha_k = 0.$$

En utilisant le même raisonnement qu'en 1D, on montre que

$$\partial_\nu(\alpha_k u_k \cdot \nu_{l \rightarrow g}) = \partial_\nu(\xi \rho_m u_m \cdot \nu_{l \rightarrow g} + J(\alpha - \xi)).$$

Par ailleurs, en utilisant (2.50b), on a

$$\nabla_\nu^\perp \cdot (\alpha_k \rho_k u_k \cdot \nu^\perp) = \nabla_\nu^\perp \cdot (\xi \rho_m u_m \cdot \nu^\perp).$$

En recombinaut les deux dérivées spatiales, on trouve (2.60c).

— On réécrit maintenant (2.51b) :

$$\partial_t(\alpha_k \rho_k u_k) + \partial_\nu \alpha_k (\rho_k (u_k \cdot \nu_{l \rightarrow g}) u_k + p_k \nu_{l \rightarrow g}) \tag{2.61}$$

$$+ \nabla_\nu^\perp \alpha_k (\rho_k (u_k \cdot \nu^\perp) u_k + p_k \nu^\perp) - (u_k \otimes J + p_k \mathbb{I}) \partial_\nu \alpha_k = 0. \tag{2.62}$$

On somme cette équation pour les deux valeurs de k . Le terme normal s'écrit comme en 1D avec l'aide de (2.53) et (2.54) :

$$\begin{aligned} & \sum_k \partial_\nu \alpha_k (\rho_k (u_k \cdot \nu_{l \rightarrow g}) u_k + p_k \nu_{l \rightarrow g}) \\ &= \sum_k \partial_\nu \left(\alpha_k \rho_k (u_k \cdot \nu_{l \rightarrow g}) \left(u_m - \left(\frac{1}{\rho_m} - \frac{1}{\rho_k} \right) J \right) + \alpha_k (\bar{p} + (u_m - u_k) \cdot J) \nu_{l \rightarrow g} \right) \\ &= \sum_k \partial_\nu \left(\alpha_k \rho_k (u_k \cdot \nu_{l \rightarrow g}) \left(u_m - \frac{J_{l \rightarrow g}}{\rho_m} \right) + \alpha_k (u_m \cdot \nu_{l \rightarrow g}) J_{l \rightarrow g} \nu_{l \rightarrow g} + \alpha_k \bar{p} \nu_{l \rightarrow g} \right) \\ &= \partial_\nu \left(\rho_m (u_m \cdot \nu_{l \rightarrow g}) \left(u_m - \frac{J_{l \rightarrow g}}{\rho_m} \nu_{l \rightarrow g} \right) - (u_m \cdot \nu_{l \rightarrow g}) J_{l \rightarrow g} \nu_{l \rightarrow g} + \bar{p} \nu_{l \rightarrow g} \right) \\ &= \partial_\nu (\rho_m (u_m \cdot \nu_{l \rightarrow g}) u_m + \bar{p} \nu_{l \rightarrow g}). \end{aligned}$$

Et par ailleurs, dans la direction tangente :

$$\begin{aligned} & \sum_k \nabla_\nu^\perp \alpha_k (\rho_k (u_k \cdot \nu^\perp) u_k + p_k \nu^\perp) \\ & \sum_k \nabla_\nu^\perp \alpha_k (\rho_k (u_m \cdot \nu^\perp) u_k + p_k \nu^\perp) \\ &= \nabla_\nu^\perp (\rho_m (u_m \cdot \nu^\perp) u_m + \underline{p} \nu^\perp). \end{aligned}$$

Ce qui permet de retrouver (2.60b). □

Remarque 2.42. Les résultats de ces deux théorèmes conduisent à préférer la forme moyenne

$$\nabla(J(\alpha - \xi)) - J \cdot \nabla \alpha \simeq -J \cdot \nabla \xi$$

à

$$-J \cdot \nabla \alpha$$

pour la moyenne du terme non-conservatif

$$-J \cdot \nabla \chi.$$

Ce choix peut se justifier empiriquement en comparant les profils de α et ξ à une interface liquide-vapeur comme représenté à la Figure 2.9. En première approximation, le liquide peut être supposé immobile dans le référentiel de l'interface (voir (2.8)). Avoir un terme de changement de phase situé au niveau du gradient de ξ facilite la mobilité du gaz qui peut s'échapper de l'interface sans être ralenti par l'inertie du liquide qui domine au niveau du gradient de α . ◁

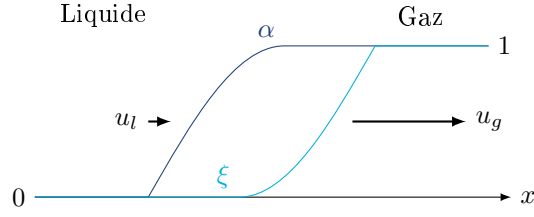


FIGURE 2.9 – Illustration de la position respective des gradients de α et de ξ pour une interface diffuse avec un rapport de densité loin de 1.

Seule une version simplifiée du modèle moyenné isotherme monovitesse (2.60) sera utilisée par la suite. Pour cela, la différence de pression entre les deux phases de l'équation (2.52) est négligée. D'autre part, le terme de changement de phase dans l'équation de conservation de la masse de gaz est réécrit

$$\nabla \cdot (J(\alpha - \xi)) - J \cdot \nabla \alpha \simeq -J \cdot \nabla \xi.$$

Ce modèle simplifié s'écrit donc

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \quad (2.63a)$$

$$\partial_t (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u + p \mathbb{I}) = 0, \quad (2.63b)$$

$$\partial_t (\xi \rho) + \nabla \cdot (\xi \rho u) - J \cdot \nabla \xi = 0. \quad (2.63c)$$

où $\xi \in [0, 1]$ est la fraction massique et ρ , u et p sont respectivement la densité, la vitesse et la pression du mélange. L'indice m présent à la section précédente sera omis à partir de maintenant. Le modèle dégénère naturellement en la version isotherme du système d'équation (2.36) quand $\xi \in \{0, 1\}$.

Ce modèle est complété par une loi d'état de mélange isobare. La densité moyenne est donnée par

$$\frac{1}{\rho(p, \xi)} = \frac{\xi}{\rho_g(p)} + \frac{1 - \xi}{\rho_l(p)}, \quad (2.64)$$

où ρ_g et ρ_l sont définies par les lois d'états (isothermes) des phases pures, comme discuté à la Section 1.1.3.

En s'inspirant de (2.36), une extension de ce modèle au cas non-isotherme peut être écrite sous la forme suivante :

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \quad (2.65a)$$

$$\partial_t (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u + p \mathbb{I}) = 0, \quad (2.65b)$$

$$\partial_t (\rho E) + \nabla \cdot (\rho H u + q) = 0, \quad (2.65c)$$

$$\partial_t (\xi \rho) + \nabla \cdot (\xi \rho u) - J \cdot \nabla \xi = 0. \quad (2.65d)$$

Ce modèle a été utilisé par exemple dans [ABG16]. Cependant, il n'a été établi rigoureusement. L'aspect thermique du changement de phase n'étant pas négligeable, une étude plus approfondie de la modélisation moyenné du modèle non-isotherme est nécessaire.

2.6 Conclusion

Ce chapitre a présenté différents aspects de la modélisation d'un écoulement liquide-vapeur avec changement de phase à l'interface. Les Sections 2.1 et 2.2 ont permis de décrire les conditions limites à l'interface en présence de changement de phase. Dans la Section 2.3, l'équation d'évolution de l'interface a été combinée aux équations de conservation d'Euler. Le système hyperbolique (2.36) constitue la base des simulations numériques qui seront menées dans la suite de cette thèse. Bien que cette approche soit sous certains aspects similaire à des modèles existants dans la littérature, elle est à notre connaissance inédite. Le problème de Riemann associé à ce système a été étudié à la Section 2.4.

Enfin, à la Section 2.5, une version moyennée des équations de conservation a été établie dans le cas isotherme. Une réflexion particulière a été menée concernant la moyenne des termes de changement de phase et les hypothèses simplificatrices applicables aux mailles de mélange. Après quelques simplifications, le système moyenné (2.63) a été obtenu.

Dans le chapitre suivant, un schéma numérique permettant de simuler (2.63) (mais aussi (2.65)) sera proposé. Parallèlement, un autre schéma numérique permettra de résoudre à l'interface les équations de conservation sous forme lagrangienne (2.41), y compris dans le cas non-isotherme. Les différents modèles étudiés dans ce chapitre et leurs relations sont résumés à la Figure 2.10. Les deux codes obtenus serviront de preuves de concept de l'intégration du changement de phase interfacial dans un code de mécanique des fluides.

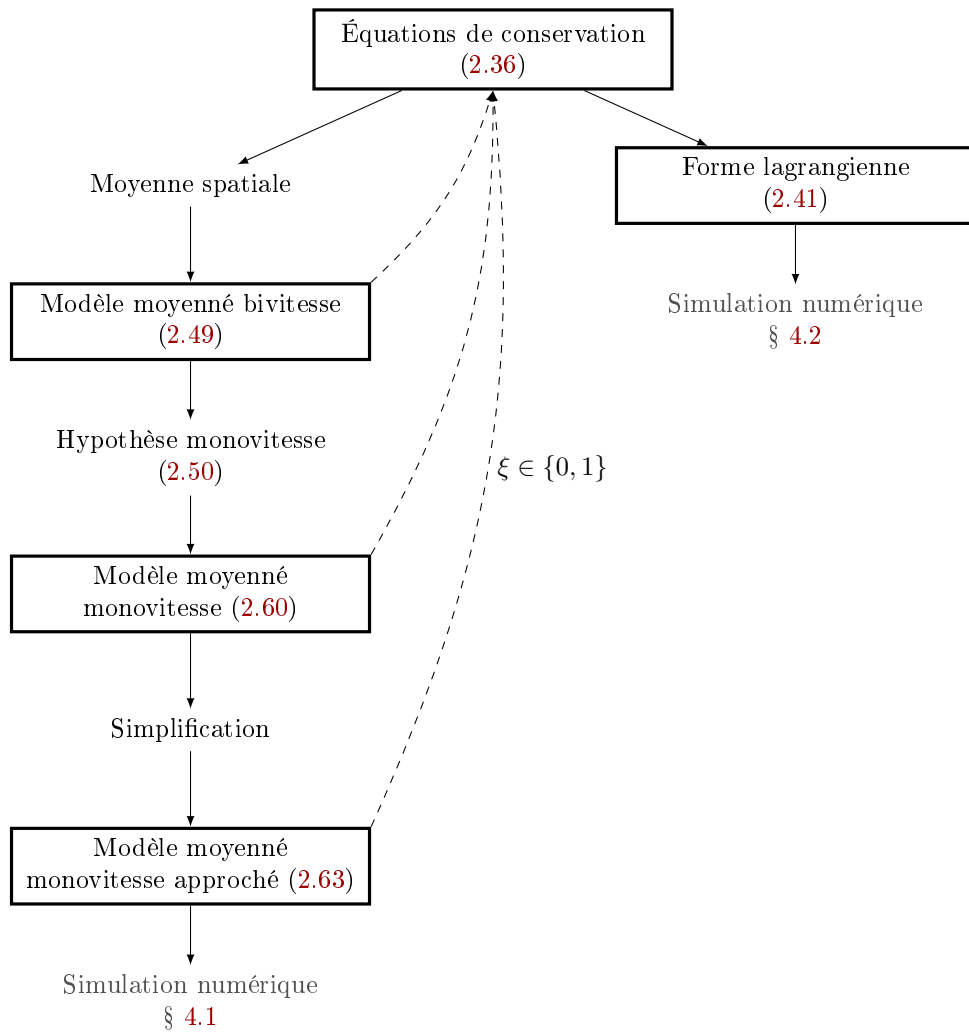


FIGURE 2.10 – Lien entre les modèles présentés dans ce chapitre et les résolutions numériques des chapitres suivants. Les flèches discontinues symbolisent la consistance des modèles moyennés qui redeviennent le modèle exact pour des phases séparées.

Chapitre 3

Méthodes volumes finis

3.1 Généralités

Dans cette section, quelques concepts généraux pour la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles seront présentés. On pourra se référer notamment aux ouvrages [Krö97] et [Tor09] pour plus de détails.

3.1.1 Système hyperbolique

Définition 3.1. Un système de lois de conservation est un système d'équations aux dérivées partielles de la forme

$$\partial_t v + \nabla \cdot F(v) = 0, \quad (3.1)$$

où

$$\forall x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n, \quad \forall t \geq 0, \quad v(x, t) \in G \subset \mathbb{R}^m,$$

où Ω est le domaine de calcul et G l'ensemble des états physiques admissibles, F est une fonction, supposée assez régulière,

$$F : G \longrightarrow \mathbb{R}^{m \times n},$$

et $\nabla \cdot$ symbolise l'opérateur divergence défini par

$$\forall k \in [1, m], \quad (\nabla \cdot F)_k = \sum_{i=1}^n \partial_i F_{ki}.$$

Les variables $(v_k)_{k \in [1, m]}$ sont appelées variables conservatives et pour tout vecteur ν dans \mathbb{R}^n , $(F_k \cdot \nu)_{k \in [1, m]}$ sont appelés les flux dans la direction ν .

On s'intéresse à la résolution de l'équation (3.1) assortie d'une condition initiale de la forme :

$$\forall x \in \Omega, \quad v(x, t = 0) = v_0(x), \quad (3.2)$$

et de conditions aux limites appropriées sur $\partial\Omega$, la frontière de Ω . Les ouvrages de références de [Smo94], [Tor09] et [Daf10] étudient plus en détails ce type de problème et ses solutions (faibles).

Définition 3.2. Le système est dit hyperbolique si, pour tout vecteur ν de \mathbb{R}^n , la matrice jacobienne des flux $F \cdot \nu$, notée A_ν est diagonalisable sur \mathbb{R} , sous la forme

$$\frac{\partial F \cdot \nu}{\partial v} = A_\nu(v) = R_\nu(v) \Lambda_\nu(v) L_\nu(v), \quad (3.3)$$

où Λ_ν est la matrice diagonale formée par les valeurs propres :

$$\Lambda_\nu(v) = \text{diag}(\lambda_{\nu, k}(v))_{k=1, m}$$

et R_ν et L_ν sont les matrices des vecteurs propres de A_ν respectivement à droite et à gauche, normalisées par

$$R_\nu(v) = L_\nu(v)^{-1}.$$

Quand il n'y a pas d'ambiguïté, les notations seront simplifiées en n'indiquant pas le vecteur normal ν .

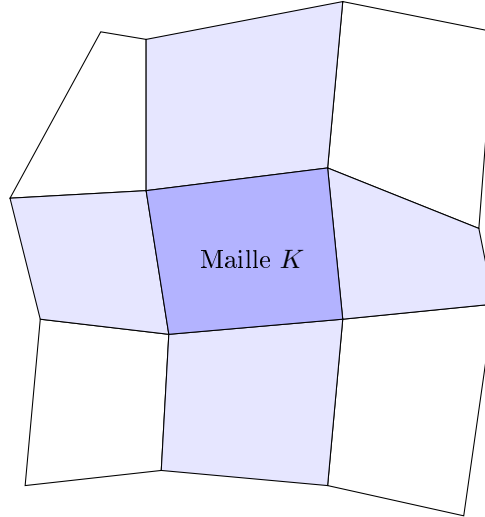


FIGURE 3.1 – Exemple de maillage non structuré. En bleu, une maille K et ses voisines $\mathcal{V}(K)$.

3.1.2 Volumes finis

Pour résoudre numériquement le problème de Cauchy, le domaine de calcul Ω est décomposé en volumes de contrôle connexes disjoints tels que :

$$\Omega = \cup_K K$$

Cette décomposition sera appelée un maillage de Ω .

Pour chaque maille K , on note $\mathcal{V}(K)$ l'ensemble des mailles voisines de K , c'est à dire

$$L \in \mathcal{V}(K) \iff |\partial L \cap \partial K| \neq 0,$$

où ∂L symbolise la frontière de L et $|\cdot|$ le volume en dimension $n - 1$.

Dans chaque maille K , la valeur moyenne des variables conservatives v est définie par

$$v_K(t) := \frac{1}{|K|} \int_K v(x, t) dx,$$

où $|\cdot|$ est le volume en dimension n .

L'équation (3.1) est intégrée sur chaque maille K en utilisant la formule de Green :

$$\begin{aligned} \partial_t v_K(t) &= -\frac{1}{|K|} \int_K \nabla \cdot F(v(x, t)) dx \\ &= \frac{1}{|K|} \int_{\partial K} F(v(x, t)) \nu dS \\ &= \frac{1}{|K|} \sum_{L \in \mathcal{V}(K)} \int_{\partial K \cap \partial L} F(v(x, t)) \nu dS, \end{aligned}$$

où ν est le vecteur normal sortant à la frontière de K et dS un élément de volume en dimension $n - 1$.

L'équation différentielle par rapport à la variable t sera résolue par la méthode d'Euler explicite. Le n ième pas de temps est noté t^n et la valeur de v à ce pas de temps est noté

$$v_K^n = v_K(t^n).$$

L'enjeu est de trouver une approximation pour le flux à la frontière entre les mailles K et L sous la forme :

$$|\partial L \cap \partial K| \phi_{K,L}(v_K^n, v_L^n) \simeq \int_{\partial K \cap \partial L} F(v(x, t^n)) \nu dS.$$

Le flux $\phi_{K,L}$ est appelé le *flux numérique* à l'interface entre K et L .

Définition 3.3. On appelle schéma volume fini explicite d'ordre 1 une approximation de (3.1) de la forme :

$$v_K^{n+1} = v_K^n - \frac{|t^{n+1} - t^n|}{|K|} \sum_{L \in \mathcal{V}(K)} |\partial L \cap \partial K| \phi(v_K^n, v_L^n). \quad (3.4)$$

Définition 3.4. [Ghi02] Un schéma volume fini tel qu'il existe une matrice $U_{K,L}(v_K, v_L)$ telle que le flux numérique s'écrit

$$\phi(v_K, v_L) = \frac{F(v_K) + F(v_L)}{2} \cdot \nu_{K,L} + U_{K,L}(v_K, v_L) \left(\frac{F(v_K) - F(v_L)}{2} \cdot \nu_{K,L} \right), \quad (3.5)$$

où $\nu_{K,L}$ est la normale unitaire à l'interface, est appelé *schéma de flux*.

En pratique, les flux considérés seront toujours équivariants par rotation. Localement à chaque face, le problème se ramène à un problème 1D avec le flux $F \cdot e_x$, via la matrice de rotation qui transforme $\nu_{K,L}$ en vecteur unitaire des abscisses e_x . Dans le paragraphe suivant, les notations 1D seront donc introduites. Elles nous serviront pour la plus grande partie du reste de cette thèse.

3.1.3 Notations 1D

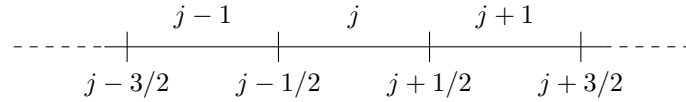


FIGURE 3.2 – Numérotation des mailles et des faces pour un maillage 1D.

En 1D, le domaine $\Omega \subset \mathbb{R}$ est divisé en segments numérotés par ordre croissant de la gauche vers la droite. Les indices fractionnaires représentent les interfaces entre segments (voir Figure 3.2).

La valeur moyenne des variables conservatives dans la maille d'indice j au pas de temps n est notée v_j^n .

$$v_j(t^n) := \frac{1}{|x_{j+1/2} - x_{j-1/2}|} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} v(x, t^n) dx.$$

Un schéma volume fini explicite d'ordre 1 s'écrit alors

$$v_j^{n+1} = v_j^n + \frac{\Delta t^n}{\Delta x_j} \left(\phi_{j-1/2}^n - \phi_{j+1/2}^n \right), \quad (3.6)$$

où $\phi_{j+1/2}^n$ est le flux numérique à la face $j + 1/2$

$$\phi_{j+1/2}^n = \phi(v_j^n, v_{j+1}^n),$$

et

$$\Delta t^n = |t^{n+1} - t^n|, \quad \Delta x_j = |x_{j-1/2} - x_{j+1/2}|.$$

Le schéma de flux (3.5) s'écrit alors

$$\phi_{j+1/2} = \frac{F_j + F_{j+1}}{2} + U(v_j, v_{j+1}) \frac{F_j - F_{j+1}}{2}. \quad (3.7)$$

3.2 Le schéma VFFC

Dans cette section, le schéma VFFC, introduit par [GKL01], sera présenté. Une variante, qui se révélera plus performante pour certains calculs de cette thèse, sera ensuite proposée.

Comme évoqué précédemment, toutes les notations seront en 1D. Les définitions sont facilement transposables en dimension supérieure grâce à l'équivariance par rotation de F .

3.2.1 VFFC « μ moyen »

En multipliant le système de lois de conservation (3.1) par $A = \frac{\partial F}{\partial v}$, il devient

$$\partial_t F(v) + A(v) \partial_x F(v) = 0. \quad (3.8)$$

Au voisinage de l'interface entre les faces j et $j+1$, ce système peut être linéarisé sous la forme

$$\partial_t F(v) + A(\mu_{j+1/2}) \partial_x F(v) = 0,$$

où $\mu_{j+1/2}$ est un état moyen entre v_j et v_{j+1} , par exemple,

$$\mu_{j+1/2} = \frac{v_j + v_{j+1}}{2}.$$

Ce système linéaire est diagonalisable sous la forme

$$\partial_t (L_{j+1/2} F(v)) + \Lambda_{j+1/2} \partial_x (L_{j+1/2} F(v)) = 0,$$

où

$$L_{j+1/2} = L(\mu_{j+1/2}), \quad \Lambda_{j+1/2} = \Lambda(\mu_{j+1/2}).$$

Le flux numérique $\phi_{j+1/2}$ sera évalué en appliquant un schéma amont à chaque caractéristique du système linéarisé :

$$\begin{cases} l_k(\mu_{j+1/2}) \cdot \phi_{j+1/2} = l_k(\mu_{j+1/2}) \cdot F(v_j) & \text{si } \lambda_{k,j+1/2} > 0, \\ l_k(\mu_{j+1/2}) \cdot \phi_{j+1/2} = l_k(\mu_{j+1/2}) \cdot F(v_{j+1}) & \text{si } \lambda_{k,j+1/2} < 0, \\ l_k(\mu_{j+1/2}) \cdot \phi_{j+1/2} = l_k(\mu_{j+1/2}) \cdot \frac{1}{2}(F(v_j) + F(v_{j+1})) & \text{si } \lambda_{k,j+1/2} = 0. \end{cases} \quad (3.9)$$

La résolution de ce système linéaire donne une expression pour le flux numérique $\phi_{j+1/2}$.

Définition 3.5. On appelle schéma VFFC (*Volumes Finis à Flux Caractéristiques*), le schéma de flux défini par

$$\phi_{j+1/2} = \frac{F_j + F_{j+1}}{2} + \operatorname{sgn}(A(\mu_{j+1/2})) \frac{F_j - F_{j+1}}{2}, \quad (3.10)$$

où A est la jacobienne des flux du système et $\mu_{j+1/2}$ est un état moyen entre v_j et v_{j+1} .

Le signe d'une matrice diagonalisable est défini comme

$$A = R \operatorname{diag}(\lambda_k)_k L \quad \Rightarrow \quad \operatorname{sgn}(A) = R \operatorname{diag}(\operatorname{sgn}(\lambda_k))_k L.$$

3.2.2 VFFC « l amont »

La variante présentée dans ce paragraphe est basée sur la recherche d'une linéarisation de l'équation (3.8) qui soit moins dépendante du choix d'un état $\mu_{j+1/2}$. Pour cela, l'équation (3.9) est réécrite sous la forme

$$\begin{cases} l_k(v_j) \cdot \phi_{j+1/2} = l_k(v_j) \cdot F(v_j) & \text{si } \lambda_{k,j+1/2} > 0, \\ l_k(v_{j+1}) \cdot \phi_{j+1/2} = l_k(v_{j+1}) \cdot F(v_{j+1}) & \text{si } \lambda_{k,j+1/2} < 0. \end{cases} \quad (3.11)$$

Le cas $\lambda_{k,j+1/2} = 0$ n'a pas été étudié dans le cadre de cette thèse. Dans la plupart des simulations, il ne joue pas un rôle important. La forme du schéma (3.9) pourra être reprise dans ce cas.

Ce schéma peut être réécrit sous la forme suivante.

Définition 3.6. On appelle schéma VFFC « l amont » le schéma de flux défini par

$$\phi_{j+1/2} = \frac{F_j + F_{j+1}}{2} + \operatorname{sgn}(\bar{A}(v_j, v_{j+1})) \frac{F_j - F_{j+1}}{2}, \quad (3.12a)$$

où

$$\bar{A}(v_j, v_{j+1}) = \bar{L}(v_j, v_{j+1})^{-1} \Lambda(\mu_{j+1/2}) \bar{L}(v_j, v_{j+1}) \quad (3.12b)$$

et \bar{L} est définie par

$$\forall k, \quad (\bar{L}(v_j, v_{j+1}))_k = \begin{cases} l_k(v_j) & \text{si } \lambda_k(\mu_{j+1/2}) > 0, \\ l_k(v_{j+1}) & \text{si } \lambda_k(\mu_{j+1/2}) < 0, \\ l_k(\mu_{j+1/2}) & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.12c)$$

Lemme 3.7. On suppose que l'état moyen μ est donné par une fonction continue des états à droite et à gauche telle que $\mu(v, v) = v$. Soit v_G un état tel que $\forall k, \lambda_k(v_G) \neq 0$. Alors, il existe un voisinage \mathcal{V} de v_G tel que pour tout $v_D \in \mathcal{V}$, la matrice $\bar{L}(v_G, v_D)$ est inversible.

Démonstration. La continuité de la fonction $v \mapsto \mu(v_G, v)$ implique qu'il existe un voisinage \mathcal{V}_1 de v_G tel que

$$\forall v \in \mathcal{V}_1, \quad \forall k, \quad \operatorname{sgn}(\lambda_k(\mu(v_G, v))) = \operatorname{sgn}(\lambda_k(\mu(v_G, v_G))) = \operatorname{sgn}(\lambda_k(v_G)) \neq 0.$$

Sur ce voisinage, la fonction $v \mapsto \bar{L}(v_G, v)$ peut s'écrire sous la forme

$$\bar{L}(v_G, v) = \sum_{k=1}^{k_0} e_k \otimes l_k(v_G) + \sum_{k=k_0+1}^m e_k \otimes l_k(v),$$

où e_k est le k ième vecteur de la base canonique de \mathbb{R}^m . La continuité des vecteurs propres l_k implique donc la continuité de $v \mapsto \bar{L}(v_G, v)$. Or, la matrice $\bar{L}(v_G, v_G) = L(v_G)$ est par définition inversible. Donc il existe un voisinage \mathcal{V} de v_G tel que $\bar{L}(v_G, v_D)$ est dans l'ensemble ouvert des matrices inversibles. \square

Pour la résolution des équations d'Euler monofluide, la différence entre les deux schémas est négligeable. Elle apparaît plus nettement lors de la simulation numérique d'une interface entre deux fluides aux lois d'états très différentes (par exemple, un liquide et sa vapeur). Le schéma μ moyen calcule le flux à l'interface en utilisant la thermodynamique de l'état moyen $\mu_{j+1/2}$ qui n'a pas d'existence physique. Le schéma l amont calcule les composantes du flux caractéristique en utilisant seulement les états droits et gauches.

L'équation équivalente associée à un schéma de la forme (3.7) a été exprimée par [Zha17]. Les deux schémas présentés ici ont la même équation équivalente jusqu'aux termes diffusifs d'ordre 2. Les termes dispersifs d'ordre 3 sont en général différents. Or, les termes dispersifs peuvent être responsables d'oscillations parasites [BBR03]. On verra à la Section 3.4 que le schéma l amont est meilleur de ce point de vue sur un cas particulier de respect du principe du maximum.

Cependant, le schéma l amont est plus coûteux que le schéma μ moyen, en raison de la résolution du système linéaire (3.11) ou de l'inversion de la matrice \bar{L} . Cependant, pour les modèles employés dans cette thèse, un logiciel de calcul formel est capable de donner une expression analytique de $\bar{L}(v_j, v_{j+1})^{-1}$, ce qui limite le surcoût.

Remarque 3.8. Le cas des conditions aux limites n'a pas été traité en détails dans cette thèse. On pourra se reporter à [GP02]. \triangleleft

3.3 Termes non-conservatifs

Dans les sections précédentes, nous n'avons considéré qu'un système conservatif de la forme

$$\partial_t v + \nabla \cdot F(v) = 0.$$

Cependant le modèle que nous voulons résoudre numériquement ne s'écrit pas exactement sous cette forme puisqu'il fait intervenir le produit non-conservatif $J \cdot \nabla \xi$. Dans cette section, nous allons donc proposer une discrétisation du système avec termes non-conservatifs de la forme :

$$\partial_t v + \nabla \cdot F(v) + C(v) : \nabla v = 0, \quad (3.13)$$

où C est un tenseur d'ordre 3 de taille $m \times m \times n$ tel que

$$(C(v) : \nabla v)_k = \sum_{i=1}^n \sum_{k'=1}^m c_k^{i,k'}(v) \partial_i v_{k'}.$$

Le coefficient $c_k^{i,k'}$ est la contribution à l'équation bilan de v_k de la dérivée de $v_{k'}$ dans la direction x_i .

En 1D, le système s'écrit

$$\partial_t v + \partial_x F(v) + C(v) \partial_x v = 0, \quad (3.14)$$

où $C(v)$ est une matrice $m \times m$.

Une discrétisation de ce type a été proposée par [GKL01] dans le cadre des écoulements bi-fluides moyennés. Dans ce travail, nous allons nous en inspirer mais proposer un approche légèrement différente (voir aussi Remarque 3.9) La discrétisation qui suit sera présentée dans le cadre général d'un système de la forme (3.13). Cependant cette approche n'a été testée numériquement que pour le cas particulier $J \cdot \nabla \xi$ qui nous intéresse dans cette thèse.

3.3.1 Schéma général

Par souci de lisibilité le cas 1D sera présenté indépendamment du cas général multidimensionnel.

Cas 1D

Au voisinage de la face $j + 1/2$, on suppose que le terme non-conservatif peut être approché par un flux G dont l'expression dépend des valeurs locales au voisinage de la face :

$$\forall x \in [x_j, x_{j+1}], \quad \partial_x F(v) + C(v) \partial_x v \simeq \partial_x (F(v) + G_{j,j+1}(v)). \quad (3.15)$$

Une telle linéarisation existe toujours : on peut choisir par exemple

$$G_{j,j+1}(v) = C \left(\frac{v_j + v_{j+1}}{2} \right) v,$$

ou bien, dans l'esprit de [GKL01],

$$G_{j,j+1}(v) = C \left(\frac{v_j + v_{j+1}}{2} \right) B^{-1} \left(\frac{v_j + v_{j+1}}{2} \right) F(v),$$

où

$$B = \frac{\partial F}{\partial v}.$$

Le choix d'une telle linéarisation peut être justifié par des raisons physiques ou par souci de simplicité de la résolution numérique. Si on a donné un sens au terme non-conservatif via par exemple le formalisme de [DLM95] (voir Section 2.3.2), il semble raisonnable d'appliquer ici la même régularisation.

Une fois une linéarisation choisie, on intègre sur un volume fini de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \int_{j-1/2}^{j+1/2} \partial_x F + C \partial_x v \, dx &= \int_{j-1/2}^j \partial_x F + C \partial_x v \, dx + \int_j^{j+1/2} \partial_x F + C \partial_x v \, dx \\ &= \int_{j-1/2}^j \partial_x (F + G_{j-1,j}) \, dx + \int_j^{j+1/2} \partial_x (F + G_{j,j+1}) \, dx \\ &= (F + G_{j-1,j})(v_j) - (F + G_{j-1,j})_{j-1/2} + (F + G_{j,j+1})_{j+1/2} - (F + G_{j,j+1})(v_j), \end{aligned}$$

et on a donc finalement

$$\int_{j-1/2}^{j+1/2} \partial_x F + C \partial_x v \, dx \simeq - (F + G_{j-1,j})_{j-1/2} + (F + G_{j,j+1})_{j+1/2} + G_{j-1,j}(v_j) - G_{j,j+1}(v_j). \quad (3.16)$$

Ici $(F + G_{j,j+1})_{j+1/2}$ désigne le « flux total » $F + G$ estimé à l'interface $j + 1/2$. Pour calculer ce flux numérique, le schéma VFFC présenté à la section précédente sera utilisé. L'approximation (3.15) entraîne que

$$\partial_t (F + G_{j,j+1})(v) + A_{j,j+1}(v) \partial_x (F + G_{j,j+1})(v) = 0, \quad (3.17)$$

où $A(v)$ est la matrice jacobienne

$$A_{j,j+1}(v) = \frac{\partial F}{\partial v} + \frac{\partial G_{j,j+1}}{\partial v}.$$

La linéarisation de (3.17) permet de définir le flux numérique :

$$\begin{aligned} (F + G_{j,j+1})_{j+1/2} &= \frac{(F + G_{j,j+1})(v_j) + (F + G_{j,j+1})(v_{j+1})}{2} \\ &+ \operatorname{sgn}[A_{j,j+1}(v)]_{j+1/2} \frac{(F + G_{j,j+1})(v_j) - (F + G_{j,j+1})(v_{j+1})}{2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Remarque 3.9. En choisissant l'approximation

$$C(v) \partial_x v = C(v) B^{-1}(v) \partial_x F(v) \simeq \partial_x ((CB^{-1})(v_0) F(v)),$$

on peut voir l'approche présentée ici comme une généralisation de celle de [GKL01]. Cependant, elles se distinguent sur deux aspects (indépendants).

— Ici la linéarisation des termes non-conservatifs se fait aux faces :

$$\forall x \in [x_j, x_{j+1}], \quad C(v) \partial_x v \simeq \partial_x ((CB^{-1})(v_{j+1/2}) F(v)),$$

et non aux centres des mailles comme dans [GKL01] :

$$\forall x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}], \quad C(v) \partial_x v \simeq \partial_x ((CB^{-1})(v_j) F(v)).$$

C'est une différence minime et chacune des deux approches peut être réécrite en changeant le domaine où a lieu la linéarisation.

— Le décentrement du flux numérique est calculé différemment. Dans [GKL01], le flux F est considéré comme advecté par la matrice $B + BCB^{-1}$:

$$\partial_t F + (B + BCB^{-1}) \partial_x F = 0.$$

Ici, on considère la forme (3.17). Elle peut être écrite comme l'advection du « flux » $(I + C_0 B_0^{-1})F$ par la matrice $B + C_0$.

$$\partial_t ((I + C_0 B_0^{-1})F) + (B + C_0) \partial_x ((I + C_0 B_0^{-1})F) = 0.$$

Ces deux différences entre les deux schémas viennent des contraintes posées par la discrétisation du terme non-conservatif de changement de phase. D'une part, une discrétisation aux faces permet d'utiliser naturellement la relation de fermeture de type $J_{l \rightarrow g}(p_l, T_l, p_g, T_g)$ décrite au chapitre précédent. D'autre part, le choix d'associer au flux numérique le terme non-conservatif se justifie physiquement ($J_{l \rightarrow g}$ est un *flux*) et permet de généraliser la linéarisation en évitant l'introduction de B^{-1} , qui peut être singulière. \triangleleft

Remarque 3.10. Dans le cas dégénéré linéaire

$$\partial_t v + \nabla \cdot (Bv) + C \nabla v = 0,$$

la discrétisation proposée ici donne le schéma amont décentré suivant $\operatorname{sgn}(B + C)$, et ceci indépendamment de la distinction arbitraire entre termes conservatifs et non-conservatifs. Ce n'est pas le cas de la discrétisation proposée par [GKL01] qui décentre le flux suivant $\operatorname{sgn}(B + BCB^{-1})$. \triangleleft

Cas multidimensionnel

Le cas multidimensionnel utilise exactement la même philosophie, mais est un peu plus technique à exprimer. On considère maintenant le système (3.13).

Pour linéariser les termes non-conservatifs « au voisinage » d'une face, une partition de chaque maille en voisinages de chaque faces va être introduite. Le schéma final ne dépend pas de cette partition, il ne s'agit que d'un outil technique pour l'intégration sur un volume fini.

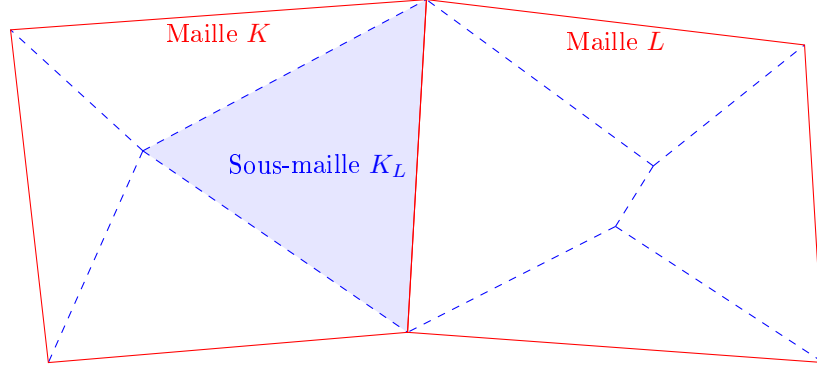


FIGURE 3.3 – Exemple de décomposition des mailles (en rouge) en sous-mailles (en bleu) pour l'intégration des termes non-conservatifs en 2D.

Soit un maille K ayant n_V voisines $\mathcal{V}(K)$. On divise K en n_V sous-mailles $\{K_L\}_{L \in \mathcal{V}(K)}$ telles que K_L est en contact avec la voisine L et seulement avec elle (voir Figure 3.3), c'est-à-dire

$$\forall L \in \mathcal{V}(K), \quad \partial K_L \cap \partial K = \partial K \cap \partial L, \quad (3.19a)$$

$$\forall L \in \mathcal{V}(K), \quad \forall L' \in \mathcal{V}(K) \setminus \{L\}, \quad \partial K_L \cap (\partial K \cap \partial L') = \emptyset. \quad (3.19b)$$

Dans le cas où K est un polygone (resp. polyèdre) convexe, une telle partition de K est possible trivialement en reliant le centre de gravité du polygone à chacun de ses sommets.

On va maintenant faire le même type d'approximation que (3.15). Au voisinage de l'interface entre deux faces K et L , on suppose que l'on peut écrire :

$$\forall x \in K_L \cup L_K, \quad \nabla F(v) + \mathbf{C}(v) : \nabla v \simeq \partial_x (F(v) + G_{K,L}(v)). \quad (3.20)$$

Alors, on intègre sur un volume fini de la façon suivante :

$$\begin{aligned} & \int_K \nabla \cdot F + C : \nabla v \, dx \\ &= \sum_{L \in \mathcal{V}(K)} \int_{K_L} \nabla \cdot F + C : \nabla v \, dx \\ &\simeq \sum_{L \in \mathcal{V}(K)} \int_{K_L} \nabla \cdot (F + G_{(K,L)}) \, dx \\ &= \sum_{L \in \mathcal{V}(K)} \int_{\partial(K_L)} (F + G_{(K,L)})(v) \nu \, dS \\ &= \sum_{L \in \mathcal{V}(K)} \left[\int_{\partial K \cap \partial L} (F + G_{(K,L)})(v) \nu \, dS + \int_{\partial(K_L) \setminus (\partial K \cap \partial L)} (F + G_{(K,L)})(v) \nu \, dS \right] \\ &\simeq \sum_{L \in \mathcal{V}(K)} \left[(F + G_{(K,L)})_{K,L} |\partial K \cap \partial L| \nu_{K,L} + (F + G_{(K,L)})(v_K) \int_{\partial(K_L) \setminus (\partial K \cap \partial L)} \nu \, dS \right] \\ &= \sum_{L \in \mathcal{V}(K)} |\partial K \cap \partial L| [(F + G_{(K,L)})_{K,L} - (F + G_{(K,L)})(v_K)] \nu_{K,L}. \end{aligned}$$

On a utilisé le fait que

$$\int_{\partial K_L \setminus (\partial K \cap \partial L)} \nu \, dS = - \int_{\partial K \cap \partial L} \nu \, dS = |\partial K \cap \partial L| \nu_{K,L}$$

d'après la formule de Green.

Puisque

$$\sum_{L \in \mathcal{V}(K)} |\partial K \cap \partial L| F(v_K) \nu_{K,L} = 0,$$

on peut réécrire le schéma comme

$$\int_K \nabla \cdot F + C : \nabla v \, dx \simeq \sum_{L \in \mathcal{V}(K)} |\partial K \cap \partial L| [(F + G_{(K,L)})_{K,L} - G_{(K,L)}(v_K)] \nu_{K,L}. \quad (3.21)$$

Comme précédemment, le flux numérique $(F + G_{(K,L)})_{K,L}$ à l'interface sera évalué par

$$(F + G_{K,L})_{K,L} = \frac{(F + G_{K,L})(v_K) + (F + G_{K,L})(v_L)}{2} \nu_{K,L} \\ + \operatorname{sgn}[\mathbf{A}_{K,L}(v) \nu_{K,L}]_{K,L} \frac{(F + G_{K,L})(v_K) - (F + G_{K,L})(v_L)}{2} \nu_{K,L}, \quad (3.22)$$

où

$$\mathbf{A}_{K,L} = \frac{\partial F}{\partial v} + \frac{\partial G_{K,L}}{\partial v}. \quad (3.23)$$

Remarque 3.11. On peut retrouver un schéma proche de celui de [Rov06, p. 75] en posant

$$G_{K,L}(v) = E_{K,L} F(v),$$

où

$$E_{K,L} = C(\mu_{K,L}) B^{-1}(\mu_{K,L}).$$

Les deux schémas s'écrivent alors de manière similaire :

$$\int_K \nabla \cdot F + C : \nabla v \, dx \simeq \sum_{L \in \mathcal{V}(K)} |\partial K \cap \partial L| [(\mathbb{I} + E_{K,L}) \Phi_{K,L} - E_{K,L} F(v_K)] \nu_{K,L}.$$

Cependant les deux approches se distinguent encore dans le choix de la matrice de décentrement de Φ . Pour [Rov06], elle est de la forme $\operatorname{sgn}(B(I + E))$, alors qu'avec le schéma proposé ici, elle est de la forme $\operatorname{sgn}((I + E)B) = \operatorname{sgn}(B + C)$. \triangleleft

3.3.2 Application au changement de phase

Cette approche va maintenant être appliquée au terme de changement de phase du modèle (2.65) :

$$\forall x \in [x_j, x_{j+1}], \quad J(v) \cdot \nabla \xi \simeq \nabla (J_{j,j+1} \xi). \quad (3.24)$$

Le choix de l'approximation de J sera discuté au Chapitre 4.

Les flux du système s'écrivent donc

$$F(v) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho H u \\ \xi \rho u \end{pmatrix}, \quad G_{j,j+1}(v) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -J_{j,j+1} \xi \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

À l'interface, le problème se ramène au système conservatif dont le problème de Riemann a été étudié à la Section 2.4 et dont les détails de calculs sont présentés au Chapitre B.

Remarque 3.12. Dans le cas particulier $\frac{\partial p}{\partial \xi} = 0$, les deux fluides ont la même loi d'état et la variable ξ est advectée sans influencer l'évolution des autres propriétés du fluide. Dans ce cas, les deux variantes du schéma VFFC donnent

$$v_j^{n+1} = v_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\phi_{j-1/2}^n - \phi_{j+1/2}^n - J_{j-1/2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \xi_{j-1/2} - \xi_j \end{pmatrix} + J_{j+1/2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \xi_{j+1/2} - \xi_j \end{pmatrix} \right),$$

où $\phi_{j\pm 1/2}^n$ est le flux numérique à l'interface $j \pm 1/2$ tel qu'il serait calculé sans changement de phase et $\xi_{j\pm 1/2}$ est une valeur décentrée de ξ à la face $j \pm 1/2$ qui dépend du schéma. On verra au chapitre suivant que pour le schéma l amont $\xi_{j\pm 1/2}$ est la valeur amont de ξ . Cette discrétisation se ramène alors à un schéma amont sur le terme non-conservatif.

Dans le cas général, le schéma est plus complexe. La discrétisation de F dépendra de $J_{l \rightarrow g}$, comme attendu au vu du problème de Riemann étudié à la Section 2.4 que l'on cherche à approcher. \triangleleft

3.4 Principe du maximum

Dans cette section, les deux variantes du schéma VFFC définies à la Section 3.2 vont être comparées à l'aune de leur respect du principe du maximum. On s'intéressera en particulier au cas de la fraction massique ξ pour le modèle étudié dans cette thèse. En effet, dans le modèle moyenné défini au chapitre précédent, la fraction massique ξ est solution d'une équation d'advection. Sans changement de phase, celle-ci s'écrit par exemple :

$$\partial_t \xi + \left(u - \frac{J}{\rho} \right) \cdot \nabla \xi = 0.$$

Cette forme implique que ξ doit satisfaire un principe du maximum local. Sous sa forme discrète, il s'écrit :

Définition 3.13. Un schéma numérique respecte le principe du maximum local discret sur ξ si

$$\forall j, \quad \forall n, \quad \min(\xi_{j-1}^n, \xi_j^n, \xi_{j+1}^n) \leq \xi_j^{n+1} \leq \max(\xi_{j-1}^n, \xi_j^n, \xi_{j+1}^n). \quad (3.26)$$

Par souci de simplicité, les résultats de cette sections seront présentés en 1D. Ils se généralisent en dimensions supérieures pour le principe du maximum discret

$$\forall K, \quad \min_{L \in \mathcal{V}(K) \cup \{K\}} \xi_L^n < \xi_K^{n+1} < \max_{L \in \mathcal{V}(K) \cup \{K\}} \xi_L^n.$$

Remarque 3.14. Cette propriété est plus forte que celle de rester borné. Dans ce modèle, la fraction volumique α est bornée ($\alpha \in [0, 1]$) mais ne satisfait pas de principe du maximum. D'un point de vue physique, ce respect des bornes est une condition plus importante que le principe du maximum. Dans le cas de ξ , le principe du maximum n'est ici que le fruit de nos hypothèses de modélisation simplificatrices. Cependant d'un point de vue mathématique, le respect du principe du maximum quand il existe pour les solutions d'équations aux dérivées partielles est un point important pour la stabilité du schéma numérique. \triangleleft

3.4.1 Sans changement de phase

Conditions suffisantes pour le respect du principe du maximum local sur ξ

Les première et dernière composantes du flux numérique $\phi_{j+1/2}$, associées respectivement aux variables conservatives ρ et $\rho\xi$, sont notées $\phi_{j+1/2}^\rho$ et $\phi_{j+1/2}^{\rho\xi}$.

Théorème 3.15. [Lar91] Soit un schéma volume fini (3.6) pour le système (2.65) sans changement de phase ($J = 0$). Si à chaque interface, les flux numériques respectent la relation

$$\phi_{j+1/2}^{\rho\xi} = \xi_{\text{amont}}(\phi_{j+1/2}^\rho) \phi_{j+1/2}^\rho, \quad (3.27)$$

où

$$\xi_{\text{amont}}(\phi_{j+1/2}^\rho) = \begin{cases} \xi_j & \text{si } \phi_{j+1/2}^\rho > 0 \\ \xi_{j+1/2} & \text{si } \phi_{j+1/2}^\rho < 0 \end{cases}, \quad (3.28)$$

et par ailleurs on a la condition suivante :

$$\forall j, \quad \max(\phi_{j+1/2}^\rho, 0) - \min(\phi_{j-1/2}^\rho, 0) \leq \rho_j \frac{\Delta x}{\Delta t}, \quad (3.29)$$

alors le schéma respecte le principe du maximum local sur ξ .

Démonstration. Le schéma volume fini explicite en 1D s'écrit

$$v_j^{n+1} = v_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\phi_{j-1/2} - \phi_{j+1/2}),$$

c'est-à-dire pour la variable ρ :

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\phi_{j-1/2}^\rho - \phi_{j+1/2}^\rho),$$

et pour la variable $\rho\xi$:

$$(\rho\xi)_j^{n+1} = (\rho\xi)_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\phi_{j-1/2}^{\rho\xi} - \phi_{j+1/2}^{\rho\xi}).$$

On peut réécrire cette dernière expression sous la forme :

$$\xi_j^{n+1} = \frac{1}{\rho_j^{n+1}} \left((\rho\xi)_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\xi_{j-1/2} \phi_{j-1/2}^\rho - \xi_{j+1/2} \phi_{j+1/2}^\rho) \right),$$

où on a noté

$$\xi_{j\pm 1/2} = \xi_{\text{amont}(\phi_{j\pm 1/2}^\rho)}.$$

En remplaçant ρ_j^{n+1} , on obtient :

$$\xi_j^{n+1} = \frac{\rho_j^n \xi_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\xi_{j-1/2} \phi_{j-1/2}^\rho - \xi_{j+1/2} \phi_{j+1/2}^\rho)}{\rho_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\phi_{j-1/2}^\rho - \phi_{j+1/2}^\rho)}.$$

La fraction massique ξ_j^{n+1} peut être vue comme une moyenne pondérée de ξ_j^n , $\xi_{j-1/2}$ et $\xi_{j+1/2}$.

On a maintenant quatre cas selon le signe de $\phi_{j+1/2}^\rho$ et celui de $\phi_{j-1/2}^\rho$. On présente le cas

$$\phi_{j-1/2}^\rho > 0, \quad \phi_{j+1/2}^\rho > 0,$$

les autres étant similaire. La relation (3.27) implique

$$\xi_{j-1/2} = \xi_{j-1}, \quad \xi_{j+1/2} = \xi_j,$$

d'où

$$\xi_j^{n+1} = \frac{\xi_j^n \left(\rho_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \phi_{j+1/2}^\rho \right) + \xi_{j-1} \frac{\Delta t}{\Delta x} \phi_{j-1/2}^\rho}{\left(\rho_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \phi_{j-1/2}^\rho - \phi_{j+1/2}^\rho \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \phi_{j-1/2}^\rho}.$$

Au vu des hypothèses, ξ_j^{n+1} est la moyenne pondérée par des poids positifs de ξ_j^n et ξ_{j-1}^n , donc

$$\min(\xi_{j-1}^n, \xi_j^n) < \xi_j^{n+1} < \max(\xi_{j-1}^n, \xi_j^n),$$

qui est une condition suffisante pour le principe du maximum discret. \square

Remarque 3.16. La condition de type CFL (3.29) n'est en pratique pas très contraignante. Pour les écoulement subsonique, on a en ordre de grandeur

$$|\phi^\rho| \sim \rho|u| < \rho(|u| + |c|) < \rho \frac{\Delta x}{\Delta t},$$

le dernière inégalité étant la condition CFL usuelle. \triangleleft

Application au schéma VFFC « μ moyen »

Lemme 3.17. *Le flux numérique associé à la variable conservative $\rho\xi$ par le schéma VFFC μ moyen pour le modèle (2.65) sans changement de phase s'écrit :*

$$\phi_{j+1/2}^{\rho\xi} = \xi_{j+1/2} \phi_{j+1/2}^\rho + \left(\xi_{\text{amont}(u_{j+1/2})} - \xi_{j+1/2} \right) (\rho u)_{\text{amont}(u_{j+1/2})}, \quad (3.30)$$

où $u_{j+1/2}$ et $\xi_{j+1/2}$ sont la vitesse et la fraction massique associées à $\mu_{j+1/2}$.

Démonstration. D'après (3.9), les flux du schéma VFFC peuvent s'écrire comme

$$\phi_{j+1/2}^\rho = \sum_k \left(l_k(\mu_{j+1/2}) \cdot F_{\text{amont}(\lambda_k(\mu_{j+1/2}))} \right) r_k^\rho(\mu_{j+1/2}),$$

et

$$\phi_{j+1/2}^{\rho\xi} = \sum_k \left(l_k(\mu_{j+1/2}) \cdot F_{\text{amont}(\lambda_k(\mu_{j+1/2}))} \right) r_k^{\rho\xi}(\mu_{j+1/2}),$$

où l_k est le k ième vecteur propre à gauche et r_k^ρ et $r_k^{\rho\xi}$ sont respectivement la première et la dernière coordonnée du k ième vecteur propre à droite. Leurs expressions sont calculées à l'Annexe B.

Pour $k \in \{1, 2, 4\}$, on remarque dans (B.11) que

$$r_k^{\rho\xi} = \xi r_k^\rho.$$

Par ailleurs, pour $k = 3$, on a :

$$r_3^{\rho\xi} = \xi r_3^\rho - 1.$$

En remplaçant $r_k^{\rho\xi}$ dans l'expression de $\phi_{j+1/2}^{\rho\xi}$, on obtient :

$$\phi_{j+1/2}^{\rho\xi} = \xi_{j+1/2} \phi_{j+1/2}^\rho + \left(l_3(\mu_{j+1/2}) \cdot F_{\text{amont}(u_{j+1/2})} \right).$$

Comme on a

$$l_3 \propto (\xi \quad 0 \quad 0 \quad -1),$$

on en déduit le résultat voulu. \square

Corollaire 3.18. Choisir $\mu_{j+1/2}$ tel que

$$\text{sgn}(u_{j+1/2}) = \text{sgn}(\phi_{j+1/2}^\rho), \quad (3.31a)$$

$$\xi_{j+1/2} = \xi_{\text{amont}(u_{j+1/2})}, \quad (3.31b)$$

est suffisant pour que le schéma VFFC μ moyen respecte (3.27).

Remarque 3.19. On peut vérifier numériquement que la condition suffisante (3.31b) est également nécessaire dans certains cas, comme l'advection d'une interface à vitesse constante. \triangleleft

Remarque 3.20. La condition (3.31a) est une condition implicite sur $\text{sgn}(u_{j+1/2})$, car le flux numérique $\phi_{j+1/2}^\rho$ en dépend. En pratique, l'approximation naïve de $u_{j+1/2}$ comme

$$u_{j+1/2} = \frac{u_j + u_{j+1}}{2},$$

donne de bons résultats, sauf dans quelques cas où u change de signe. Dans les résultats présentés plus loin dans cette thèse, c'est l'approximation

$$u_{j+1/2} = \frac{\rho_j c_j u_j + \rho_{j+1} c_{j+1} u_{j+1}}{\rho_j c_j + \rho_{j+1} c_{j+1}} + \frac{p_j - p_{j+1}}{\rho_j c_j + \rho_{j+1} c_{j+1}},$$

tirée du solveur de Riemann acoustique (voir aussi Lemme 3.27), qui a été utilisée, sans être prise en défaut. \triangleleft

Application au schéma VFFC « l amont »

Le lemme précédent a permis de trouver une condition suffisante sur le choix de l'état moyen $\mu_{j+1/2}$ pour le respect du principe du maximum avec le schéma μ moyen. Le prochain lemme va montrer que la condition suffisante (3.31b) est automatiquement respectée par le schéma l amont.

Lemme 3.21. Le flux numérique associé à la variable conservative $\rho\xi$ par le schéma VFFC l amont pour le modèle (2.65) sans changement de phase s'écrit :

$$\phi_{j+1/2}^{\rho\xi} = \xi_{\text{amont}(u_{j+1/2})} \phi_{j+1/2}^\rho, \quad (3.32)$$

où $u_{j+1/2}$ est la vitesse associée à $\mu_{j+1/2}$.

Démonstration. Ce résultat se vérifie à l'aide d'un logiciel de calcul formel et des matrices calculées à l'Annexe B. \square

Corollaire 3.22. Choisir $\mu_{j+1/2}$ tel que

$$\operatorname{sgn}(u_{j+1/2}) = \operatorname{sgn}\left(\phi_{j+1/2}^\rho\right), \quad (3.33)$$

est suffisant pour que le schéma VFFC l amont respecte (3.27).

Remarque 3.23. La Remarque 3.20 s'applique toujours à (3.33). \triangleleft

Le schéma l amont sélectionne automatiquement un état moyen décentré qui garantit le principe du maximum sur ξ (au signe de la valeur propre près). Il est envisageable que cette bonne propriété vaille aussi pour d'autres invariants de Riemann du système quand ils existent (comme l'entropie s qui doit respecter un principe du maximum partout où la solution est régulière). Ces autres grandeurs étant beaucoup plus difficile à étudier que le cas dégénéré de ξ , aucune preuve mathématique générale n'a cependant pu être apportée au cours de ce travail.

3.4.2 Avec changement de phase

Enfin, pour conclure cette section sur le principe du maximum, on vérifie que le résultat précédent s'étend au cas où le terme de changement de phase est introduit, selon la discrétisation présentée à la Section 3.3.

Lemme 3.24. Avec le schéma VFFC l amont, le schéma volume fini avec terme non-conservatif s'écrit

$$v_j^{n+1} = v_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\varphi_{j-1/2} - \varphi_{j+1/2} - (J_{j-1/2} - J_{j+1/2}) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \xi_j \end{pmatrix} \right),$$

où le flux numérique φ approchant $F + G$ respecte la relation

$$\varphi_{j+1/2}^{\rho\xi} = \xi_{\text{amont}(u-\frac{J}{\rho})_{j+1/2}} \left(\varphi_{j+1/2}^\rho - J \right).$$

Démonstration. Le flux numérique φ est calculé à partir des résultats de l'Annexe B à l'aide d'un logiciel de calcul formel. \square

Corollaire 3.25. Avec changement de phase, le schéma l amont respecte le principe du maximum à la condition suffisante suivante :

$$\max\left(\varphi_{j+1/2}^\rho - J_{j+1/2}, 0\right) - \min\left(\varphi_{j-1/2}^\rho - J_{j-1/2}, 0\right) - J_{j-1/2} + J_{j+1/2} \leq \rho_j \frac{\Delta x}{\Delta t},$$

et

$$\forall j, \quad \operatorname{sgn}\left(u - \frac{J}{\rho}\right)_{j+1/2} = \operatorname{sgn}\left(\varphi^\rho - J\right)_{j+1/2}.$$

Démonstration. En notant

$$\xi_{j\pm 1/2} = \xi_{\text{amont}(u-\frac{J}{\rho})_{j\pm 1/2}},$$

le schéma s'écrit

$$(\rho\xi)_j^{n+1} = (\rho\xi)_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\xi_{j-1/2} \left(\varphi_{j-1/2}^\rho - J_{j-1/2} \right) - \xi_{j+1/2} \left(\varphi_{j+1/2}^\rho - J_{j+1/2} \right) - (J_{j+1/2} - J_{j-1/2}) \xi_j \right),$$

et

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\varphi_{j-1/2}^\rho - \varphi_{j+1/2}^\rho \right),$$

d'où

$$\xi_j^{n+1} = \frac{\xi_j \left(\rho_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (-J_{j+1/2} + J_{j-1/2}) \right) + \xi_{j-1/2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\varphi_{j-1/2}^\rho - J_{j-1/2} \right) - \xi_{j+1/2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\varphi_{j+1/2}^\rho - J_{j+1/2} \right)}{\rho_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\varphi_{j-1/2}^\rho - \varphi_{j+1/2}^\rho \right)}.$$

Les mêmes arguments que dans la preuve du Théorème 3.15 vont être utilisés.
Par exemple dans le cas

$$(\varphi^\rho - J)_{j-1/2} > 0, \quad (\varphi^\rho - \bar{J})_{j+1/2} > 0,$$

on a par hypothèse

$$\xi_{j-1/2} = \xi_{j-1}, \quad \xi_{j+1/2} = \xi_j, \quad \varphi_{j+1/2} - J_{j-1/2} \leq \rho_j \frac{\Delta x}{\Delta t},$$

d'où

$$\xi_j^{n+1} = \frac{\xi_j \left(\rho_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(-\varphi_{j+1/2}^\rho + J_{j-1/2} \right) \right) + \xi_{j-1} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\varphi_{j-1/2}^\rho - J_{j-1/2} \right)}{\rho_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\varphi_{j-1/2}^\rho - \varphi_{j+1/2}^\rho \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(J_{j-1/2} - J_{j-1/2} \right)}.$$

La fraction massique ξ_j^{n+1} s'écrit comme moyenne pondérée (à coefficients positifs) de ξ_j et ξ_{j-1} qui est une condition suffisante pour le respect du principe du maximum.

Il en va de même dans les autres cas. □

3.5 Schéma à reconstruction d'interface

Enfin, dans cette dernière section de ce chapitre, une approche particulière pour la discrétisation des interfaces entre fluides va être présentée. On se rapportera par exemple à [Bra07] ou [Cha12] pour plus de détails.

3.5.1 Présentation

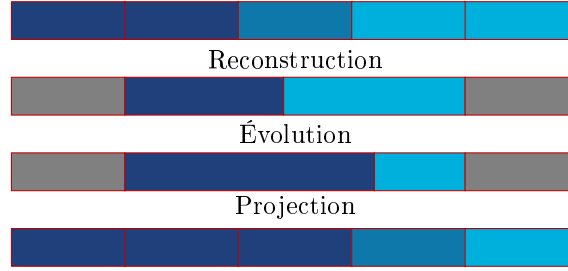


FIGURE 3.4 – Diagramme des différentes étapes du schéma en 1D pour un condensat simple (à deux couches).

La Figure 3.4 présente les différentes étapes de la gestion d'une interface par le code. Dans un premier temps, l'étape de reconstruction des interfaces transforme les mailles mixtes et les mailles voisines en un ensemble de couches de fluide pur appelé *condensat*. Ces couches de fluide évoluent de manière lagrangienne pendant un temps Δt . Enfin, le condensat est reprojété sur le maillage cartésien initial. Le reste du domaine est résolu par un schéma volume fini usuel.

L'extension du schéma au cas multidimensionnel se fait par pas de temps fractionnaires. Par exemple, en deux dimensions :

- a. Dans la direction x :
 - i. Construction de condensats en tranches verticales.
 - ii. Calcul des flux et évolution des condensats dans la direction x .
 - iii. Projection sur le maillage cartésien.
- b. Dans la direction y :
 - i. Construction de condensats en tranches horizontales.
 - ii. Calcul des flux et évolution des condensats dans la direction y .
 - iii. Projection sur le maillage cartésien.

En une dimension, l'étape de reconstruction se fait simplement à partir de la connaissance de la fraction volumique α . En dimensions supérieures, le problème devient plus complexe. Cependant, la modélisation du changement de phase n'a pas d'influence directe sur cette étape de calcul. Elle ne sera donc pas discutée plus en détails dans ce mémoire. On pourra se rapporter aux références citées ci-dessus.

Dans la suite de cette section, l'étape d'évolution va être décrite plus en détails. C'est elle qui devra être modifiée pour simuler le changement de phase interfacial dans la suite de cette thèse.

Évolution lagrangienne de l'interface

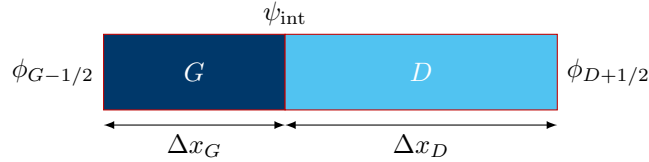


FIGURE 3.5 – Notations pour un condensat simple

Pour décrire l'évolution de l'interface, le problème va être traité dans un formalisme lagrangien, c'est-à-dire dans le référentiel du fluide évoluant à la vitesse u . Les équations d'Euler s'écrivent

$$d_t^u v + \partial_x F = 0, \quad (3.34)$$

où

$$v = \begin{pmatrix} \tau \\ u \\ E \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} -u \\ p \\ pu \end{pmatrix},$$

et

$$d_t^u = \rho \partial_t + \rho u \partial_x.$$

À l'interface entre les deux fluides, à l'intérieur du condensat, on définit les pressions et vitesses interfaciales p_{int} et u_{int} telles que

$$u_{\text{int}} = \frac{\rho_G c_G u_G + \rho_D c_D u_D}{\rho_G c_G + \rho_D c_D} + \frac{p_G - p_D}{\rho_G c_G + \rho_D c_D}, \quad (3.35a)$$

$$p_{\text{int}} = \frac{\rho_G c_G p_G + \rho_D c_D p_D}{\rho_G c_G + \rho_D c_D} + \rho_G c_G \rho_D c_D \frac{u_G - u_D}{\rho_G c_G + \rho_D c_D}. \quad (3.35b)$$

Grâce à elles, un flux numérique approchant le flux de (3.34) peut être écrit comme

$$\psi_{\text{int}} = \begin{pmatrix} -u_{\text{int}} \\ p_{\text{int}} \\ u_{\text{int}} p_{\text{int}} \end{pmatrix}. \quad (3.36)$$

Par ailleurs les flux aux bords du condensat sont calculés par un schéma VFFC (voir section 3.2), sous la forme

$$\phi_{G-1/2} = \phi(v_{G-1}, v_G), \quad \phi_{D+1/2} = \phi(v_{D-1}, v_D).$$

Enfin, ces flux serviront à mettre à jour les volumes, masses, quantités de mouvement et énergies totales de chacune des couches du condensat. Ces bilans s'écrivent

$$\Delta x_G^{n+1} = \Delta x_G^n - \Delta t \psi_{\text{int}}^\tau, \quad (3.37a)$$

$$(\Delta x \rho)_G^{n+1} = (\Delta x \rho)_G^n + \Delta t \phi_{G-1/2}^\rho, \quad (3.37b)$$

$$(\Delta x \rho u)_G^{n+1} = (\Delta x \rho u)_G^n - \Delta t \left[\psi_{\text{int}}^u - \phi_{G-1/2}^{\rho u} \right], \quad (3.37c)$$

$$(\Delta x \rho E)_G^{n+1} = (\Delta x \rho E)_G^n - \Delta t \left[\psi_{\text{int}}^E - \phi_{G-1/2}^{\rho E} \right], \quad (3.37d)$$

et de même symétriquement pour la maille D .

3.5.2 Condition d'entropie

Dans ce paragraphe, on vérifie que le flux numérique (3.36) est conforme au Second Principe de la Thermodynamique. Ce résultat est analogue à [Bra07, Proposition 11] avec une condition d'entropie discrète différente.

La condition d'entropie physique peut se réécrire à l'aide du système de lois de conservation (3.34) comme :

$$0 \leq \rho d_t^u s = \rho \frac{\partial s}{\partial v} d_t^u v = -\frac{\partial s}{\partial v} \partial_x F.$$

Il peut donc être intégré au voisinage d'une interface de la façon suivante :

$$-\int_G^D \frac{\partial s}{\partial v} \partial_x F dx \simeq \left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_G (F_G - \psi_{\text{int}}) + \left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_D (\psi_{\text{int}} - F_D). \quad (3.38)$$

Théorème 3.26. *Le flux numérique (3.36) est entropique au sens de*

$$\left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_G (F_G - \psi_{\text{int}}) + \left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_D (\psi_{\text{int}} - F_D) \geq 0.$$

Démonstration. De la relation thermodynamique

$$T ds = de + p d\tau = dE - u du + p d\tau$$

on tire

$$\frac{\partial s}{\partial v} = \frac{1}{T} \begin{pmatrix} p \\ -u \\ 1 \end{pmatrix}.$$

On remplace $\frac{\partial s}{\partial v}$ et ψ dans le bilan d'entropie :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{T_G} \begin{pmatrix} p_G \\ -u_G \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -u_G + u_{\text{int}} \\ p_G - p_{\text{int}} \\ p_G u_G - p_{\text{int}} u_{\text{int}} \end{pmatrix} + \frac{1}{T_D} \begin{pmatrix} p_D \\ -u_D \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -u_{\text{int}} + u_D \\ p_{\text{int}} - p_D \\ p_{\text{int}} u_{\text{int}} - p_D u_D \end{pmatrix} \geq 0, \\ & \iff -\frac{1}{T_G} (p_G - p_{\text{int}}) (u_G - u_{\text{int}}) + \frac{1}{T_D} (p_D - p_{\text{int}}) (u_D - u_{\text{int}}) \geq 0. \end{aligned}$$

On peut réécrire les définitions de u_{int} et p_{int} (3.35) comme :

$$p_G - p_{\text{int}} = -\rho_G c_G (u_G - u_{\text{int}}) \quad p_D - p_{\text{int}} = \rho_D c_D (u_D - u_{\text{int}}),$$

ce qui permet de conclure. □

3.5.3 Généralisation

Pour l'intégration du changement de phase dans ce code, l'enjeu est la discrétisation des équations de la Section 2.3.4. Pour cela, une généralisation du flux lagrangien (3.36) est nécessaire. On s'inspirera de la démonstration de (3.36) par [Cha12, p. 37-40] pour proposer le résultat suivant.

Lemme 3.27. *Soit le système lagrangien isentropique*

$$d_t^u v + \partial_x F = 0, \quad (3.39)$$

où

$$v = \begin{pmatrix} \tau \\ u \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} -u \\ p \end{pmatrix}.$$

Le flux numérique du schéma VFFC l amont (voir Section 3.2.2) pour ce système s'écrit

$$\psi = \begin{pmatrix} -u_{\text{int}} \\ p_{\text{int}} \end{pmatrix},$$

où u_{int} et p_{int} sont les valeurs données par (3.35).

Démonstration. La matrice jacobienne pour ce système s'écrit

$$\frac{\partial F}{\partial v} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \frac{\partial p}{\partial \tau} & 0 \end{pmatrix},$$

où

$$\frac{\partial p}{\partial \tau} = -\rho^2 c^2,$$

par définition de la vitesse du son c .

Les vecteurs $(\rho c \ 1)$ et $(-\rho c \ 1)$ sont vecteurs propres à gauche de la matrice jacobienne, associés respectivement aux valeurs propres $-c$ et c . Le signe des valeurs propres étant indépendant de v_G et v_D , la matrice de décentrement des flux pour le schéma l amont s'écrit

$$\begin{pmatrix} \rho_G c_G & 1 \\ -\rho_D c_D & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_G c_G & 1 \\ -\rho_D c_D & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\rho_G c_G + \rho_D c_G} \begin{pmatrix} \rho_G c_G - \rho_D c_D & -2 \\ -2\rho_G c_G \rho_D c_D & \rho_D c_D - \rho_G c_G \end{pmatrix},$$

d'où on trouve le résultat voulu. □

Dans la suite de ce mémoire, le schéma VFFC l amont va donc être appliqué au système (2.41).

Remarque 3.28. Le lemme précédent garantit que le résultat coïncidera avec (3.35) dans le cas isentropique sans changement de phase. Cependant, dans le cas non-isentropique sans changement de phase, il différera de (3.36) où on a supposé $(\rho u)_{\text{int}} = p_{\text{int}} u_{\text{int}}$. Cette dernière expression a l'avantage d'être rapide à calculer et le bilan d'entropie est facile à étudier comme on l'a vu à la Section 3.5.2. Cependant, l'approche suivie dans ce travail en étant plus abstraite se généralise plus facilement à des systèmes plus complexes comme celui avec changement de phase. ◁

Chapitre 4

Implémentation du modèle de changement de phase

Dans le Chapitre 3, la discrétisation d'équations aux dérivées partielles hyperboliques par la méthode des volumes finis a été discutée. Les schémas présentés vont maintenant être appliqués au modèle avec le changement de phase interfacial liquide-vapeur, présenté au Chapitre 2.

4.1 Implémentation du modèle moyenné

Dans cette section, le système d'équations (2.63)

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) &= 0, \\ \partial_t (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u + p \mathbb{I}) &= 0, \\ \partial_t (\xi \rho) + \nabla \cdot (\xi \rho u) - J \cdot \nabla \xi &= 0,\end{aligned}$$

sera discrétisé pour être simulé numériquement. La même approche pourra être utilisée pour le modèle (2.65). Cependant, ce dernier n'a pas été établi aussi rigoureusement et présente quelques difficultés supplémentaires (voir la Remarque 4.1). Les paragraphes de cette section et les cas tests qui suivent se focaliseront donc sur le modèle (2.63).

Remarque 4.1. La discrétisation par la méthode des volumes finis de ce type de modèle n'est pas capable de simuler l'advection linéaire à vitesse constante d'une discontinuité de contact entre deux fluides différents sans créer d'oscillations de pression parasites [Abg96]. Dans le cas du modèle isotherme ou de conditions initiales avec une température homogène, les oscillations de pression créées par le code sont de l'ordre d'une dizaine de Pascal pour une pression de l'ordre de 1 bar. Elles sont suffisamment faibles pour ne pas avoir d'influence sur le résultat du calcul. Cependant, dans le cas de l'advection linéaire d'une discontinuité de contact entre deux phases à des températures différentes (par exemple, une bulle de gaz chaud dans un liquide froid), des oscillations de pressions non-négligeables apparaissent avec le modèle (2.65). L'hypothèse locale $T_g = T_l$ n'est certainement pas adaptée à la simulation de ce type de cas et un modèle plus complexe ne faisant pas cette hypothèse simplificatrice, comme [KK10], pourrait donner de meilleurs résultats. Ce phénomène est une des raisons pour lesquelles le modèle isotherme sera privilégié dans les résultats numériques avec changement de phase qui suivent. ◁

Le programme utilisé pour la résolution numérique du système hyperbolique est basé sur le travail de [Rov06]. Les étapes principales sont présentées à la Figure 4.1. La plus grande partie du code est une boucle : à chaque itération, la solution au pas de temps $t^{n+1} = t^n + \Delta t_n$ est calculée à partir de la solution au pas de temps t^n . La boucle s'arrête quand le nombre maximum de pas de temps ou un temps final fixé est atteint. Dans la suite de cette section, certaines de ces étapes seront discutées plus en détails.

Variables et loi d'état

Le code travaille avec deux jeux de variables :

- D'une part les variables conservatives, notées v , sont celles qui apparaissent directement dans le système de lois de conservation. Par exemple, $v = (\rho, \rho u, \xi \rho)$.

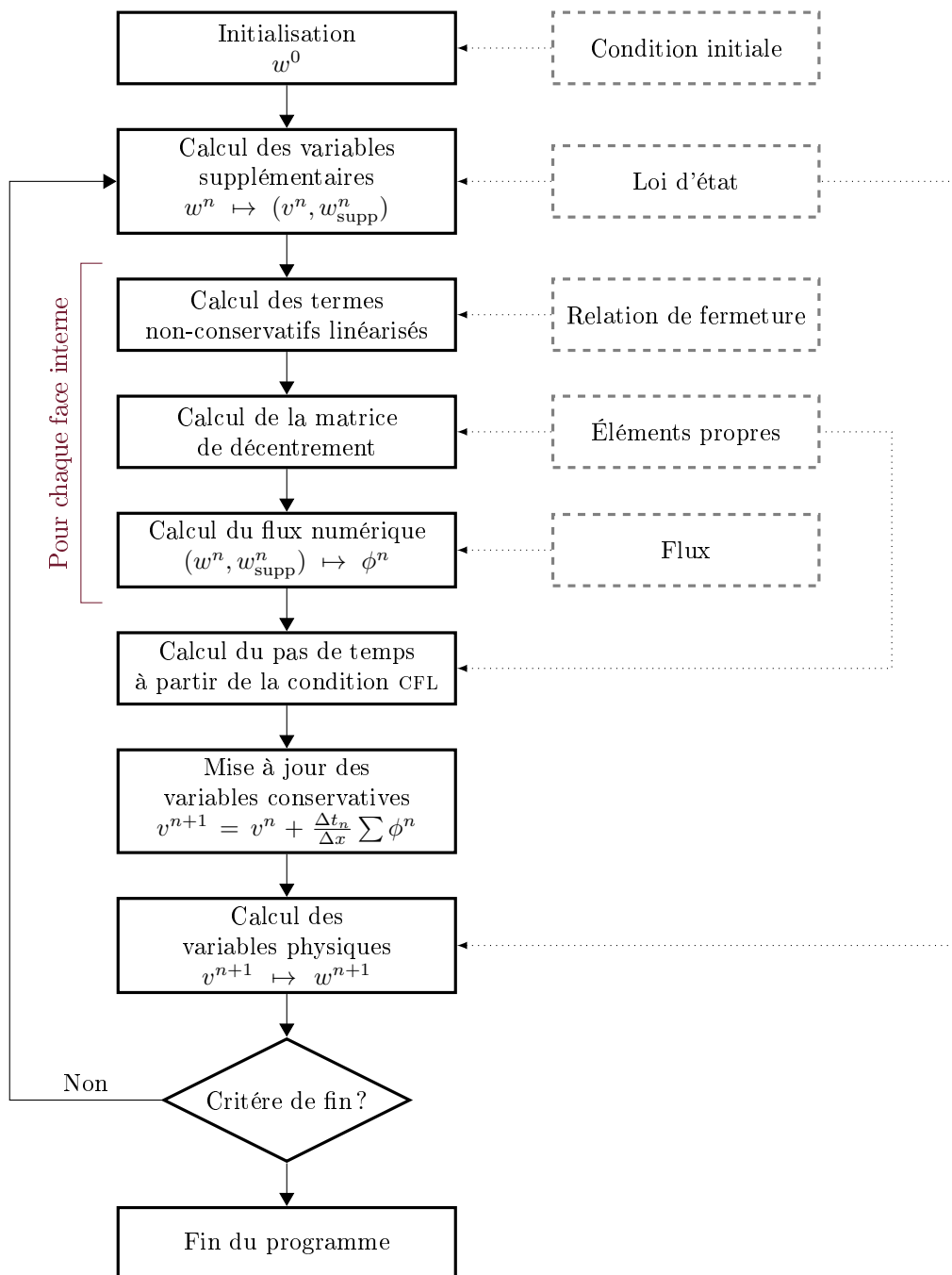


FIGURE 4.1 – Schéma général du code. À gauche, les principales étapes du code. À droite, les modules qui changeront d'un cas test à l'autre. Par souci de simplicité, les faces de bord (conditions aux limites) n'ont pas été incluses dans le diagramme.

- D'autre part, les variables dites de calcul, notées w , sont celles d'intérêt physique qui seront données par l'utilisateur en conditions initiales et retournées à la fin du calcul. Ici, le jeu de variable $w = (p, u, \xi)$ sera utilisé.

Dans le diagramme de la Figure 4.1, l'appellation « Loi d'état » désigne

- la loi d'état du fluide dans le cas monofluide,
- l'ensemble des lois d'états des fluides et de la loi de mélange dans le cas multi-fluide.

Dans les deux cas il s'agit des relations qui relient w et v .

Le code demande la donnée d'une fonction $w \mapsto v$. La fonction inverse peut être calculée numériquement par la méthode de Newton. Alternativement, dans le cas simple d'un mélange isotherme et isobare de deux gaz parfaits ou gaz raidis, la fonction $v \mapsto w$ peut se ramener à la résolution d'un polynôme d'ordre 2. L'Annexe D présente le détail de ce résultat.

Termes non-conservatifs

Le calcul du flux numérique à l'interface demande une linéarisation du terme $J \cdot \nabla \xi$ comme évoqué à la Section 3.3. Celle-ci se fera en deux temps. On rappelle que J est défini comme le flux de masse porté par la normale unitaire à l'interface. La norme et la direction de J pourront être approchées séparément

$$J \cdot \nabla \xi = J_{l \rightarrow g} \nu_{l \rightarrow g} \cdot \nabla \xi \simeq \nabla \cdot (J_{l \rightarrow g, j+1/2} \xi \nu_{l \rightarrow g, j+1/2}).$$

Cas 1D

En 1D, la normale à l'interface $\nu_{l \rightarrow g}$ vaut ± 1 . À l'interface $j + 1/2$, le flux de masse est calculé par la relation cinétique associée au modèle :

$$J_{j+1/2} := \begin{cases} \mathcal{J}_{l \rightarrow g}(w_j, w_{j+1}) & \text{si } \xi_j < \xi_{j+1} \text{ (le liquide est à gauche),} \\ -\mathcal{J}_{l \rightarrow g}(w_{j+1}, w_j) & \text{si } \xi_j > \xi_{j+1} \text{ (le gaz est à gauche),} \end{cases} \quad (4.1)$$

où $\mathcal{J}_{l \rightarrow g}$ est une relation cinétique de changement de phase comme discutée à la Section 2.2. Dans le cas isotherme, la relation cinétique

$$\mathcal{J}_{l \rightarrow g}(p_g, p_l) \propto -(p_g - p^{\text{sat}}(T_0))$$

qui est un cas particulier de (2.32), pourra être utilisée.

Cas multidimensionnel

Comme en 1D, on fait l'approximation

$$\forall x \in K_L \cup L_K, \quad J \cdot \nabla \xi \simeq \nabla \cdot (J_{K,L} \xi).$$

La difficulté par rapport au cas 1D est d'estimer $\nu_{l \rightarrow g}$ la normale à l'interface locale. Celle-ci peut être estimée simplement à l'aide des valeurs de ξ dans les deux mailles voisines K et L . Elle vaudra alors toujours

$$\nu_{l \rightarrow g} = \pm \nu_{K,L}. \quad (4.2)$$

Cette approximation grossière peut détériorer la qualité de la solution comme le montrera le cas test de la Section 4.4.2.

Pour une résolution plus précise, la normale à l'interface $\nu_{l \rightarrow g} \simeq \frac{\nabla \xi}{|\nabla \xi|}$ pourra être estimées numériquement par

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{(\xi_{\text{NE}} - \xi_{\text{NW}}) + (\xi_{\text{SE}} - \xi_{\text{SW}})}{4} \quad (4.3a)$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial y} = \frac{(\xi_{\text{NW}} - \xi_{\text{SW}}) + 2(\xi_{\text{N}} - \xi_{\text{S}}) + (\xi_{\text{NE}} - \xi_{\text{SE}})}{4} \quad (4.3b)$$

où les notations sont celles de la Figure 4.2. Le gradient selon x peut être interprété comme une moyenne des différences de ξ aux quatre faces verticales de la Figure 4.2. Celui selon y peut être interprété comme une moyenne pondérée des différences de ξ aux trois faces horizontales. L'étude plus précise de ce type de discrétisation (comme leur comportement aux bords du domaine ou leur extension à d'autres maillages) est en dehors du cadre de cette thèse.

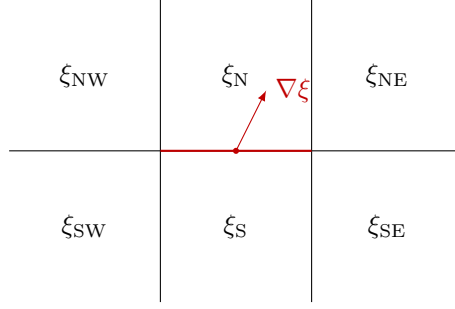


FIGURE 4.2 – Notation pour l’estimation du vecteur normale à l’interface liquide-vapeur en 2D sur un maillage cartésien. Ici, on cherche à linéariser le terme de changement de phase à l’interface entre les mailles N et S.

Flux numérique

Le détail de la matrice jacobienne et de ces éléments propres peut être tiré des résultats de l’Annexe B. On l’appliquera au schéma l amont défini à la Section 3.2.2. Pour le calcul du signe des valeurs propres on utilise la Remarque 3.20 pour la vitesse et une moyenne $\frac{w_G + w_D}{2}$ pour les autres grandeurs.

4.2 Implémentation dans le schéma à reconstruction d’interface

Dans cette section, l’implémentation du modèle de changement de phase interfacial dans le code décrit à la Section 3.5, va être présentée plus en détails. Une gestion des condensats simples (c’est-à-dire ne contenant qu’une seule interface) a été pour implémentée dans le code de [Rov06] décrit à la section précédente. Cette implémentation a pour but de servir de preuve de concept pour la discrétisation du terme de changement de phase. Par la suite, elle sera nommée « Flux-IC-1D ».

4.2.1 Flux numérique et schéma

Au chapitre précédent, le Lemme 3.27 a montré que le flux numérique à l’interface lagrangienne est un schéma VFFC l amont pour le système lagrangien isentropique. Pour généraliser cette idée, le flux numérique à l’interface va être écrit comme le flux numérique du schéma VFFC pour le système lagrangien avec changement de phase.

Suivant la même philosophie que précédemment pour la gestion des termes non-conservatifs, le système (2.41) est linéarisé de la façon suivante :

$$d_t^\omega \tau + \partial_x(-u + J_{\text{int}}\tau) = 0, \quad (4.4a)$$

$$d_t^\omega u + \partial_x(p + J_{\text{int}}u) = 0, \quad (4.4b)$$

$$d_t^\omega E + \partial_x(pu + J_{\text{int}}E) = 0, \quad (4.4c)$$

$$d_t^\omega \xi = 0, \quad (4.4d)$$

où J_{int} est une estimation du flux de masse à l’interface liquide-vapeur entre t et $t + \Delta t$. Sa valeur sera discutée dans un prochain paragraphe. Par souci de lisibilité, ce flux sera noté simplement J par la suite.

Ce système s’écrit sous la forme d’un système de lois de conservation

$$d_t v + \partial_x(F + G) = 0,$$

où

$$v = \begin{pmatrix} \tau \\ u \\ E \\ \xi \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} -u \\ p \\ pu \\ 0 \end{pmatrix}, \quad G = J \begin{pmatrix} \tau \\ u \\ E \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Ce système et la matrice jacobienne associée sont étudiés plus en détails à l’Annexe C.

En utilisant le schéma l amont sur ce système, un flux numérique lagrangien peut être calculé sous la forme

$$\begin{aligned} \psi_{\text{int}}(v_G, v_D) = & \\ & \frac{F_G + F_D}{2} + \text{sgn} \left(\frac{\partial F + G}{\partial v} \right) (v_G, v_D) \frac{F_G - F_D}{2} + \\ & \frac{G_G + G_D}{2} + \text{sgn} \left(\frac{\partial F + G}{\partial v} \right) (v_G, v_D) \frac{G_G - G_D}{2}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Le schéma ne définit pas la matrice signe dans le cas où une valeur propre est nulle, c'est-à-dire quand $J = 0$. Dans ce cas sans changement de phase, le flux (3.36) pourra être utilisé.

Remarque 4.2. Le terme $\frac{\partial p}{\partial \xi_{\rho, e}}$ n'apparaît pas dans ψ_{int} . Comme pour le problème de Riemann étudié à la Section 2.4, le choix d'un modèle de mélange est utile mathématiquement mais n'a pas d'influence sur le résultat final. \triangleleft

Remarque 4.3. Dans le cas simple $p_G = p_D = p$, $u_G = u_D = 0$ et $J > 0$, le flux à l'interface s'écrit :

$$\psi_{\text{int}} = \begin{pmatrix} 0 \\ p \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + J \begin{pmatrix} \tau_D \\ 0 \\ e_D \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{J}{\rho_G c_G + \rho_D c_D} \left[c_G \left(1 - \frac{\rho_G}{\rho_D} \right) + \frac{\Gamma_G}{c_G} (h_D - h_G) \right] \begin{pmatrix} -1 \\ \rho_D c_D \\ p \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Bien que les deux phases aient toutes deux une quantité de mouvement nulle, une quantité de mouvement non nulle est échangée à l'interface. En effet, la masse ayant nouvellement changé de loi d'état se détend (évaporation) ou se contracte (condensation). Une discrétisation de type pas fractionnaires, séparant le terme de changement de phase du reste, n'aurait donné que les deux premiers termes de (4.6). En pratique, le troisième terme est nécessaire à la stabilité de la solution pour de petits rapports de densité ou des chaleurs latentes élevées.

Le flux d'énergie peut se réécrire sous la forme

$$\psi_{\text{int}}^E = Jh_D - p\psi_{\text{int}}^\tau.$$

Il correspond donc à l'enthalpie de la masse changeant de phase à laquelle s'ajoute le travail des forces de pression lors de la détente/contraction. \triangleleft

Cette dernière relation peut se généraliser sous la forme du résultat suivant.

Lemme 4.4. *Quels que soient les états gauche et droit, le flux numérique ψ respecte*

$$\psi_{\text{int}}^E = Jh_K - p_K \psi_{\text{int}}^\tau - p_K u_K + \psi_{\text{int}}^u u_K, \quad (4.7)$$

où l'état K est l'état droit D si $J < 0$, l'état gauche G si $J > 0$ (c'est-à-dire le liquide en cas d'évaporation et le gaz en cas de condensation).

Démonstration. La relation (3.11) définissant le schéma l amont est appliquée à la seconde valeur propre $\lambda_2 = J$:

$$\begin{pmatrix} p_K \\ -u_K \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \psi_{\text{int}} = \begin{pmatrix} p_K \\ -u_K \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} (F_K + G_K),$$

d'où on tire la relation voulue. \square

Remarque 4.5. Pour décrire un échange de chaleur entre les deux couches du condensat, un terme de flux d'énergie q_{int} peut être ajouté à ψ_{int} . On verra à la section suivante que celui-ci peut être nécessaire pour garantir la condition d'entropie en cas de changement de phase. \triangleleft

De la même manière que pour (3.37), le schéma s'écrit

$$\Delta x_G^{n+1} = \Delta x_G^n - \Delta t \psi_{\text{int}}^\tau, \quad (4.8a)$$

$$(\Delta x \rho)_G^{n+1} = (\Delta x \rho)_G^n - \Delta t \left[J - \phi_{G-1/2}^\rho \right], \quad (4.8b)$$

$$(\Delta x \rho u)_G^{n+1} = (\Delta x \rho u)_G^n - \Delta t \left[\psi_{\text{int}}^u - \phi_{G-1/2}^{\rho u} \right], \quad (4.8c)$$

$$(\Delta x \rho E)_G^{n+1} = (\Delta x \rho E)_G^n - \Delta t \left[\psi_{\text{int}}^E - \phi_{G-1/2}^{\rho E} \right], \quad (4.8d)$$

et de même symétriquement pour la maille D . Par construction, on a $\xi_G^{n+1} = \xi_G^n$ et $\xi_D^{n+1} = \xi_D^n$.

4.2.2 Bilan d'entropie

On a vu précédemment que de la diffusion thermique est nécessaire pour obtenir une solution physique. La diffusion numérique est néanmoins suffisante pour obtenir une solution ayant un sens physique. Dans cette section, un bilan d'entropie discret, incluant les effets du schéma, va être établi pour valider le respect par J du Second Principe de la Thermodynamique.

Suivant l'exemple de la Section 3.5.2, la condition d'entropie peut s'écrire :

$$\begin{aligned} 0 &\leq d_t^u s = (d_t^\omega s - \rho(\omega - u)\partial_x s) \\ &= \frac{\partial s}{\partial v} d_t^\omega v + J \partial_x s \\ &= -\frac{\partial s}{\partial v} \partial_x (F + G) + J \partial_x s. \end{aligned}$$

Elle peut être discrétisée sous la forme

$$\int_G^D \left(-\frac{\partial s}{\partial v} \partial_x (F + G) - J \partial_x s \right) dx \simeq \left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_G (F_G + G_G - \psi_{\text{int}}) + \left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_D (\psi_{\text{int}} - F_D - G_D) + J (s_D - s_G). \quad (4.9)$$

Le schéma proposé ici ne permet pas une étude facile de ce bilan d'entropie dans le cas général (voir aussi Remarque 3.28). Cependant, une expression pour J pourra être proposée en étudiant le bilan d'entropie dans le cas particulier où seul le changement de phase entre en jeu (comme par exemple à la Remarque 4.3).

Lemme 4.6. *On suppose $p_G = p_D = p$ et $u_G = u_D = 0$. Le flux numérique ψ_{int} respecte*

$$\left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_G (F_G + G_G - \psi_{\text{int}}) + \left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_D (\psi_{\text{int}} - F_D - G_D) = J \frac{h_G - h_D}{T_K},$$

où

$$T_K = \begin{cases} T_G & \text{si } J < 0, \\ T_D & \text{si } J > 0. \end{cases}$$

Démonstration. Mêmes arguments que le Lemme 4.4. □

Lemme 4.7. *Avec les mêmes hypothèses que précédemment, la condition d'entropie discrète (4.9) s'écrit*

$$J_{l \rightarrow g} \left(s_g - s_l + \frac{h_l - h_g}{T_k} \right) \geq 0, \quad (4.10)$$

où

$$T_k = \begin{cases} T_g & \text{si } J_{l \rightarrow g} < 0, \\ T_l & \text{si } J_{l \rightarrow g} > 0. \end{cases}$$

Démonstration. Avec le lemme précédent, la condition d'entropie discrète (4.9) s'écrit

$$J \left(s_D - s_G + \frac{h_G - h_D}{T_K} \right) \geq 0,$$

où

$$T_K = \begin{cases} T_G & \text{si } J < 0, \\ T_D & \text{si } J > 0. \end{cases}$$

Ce résultat peut être réécrit en remplaçant les états gauche G et droit D par les états gaz g et liquide l . Le flux J est relié au flux du liquide vers la gaz $J_{l \rightarrow g}$ par la relation

$$\begin{cases} J = J_{l \rightarrow g} & \text{si le liquide à gauche et le gaz à droite,} \\ J = -J_{l \rightarrow g} & \text{si le gaz est à gauche et le liquide à droite.} \end{cases}$$

On en déduit le résultat. □

Les bilans d'entropie de la Section 2.1.5 peuvent être réécrits comme

$$J_{l \rightarrow g}[s]_l^g + \frac{J_{l \rightarrow g}h_l - Q_{l \rightarrow g}}{T_l} - \frac{J_{l \rightarrow g}h_g - Q_{l \rightarrow g}}{T_g} \geq 0.$$

Le terme impliquant les enthalpies dans (4.10) peut être interprété comme le terme de création d'entropie d'un flux d'énergie de la forme

$$Q_{l \rightarrow g}^{\text{schéma}} = \begin{cases} J_{l \rightarrow g}h_l & \text{si } J_{l \rightarrow g} < 0, \\ J_{l \rightarrow g}h_g & \text{si } J_{l \rightarrow g} > 0. \end{cases}$$

Ce flux d'énergie à l'interface dépend du signe du flux de masse. C'est la conséquence naturelle de l'utilisation d'un schéma décentré amont. L'expression de $J_{l \rightarrow g}$ devra s'adapter à ce flux.

Pour utiliser une expression de $J_{l \rightarrow g}$ comme celle de (2.29), le flux d'énergie pourra être compenser par l'ajout d'un flux de chaleur entre les deux couches du condensat.

Théorème 4.8. *Les flux*

$$q_{\text{int}} = \begin{cases} J_{l \rightarrow g}(h_l - h_g) & \text{si } J_{l \rightarrow g} < 0, \\ 0 & \text{si } J_{l \rightarrow g} > 0. \end{cases} \quad J_{l \rightarrow g} = G_m \frac{\mu_l(p_l, T_l) - \mu_g(p_g, T_l)}{T_l}, \quad (4.11)$$

avec $G_m \geq 0$, respectent la condition d'entropie.

Démonstration. On vérifie que

$$Q_{l \rightarrow g} = Q_{l \rightarrow g}^{\text{schéma}} + q_{\text{int}} = J_{l \rightarrow g}h_g.$$

On utilise alors les mêmes arguments qu'au Théorème 2.12. □

Le cas test de retour à l'équilibre présenté à la Section 4.5 permettra de valider numériquement ce résultat.

4.3 Diffusion thermique implicite 1D

Dans le dernier cas test de ce chapitre, la diffusion thermique sera prise en compte. Le flux de chaleur et le reste des flux seront résolus séparément par la méthode des pas fractionnaires.

Le calcul du flux de chaleur seul se décompose en deux étapes :

— D'une part, l'équation de la chaleur

$$\partial_t T = \beta \partial_x^2 T,$$

où β est la diffusivité thermique, est discrétisée de manière implicite sous la forme

$$T_j^{n+1,*} = T_j^n + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left(-\beta_{j-1/2} \left(T_j^{n+1,*} - T_{j-1}^{n+1,*} \right) + \beta_{j+1/2} \left(T_{j+1}^{n+1,*} - T_j^{n+1,*} \right) \right).$$

Le calcul de $T^{n+1,*}$ se fait par la résolution d'un système linéaire tridiagonal.

- L'évolution de T par la formule précédente ne respecte en général pas la conservation des grandeurs qui doivent l'être. Pour garantir la conservativité du schéma, le champ de température $T^{n+1,*}$ va être utilisé pour calculé les flux de chaleurs implicites $q^{n+1,*}$,

$$q_{j+1/2}^{n+1,*} = -\frac{k_{j+1/2}}{\Delta x} (T_{j+1}^{n+1,*} - T_j^{n+1,*}).$$

où k est la conductivité thermique. Ces flux seront utilisés pour le calcul de nouvelles variables conservatives :

$$v_j^{n+1} = v_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{j-1/2}^{n+1,*} - q_{j+1/2}^{n+1,*}).$$

Remarque 4.9. Dans le cas particulier de la résolution de l'équation de diffusion linéaire scalaire, on vérifie que la deuxième étape est inutile. \triangleleft

4.4 Cas tests isothermes

Dans cette section, l'implémentation du modèle de changement de phase décrite précédemment va être validée par quelques cas tests simples. Les premiers cas tests proposés ci-après sont isothermes. Cette hypothèse simplificatrice va permettre de valider le cœur du modèle. L'aspect thermique, moins bien contrôlé, sera présenté à la section suivante.

4.4.1 Changement de phase forcé isotherme 1D

Le premier cas test présenté ici à pour objectifs de tester la capacité du code à

- décrire une interface franche avec changement de phase,
- gérer une large gamme de rapports de densité DR.

Pour se concentrer sur ces points, l'évolution sera supposée isotherme et le flux de masse à l'interface sera décorrélé du reste du système. Grâce à ces hypothèses, une solution analytique sera obtenue et comparée à la solution numérique.

Description

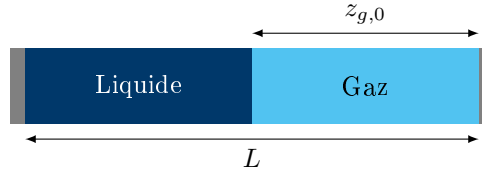


FIGURE 4.3 – Condition initiale du cas test.

On considère un tube de section S et de longueur L , fermé aux deux extrémités. Il est rempli initialement d'un volume $S \times z_{g,0}$ de gaz et $S \times (L - z_{g,0})$ de liquide (voir Figure 4.3). Ces deux phases suivent respectivement des lois d'états de gaz parfait isotherme et de gaz raidi isotherme, c'est-à-dire :

$$\rho_g(p) = \frac{p}{c_{g,0}^2}, \quad \rho_l(p) = \rho_{l,0} + \frac{p - p_0}{c_{l,0}^2},$$

où $c_{g,0}$ et $c_{l,0}$ sont les vitesses du son constantes respectivement du gaz et du liquide. Enfin, un flux d'évaporation $J_{l \rightarrow g}(t)$ est donné arbitrairement à l'interface.

Solution analytique

On suppose une pression uniforme dans tout le domaine.

Lemme 4.10. Les lois d'état des deux fluides isothermes peuvent se réécrire comme

$$\frac{\rho_g}{\rho_{g,0}} = \frac{p}{p_0}, \quad \frac{\rho_l}{\rho_{l,0}} = 1 + \frac{\rho_{g,0} c_{g,0}^2}{\rho_{l,0} c_{l,0}^2} \left(\frac{p}{p_0} - 1 \right).$$

Théorème 4.11. *Pour tout t , la pression est solution de :*

$$\left(1 + \text{DR} \frac{c_{g,0}^2}{c_{l,0}^2} \left(\frac{p(t)}{p_0} - 1\right)\right) \left(\tilde{L} - \frac{1 + \widehat{m}(t)}{p(t)} p_0\right) - \tilde{L} + 1 + \text{DR} \widehat{m}(t) = 0 \quad (4.12)$$

où \tilde{L} et DR sont respectivement les rapports d'aspect et de densité définis par

$$\tilde{L} = \frac{L}{z_{g,0}}, \quad \text{DR} = \frac{\rho_{g,0}}{\rho_{l,0}},$$

et $\widehat{m}(t)$ est la masse échangée adimensionnée

$$\widehat{m}(t) = \frac{1}{\rho_{g,0} z_{g,0}} \int_0^t J_{l \rightarrow g}(t) dt.$$

Démonstration. On note $z_g(t)$ la taille du domaine gazeux à l'instant t .

La conservation de la masse de liquide s'écrit alors :

$$\rho_l(L - z_g) = \rho_{l,0}(L - z_{g,0}) - \rho_{g,0} z_{g,0} \widehat{m}(t).$$

En divisant par $\rho_{l,0}$ et $z_{g,0}$, on en tire

$$\frac{\rho_l}{\rho_{l,0}} \left(\tilde{L} - \frac{z_g}{z_{g,0}}\right) = \tilde{L} - 1 - \text{DR} \widehat{m}(t).$$

Grâce à la loi d'état du liquide, on déduit

$$\left(1 + \text{DR} \frac{c_{g,0}^2}{c_{l,0}^2} \left(\frac{p}{p_0} - 1\right)\right) \left(\tilde{L} - \frac{z_g}{z_{g,0}}\right) = \tilde{L} - 1 - \text{DR} \widehat{m}(t).$$

Par ailleurs, l'évolution de la masse de gaz s'écrit :

$$\rho_g z_g = \rho_{g,0} z_{g,0} (1 + \widehat{m}(t)),$$

d'où, en utilisant la loi d'état du gaz

$$\frac{z_g}{z_{g,0}} = \frac{p_0}{p} (1 + \widehat{m}(t)).$$

La substitution de cette expression dans l'équation précédente donne le résultat voulu. \square

Remarque 4.12. Si DR = 1 ou $J_{l \rightarrow g}(t) = 0$, alors $p(t) = p_0$ est solution de (4.12). \triangleleft

En pratique pour les fluides étudiés, la compressibilité du liquide joue un rôle très faible. Elle pourra être négligée grâce au résultat suivant.

Corollaire 4.13. *En notant CR le rapport des indices de compressibilité, défini par*

$$\text{CR} = \frac{\rho_{g,0} c_{g,0}^2}{p_0} \times \frac{p_0}{\rho_{l,0} c_{l,0}^2} = \frac{\rho_{g,0} c_{g,0}^2}{\rho_{l,0} c_{l,0}^2},$$

la pression $p(t)$ peut s'écrire comme

$$p(t) = p_0 \frac{1 + \widehat{m}(t)}{1 + \text{DR} \widehat{m}(t)} + O(\text{CR}). \quad (4.13)$$

Démonstration. On peut réécrire (4.12) comme

$$-\frac{1 + \widehat{m}}{p(t)} p_0 + 1 + \text{DR} \widehat{m} + \text{CR} \left[\left(\frac{p(t)}{p_0} - 1\right) \left(\tilde{L} - \frac{1 + \widehat{m}}{p(t)} p_0\right) \right] = 0.$$

En multipliant cette expression par $p(t)/p_0$, on obtient le résultat voulu. \square

Choix de $J_{l \rightarrow g}$

On a choisi arbitrairement d'étudier un flux de masse de la forme $J_{l \rightarrow g} = A \sin(\omega t)$. Le choix de A et ω est régi par les contraintes suivantes :

- La pression doit rester positive (ainsi les densités restent positives). Pour cela, il suffit de choisir

$$A > 0. \quad (4.14a)$$

- La vitesse du fluide reste subsonique $\forall t, u(t) < c$. En majorant la vitesse maximale d'échappement du gaz, cette condition devient

$$\max(u_g) \leq \frac{\max(|J_{l \rightarrow g}|)}{\min(\rho_g)} = \frac{A}{\rho_{g,0}} < c_{g,0}. \quad (4.14b)$$

- Les variations de flux de masse sont assez lentes pour que l'hypothèse de la pression uniforme soit valide :

$$\omega \ll \frac{c_{g,0}}{L}. \quad (4.14c)$$

Forme adimensionnée

Les équation précédentes peuvent être réécrite sous forme adimensionnées. Les variables adimensionnées seront notées par un tilde. Elles sont définies par

$$z_g = z_{g,0} \tilde{z}_g, \quad \rho_g = \rho_{g,0} \tilde{\rho}_g, \quad \rho_l = \rho_{g,0} \tilde{\rho}_l, \quad t = \frac{z_{g,0}}{c_{g,0}} \tilde{t}, \quad p = \rho_{g,0} c_{g,0}^2 \tilde{p}, \quad J_{l \rightarrow g} = \rho_{g,0} c_{g,0} \tilde{J}_{l \rightarrow g}.$$

Les équations d'état deviennent

$$\tilde{\rho}_g = \tilde{p}, \quad \tilde{\rho}_l = \frac{1}{\text{DR}} (1 + \text{CR}(\tilde{p} - 1)).$$

Le flux de masse peut s'écrire

$$\tilde{J}_{l \rightarrow g} = \text{Ma} \sin(\tilde{\omega} \tilde{t}),$$

où

$$\tilde{\omega} = \frac{\omega z_{g,0}}{c_{g,0}}, \quad \text{Ma} = \frac{A}{\rho_{g,0} c_{g,0}}.$$

Ce dernier nombre dans dimension peut s'interpréter comme le nombre de Mach associé à la vitesse maximale du gaz de l'équation (4.14b).

Les conditions initiales s'écrivent sous forme adimensionnée

$$\tilde{p}(0, x) = 1, \quad \begin{cases} \xi(0, x) = 1 & \text{si } 0 < \tilde{x} < 1, \\ \xi(0, x) = 0 & \text{si } 1 < \tilde{x} < \tilde{L}. \end{cases}$$

Enfin, les conditions (4.14) deviennent

$$0 < \text{Ma} < 1, \quad \tilde{\omega} \tilde{L} \ll 1.$$

Le problème dépend donc de cinq paramètres, qui sont DR, CR, \tilde{L} , Ma et $\tilde{\omega}$. La Table 4.1 en propose des valeurs. Les valeurs de DR et CR sont inspirées des propriétés du couple eau-vapeur.

DR	10^{-3}
CR	$4 \cdot 10^{-5}$
\tilde{L}	2
Ma	0.1
$\tilde{\omega}$	0.05

TABLE 4.1 – Paramètres adimensionnés qui seront utilisés pour les résolutions numériques.

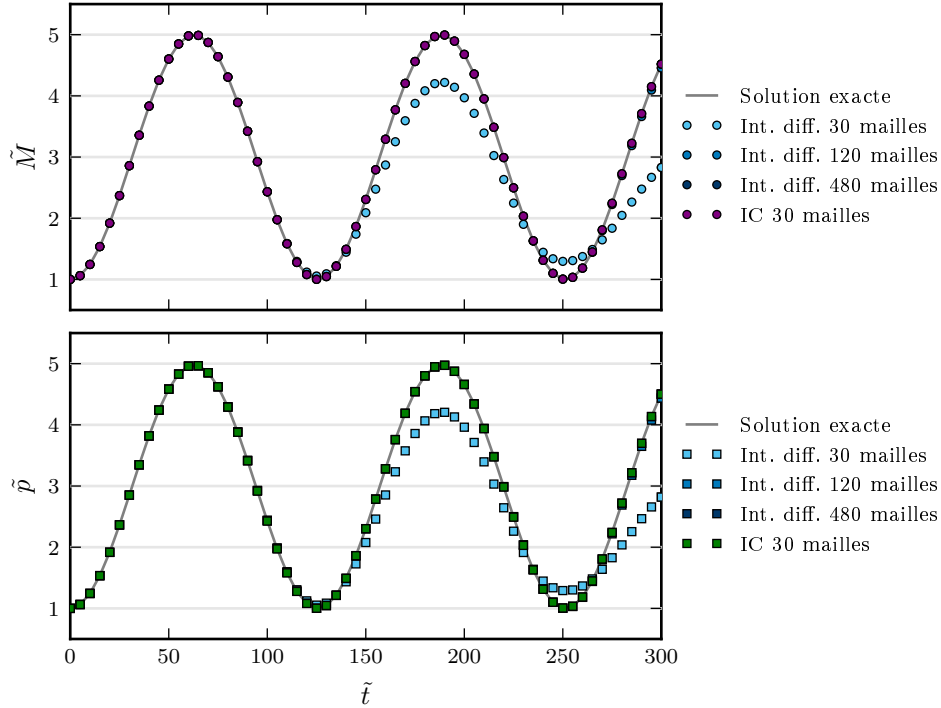


FIGURE 4.4 – Évolution de la masse totale de gaz adimensionnée (en haut) et de la pression adimensionnée au milieu du domaine (en bas) en fonction du temps pour le modèle moyenné à interface diffuse avec trois maillages de 30 à 480 mailles, le code Flux-IC-1D et la solution exacte. Les paramètres sont ceux de la Table 4.1. La période vaut $2\pi/\tilde{\omega} \simeq 125$.

Résultats et commentaires

Ce cas test a été résolu à la fois avec le modèle moyenné à interface diffuse et le code Flux-IC-1D à reconstruction d'interface et ceci pour différents maillages. Dans les deux cas le nombre CFL a été fixé à 0.8. Les résultats numériques ont été comparés à la solution analytique obtenue au Théorème 4.11.

La Figure 4.4 présente la variation au cours du temps de la masse totale de gaz et de la pression dans le domaine. Le liquide étant très dense et presque incompressible, le volume de gaz est presque constant et la pression est donc proportionnelle à la masse totale de gaz (égale en grandeurs adimensionnées). Tous les résultats numériques sont en très bon accord avec la solution exacte, à l'exception du modèle moyenné pour le maillage le plus grossier.

Ce défaut peut s'expliquer en observant le profil de fraction massique représenté à la Figure 4.5. Pour le maillage le plus grossier, la diffusion de l'interface l'a élargie jusqu'à atteindre la limite droite du domaine après une période. Dans cette situation, la masse de gaz échangée par changement de phase n'est plus la même ($\int |\nabla \xi| dx \neq 1$). Pour des maillages plus fins, la diffusion est réduite et ce biais n'apparaît plus avant la fin de la simulation.

Le code Flux-IC-1D retrouve comme attendu la position initiale exacte après une période. Avec le modèle moyenné, la diffusion de la fraction volumique α est relativement symétrique autour de la solution exacte. En raison du très faible rapport de densité, les profils de ξ et α apparaissent très différents.

Enfin, à la Figure 4.6, le profil de vitesse est tracé à un instant d'évaporation maximale. Du gaz s'échappe de l'interface vers la droite, c'est-à-dire avec une vitesse positive. La vitesse du liquide est presque nulle (le liquide est en fait très faiblement comprimé par l'augmentation de pression). À l'interface, une discontinuité de vitesse apparaît comme prédit à la Section 2.1.2. La condition limite aux parois y impose une vitesse nulle. Pour le modèle moyenné, la discontinuité de vitesse est diffuse, suivant un profil similaire à celui de ξ .

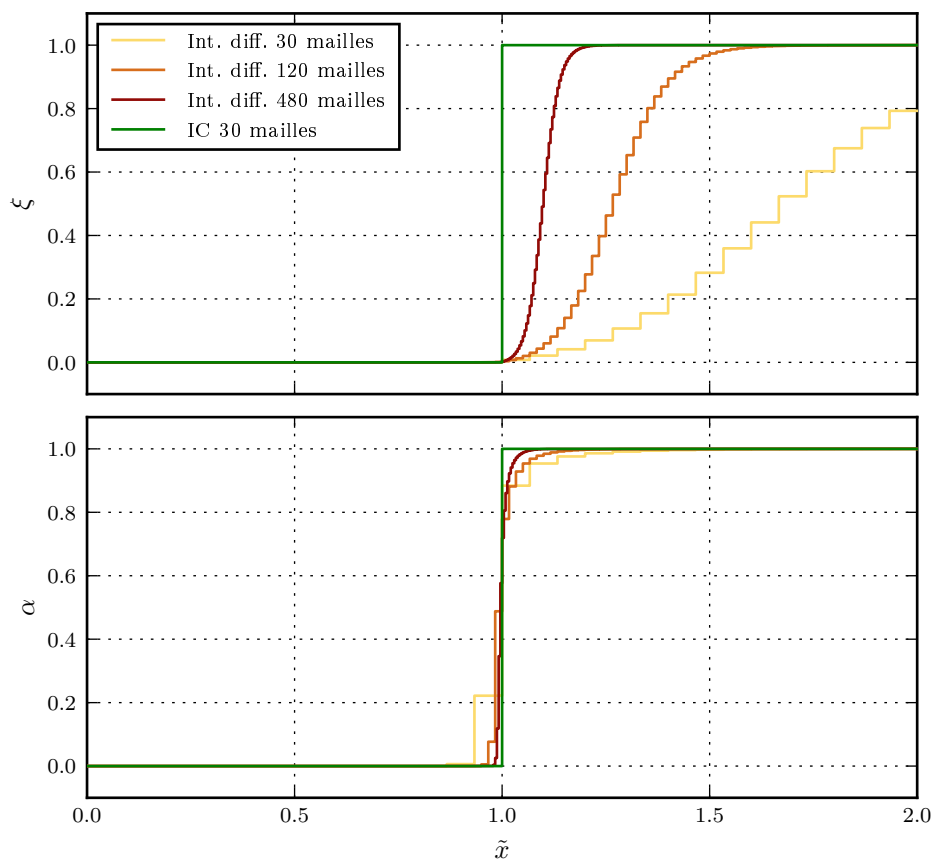


FIGURE 4.5 – Profils de fraction massique ξ et de fraction volumique α après une période, (c'est-à-dire à $\tilde{t} \simeq 125$) pour les différents calculs numériques. Les paramètres sont ceux de la Table 4.1.

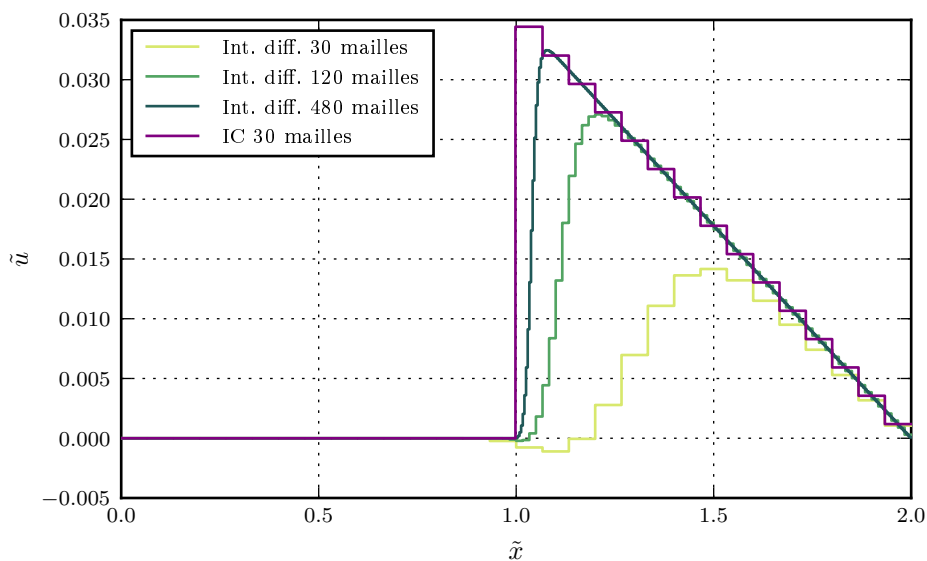


FIGURE 4.6 – Profils de vitesse adimensionnée à $\tilde{t} \simeq 155$ (c'est-à-dire après 5/4 de période, à un instant où le flux d'évaporation est maximal). Les paramètres sont ceux de la Table 4.1.

4.4.2 Changement de phase forcé isotherme 2D

Ce cas test est une extension du précédent en deux dimensions. On considère une bulle de gaz de rayon initial r_0 entourée de liquide (voir Figure 4.7). Comme pour le cas précédent, les fluides sont décrits par des lois d'état de gaz parfait et de gaz raidi isothermes. Le flux de masse surfacique à l'interface est donné par une expression arbitraire $J_{l \rightarrow g}(t)$.

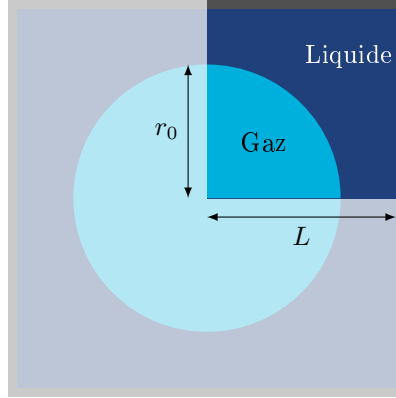


FIGURE 4.7 – Schéma du cas test de changement de phase forcé isotherme en 2D. Par symétrie, seul le quart nord-est du problème sera résolu numériquement.

Théorème 4.14. *En supposant une pression homogène dans tout le domaine et un liquide dense et incompressible (c'est-à-dire $DR \simeq 0$ et $CR \simeq 0$), alors la pression respecte*

$$p = p_0 \left(1 + \frac{2}{\rho_{g,0} r_0} \int_0^t J_{l \rightarrow g}(t) dt \right). \quad (4.15)$$

Démonstration. La conservation de la masse de liquide s'écrit

$$\rho_l (L^2 - \pi r(t)^2) = \rho_{l,0} (L^2 - \pi r_0^2) - \int_0^t 2\pi r(t) J_{l \rightarrow g}(t) dt.$$

Le liquide étant incompressible ($CR \simeq 0$), sa loi d'état implique $\rho_l = \rho_{l,0}$. On en déduit donc

$$r(t)^2 = r_0^2 + 2 \frac{1}{\rho_{l,0}} \int_0^t r(t) J_{l \rightarrow g}(t) dt.$$

La différenciation de cette équation implique

$$\frac{dr}{dt} = \frac{J_{l \rightarrow g}(t)}{\rho_{l,0}}$$

Pour $DR \simeq 0$, on a

$$\frac{dr}{dt} \simeq 0.$$

Par ailleurs, la conservation de la masse de gaz s'écrit :

$$\rho_g \pi r(t)^2 = \rho_{g,0} \pi r_0^2 + \int_0^t 2\pi r(t) J_{l \rightarrow g}(t) dt.$$

d'où, en prenant $\forall t, r(t) \simeq r_0$,

$$p = p_0 \left(1 + \frac{2}{\rho_{g,0} r_0} \int_0^t J_{l \rightarrow g}(t) dt \right).$$

□

Résultats et commentaire

Le problème est simulé numériquement à l'aide du modèle moyenné. La maquette Flux-IC-1D à reconstruction d'interface n'ayant pas été étendue en 2D au cours de cette thèse, le modèle à interface lagrangienne ne sera pas utilisé pour ce cas test.

Plusieurs calculs vont être effectués avec les mêmes paramètres que dans le cas 1D (voir Table 4.1). Les différentes discrétisations de la normale à l'interface liquide-vapeur (4.2) et (4.3) vont être comparées. Pour ce cas test la solution exacte est connue : le problème est à symétrie sphérique et la normale à l'interface est toujours

$$\nu_{l \rightarrow g} = \frac{1}{\sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}} \begin{pmatrix} x-x_0 \\ y-y_0 \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

où (x_0, y_0) est le centre de symétrie du problème. Cette troisième méthode pour le calcul de la normale à l'interface liquide-vapeur sera utilisée numériquement et comparée aux deux reconstructions (4.2) et (4.3).

Le choix de la discrétisation de $\nu_{l \rightarrow g}$ aura une influence sur le flux de masse total échangé à l'interface. En effet, l'approximation de l'orientation locale de l'interface influence la longueur totale. Ce phénomène est illustré sur la Figure 4.8 (dans le cas de la reconstruction d'ordre 1 (4.2)). Dans ce cas, la longueur effective de l'interface est $\frac{4}{\pi}$ fois plus grande que la longueur exacte. À flux de masse surfacique constant, la quantité totale de masse échangée sera donc plus importante. Les solutions numériques seront donc comparées à la fois à la solution analytique (4.15) et à l'expression suivante qui prend en compte ce biais :

$$p = p_0 \left(1 + \frac{2}{\rho_{g,0} r_0} \frac{4}{\pi} \int_0^t J_{l \rightarrow g}(t) dt \right). \quad (4.17)$$

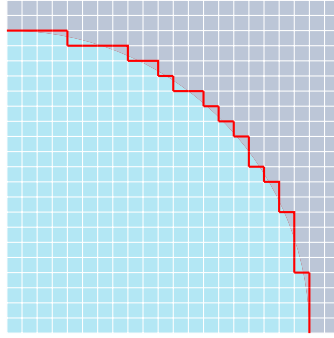


FIGURE 4.8 – Approximation d'un arc de cercle suivant un maillage cartésien. Si le rayon du cercle est 1, la longueur de l'interface discrète en rouge vaut toujours 2, quel que soit le niveau de raffinement. Elle ne converge pas vers la longueur réelle de l'interface, qui est $\pi/4$.

La Figure 4.9 présente l'évolution de la pression en fonction du temps pour différents maillages et différentes approximations de la normale à l'interface liquide-vapeur. Tous les calculs ont été faits avec $CFL = 0.25$.

Comme attendu la reconstruction de la normale à l'interface à l'ordre 1 (4.2) approche l'expression analytique biaisée (4.17). La reconstruction d'ordre 2 (4.3) donne un résultat plus proche de la solution exacte. Cependant, seule la valeur exacte de la normale donnée par (4.16) donne la pression de l'expression analytique (4.15).

La Figure 4.10 représente la distribution spatiale de ξ et α après une oscillation. La diffusion numérique affecte la surface interfaciale totale effective $\int |\nabla \xi| dx$. La quantité de masse échangée est donc réduite et les oscillations de pressions seront amorties après le premier pic.

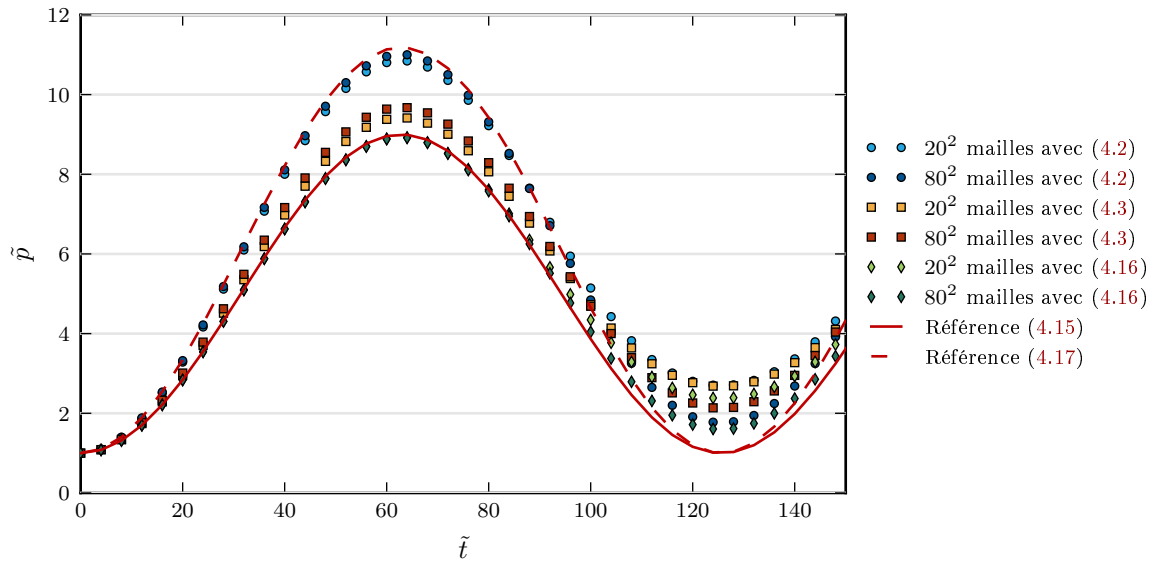


FIGURE 4.9 – Évolution de la pression adimensionnée (au centre du domaine) en fonction du temps adimensionné pour différents maillages et différentes approximations de la normale à l'interface liquide-vapeur. Les courbes rouges en lignes continues et discontinues sont les solutions de référence.

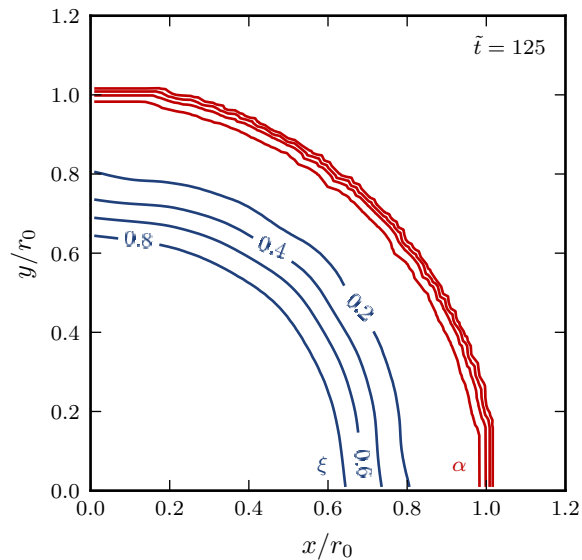


FIGURE 4.10 – Lignes de niveau de la fraction massique ξ en bleu et de la fraction volumique α en rouge après une période ($\tilde{t} = 125$) pour un maillage de 80×80 mailles avec la discrétisation (4.2). À comparer à la Figure 4.5.

4.4.3 Problème de Riemann isotherme avec changement de phase

Dans le cas isotherme, des solutions exactes au problème de Riemann avec changement de phase ont été calculées par [HDW13]. Ces solutions vont être comparées à la solution approchée donnée par notre code. Ce cas test permet de valider la capacité du code à gérer un terme d'échange $J_{l \rightarrow g}$ non trivial.

Présentation du cas test

Les conditions initiales sont celles d'un problème de Riemann avec deux fluides purs dans des phases différentes. Les états initiaux à droite de à gauche sont notés respectivement (u_G, p_G) et (u_D, p_D) . Les états constants apparaissant entre les ondes sont notés (u_G^*, p_G^*) et (u_D^*, p_D^*) (voir Figure 4.11). Deux jeux de paramètres et de conditions initiales seront étudiés. Ils sont résumés dans la Table 4.2.

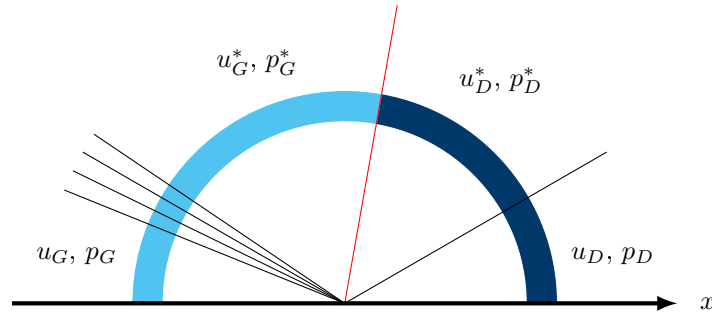


FIGURE 4.11 – Représentation schématique d'une solution au problème de Riemann pour le modèle isotherme.

Comme précédemment, les fluides sont décrits respectivement par la loi d'état de gaz parfait isotherme et de gaz raidi isotherme :

$$\rho_g(p) = \frac{p}{c_{g,0}^2}, \quad \rho_l(p) = \rho_{l,0} + \frac{p - p_0}{c_{l,0}^2},$$

où $c_{g,0}$ et $c_{l,0}$ sont les vitesses du son constante des deux fluides. Avec les notations de [HDW13], elles s'écrivent

$$c_{g,0}^2 = \frac{k_B T_0}{m}, \quad c_{l,0}^2 = \frac{K_0}{\rho_{l,0}}$$

où k_B est la constante de Boltzmann ($k_B = 1.381 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$), m est la masse d'une molécule d'eau ($m = 2.99 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$), T_0 et $\rho_{l,0}$ sont des états de références, et K_0 est la compressibilité isotherme du liquide. Les valeurs de ces paramètres sont donnés dans la Table 4.2.

La relation cinétique est celle donnée par [HDW13, éq. (5.23)]. Avec les grandeurs définies ci-dessus, elle s'écrit implicitement :

$$J_{l \rightarrow g} = \frac{p_g}{c_{g,0}^3 \sqrt{2\pi}} \left[c_{l,0}^2 \ln \frac{\rho_l}{\rho_{l,0}} - c_{g,0}^2 \ln \frac{p_g}{p_0} + \frac{1}{2} \frac{J_{l \rightarrow g}^2}{\rho_l^2} - \frac{1}{2} \frac{J_{l \rightarrow g}^2}{\rho_g^2} \right]. \quad (4.18)$$

Cette équation ayant en général deux solutions, c'est la solution la plus petite en valeur absolue qui a été choisie lors du calcul de $J_{l \rightarrow g}$ à chaque pas de temps.

Remarque 4.15. En faisant des approximations similaires à celles de la Section 2.2, ce flux de masse se réduit à

$$J_{l \rightarrow g} \simeq -\frac{p_g}{p_0 c_{g,0} \sqrt{2\pi}} (p_g - p_0).$$

Cette forme est similaire à celle utilisée dans le reste de la thèse dans le cas isotherme. ◀

	Cas Test 1	Cas Test 2
Paramètres		
T_0	K	293.15
$\rho_{l,0}$	kg m ⁻³	998.2
p_0	Pa	2339
K_0	Pa	2151 · 10 ⁶
$c_{g,0}$	m s ⁻¹	367.9
$c_{l,0}$	m s ⁻¹	1478
DR		1.001 · 10 ⁻³
Conditions initiales		
u_G	m s ⁻¹	-100
u_D	m s ⁻¹	100
p_G	Pa	2300
p_D	Pa	1000
Conditions initiales adimensionnées		
\tilde{u}_G		-0.2718
\tilde{u}_D		0.2718
\tilde{p}_G		0.9833
\tilde{p}_D		0.4275

TABLE 4.2 – Données pour les deux cas tests tirés de [HDW13]

Forme adimensionnée

Comme pour le cas test précédent, les équations peuvent être adimensionnées par rapport à la pression p_0 , à la densité $\rho_{g,0}$ et à la vitesse $c_{g,0}$. Les lois d'états s'écrivent alors

$$\tilde{\rho}_g = \tilde{p}, \quad \tilde{\rho}_l = \frac{1}{\text{DR}} (1 + \text{CR}(\tilde{p} - 1)),$$

et on peut reformuler la relation cinétique (4.18) comme

$$\tilde{J}_{l \rightarrow g} = \frac{\tilde{\rho}_g}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{c_{l,0}^2}{c_{g,0}^2} \ln(\text{DR} \tilde{\rho}_l) - \ln \tilde{p}_g + \frac{\tilde{J}_{l \rightarrow g}^2}{2} \left(\frac{1}{\text{DR}^2 \tilde{\rho}_l^2} - \frac{1}{\tilde{\rho}_g^2} \right) \right], \quad (4.19)$$

ou encore, avec l'aide de la loi d'état :

$$\tilde{J}_{l \rightarrow g} - \frac{\tilde{J}_{l \rightarrow g}^2}{2} \frac{\tilde{p}_g}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{(1 + \text{CR}(\tilde{p}_l - 1))^2} - \frac{1}{\tilde{p}_g^2} \right] = \frac{\tilde{p}_g}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{c_{l,0}^2}{c_{g,0}^2} \ln \left(1 + \text{DR} \frac{c_{g,0}^2}{c_{l,0}^2} (\tilde{p}_l - 1) \right) - \ln \tilde{p}_g \right].$$

Résultats et commentaires

Le modèle moyenné monovitesse n'a pas été capable de résoudre ce cas test, et ceci que ce soit avec ou sans changement de phase. Cela est probablement dû à l'hypothèse monovitesse plutôt qu'au modèle de changement de phase.

Les deux cas ont été résolus avec Flux-IC-1D, sur un maillage de 100 mailles. Sur tout le domaine en dehors du condensat, une reconstruction MUSCL d'ordre 2 en espace a été utilisé. Le pas de temps fixe correspond à un nombre de Courant voisin de 0.45.

Les Figures 4.12, 4.13, 4.14 et 4.15 présentent les profils de pression et de vitesse pour les deux cas tests. Les résultats sont comparés au cas sans changement de phase, c'est-à-dire $J = 0$.

Les sauts de pression et de vitesse à l'interface décrits au Chapitre 2 sont clairement visibles. Dans les deux cas, la pression initiale est inférieure à la pression de saturation. Le cas avec changement de phase présente toujours une pression moyenne plus proche de la pression de saturation.

Dans la Table 4.3, les valeurs pour les états constants entre les ondes obtenues par ce calcul sont comparées aux valeurs données par [HDW13]. Les résultats sont concordant, sauf pour la pression à droite pour le premier jeu de paramètre, où un léger écart est notable.

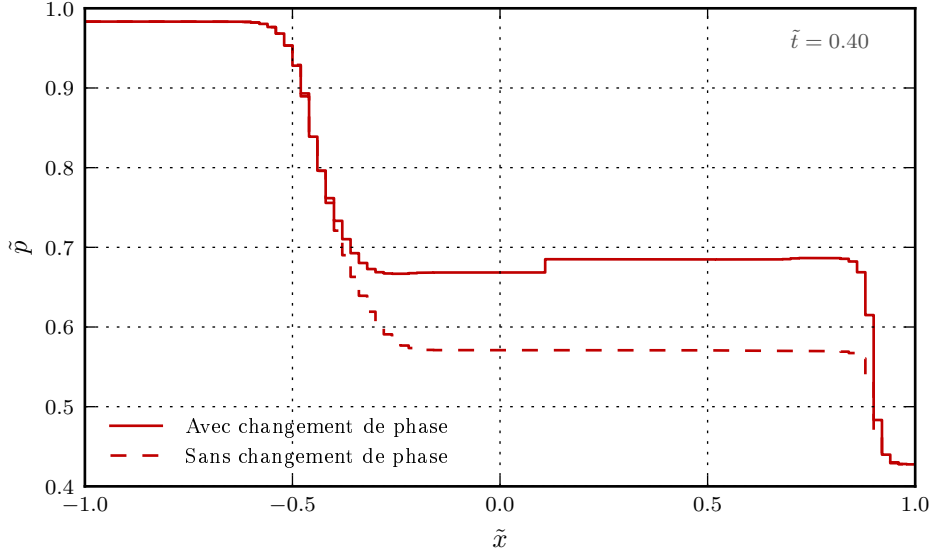


FIGURE 4.12 – Profil de pression adimensionnée pour le premier cas, avec et sans changement de phase.

	[HDW13]	Flux-IC-1D
Cas Test 1		
\tilde{u}_G^*	0.114	0.1144
\tilde{u}_D^*	0.2718	0.2719
\tilde{p}_G^*	0.667	0.6684
\tilde{p}_D^*	0.7263	0.6850
Cas Test 2		
\tilde{u}_G^*	-1.000	-1.013
\tilde{u}_D^*	-0.1067	-0.1059
\tilde{p}_G^*	0.0685	0.0689
\tilde{p}_D^*	0.1244	0.1257

TABLE 4.3 – Comparaison des valeurs entre les ondes.

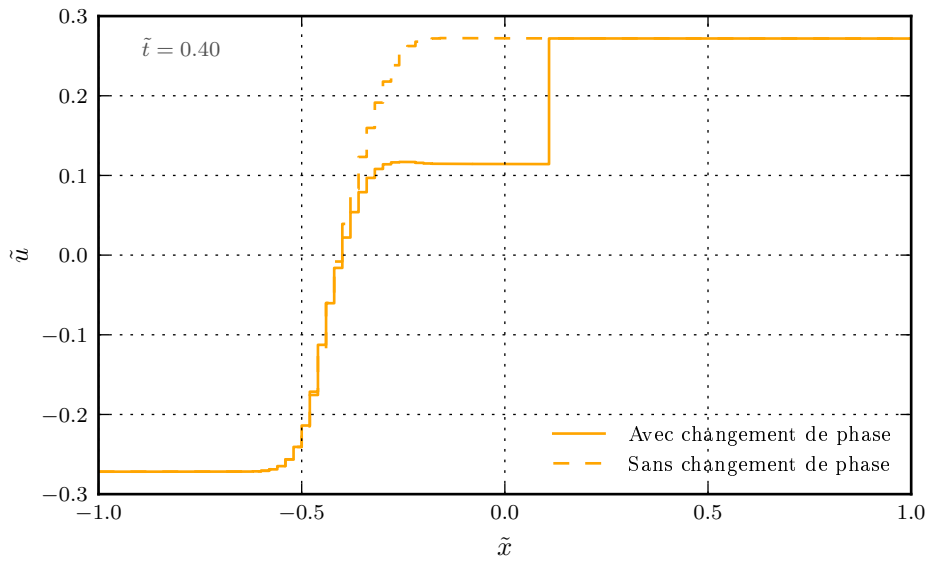


FIGURE 4.13 – Profil de vitesse adimensionnée pour le premier cas, avec et sans changement de phase.

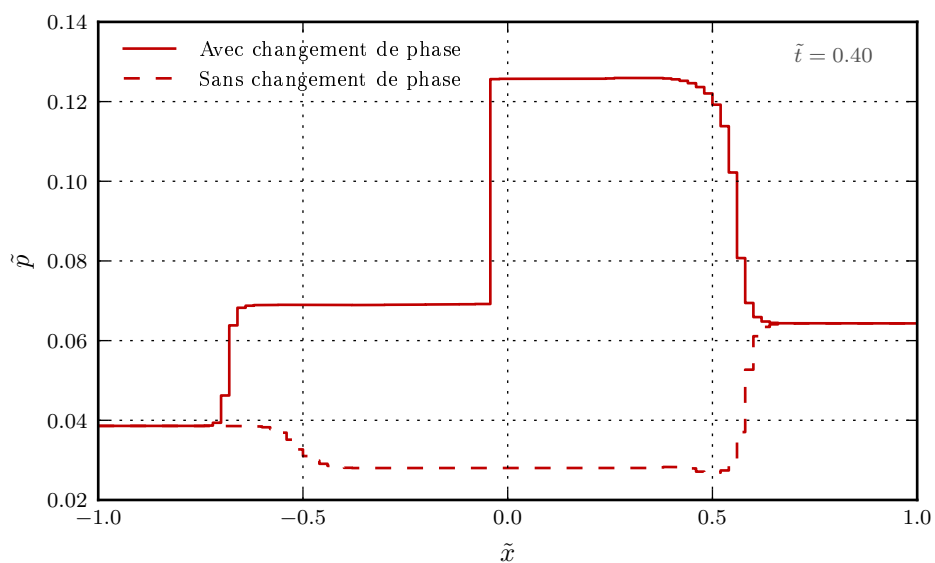


FIGURE 4.14 – Profil de pression adimensionnée pour le second cas, avec et sans changement de phase.

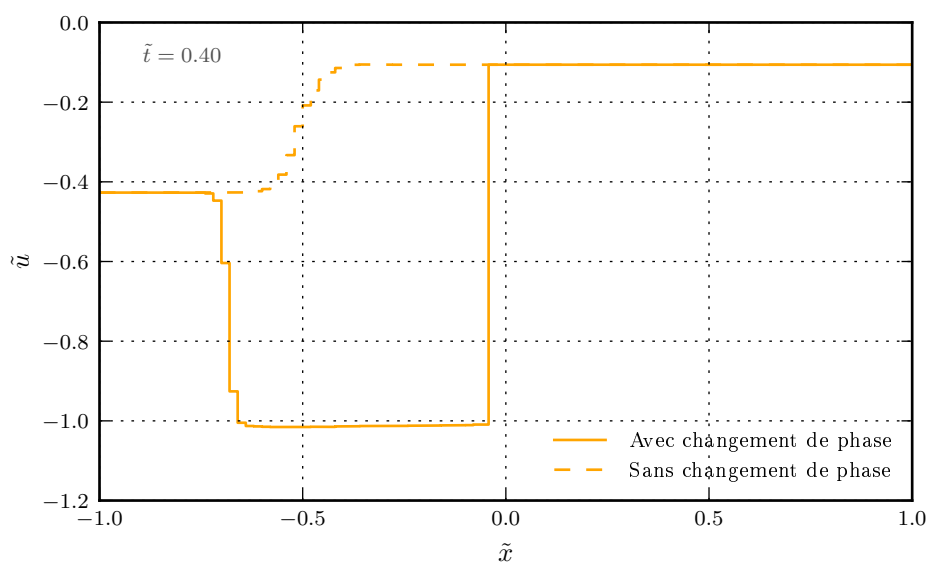


FIGURE 4.15 – Profil de vitesse adimensionnée pour le second cas, avec et sans changement de phase.

4.5 Cas tests de retour à l'équilibre liquide-vapeur

Dans les paragraphes qui précèdent, quelques cas test isothermes ont été présentés. Pour conclure ce chapitre, l'hypothèse isotherme va être levée et des résultats impliquant l'aspect thermique vont être présentés.

4.5.1 Diffusion numérique seule

Dans un premier temps, la capacité de la diffusion numérique à régulariser le système va être vérifiée. Son effet sur les résultats obtenus sera mise en évidence par les calculs qui suivent.

Description

Les conditions initiales sont similaires à celles du cas test 4.4.1, représentées à la Figure 4.3. Initialement, la pression p_0 et la température T_0 sont uniformes dans le domaine. On considérera deux températures initiales $T_0 = 100$ K et $T_0 = 120$ K respectivement inférieure et supérieure à la température de saturation $T^{\text{sat}}(p_0) = 111$ K. On s'intéresse à l'état du système après qu'une relaxation thermodynamique ait eu lieu à l'interface. Les lois d'état sont les lois de gaz parfait et de gaz raidis avec les paramètres de la Table 1.1.

Le choix d'une expression pour le flux de mass $J_{l \rightarrow g}$ est ici crucial. Les expressions proposées à la Section 4.2.2 seront appliquées ici. Le problème a été résolu avec le code Flux-IC-1D, avec CFL = 0.9.

Résultats et commentaires – Condensation

Pour la condition initiale $T_0 = 100$ K, l'évolution de la masse de gaz totale et de l'entropie totale ont été tracées à la Figure 4.16. Après quelques instants, l'état du système se stabilise : la masse totale de gaz a diminué, l'entropie totale a augmenté. L'état final atteint n'est pas le même suivant le maillage, bien qu'il corresponde toujours à un état d'équilibre local à l'interface, comme représenté sur la Figure 4.18.

Sur la Figure 4.17, le profil de température à la fin de la relaxation a été tracé. La diffusion thermique n'ayant pas été modélisée, rien ne permet l'équilibre thermique global. La variation de température dans le gaz provient uniquement de la variation de pression causée par la condensation. La température de la première maille de liquide à l'interface a changé en raison de la chaleur latente libérée par la condensation. Avec les relations cinétiques (4.11) c'est la température de cette maille qui détermine l'équilibre liquide-vapeur ($T = T^{\text{sat}}(p)$). La condition d'entropie a imposé un flux de chaleur tel que c'est cette maille qui reçoit la chaleur latente. Selon la taille de la maille la température évolue différemment pour une quantité d'énergie donnée. Son retour à l'équilibre local sera donc différent.

Cette dépendance au maillage peut s'interpréter comme une dépendance envers la diffusion thermique, qui apparaît ici sous forme d'artefact numérique. La nécessité d'une diffusion thermique a déjà été évoquée à la Remarque 2.7. Si le résultat converge quand la taille des mailles tend vers 0, ce résultat convergé n'est pas physique.

Résultats et commentaires – Évaporation

La Figure 4.19 présente l'évolution de la masse totale de gaz et de l'entropie totale pour la condition initiale $T_0 = 120$ K. La masse de gaz totale initiale est plus élevée que pour le cas de la condensation : en changeant la température initiale pour la même pression initiale, la densité du gaz a été modifiée.

La variation de l'entropie totale n'est pas strictement monotone. Cela peut s'expliquer par les nombreuses approximations qui ont été faites pour aboutir aux expressions de $J_{l \rightarrow g}$ et q . Le coût de la chaleur latente doit être payé en amont par le liquide pour que le flux $J_{l \rightarrow g}$ de (4.11) soit en accord avec le Second Principe de la Thermodynamique. La Figure 4.20 laisse penser que flux q choisi mésestime légèrement cette quantité de chaleur et une partie de la chaleur latente reste dans le gaz qui s'échappe de l'interface.

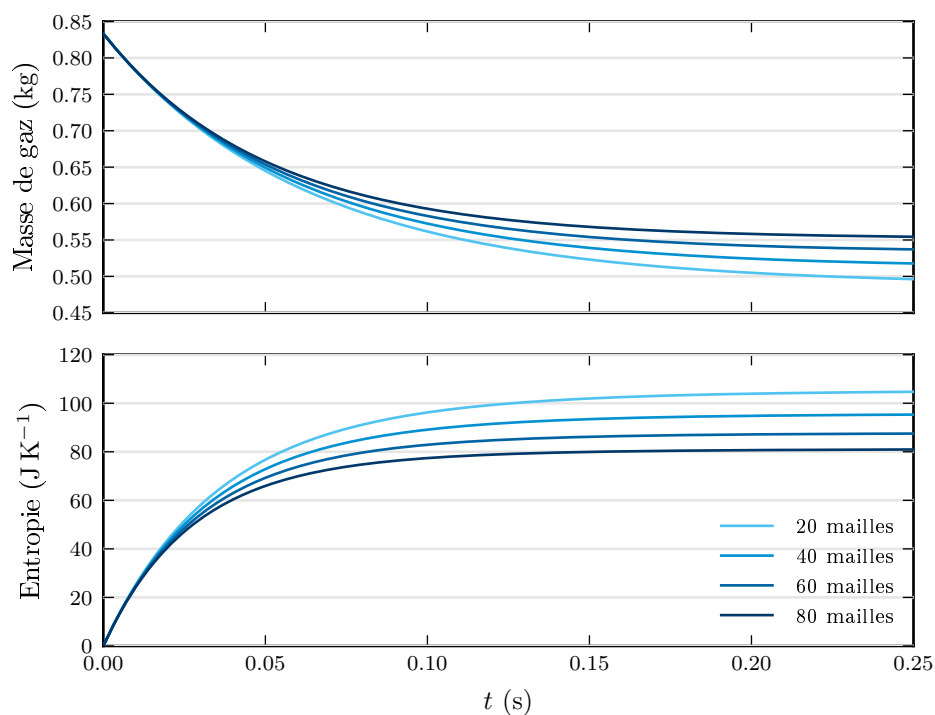


FIGURE 4.16 – Évolution de la masse totale de gaz et de l'entropie totale en fonction du temps pour le cas test de condensation ($T_0 = 100 \text{ K}$) pour différents maillages.

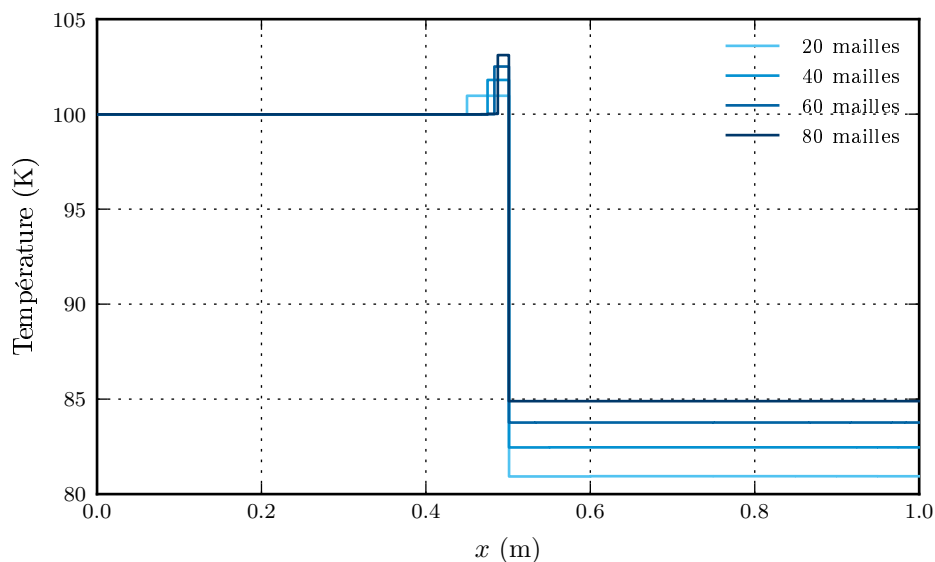


FIGURE 4.17 – Profil de température à la fin de la simulation pour le cas test de condensation ($T_0 = 100 \text{ K}$) pour différents maillages. La température du gaz sur la droite a diminué uniquement à cause de la variation de pression. La chaleur latente libérée pendant la condensation est dans la première maille de liquide à l'interface.

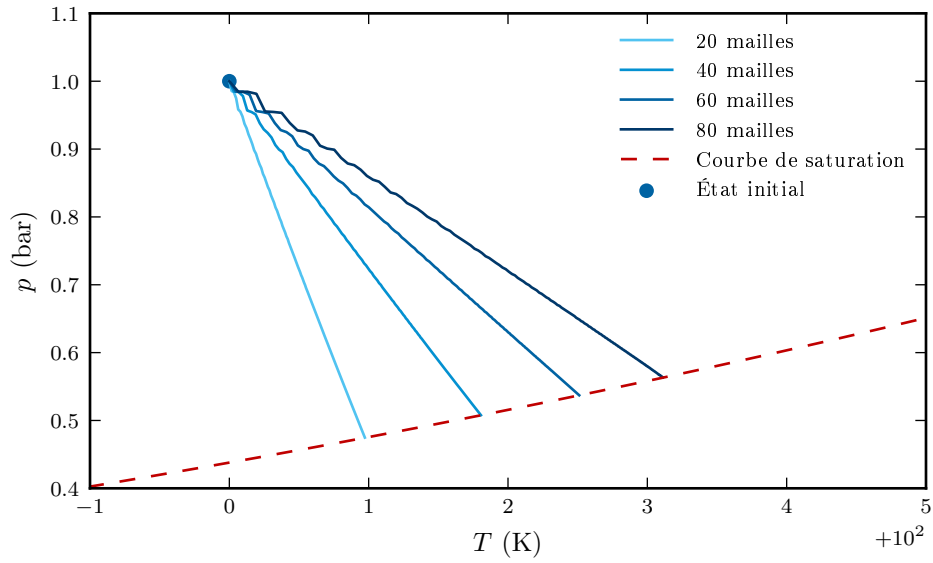


FIGURE 4.18 – Évolution de l'état de la première maille de liquide à gauche de l'interface dans un diagramme (T, p) pour différents maillages.

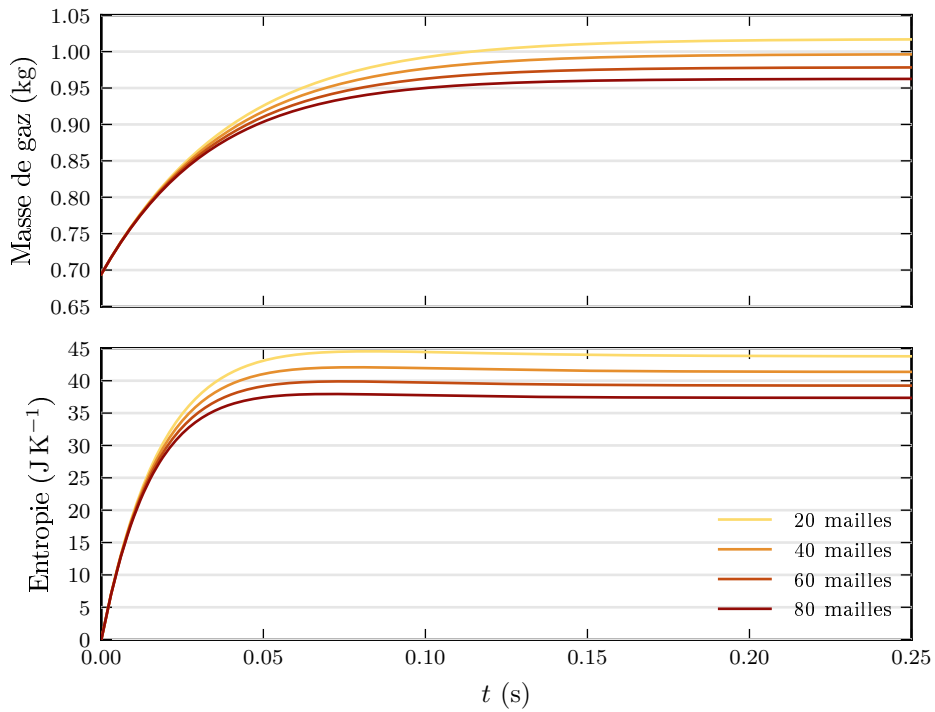


FIGURE 4.19 – Évolution de la masse totale de gaz et de l'entropie totale en fonction du temps pour le cas test d'évaporation ($T_0 = 120$ K) pour différents maillages.

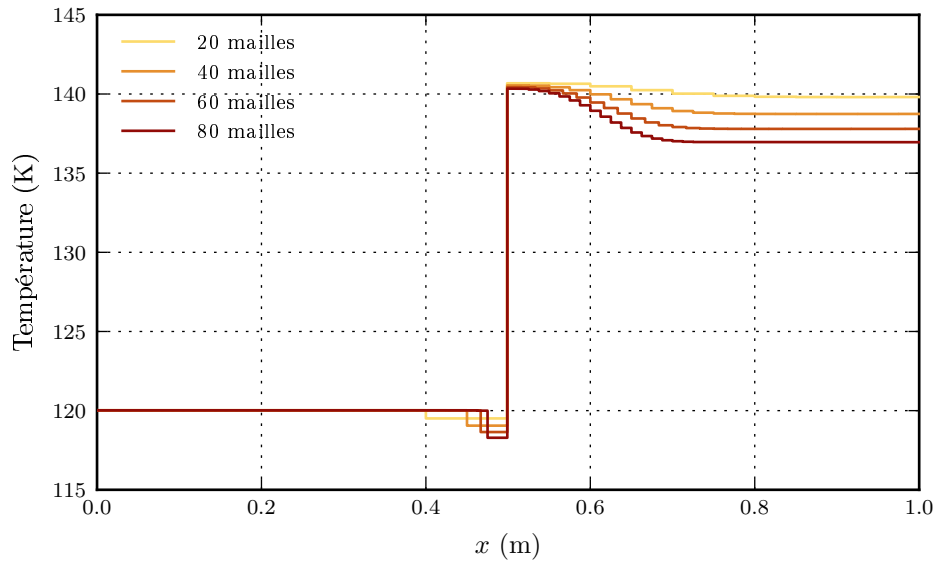


FIGURE 4.20 – Profil de température à la fin de la simulation pour le cas test d'évaporation ($T_0 = 120$ K) pour différents maillages.

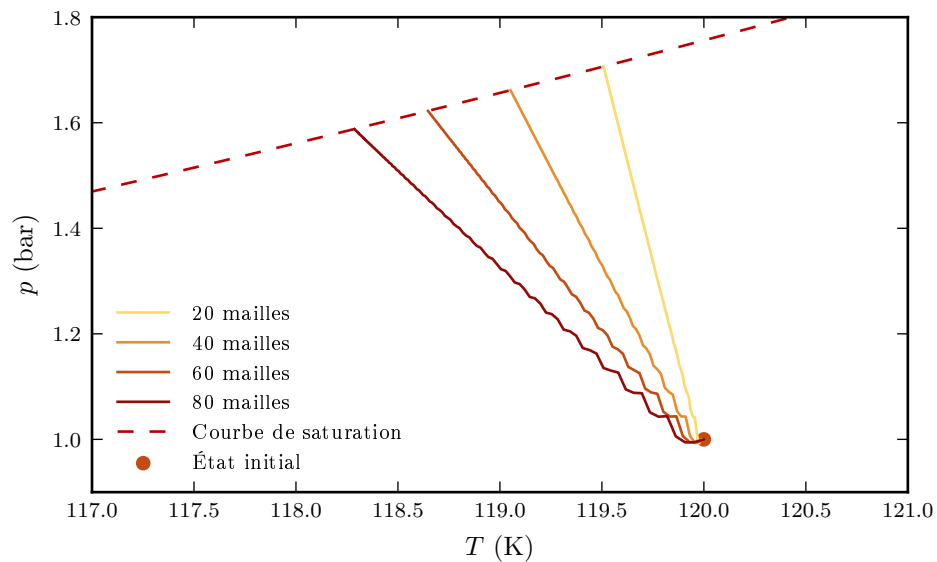


FIGURE 4.21 – Évolution de l'état de la première maille de liquide à gauche de l'interface dans un diagramme (T, p) pour différents maillages.

4.5.2 Convergence avec diffusion thermique

Dans ce paragraphe, l'effet d'une description plus réaliste de la conduction thermique va être étudié. La diffusion thermique physique sera discrétisée comme présenté à la Section 4.3.

La conductivité thermique a été choisie identique dans le gaz et le liquide par souci de simplicité. Sa valeur ($k = 100 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$) est élevée au regards de sa valeur physique pour l'eau ou le méthane, afin de mieux se démarquer de l'effet de la diffusion numérique. Le maillage va être raffiné progressivement afin de limiter l'effet de cette dernière.

Sur les Figures 4.22 et 4.24, l'évolution de la masse de gaz et de l'entropie totale ont été tracées en fonction du temps. Cette évolution se compose de deux phases, déjà évoquées à la Section 1.3 :

- Tout d'abord une relaxation à l'équilibre local à l'interface comme observé dans les résultats précédents.
- Ensuite, un régime permanent de changement de phase dominé par la conduction thermique. Le retour jusqu'à l'équilibre global dans le domaine est relativement long et n'a pas été tracé ici.

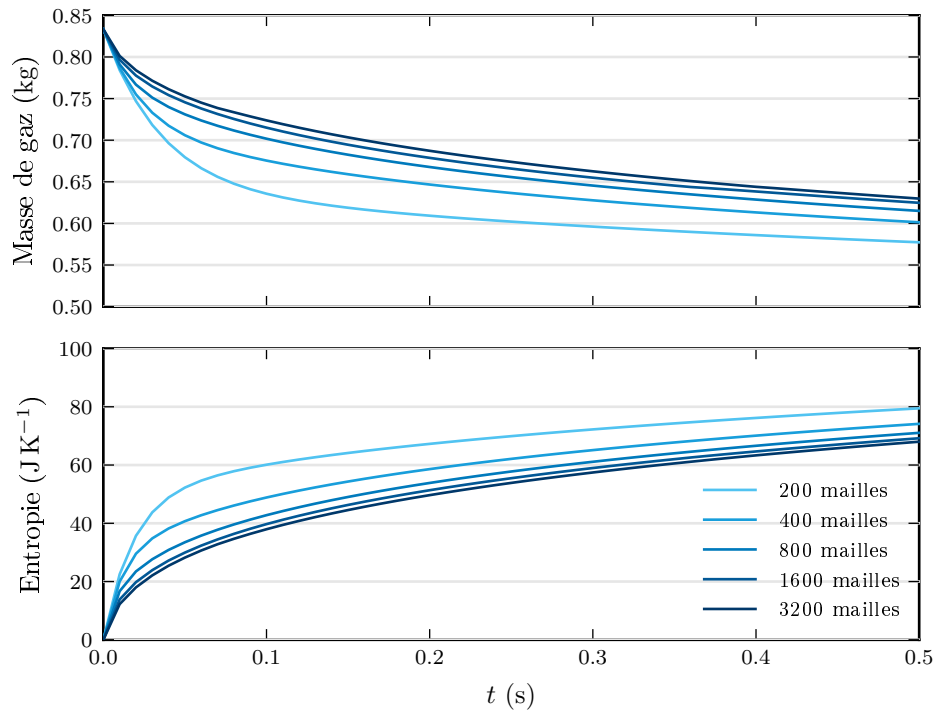


FIGURE 4.22 – Évolution de la masse totale de gaz et de l'entropie totale en fonction du temps pour le cas test de condensation ($T_0 = 100 \text{ K}$) pour différents maillages.

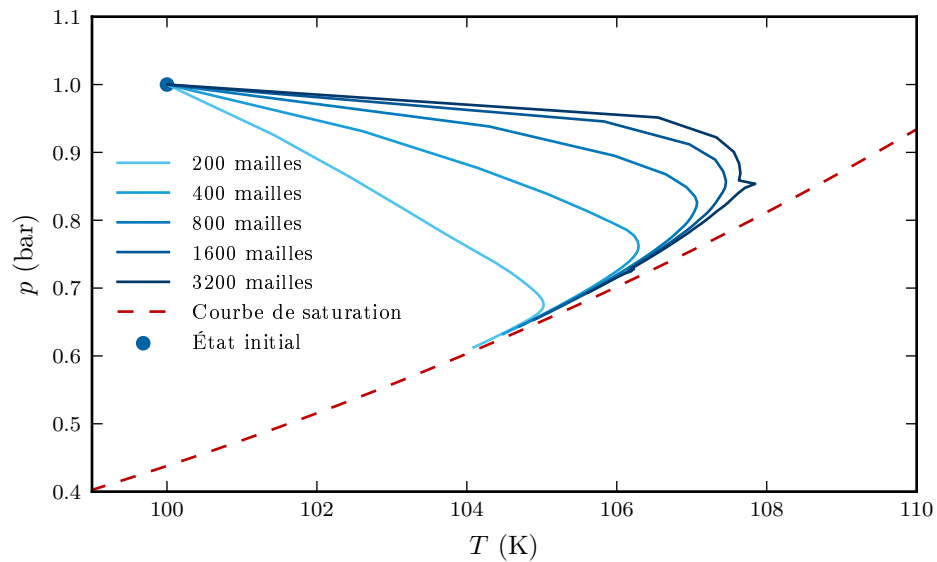


FIGURE 4.23 – Évolution de l'état de la première maille de liquide à gauche de l'interface dans un diagramme (T, p) pour différents maillages.

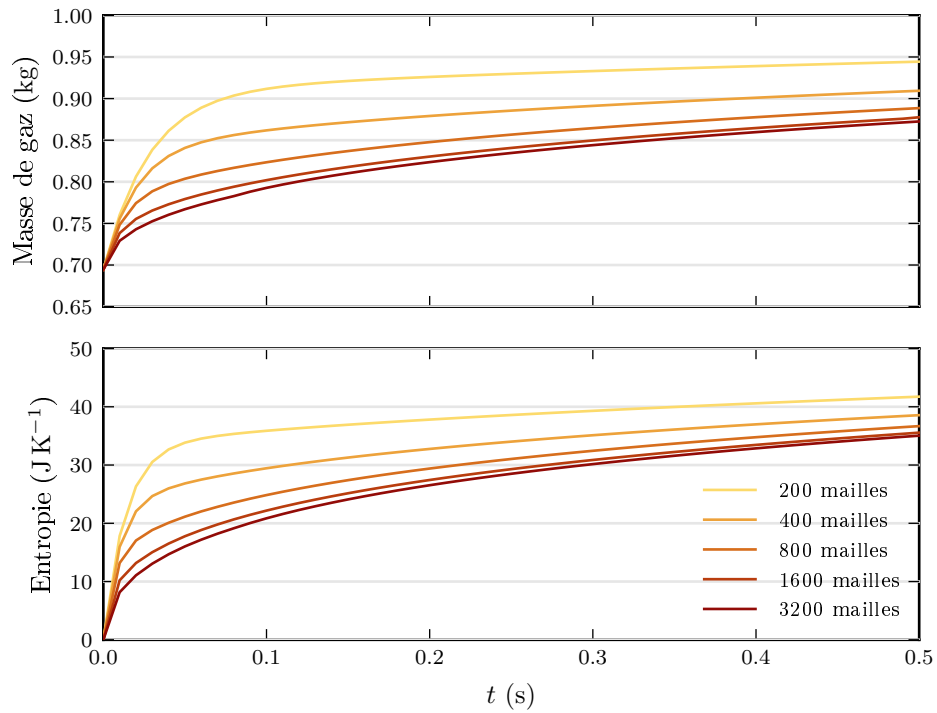


FIGURE 4.24 – Évolution de la masse totale de gaz et de l'entropie totale en fonction du temps pour le cas test d'évaporation ($T_0 = 120 \text{ K}$) pour différents maillages.

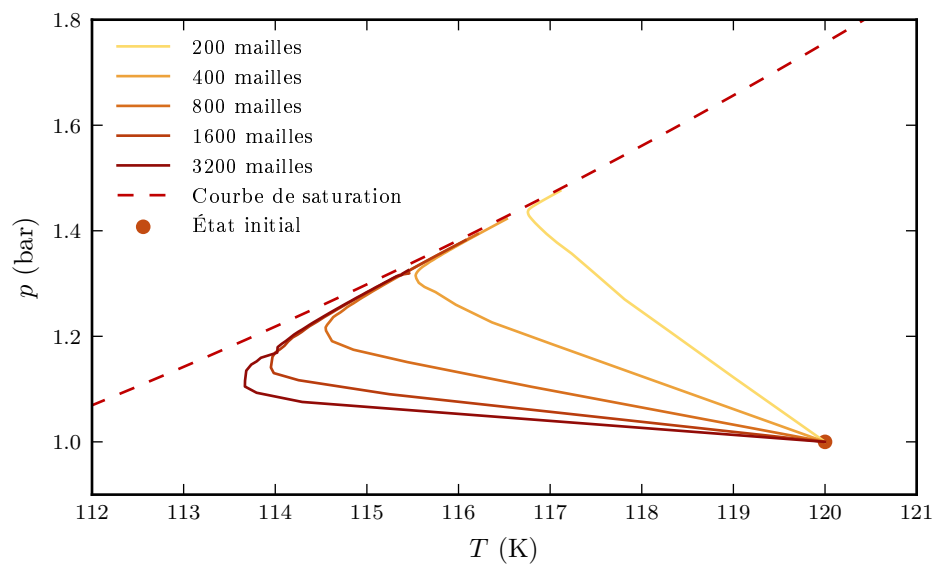


FIGURE 4.25 – Évolution de l'état de la première maille de liquide à gauche de l'interface dans un diagramme (T, p) pour différents maillages.

4.5.3 Effet de la conductivité thermique

Enfin, l'effet de la conductivité thermique k sur le retour à l'équilibre local est étudié. Si la vitesse du son est supposée suffisamment élevée pour garantir une pression homogène dans tout le domaine, la conductivité thermique impose la seule échelle spatiale. Les différentes valeurs de k utilisées ici peuvent donc aussi être vues comme des changements de la dimension du problème.

Le maillage se compose de 800 mailles. D'après les résultats précédent, ce maillage ne correspond pas à un résultat complètement convergé. Il est néanmoins suffisant pour observer l'influence de la diffusion thermique physique.

Les résultats sont présentés sur les Figures 4.26, 4.27, 4.28 et 4.29. Comme déjà pressenti en observant la diffusion numérique, une conductivité thermique plus importante conduit à un flux de masse par changement de phase plus important. L'évolution de l'état thermodynamique au voisinage de l'interface est plus proche de celle du retour à l'équilibre isotherme.

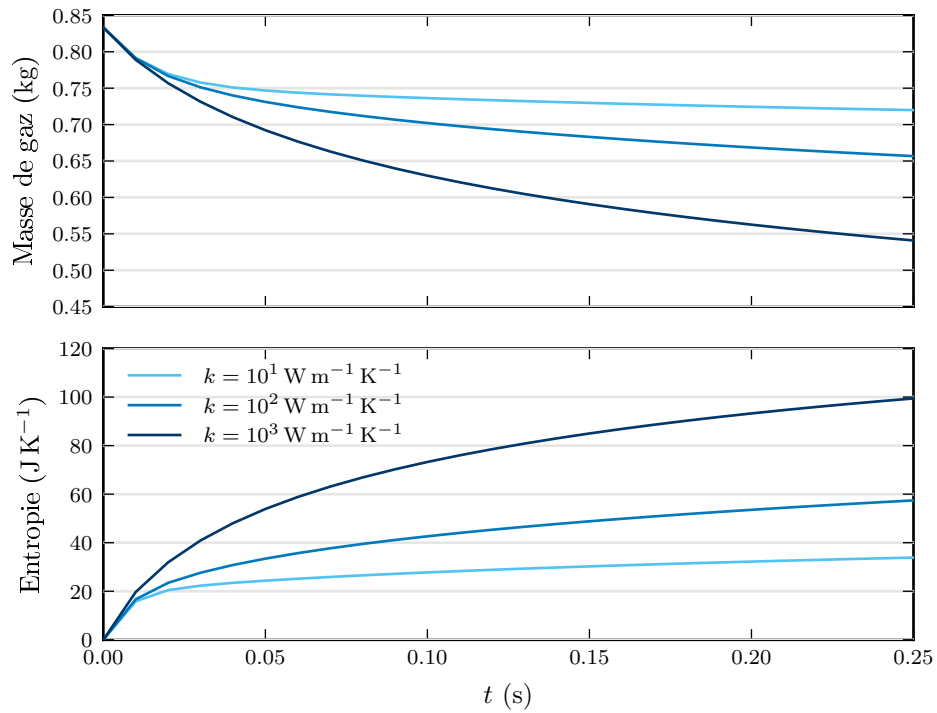


FIGURE 4.26 – Évolution de la masse totale de gaz et de l'entropie totale en fonction du temps pour le cas test de condensation ($T_0 = 100$ K) pour différentes conductivités thermiques.

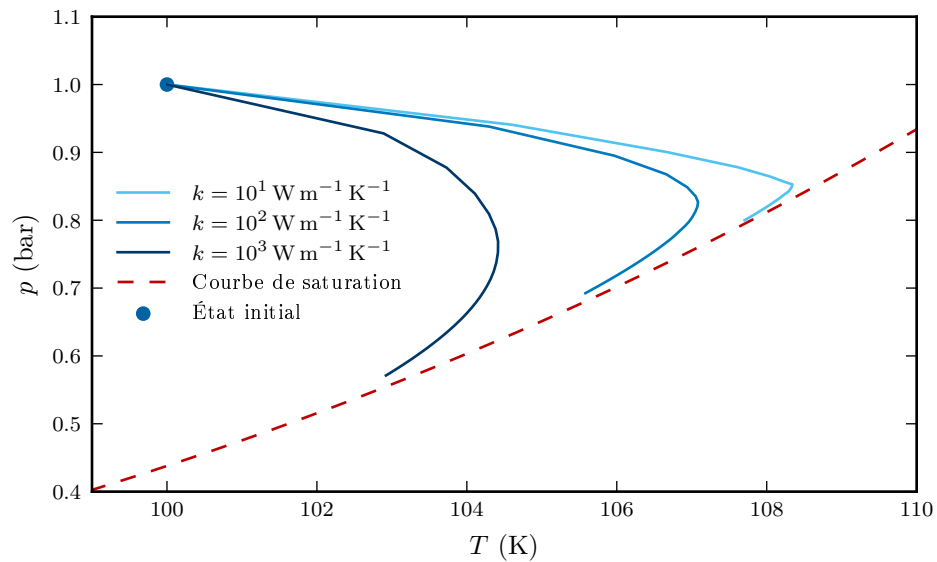


FIGURE 4.27 – Évolution de l'état de la première maille de liquide à gauche de l'interface dans un diagramme (T, p) pour différentes conductivités thermiques.

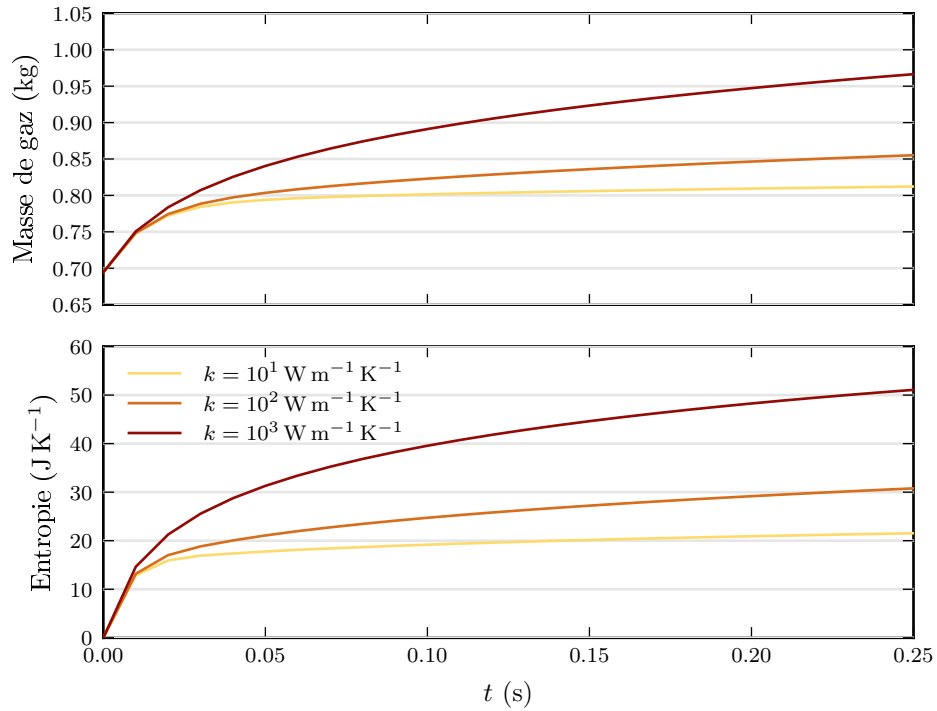


FIGURE 4.28 – Évolution de la masse totale de gaz et de l'entropie totale en fonction du temps pour le cas test d'évaporation ($T_0 = 120 \text{ K}$) pour différentes conductivités thermiques.

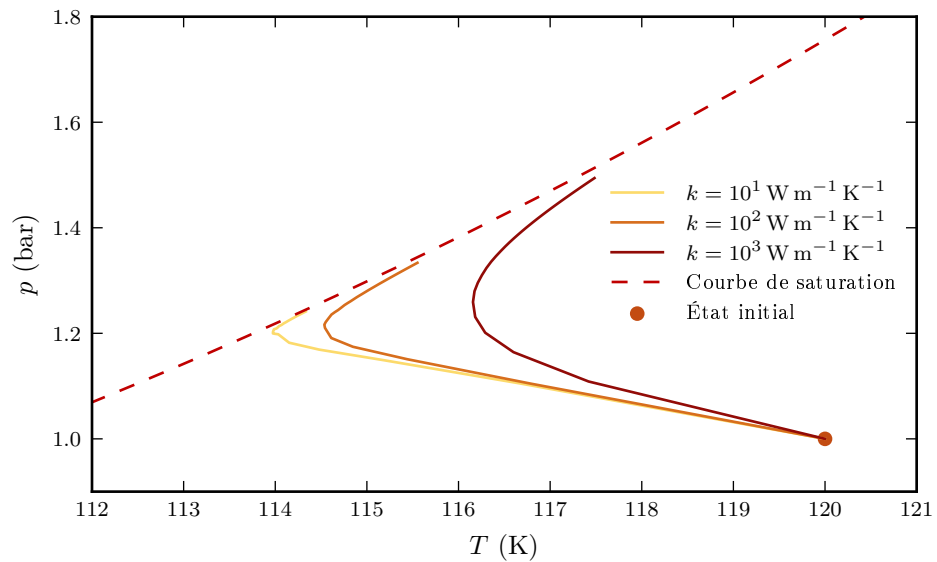


FIGURE 4.29 – Évolution de l'état de la première maille de liquide à gauche de l'interface dans un diagramme (T, p) pour différentes conductivités thermiques.

4.6 Conclusion

Dans les Chapitres 2 à 4, deux approches pour la résolution numérique du modèle d'écoulement avec changement de phase de la Section 2.3 ont été présentées.

La première se base sur une représentation de l'interface par un modèle bifluide moyenné. L'expression analytique de ces équations moyennées a été discutée à la Section 2.5. Les Sections 3.1 à 3.3 ainsi que 4.1 ont été consacrées à la discrétisation de ces équations moyennées. Les cas tests des Sections 4.4.1 et 4.4.2 ont permis de valider la capacité de ce code à capturer l'interface liquide-vapeur en 1D et 2D, ainsi qu'à gérer des rapports de densité réalistes.

Seuls des cas isothermes ont été présentés. L'extension au cas non-isotherme est possible mais un travail important est nécessaire pour assurer une bonne gestion de la chaleur latente dans l'interface diffuse et garantir la croissance de l'entropie.

L'autre approche présentée pour la simulation numérique du changement de phase se base sur une reconstruction de l'interface. La forme lagrangienne des équations de conservation, présentée à la Section 2.3.4 a été discrétisée en généralisant le schéma présenté à la Section 3.5. Quelques détails sur cette implémentation sont donnés à la Section 3.5.

Les résultats ont pu être comparés à ceux obtenus par le modèle moyenné avec le cas test 4.4.1, ainsi qu'à un résultat analytique de la littérature avec le cas test 4.4.3. Enfin, le comportement du code dans le cas non-isotherme a été discuté à la Section 4.5. L'approche à reconstruction d'interface permet de gérer la chaleur latente et le retour à l'équilibre thermodynamique, bien que celui-ci puisse être biaisé par la diffusion numérique du code. Cette approche n'a été implémentée qu'en 1D. Dans le cas sans changement de phase, une extension au cas 2D a été faite par une méthode à pas fractionnaires, qui n'est a priori pas affectée par la prise en compte du changement de phase.

La Figure 4.30 résume les possibilités actuelles des deux approches.

	Capture de l'interface	Faible rapport de densité et discontinuité des vitesses	Chaleur latente élevée et croissance de l'entropie	Simulations 2D
Modèle moyenné	✓	✓	✗	✓
Schéma à reconstruction d'interface	✓	✓	✓	✗

FIGURE 4.30 – Synthèse des caractéristiques des deux schémas numériques présentés dans cette thèse.

Chapitre 5

Application au problème du piston

Comme évoqué dans l'introduction de ce mémoire, la variation de pression lors l'impact d'une vague peut être compris comme la superposition de plusieurs chargements élémentaires. L'un d'entre eux est causé par la compression du gaz enfermé entre la vague déferlante et la paroi, comme observé expérimentalement à la Figure 0.4. Ce phénomène peut être modélisé comme un problème 1D de compression d'une poche de gaz par un piston. Ce cas test simple sera étudié en détails dans ce chapitre.

5.1 Quelques modèles de Bagnold 0D

La compression de la poche de gaz est modélisée sous la forme d'une équation différentielle ordinaire par le *modèle de Bagnold*, introduit par [Bag39]. Dans [ABG12], ce modèle a été enrichi pour décrire l'effet du changement de phase sur la compression de la poche de gaz. Dans cette section, le même type de modèle sera repris avec une approche légèrement différente (voir par exemple la Remarque 5.2) mais des conclusions similaires. Ces variantes du modèle de Bagnold permettront d'illustrer les paramètres importants pour la compréhension de l'effet du changement de phase.

Par souci de simplicité, l'effet de la gravité (ou d'une quelconque accélération due aux mouvements du bateau) ne sera pas étudié (voir aussi la Remarque 5.14).

5.1.1 Le modèle de Bagnold original (adiabatique)

Dans un premier temps, le modèle original de Bagnold est présenté. Dans les paragraphes qui suivent, celui-ci est enrichi d'effets thermodynamiques.

Présentation

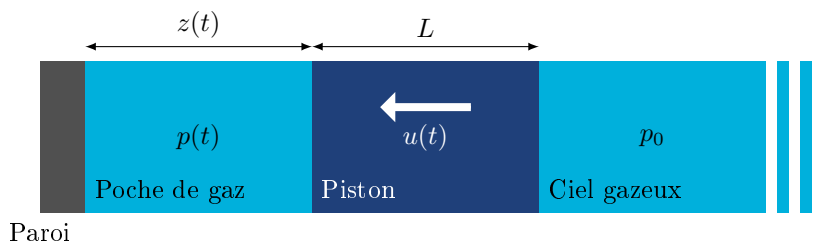


FIGURE 5.1 – Schéma du modèle de Bagnold

Une poche de gaz, de hauteur z et de pression p est comprimée par un piston, supposé solide, de hauteur L , de densité ρ_{piston} et de vitesse u (dans le référentiel de la paroi). À droite du piston, une poche de gaz, supposée ici de taille infinie, a une pression constante p_0 . La Figure 5.1 résume les composants du modèle.

Description mathématique

La compression de la poche de gaz étant adiabatique, la pression peut être calculée par la loi d'état des gaz parfaits isentropique, qui s'écrit ici :

$$p(t) = p_0 \left(\frac{z_0}{z(t)} \right)^\gamma$$

où γ est le coefficient isentropique du gaz parfait, et p_0 et z_0 sont respectivement la pression initiale et la dimension initiale de la poche de gaz.

Le principe fondamental de la dynamique appliqué au piston s'écrit

$$\frac{dz}{dt} = u, \quad L_{\text{piston}} \rho_{\text{piston}} \frac{du}{dt} = p(t) - p_0,$$

où u est la vitesse du piston. Ici u est supposée négative pendant la compression. Cette équation peut être réécrite comme l'équation différentielle ordinaire d'ordre 2 suivante :

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{p_0}{L_{\text{piston}} \rho_{\text{piston}}} \left(\left(\frac{z_0}{z} \right)^\gamma - 1 \right), \quad (5.1a)$$

à laquelle sont associées les conditions initiales

$$z(t=0) = z_0, \quad \left. \frac{dz}{dt} \right|_{t=0} = u_0. \quad (5.1b)$$

Ce problème peut être résolu analytiquement et numériquement. La solution est une oscillation périodique comme représentée à la Figure 5.2.

Adimensionnement

Dans ce paragraphe, le problème va être réécrit sous forme adimensionnée pour en extraire les paramètres importants. Les variables sans dimensions \tilde{z} et \tilde{t} sont définies comme :

$$z = z_0 \tilde{z}, \quad t = \sqrt{\frac{\rho_{\text{piston}}}{p_0}} z_0 L_{\text{piston}} \tilde{t}.$$

Lemme 5.1. Avec ces variables, le problème (5.1) s'écrit :

$$\frac{d^2 \tilde{z}}{d\tilde{t}^2} = \tilde{z}^{-\gamma} - 1, \quad (5.2a)$$

avec la condition initiale

$$\tilde{z}(0) = 1, \quad \left. \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}} \right|_{\tilde{t}=0} = \pm \sqrt{S}, \quad (5.2b)$$

où S est le nombre d'impact défini par :

$$S = \frac{L_{\text{piston}} \rho_{\text{piston}} u_0^2}{p_0 z_0}. \quad (5.3)$$

Démonstration. En introduisant les variables adimensionnées dans (5.1), on obtient :

$$\frac{z_0 p_0}{\rho_{\text{piston}} L_{\text{piston}} z_0} \frac{d^2 \tilde{z}}{d\tilde{t}^2} = \frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{p_0}{L_{\text{piston}} \rho_{\text{piston}}} (\tilde{z}^{-\gamma} - 1),$$

et

$$z_0 \tilde{z}(\tilde{t}=0) = z(t=0) = z_0, \quad \sqrt{\frac{p_0}{\rho_{\text{piston}} L_{\text{piston}} z_0}} z_0 \left. \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}} \right|_{\tilde{t}=0} = \left. \frac{dz}{dt} \right|_{t=0} = u_0,$$

ce qui permet de conclure. \square

Remarque 5.2. Ce n'est pas la seule façon possible d'adimensionner le problème. Dans [ABG12] par exemple, le problème adimensionné est écrit comme :

$$\frac{d^2 \tilde{z}}{d\tilde{t}^2} = \frac{1}{S} (\tilde{z}^{-\gamma} - 1), \quad (5.4a)$$

$$\tilde{z}(0) = 1, \quad \left. \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}} \right|_{\tilde{t}=0} = \pm 1, \quad (5.4b)$$

ce qui correspond à une définition de \tilde{t} comme

$$t = \frac{z_0}{u_0} \tilde{t}.$$

Les deux adimensionnements sont fondamentalement équivalents. Avec (5.4), la vitesse est adimensionnée par la vitesse initiale du piston et S peut être vu comme le coefficient d'élasticité du gaz. Avec (5.2), la vitesse est adimensionnée par l'énergie interne du gaz et S est l'énergie cinétique initiale du piston. Pour le système (5.2), la période adimensionnée des oscillations du piston dépend moins de S que pour que le système (5.4), ce qui peut se révéler pratique d'un point de vue numérique. \triangleleft

Remarque 5.3. Par ailleurs, dans [BGGL13], le nombre d'impact est défini comme

$$S = \frac{1}{2} S_B + S_g = \frac{1}{2} \frac{L_{\text{piston}} \rho_{\text{piston}} u_0^2}{p_0 z_0} + \frac{L_{\text{piston}} \rho_{\text{piston}} g}{p_0}.$$

Dans cette thèse, S désignera toujours le nombre défini par (5.3), c'est-à-dire S_B . Seul l'ordre de grandeur de S est pertinent et ce le facteur $\frac{1}{2}$ ne change rien à l'interprétation des résultats qui suivent. \triangleleft

Résultats

Une solution au problème adimensionné a été tracée sur la Figure 5.2. La solution est une oscillation périodique. En raison de sa vitesse initiale, le piston comprime la poche de gaz. La pression de celle-ci augmente, freinant puis repoussant le piston. Celui-ci revient à sa position initiale avec une vitesse exactement opposée à la vitesse initiale. Entraîné par son inertie, il crée une dépression dans la poche de gaz, qui le rappelle vers sa position initiale, et ainsi de suite.

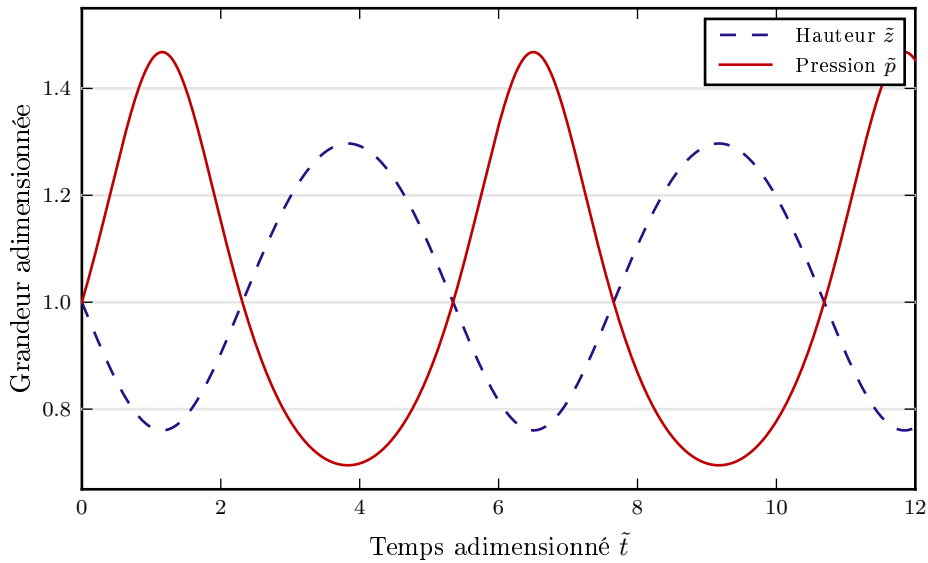


FIGURE 5.2 – Pression dans la poche de gaz et élévation du piston en fonction du temps, en variables adimensionnées pour $S = 0.1$, $\gamma = 1.4$.

L'amplitude de ces oscillations dépend du nombre d'impact S , comme représenté sur la Figure 5.3. Ce nombre sans dimension peut être vu comme le rapport de l'énergie cinétique initiale du piston $\rho_{\text{piston}} L_{\text{piston}} u_0^2$ sur l'énergie interne de la poche de gaz $p_0 z_0$. Il peut donc s'interpréter comme une mesure de la violence de l'impact. L'influence du coefficient γ du gaz parfait ne sera pas étudiée en détails dans ce mémoire. On pourra se rapporter à [BGGL13] pour plus de détails à ce sujet.

Remarque 5.4. Sur la Figure 5.3, la période des oscillations semble peu varier avec S . C'est la cas pour l'adimensionnement en temps choisi ici. Cependant la période en temps réel des oscillations dépend fortement de S . \triangleleft

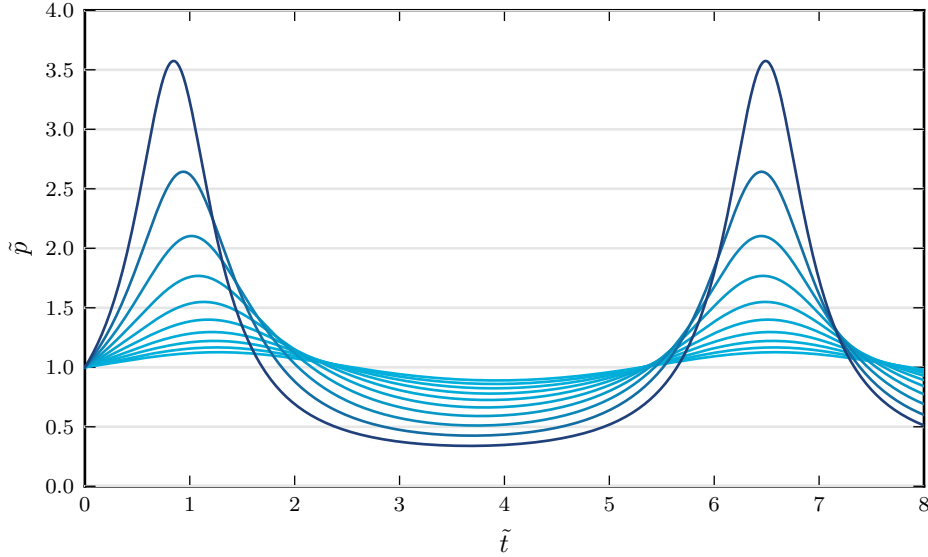


FIGURE 5.3 – Pression adimensionnée en fonction du temps adimensionné pour des nombres d'impact S entre 10^{-2} (bleu clair) et 1 (bleu foncé), $\gamma = 1.4$.

Sur le Figure 5.4, la dépendance de la pression maximale par rapport au nombre d'impact S a été tracée. Sur cette figure, l'utilisation du modèle de Bagnold pour la mise à l'échelle de la pression dans les poches de gaz a été schématisée. Si la longueur est mise à l'échelle par un facteur λ ($\lambda = \frac{1}{40}$ par exemple), le temps est multiplié par un facteur $\sqrt{\lambda}$ (voir p. 6). La vitesse est donc multipliée par $\sqrt{\lambda}$ et le nombre d'impact par λ . La pression à l'échelle 1 peut être déduite de la pression à l'échelle λ par l'intermédiaire du nombre d'impact comme illustré sur la Figure 5.4.

5.1.2 Préliminaires à l'extension du modèle de Bagnold

Hypothèses

Dans cette section et les suivantes, on veut généraliser ce modèle pour y inclure quelques effets thermodynamiques et étudier leurs conséquences sur la pression dans la poche de gaz. Par simplicité, l'aspect mécanique du modèle de Bagnold de base va être décorrélé des effets thermodynamiques. La Figure 5.5 décrit les différentes interactions au sein du modèle.

En réalité, l'environnement avec lequel interagit le gaz n'est autre que le piston et la paroi. Cependant, ces interactions thermodynamiques sont supposées ne pas influencer les propriétés mécaniques du piston et de la paroi. Par exemple, la condensation de l'ensemble de la poche de gaz ne représenterait qu'une variation négligeable de la masse du piston. Par ailleurs, toute variation de densité du piston due à une variation de température peut raisonnablement être négligée. Tous les effets thermodynamiques dans le ciel gazeux ou entre le ciel gazeux et le piston ont également été négligés, pour simplifier l'interprétation des résultats. Les calculs 1D de la Section 5.2 ne feront pas ces hypothèses simplificatrices, ce qui pourra permettre de les valider.

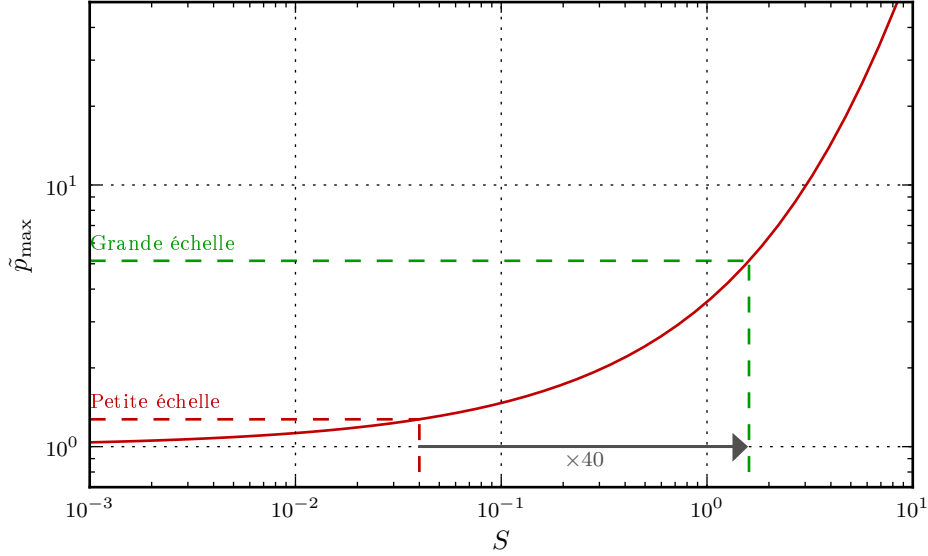


FIGURE 5.4 – Pression maximale adimensionnée en fonction du nombre d’impact S , en échelle logarithmique, pour $\gamma = 1.4$. Schéma de l’utilisation du modèle de Bagnold pour le changement d’échelle : à la pression mesurée à petite échelle est associée un nombre d’impact qui va être mis à l’échelle pour obtenir finalement une pression à grande échelle.

Loi d’état

Pour enrichir le modèle, la loi d’état des gaz parfaits doit être écrite sous une forme plus générale que la forme isentropique introduite précédemment. L’état de la poche de gaz peut être décrit par trois variables : son volume z , sa masse M_g et son énergie \mathcal{E}_g . L’équation d’état des gaz parfaits donne alors une expression pour la pression p et la température T_g comme

$$p = (\gamma_g - 1) \frac{M_g}{z} \mathcal{C}_{vg} T_g, \quad (5.5a)$$

$$T_g = T_0 + \frac{\mathcal{E}_g - M_g e_{g,0}}{\mathcal{C}_{vg} M_g}, \quad (5.5b)$$

où γ_g et \mathcal{C}_{vg} sont des paramètres de la loi d’état, T_0 est une température de référence et $e_{g,0}$ l’énergie spécifique correspondante, telle que $\mathcal{E}_g(T_g = T_0) = M_g e_{g,0}$.

Lemme 5.5. Avec cette loi d’état, le modèle de Bagnold adiabatique (5.1) peut se réécrire comme

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{1}{L_{\text{piston}} \rho_{\text{piston}}} (p - p_0), \quad (5.6a)$$

$$\frac{d\mathcal{E}_g}{dt} = -p \frac{dz}{dt}, \quad (5.6b)$$

$$\frac{dM_g}{dt} = 0. \quad (5.6c)$$

avec la condition initiale

$$z(0) = z_0, \quad \frac{dz}{dt}(0) = u_0, \quad M_g(0) = M_{g,0}, \quad \mathcal{E}_g(0) = M_{g,0} e_{g,0}, \quad (5.6d)$$

(c’est-à-dire $T_g(0) = T_0$).

Adimensionnement

En introduisant les variables adimensionnées suivantes

$$p = p_0 \tilde{p}, \quad \mathcal{E}_g = p_0 z_0 \tilde{\mathcal{E}}_g, \quad M_g = M_{g,0} \tilde{M}_g, \quad T_g = T_0 \tilde{T}_g,$$

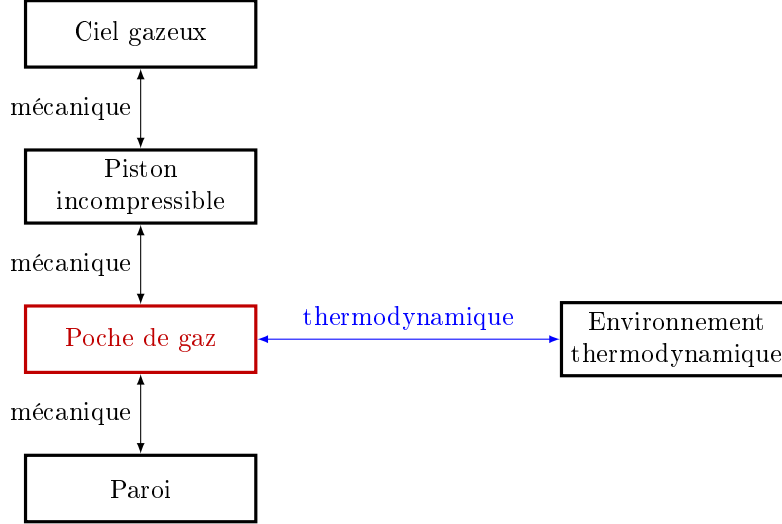


FIGURE 5.5 – Schéma des interactions dans les petits modèles de Bagnold avec thermodynamique. L’effet thermodynamique ajouté au modèle est indépendant des interactions mécaniques déjà présentes dans le modèle de base.

où

$$T_0 = \frac{p_0 z_0}{(\gamma_g - 1) M_{g,0} C_{vg}},$$

la loi d’état précédente peut se réécrire comme

$$\tilde{p} = \frac{\tilde{M}_g}{\tilde{z}} \tilde{T}_g, \quad (5.7a)$$

$$\tilde{T}_g = 1 + (\gamma_g - 1) \left(\frac{\tilde{\mathcal{E}}_g}{\tilde{M}_g} - \tilde{e}_{g,0} \right), \quad (5.7b)$$

où

$$\tilde{e}_{g,0} = \frac{e_{g,0} M_{g,0}}{p_0 z_0}.$$

Cette énergie spécifique de référence n’a aucune influence sur la physique du problème et peut être prise nulle. Seule la différence des niveaux d’énergies de référence entre le liquide et le gaz interviendra plus tard dans le modèle avec changement de phase.

Lemme 5.6. *Avec cet adimensionnement, le modèle adiabatique peut se réécrire comme*

$$\frac{d^2 \tilde{z}}{d\tilde{t}^2} = \tilde{p} - 1, \quad (5.8a)$$

$$\frac{d\tilde{\mathcal{E}}_g}{d\tilde{t}} = -\tilde{p} \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}}, \quad (5.8b)$$

$$\frac{d\tilde{M}_g}{d\tilde{t}} = 0. \quad (5.8c)$$

avec la condition initiale

$$\tilde{z}(0) = 1, \quad \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}}(0) = \pm\sqrt{S}, \quad \tilde{M}_g(0) = 1, \quad \tilde{\mathcal{E}}_g(0) = \tilde{e}_{g,0}. \quad (5.8d)$$

À ce stade, le modèle dépend toujours des deux nombres sans dimension S et γ .

5.1.3 Le modèle de Bagnold avec échange thermique

Dans cette partie, l’effet thermodynamique auquel la poche de gaz est soumise est simplement un échange de chaleur avec son environnement. Même si cet effet est moins important que l’effet du changement de phase, il est plus simple à décrire et à comprendre. Il constitue une bonne introduction au modèle

de Bagnold avec changement de phase qui sera développé par la suite. L'effet des échanges thermiques sur la pression dans les poches de gaz a aussi été étudié dans [AF11].

Dans cette section, la masse totale de gaz est toujours constante. L'équation triviale

$$\frac{dM_g}{dt} = 0$$

ne sera donc pas écrite.

Équilibre thermique instantané

Supposons dans un premier temps que le gaz est, à tout instant, à l'équilibre thermique avec un thermostat à une température T_0 donnée. En supposant la masse du gaz et sa température constantes égales à M_0 et T_0 respectivement, la loi d'état s'écrit

$$p = (\gamma_g - 1) \frac{M_0}{z} C_v T_0, \quad (5.9)$$

ou sous forme adimensionnée

$$\tilde{p} = \frac{1}{\tilde{z}}, \quad \tilde{T}_g = 1. \quad (5.10)$$

L'équation d'évolution de z s'écrit alors sous forme adimensionnée

$$\frac{d^2 \tilde{z}}{d\tilde{t}^2} = \frac{1}{\tilde{z}} - 1. \quad (5.11)$$

La solution est une oscillation périodique comme pour le modèle adiabatique. La hauteur des pics de pression en fonction de S est tracée sur la Figure 5.6.

Cependant, l'hypothèse qu'un équilibre thermique a le temps d'être atteint à tout instant est peu vraisemblable, a fortiori durant un événement rapide et violent comme un impact de vague. Dans le paragraphe suivant, un temps de relaxation non nul sera introduit.

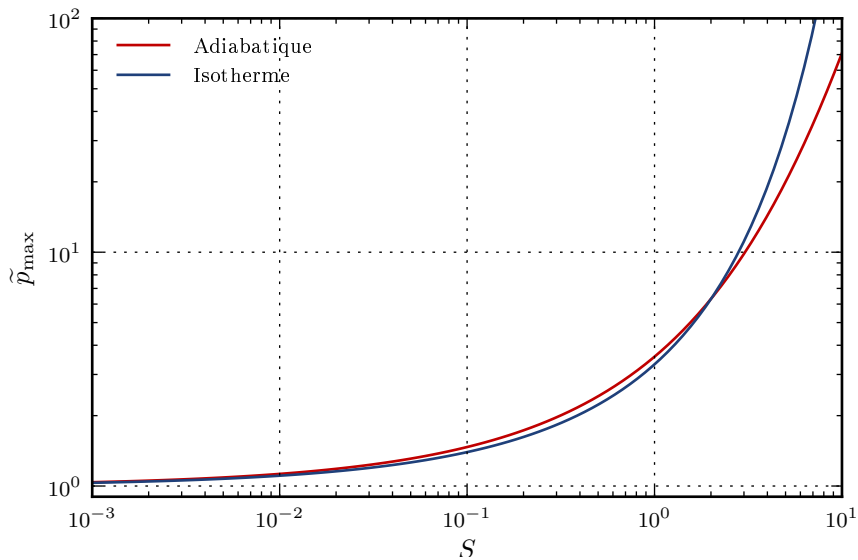


FIGURE 5.6 – Pression maximale adimensionnée en fonction du nombre d'impact S , en échelle logarithmique, pour le modèle de Bagnold adiabatique (5.8) avec $\gamma = 1.4$ et le modèle isotherme (5.11).

Échanges non-instantanés avec un thermostat

La température de la poche de gaz T_g n'est maintenant plus supposée constante dans le temps. Le gaz échange de la chaleur avec un thermostat à la température constante T_0 . L'évolution du système s'écrit :

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{1}{L_{\text{piston}} \rho_{\text{piston}}} (p - p_0), \quad (5.12a)$$

$$\frac{d\mathcal{E}_g}{dt} = -p \frac{dz}{dt} + Q_{l \rightarrow g}, \quad (5.12b)$$

avec la condition initiale

$$z(0) = z_0, \quad \frac{dz}{dt}(0) = u_0, \quad \mathcal{E}_g(0) = M_{g,0} e_{g,0}. \quad (5.12c)$$

Le flux de chaleur $Q_{l \rightarrow g}$ va être modélisé sous la forme

$$Q_{l \rightarrow g} = G_q (T_0 - T_g),$$

où G_q est une conductance thermique.

Lemme 5.7. *Si $G_q \geq 0$, alors le Second Principe de la Thermodynamique est respecté.*

Démonstration. L'évolution de l'entropie de la poche de gaz s'écrit

$$T_g \frac{dS_g}{dt} = \frac{d\mathcal{E}_g}{dt} + p \frac{dz}{dt},$$

c'est-à-dire

$$T_g \frac{dS_g}{dt} = Q_{l \rightarrow g}.$$

Cette variation d'entropie se compose d'une entropie échangée avec le thermostat $\frac{Q_{l \rightarrow g}}{T_0}$ et d'une entropie créée. Le bilan de création d'entropie s'écrit donc

$$\frac{dS^{\text{créée}}}{dt} = Q_{l \rightarrow g} \left(\frac{1}{T_g} - \frac{1}{T_0} \right) = Q_{l \rightarrow g} \frac{T_0 - T_g}{T_0 T_g}. \quad (5.13)$$

Le Second Principe de la Thermodynamique impose que ce taux d'entropie créée soit positif. Avec l'expression de $Q_{l \rightarrow g}$ proposée ici, il suffit d'avoir $G_q \geq 0$. \square

Sous forme adimensionnée, ce système s'écrit :

$$\frac{d^2 \tilde{z}}{d\tilde{t}^2} = \tilde{p} - 1, \quad (5.14a)$$

$$\frac{d\tilde{\mathcal{E}}_g}{d\tilde{t}} = -\tilde{p} \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}} + \Omega_q (1 - \tilde{T}_g), \quad (5.14b)$$

avec la condition initiale

$$\tilde{z}(0) = 1, \quad \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}}(0) = \pm \sqrt{S}, \quad \tilde{\mathcal{E}}_g(0) = \tilde{e}_{g,0}. \quad (5.14c)$$

Le coefficient sans dimension Ω_q est défini par

$$\Omega_q = \frac{G_q T_0}{p_0} \sqrt{\frac{\rho_{\text{piston}} L_{\text{piston}}}{p_0 z_0}} = \frac{G_q}{M_{g,0} (\gamma_g - 1) \mathcal{C}_v} \sqrt{\frac{\rho_{\text{piston}} L_{\text{piston}}}{p_0} z_0}.$$

Il peut être interprété comme le rapport du temps caractéristique des oscillations du piston par le temps caractéristique de retour à l'équilibre thermique :

$$\Omega_q = \frac{\sqrt{\frac{\rho_{\text{piston}} L_{\text{piston}}}{p_0} z_0}}{\frac{M_{g,0} (\gamma_g - 1) \mathcal{C}_v}{G_q}} \simeq \frac{t_{\text{mécanique}}}{t_{\text{thermique}}}.$$

Quand $\Omega_q \rightarrow \infty$, la relaxation thermique est rapide par rapport aux oscillations du piston, l'évolution est isotherme. À l'inverse quand $\Omega_q \rightarrow 0$, la relaxation thermique est lente par rapport aux oscillations mécaniques et l'évolution est adiabatique. (Le modèle (5.14) devient bien le modèle adiabatique (5.8) pour $\Omega_q = 0$.)

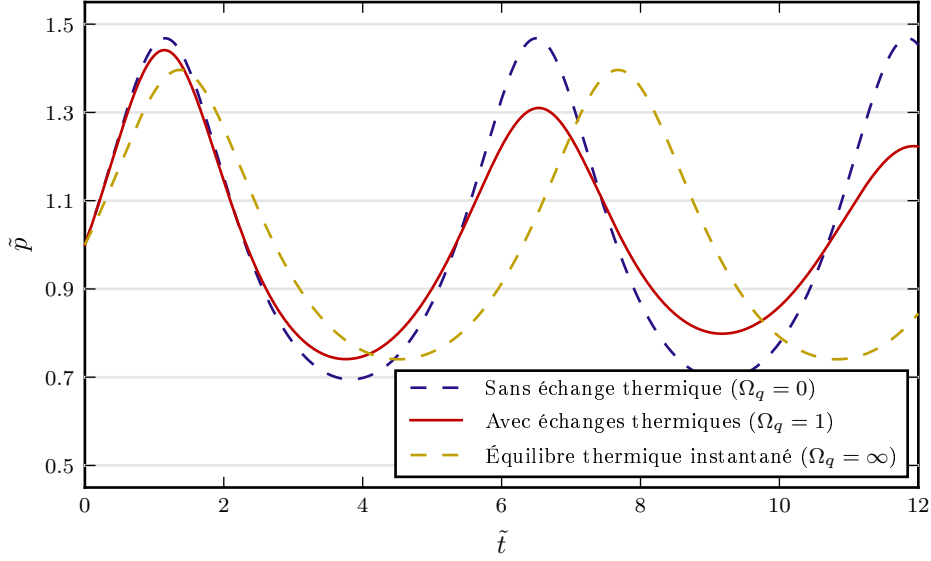


FIGURE 5.7 – Évolution de la pression adimensionnée pour le modèle de Bagnold avec échange thermique (5.14) pour $\Omega_q = 1$, $S = 0.1$ et $\gamma_g = 1.4$, calculée avec (5.14). Comparaison avec les modèles adiabatique (5.8) et isotherme (5.11).

Résultats et commentaires Sur la Figure (5.7), l'évolution de la pression en fonction du temps a été tracée pour le modèle adiabatique (5.2), pour le modèle isotherme (5.11) et pour le modèle avec échange de chaleur (5.14). Une différence qualitative peut être observée : pour le modèle avec échange de chaleur, l'évolution n'est plus périodique ; les oscillations sont amorties.

Sur la Figure 5.8, la hauteur des pics de pression a été tracée en fonction de S et de Ω_q . La hauteur du premier pic (en bleu) peut être comparée à la hauteur du second pic (en vert) pour quantifier l'amortissement des oscillations. Pour $\Omega_q \rightarrow 0$, les deux premiers pics ont la même pression, qui est celle du modèle adiabatique. De même pour $\Omega_q \rightarrow \infty$, les deux pics convergent vers la pression du modèle isotherme. Pour Ω_q voisin de 10, les oscillations sont amorties.

Pour le bilan d'entropie (5.13) les cas limite $Q = 0$ (adiabatique) et $T_g = T_0$ (isotherme) correspondent tous les deux à une production d'entropie nulle. Dans le cas intermédiaire seulement, une certaine quantité d'entropie est générée par l'évolution du système, entraînant une irréversibilité. Celle-ci prend la forme d'un amortissement des oscillations du piston.

Échange non-instantané avec une masse finie

L'hypothèse que tout le liquide autour de la poche de gaz a une température homogène et constante peut être remise en question. Pendant la brève durée de l'impact, l'équilibre thermique n'a pas le temps de s'établir entre une fine couche de liquide chauffée par la compression et le reste de l'environnement. Dans ce paragraphe, on va supposer que la poche de gaz n'échange de la chaleur qu'avec une masse finie (constante). Elle est notée avec l'indice l , mais peut aussi représenter la membrane métallique à la paroi.

Cette masse finie sera caractérisée par une masse M_l , une température T_l et une énergie \mathcal{E}_l . Sa loi d'état s'écrit

$$T_l = T_0 + \frac{\mathcal{E}_l - e_{l,0}M_l}{M_l C_{v,l}},$$

où $C_{v,l}$ est sa capacité thermique spécifique et $e_{l,0}$ est une énergie spécifique de référence correspondant à la température T_0 .

Pour la mise sous forme adimensionnée du problème, les variables suivantes sont utilisées :

$$\mathcal{E}_l = p_0 z_0 \tilde{\mathcal{E}}_l, \quad M_l = M_{l,0} \tilde{M}_l, \quad T_l = T_0 \tilde{T}_l,$$

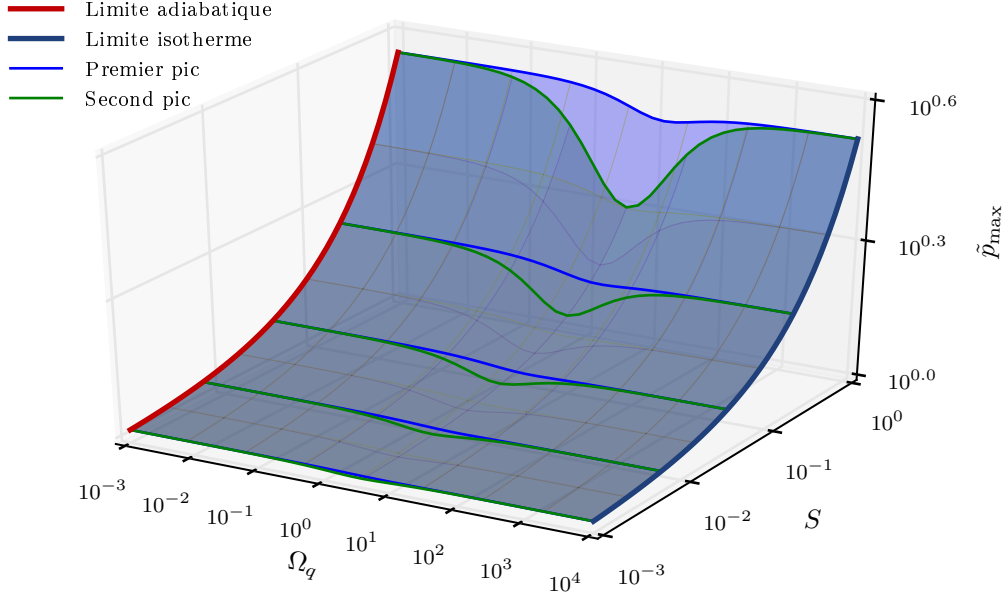


FIGURE 5.8 – Pression maximale adimensionnée calculée avec (5.14) pour le premier pic (en bleu) et le second pic (en vert) en fonction du nombre d’impact S et du temps caractéristique de relaxation thermique adimensionné Ω_q en échelle logarithmique. Les courbes rouge et bleu foncé correspondent respectivement aux cas limites adiabatique (5.8) et isotherme (5.11) (cf. Figure 5.6).

d’où la loi d’état adimensionnée

$$\widetilde{T}_l = 1 + \frac{1}{\mathfrak{C}_l} \left(\frac{\widetilde{\mathcal{E}}_l}{\widetilde{M}_l} - \widetilde{e}_{l,0} \right),$$

où \mathfrak{C}_l est l’inertie thermique adimensionnée du liquide, définie par

$$\mathfrak{C}_l = \frac{M_{l,0} \mathcal{C}_{vl} T_0}{p_0 z_0} = \frac{M_{l,0} \mathcal{C}_{vl}}{(\gamma_g - 1) M_{g,0} \mathcal{C}_{vg}},$$

et

$$\widetilde{e}_{l,0} = \frac{e_{l,0} M_{l,0}}{p_0 z_0}.$$

Le cas limite $\mathfrak{C}_l \rightarrow \infty$ correspond à un thermostat de température constante comme dans le modèle précédent. Dans le cas limite $\mathfrak{C}_l \rightarrow 0$ le gaz n’échange de la chaleur avec rien, comme dans le modèle adiabatique.

L’équation d’évolution du système s’écrit

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{1}{L_{\text{piston}} \rho_{\text{piston}}} (p - p_0), \quad (5.15a)$$

$$\frac{d\mathcal{E}_g}{dt} = -p \frac{dz}{dt} + Q_{l \rightarrow g}, \quad (5.15b)$$

$$\frac{d\mathcal{E}_l}{dt} = -Q_{l \rightarrow g}, \quad (5.15c)$$

avec les conditions initiales

$$z(0) = z_0, \quad \frac{dz}{dt}(0) = u_0, \quad \mathcal{E}_g(0) = M_{g,0} e_{g,0}, \quad \mathcal{E}_l(0) = M_{l,0} e_{l,0}. \quad (5.15d)$$

Le flux de chaleur Q s’écrit comme précédemment

$$Q_{l \rightarrow g} = G_q (T_l - T_g).$$

Sous forme adimensionnée, le système s'écrit

$$\frac{d^2 \tilde{z}}{d\tilde{t}^2} = \tilde{p} - 1, \quad (5.16a)$$

$$\frac{d\tilde{\mathcal{E}}_g}{d\tilde{t}} = -\tilde{p} \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}} + \Omega_q (\tilde{T}_l - \tilde{T}_g), \quad (5.16b)$$

$$\frac{d\tilde{\mathcal{E}}_l}{d\tilde{t}} = -\Omega_q (\tilde{T}_l - \tilde{T}_g), \quad (5.16c)$$

avec les conditions initiales

$$\tilde{z}(0) = 1, \quad \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}}(0) = \pm\sqrt{S}, \quad \tilde{\mathcal{E}}_g(0) = \widetilde{e_{g,0}}, \quad \tilde{\mathcal{E}}_l(0) = \widetilde{e_{l,0}}. \quad (5.16d)$$

Ces conditions initiales correspondent à

$$\widetilde{T}_g(0) = 1, \quad \widetilde{T}_l(0) = 1, \quad \tilde{p}(0) = 1.$$

Résultats et commentaires Sur la Figure 5.9, plusieurs surfaces similaires à la Figure 5.8 ont été tracées pour trois valeurs de \mathfrak{C}_l entre 0.5 et 50. Pour des inerties thermiques \mathfrak{C}_l élevées, le résultat est très proche de celui obtenu pour un thermostat à la Figure 5.8. Pour des inerties thermiques faibles, le résultat tend vers une évolution adiabatique. On peut aussi observer une légère diminution de la valeur de Ω_q correspondant à l'amortissement maximal quand \mathfrak{C}_l diminue.

Remarque 5.8. Avec quelques hypothèses, une valeur réaliste de \mathfrak{C}_l peut être estimée. À l'aide de l'équation de la chaleur, l'épaisseur de liquide Δx affectée par les variations de températures du gaz pendant Δt peut être estimée comme $\Delta x = \sqrt{\frac{k_l}{\rho_l \mathcal{C}_{vl}} \Delta t}$ où k_l est la conductivité thermique du liquide, \mathcal{C}_{vl} sa capacité thermique isochore et ρ_l sa densité. L'inertie thermique de cette couche limite de liquide est donc

$$\rho_l \mathcal{C}_{vl} \Delta x = \rho_l \mathcal{C}_{vl} \sqrt{\frac{k_l}{\rho_l \mathcal{C}_{vl}} \Delta t} = \sqrt{\rho_l \mathcal{C}_{vl} k_l \Delta t},$$

d'où une estimation de \mathfrak{C}_l :

$$\mathfrak{C}_l \simeq \frac{\sqrt{\rho_l \mathcal{C}_{vl} k_l \Delta t}}{p_0 z_0}.$$

Pour les propriétés thermodynamiques de l'eau ou du méthane, on trouve l'ordre de grandeur

$$\mathfrak{C}_l \simeq \frac{\sqrt{\Delta t}}{z_0} 10^{-2} \text{ m s}^{-1}$$

où z_0 est la taille caractéristique de la poche de gaz et Δt la durée caractéristique de l'impact.

Pendant un impact d'une durée de l'ordre de 10^{-2} s, l'effet est négligeable pour toutes les poches de gaz macroscopiques ($z_0 \geq 10^{-2}$ m). \triangleleft

5.1.4 Le modèle de Bagnold avec changement de phase

Les concepts introduits précédemment pour l'étude d'un échange thermique entre la poche de gaz et son environnement vont maintenant être utilisés pour étudier le modèle de Bagnold avec changement de phase.

Équilibre instantané

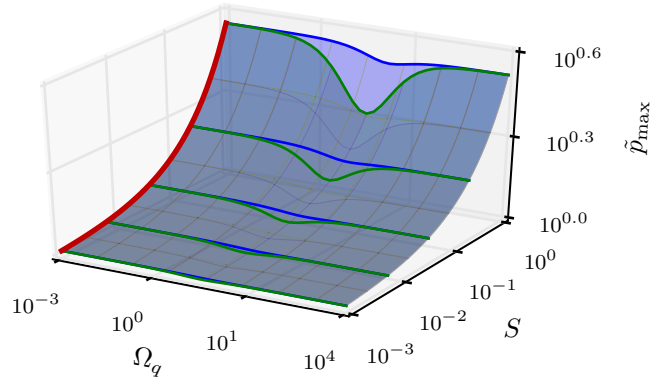
Comme dans le cas de l'échange thermique, le premier modèle proposé est celui de l'équilibre thermodynamique instantané de la poche de gaz avec un environnement extérieur à température constante T_0 . On peut alors écrire la pression dans la poche de gaz comme

$$p = p^{\text{sat}}(T_0), \quad (5.17)$$

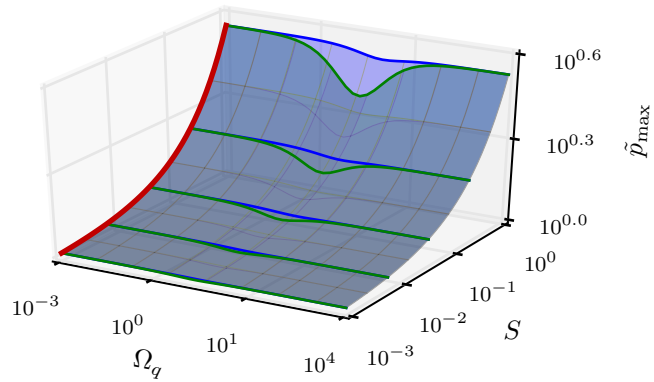
c'est-à-dire, si on suppose $p_0 = p^{\text{sat}}(T_0)$,

$$p = p_0, \quad \tilde{p} = 1.$$

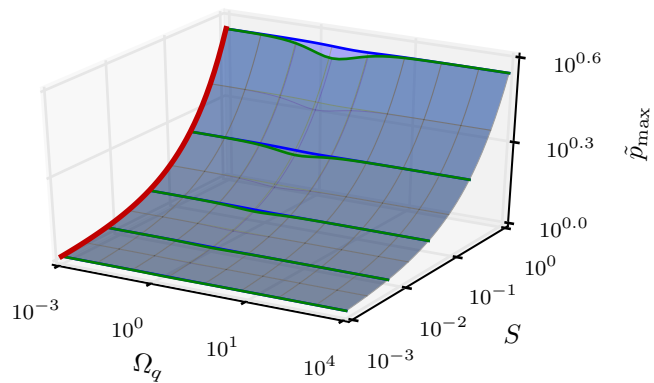
Même si la pression dans la poche de gaz reste minimale, ce cas n'est aucunement favorable. Le piston va avancer à vitesse constante jusqu'à toucher la paroi. Le chargement à attendre à la paroi est localement de l'ordre de la pression acoustique du liquide.



(a) $\mathfrak{C}_l = 50$



(b) $\mathfrak{C}_l = 5$



(c) $\mathfrak{C}_l = 0.5$

FIGURE 5.9 – Pression maximale adimensionnée calculée avec (5.8) pour le premier pic (en bleu) et le second pic (en vert) en fonction de S et de Ω_q pour trois valeurs de \mathfrak{C}_l entre 0.5 et 50.

Cependant, comme précédemment, il est peu raisonnable de supposer qu'un équilibre est atteint à tout instant pendant l'impact. Dans les paragraphes suivants, un temps fini de relaxation vers l'équilibre thermodynamique va être introduit.

Équilibre non-instantané avec un thermostat

Le gaz est supposé être au voisinage d'une phase liquide de masse supposée infinie ($M_l = \infty$) et de température constante T_0 . Le flux de masse échangé entre la poche de gaz et le liquide environnant est noté comme précédemment J . L'évolution de la poche de gaz s'écrit

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{1}{L_{\text{piston}} \rho_{\text{piston}}} (p - p_0), \quad (5.18a)$$

$$\frac{d\mathcal{E}_g}{dt} = -p \frac{dz}{dt} + Q_{l \rightarrow g}, \quad (5.18b)$$

$$\frac{dM_g}{dt} = J_{l \rightarrow g}. \quad (5.18c)$$

Les flux Q et J doivent être choisis de manière à satisfaire le Second Principe de la Thermodynamique. Le résultat suivant sera appliqué à $T_l = T_0$.

Théorème 5.9. *Les flux suivants respectent le Second Principe de la Thermodynamique :*

$$Q_{l \rightarrow g} = G_q(T_l - T_g) + h_g(p, T_g) J_{l \rightarrow g}, \quad J_{l \rightarrow g} = G_m \frac{\mu_l(p, T_l) - \mu_g(p, T_l)}{T_l}, \quad (5.19)$$

où h_g est l'enthalpie spécifique du gaz, μ_g et μ_l sont respectivement les potentiels chimiques de la phase gaz et de la phase liquide, et G_q et G_m sont des coefficients de transfert positifs ou nuls.

Démonstration. Dans chacune des deux phases, on a la relation thermodynamique

$$T dS = d\mathcal{E} + pdz - \mu dM.$$

On en déduit l'évolution de l'entropie totale du système :

$$\frac{dS_{\text{total}}}{dt} = \frac{dS_g}{dt} + \frac{dS_l}{dt} = \left(\frac{1}{T_g} - \frac{1}{T_l} \right) Q_{l \rightarrow g} + \left(\frac{\mu_l(p, T_l)}{T_l} - \frac{\mu_g(p, T_g)}{T_g} \right) J_{l \rightarrow g}.$$

D'après la relation de Gibbs-Helmholtz, donnée au Lemme 2.10, on a

$$\forall T, \quad \frac{\mu_g(p, T)}{T} \simeq \frac{\mu_g(p, T_0)}{T_0} + h_g(p, T) \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right).$$

En introduisant cette relation dans le bilan d'entropie, on obtient

$$\frac{dS_{\text{total}}}{dt} = \left(\frac{1}{T_g} - \frac{1}{T_l} \right) (Q_{l \rightarrow g} - h_g(p, T_g) J_{l \rightarrow g}) + \left(\frac{\mu_l(p, T_l) - \mu_g(p, T_l)}{T_l} \right) J_{l \rightarrow g},$$

ce qui permet de conclure. □

Remarque 5.10. Ce choix de flux de chaleur Q revient à faire déposer/prélever la chaleur latente dans le liquide plutôt que dans le gaz. En introduisant les enthalpies totales du gaz $\mathcal{H}_g = M_g h_g$ et du liquide $\mathcal{H}_l = M_l h_l$, on peut écrire :

$$\begin{aligned} M_g \frac{dh_g}{dt} &= \frac{d\mathcal{H}_g}{dt} - h_g \frac{dM_g}{dt} = -\gamma_g p \frac{dz}{dt} + G_q(T_l - T_g), \\ M_l \frac{dh_l}{dt} &= \frac{d\mathcal{H}_l}{dt} - h_l \frac{dM_l}{dt} = -G_q(T_l - T_g) + J_{l \rightarrow g}(h_l - h_g). \end{aligned}$$

Seule l'enthalpie spécifique du liquide est influencée par le changement de phase. Ce choix impose, par l'intermédiaire de la condition d'entropie, que le flux de masse soit calculé avec la température du liquide. D'autres choix d'écriture des flux sont possibles comme évoqué à la Remarque 2.13. ◁

Par ailleurs, le Lemme 2.15 sera utilisé pour estimer le flux de masse comme

$$J_{l \rightarrow g} \simeq -G_m \frac{z_0}{M_{g,0} T_l} (p - p^{\text{sat}}(T_l)).$$

Dans le cas où le liquide est un thermostat, on a :

$$p^{\text{sat}}(T_l) = p^{\text{sat}}(T_0) = p_0.$$

Sous forme adimensionnée, le système se réécrit alors

$$\frac{d^2 \tilde{z}}{d\tilde{t}^2} = \tilde{p} - 1, \quad (5.20a)$$

$$\frac{d\tilde{\mathcal{E}}_g}{d\tilde{t}} = -\tilde{p} \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}} + \Omega_q (1 - \tilde{T}_g) + \frac{\tilde{\mathcal{E}}_g + \tilde{p}\tilde{z}}{\tilde{M}_g} \frac{d\tilde{M}}{d\tilde{t}}, \quad (5.20b)$$

$$\frac{d\tilde{M}_g}{d\tilde{t}} = -\Omega_m (\tilde{p} - 1), \quad (5.20c)$$

avec les mêmes conditions initiales que (5.8), où Ω_q est le même coefficient d'échange thermique que précédemment et Ω_m est le coefficient d'échange massique défini par

$$\Omega_m = G_m \frac{p_0}{\rho_{g,0}^2 T_0} \sqrt{\frac{\rho_{\text{piston}} L_{\text{piston}}}{p_0 z_0}}. \quad (5.21)$$

Résultats et commentaires Sur la Figure (5.10), l'évolution de la pression dans la poche de gaz au cours du temps a été tracée pour $\Omega_m = 1$. Cette pression est comparée au cas adiabatique ainsi qu'au cas d'équilibre instantané. Une disparition complète des oscillations peut être observée.

Sur la Figure 5.11, les pressions maximales adimensionnées ont été représentées en fonction de S et Ω_m pour $\Omega_q = 0$. Dans certains cas, l'impact du piston sur la paroi en raison de la condensation de la poche de gaz empêche la lecture d'un second pic de pression (voir Figure (5.10)). Dans ce cas, la figure a été complétée arbitrairement en prenant 1 bar comme hauteur du second pic.

Dans le cas limite $\Omega_m \rightarrow 0$, le système oscille périodiquement avec la même pression que le modèle adiabatique. Dans le cas limite $\Omega_m \rightarrow +\infty$, on retrouve le cas de l'équilibre instantané : la pression dans la poche de gaz est constante et le piston heurte la paroi avec sa vitesse initiale. Entre ces deux cas limites, la pression maximale diminue continûment. Un amortissement des oscillations comme sur la Figure 5.8 peut également être observé.

Équilibre non-instantané avec un volume fini de liquide

Comme pour l'étude de l'échange thermique, il n'est pas certain qu'une quantité infinie de liquide ait le temps d'interagir avec la poche de gaz pendant le temps de l'impact. Le changement de phase va maintenant être étudié entre la poche de gaz et une quantité finie de liquide (incompressible). Le modèle obtenu sera le dernier de cette section et le plus général.

L'évolution du système s'écrit sous la forme :

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{1}{L_{\text{piston}} \rho_{\text{piston}}} (p - p_0), \quad (5.22a)$$

$$\frac{d\mathcal{E}_g}{dt} = -p \frac{dz}{dt} + Q_{l \rightarrow g}, \quad (5.22b)$$

$$\frac{dM_g}{dt} = J_{l \rightarrow g}, \quad (5.22c)$$

$$\frac{d\mathcal{E}_l}{dt} = -Q_{l \rightarrow g}, \quad (5.22d)$$

$$\frac{dM_l}{dt} = -J_{l \rightarrow g}. \quad (5.22e)$$

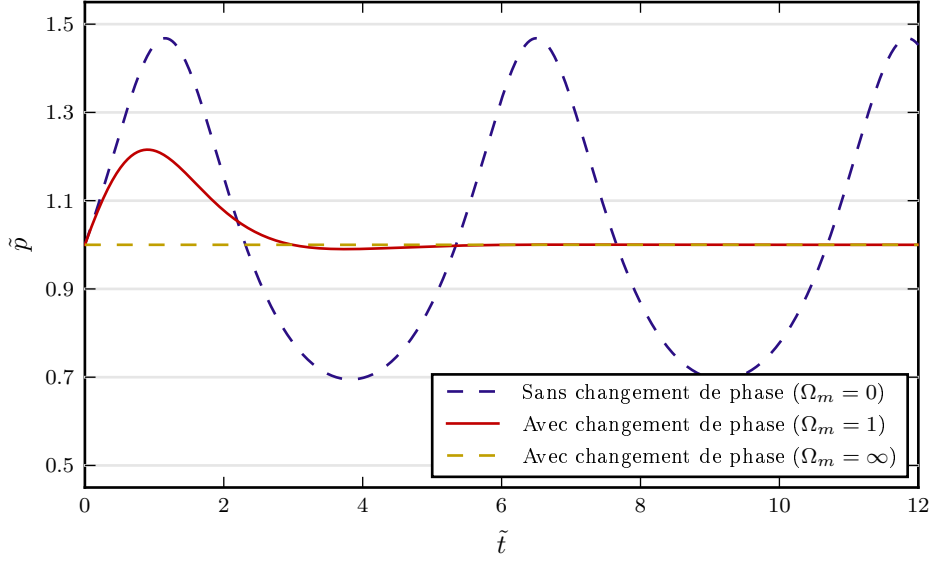


FIGURE 5.10 – Évolution de la pression adimensionnée dans la poche de gaz avec changement de phase pour $S = 0.1$, $\gamma = 1.4$, $\Omega_q = 0$, $\Omega_m = 1$ d'après (5.20). Comparaison avec le modèle adiabatique (5.8) et l'équilibre instantané (5.17).

On rappelle les lois d'état

$$p = (\gamma_g - 1) \mathcal{C}_{vg} \frac{M_g}{z} T_g,$$

$$T_g = T_0 + \frac{\mathcal{E}_g - M_g e_{g,0}}{\mathcal{C}_{vg} M_g},$$

$$T_l = T_0 + \frac{\mathcal{E}_l - M_l e_{l,0}}{\mathcal{C}_{vl} M_l}.$$

Les énergies de référence $e_{g,0}$ et $e_{l,0}$ doivent être choisies telles que

$$e_{g,0} - e_{l,0} = h_{g,0} - h_{l,0} - p_0(\tau_{g,0} - \tau_{l,0}) \quad (5.24)$$

$$= \mathcal{L} - p_0(\tau_{g,0} - \tau_{l,0}) \quad (5.25)$$

$$\simeq \mathcal{L} - p_0 \tau_{g,0} \quad (5.26)$$

$$(5.27)$$

où \mathcal{L} est la chaleur latente. En pratique, on prendra

$$e_{l,0} = 0, \quad e_{g,0} = \mathcal{L} - p_0 \tau_{g,0},$$

d'où

$$p = (\gamma_g - 1) \mathcal{C}_{vg} \frac{M_g}{z} T_g,$$

$$T_g = T_0 + \frac{\mathcal{E}_g - M_g(\mathcal{L} - p_0 \tau_{g,0})}{\mathcal{C}_{vg} M_g},$$

$$T_l = T_0 + \frac{\mathcal{E}_l}{\mathcal{C}_{vl} M_l}.$$

Comme précédemment, les flux de masse et de chaleur seront choisis de manière à respecter le Second Principe de la Thermodynamique à l'aide du Théorème 5.9.

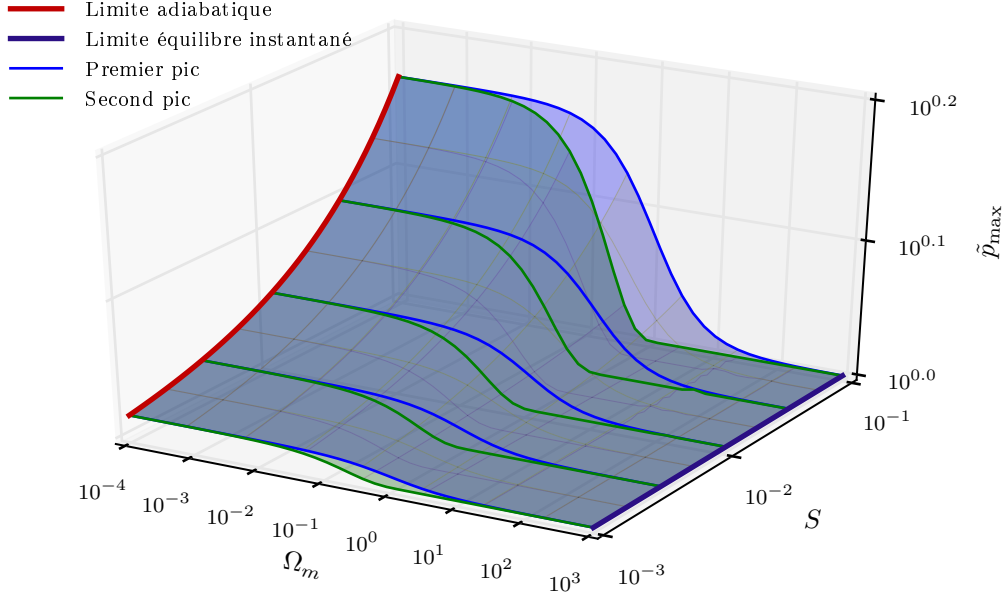


FIGURE 5.11 – Pression maximale adimensionnée d’après (5.20) pour le premier pic (en bleu) et le second pic (en vert) en fonction du nombre d’impact S et du temps caractéristique de relaxation adimensionné Ω_m en échelle logarithmique, pour $\gamma = 1.4$, $\Omega_q = 0$. Les courbes rouge et bleu foncé correspondent respectivement aux cas limites adiabatique (5.8) et d’équilibre thermodynamique instantané (5.17).

Forme adimensionnée Les lois d’état sont écrites sous forme adimensionnée comme

$$\tilde{p} = \frac{\tilde{M}_g}{\tilde{z}} \tilde{T}_g, \quad (5.29a)$$

$$\tilde{T}_g = 1 + (\gamma_g - 1) \left(\frac{\tilde{\mathcal{E}}_g}{\tilde{M}_g} - \Lambda + 1 \right), \quad (5.29b)$$

$$\tilde{T}_l = 1 + \frac{\tilde{\mathcal{E}}_l}{\mathcal{C}_l \tilde{M}_l}, \quad (5.29c)$$

où \tilde{M}_l est la masse de liquide adimensionnée, définie par

$$\tilde{M}_l = \frac{M_l}{M_{l,0}},$$

et Λ est la chaleur latente adimensionnée défini par

$$\Lambda = \frac{M_{g,0} \mathcal{L}}{p_0 z_0}.$$

La pression de saturation, exprimée par l’équation de Clapeyron (1.7), s’écrit sous forme adimensionnée

$$\tilde{p}^{\text{sat}}(\tilde{T}) = \frac{p^{\text{sat}}(\tilde{T})}{p_0} = \exp \left(\Lambda \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}} \right) \right). \quad (5.30)$$

Remarque 5.11. Pour l’étude de l’évaporation le long d’une paroi chaude à pression constante p_0 , Jakob a introduit le nombre sans dimension, dit *nombre de Jakob*,

$$\text{Ja} = \frac{C_p (T_{\text{paroi}} - T^{\text{sat}}(p_0))}{\mathcal{L}}, \quad (5.31)$$

où \mathcal{L} est la chaleur latente spécifique, C_p est la capacité thermique isobare du liquide, T_{paroi} est la température de la paroi et $T^{\text{sat}}(p_0)$ est la température de saturation à la pression de référence p_0 . Ce

nombre, qui caractérise l'évolution de ce problème, peut être interprété comme le rapport de l'énergie spécifique disponible sous forme de chaleur sur l'énergie spécifique nécessaire au changement de phase. Il n'est pas une propriété intrinsèque du fluide mais dépend d'un contexte particulier.

On peut faire apparaître lors de l'adimensionnement de la loi d'état le nombre sans dimension

$$\ll \text{Ja} \gg = \frac{\gamma_g \mathcal{C}_{vg} T_0}{\mathcal{L}},$$

que l'on peut baptiser nombre de Jakob par analogie. Cependant il n'a pas d'interprétation physique comparable à celle de la grandeur définie par (5.31). Sa généralisation dans des cas autres que le gaz parfait n'est pas évidente. Enfin, numériquement, il est malcommode dans le cas limite $\mathcal{L} = 0$.

Pour cela, on travaille dans cette thèse avec le nombre

$$\Lambda = \frac{\mathcal{L}}{p\tau_g}, \quad (5.32)$$

que l'on appelle *chaleur latente adimensionnée*. Il a déjà été évoqué à la Remarque 1.6 et apparaît naturellement dans l'adimensionnement du modèle de Bagnold avec changement de phase.

Pour un gaz parfait, les deux sont reliés par

$$\frac{\gamma_g \mathcal{C}_{vg} T_0}{\mathcal{L}} = \frac{\gamma_g}{(\gamma_g - 1)\Lambda}.$$

◁

Sous forme adimensionnée, le système (5.22) s'écrit

$$\frac{d^2 \tilde{z}}{d\tilde{t}^2} = \tilde{p} - 1, \quad (5.33a)$$

$$\frac{d\tilde{\mathcal{E}}_g}{d\tilde{t}} = -\tilde{p} \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}} + \Omega_q (\tilde{T}_l - \tilde{T}_g) + \frac{\tilde{\mathcal{E}}_g + \tilde{p}\tilde{z}}{\tilde{M}_g} \frac{d\tilde{M}_g}{d\tilde{t}}, \quad (5.33b)$$

$$\frac{d\tilde{M}_g}{d\tilde{t}} = -\Omega_m \left(\tilde{p} - \tilde{p}^{\text{sat}}(\tilde{T}) \right), \quad (5.33c)$$

$$\frac{d\tilde{\mathcal{E}}_l}{d\tilde{t}} = -\Omega_q (\tilde{T}_l - \tilde{T}_g) - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_g + \tilde{p}\tilde{z}}{\tilde{M}_g} \frac{d\tilde{M}_g}{d\tilde{t}}, \quad (5.33d)$$

$$\frac{d\tilde{M}_l}{d\tilde{t}} = \frac{1}{\mathfrak{M}_{l,0}} \Omega_m \left(\tilde{p} - \tilde{p}^{\text{sat}}(\tilde{T}_l) \right), \quad (5.33e)$$

où

$$\mathfrak{M}_{l,0} = \frac{M_{l,0}}{M_{g,0}}.$$

avec pour conditions initiales

$$\tilde{z}(0) = 1, \quad \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}}(0) = \pm\sqrt{S}, \quad \tilde{\mathcal{E}}_g(0) = \Lambda - 1, \quad \tilde{\mathcal{E}}_l(0) = 0, \quad \tilde{M}_g(0) = 1, \quad \tilde{M}_l(0) = 1.$$

Ces conditions initiales correspondent à

$$\tilde{p}(0) = 1, \quad \tilde{T}_g(0) = 1, \quad \tilde{T}_l(0) = 1,$$

c'est-à-dire un état initial d'équilibre entre les phases.

Nombres sans dimension Le modèle fait intervenir les nombres sans dimension suivants : γ_g , S , Ω_q , Ω_m , Λ , \mathcal{C}_l et enfin $\mathfrak{M}_{l,0}$. Les valeurs réalistes de Ω_q et Ω_m sont difficiles à estimer et un large domaine de valeurs est étudié dans tout ce chapitre. La chaleur latente adimensionnée Λ est une grandeur intrinsèque au fluide de l'ordre de 10 pour le méthane à 111 K comme pour l'eau à 373 K. Une valeur réaliste de \mathcal{C}_l a été discutée à la Remarque 5.8. Enfin, les capacités thermiques du liquide et du gaz étant du même ordre de grandeur, il est raisonnable de supposer $\mathfrak{M}_{l,0} \sim \mathcal{C}_l$.

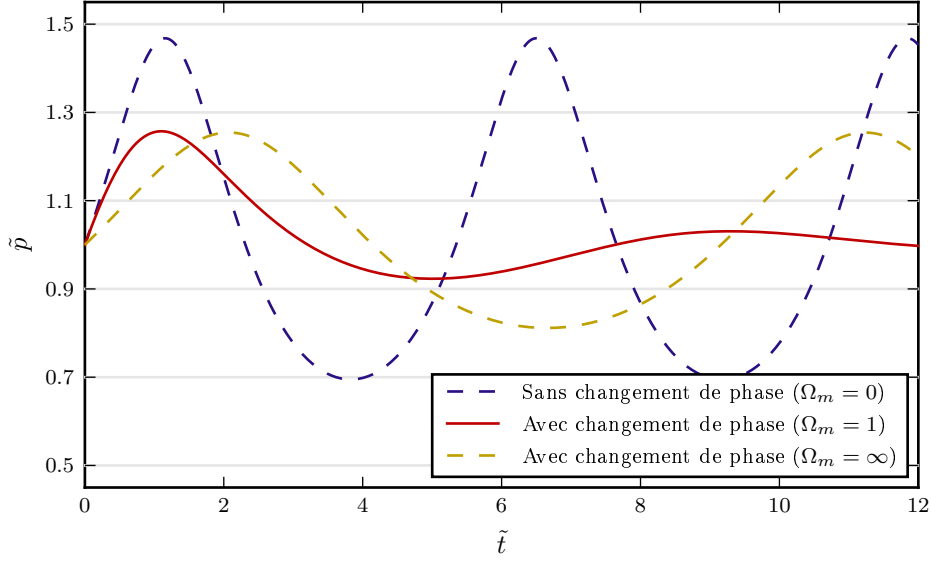


FIGURE 5.12 – Évolution de la pression adimensionnée dans la poche de gaz avec changement de phase d’après (5.33) pour $S = 0.1$, $\gamma = 1.4$, $\Omega_q = 0$ et $\mathfrak{C}_l = 100$, pour trois valeurs de Ω_m .

Résultats et commentaires La Figure 5.12 présente l’évolution au cours du temps de la pression dans le cas de changement de phase avec une masse finie de liquide. Les tendances observées sont similaires à celles observées précédemment (par exemple à la Figure 5.7). Les Figures 5.13 et 5.14 présentent les pressions maximales adimensionnées en fonction de S et Ω_m pour diverses valeurs de Λ , \mathfrak{C}_l et $\mathfrak{M}_{l,0}$.

Rôle de \mathfrak{C}_l et $\mathfrak{M}_{l,0}$ La Figure 5.13 présente des pressions maximales pour plusieurs valeurs de \mathfrak{C}_l et $\mathfrak{M}_{l,0}$. Pour les ordres de grandeur présentés ici, seul le coefficient \mathfrak{C}_l joue un rôle important.

Remarque 5.12. Dans [ABG12], le rôle des nombres sans dimensions \mathfrak{C}_l et $\mathfrak{M}_{l,0}$ est joué par les nombres $\frac{\mathfrak{C}_l}{\mathfrak{M}_{l,0}}$ et $\mathfrak{M}_{l,0}$, baptisés respectivement κ_l et ν_0 . L’influence de ν_0 sur la pression maximale, observée dans [ABG12], vient de la capacité thermique totale du liquide. C’est pour mettre en évidence ce phénomène que des nombres sans dimensions légèrement différents ont été choisis. ◁

Rôle de Λ Le rôle joué par l’aspect thermique peut être confirmé en faisant varier la chaleur latente adimensionnée Λ . Les résultats ont été tracés sur la Figure 5.14. Quand la chaleur latente tend vers 0 l’évolution du système tend vers le résultat du modèle isotherme représenté à la Figure 5.11. En effet, le problème est alors purement mécanique. Quand la chaleur latente devient importante, le retour à l’équilibre affecte moins la variation de pression. (Voir aussi la Remarque 1.6.) Ce phénomène est schématisé sur la Figure 6.1.

Rôle de Ω_q et Ω_m Les résultats précédents n’incluaient qu’un phénomène à la fois : soit la relaxation thermique contrôlée par Ω_q , soit le changement de phase contrôlé par Ω_m . Chacun de ces deux effets pris séparément montre un phénomène de résonance où les oscillations du piston sont amorties. Les derniers résultats de cette section couplent ces deux phénomènes. Sur la Figure 5.15, les pressions maximales ont été représentées pour plusieurs valeurs de Ω_q et Ω_m pour un nombre d’impact fixé. Pour une raison qui reste à expliquer, l’équilibre thermique $\Omega_q \simeq \infty$ diminue l’amplitude de la résonance due au changement de phase et vice-versa.

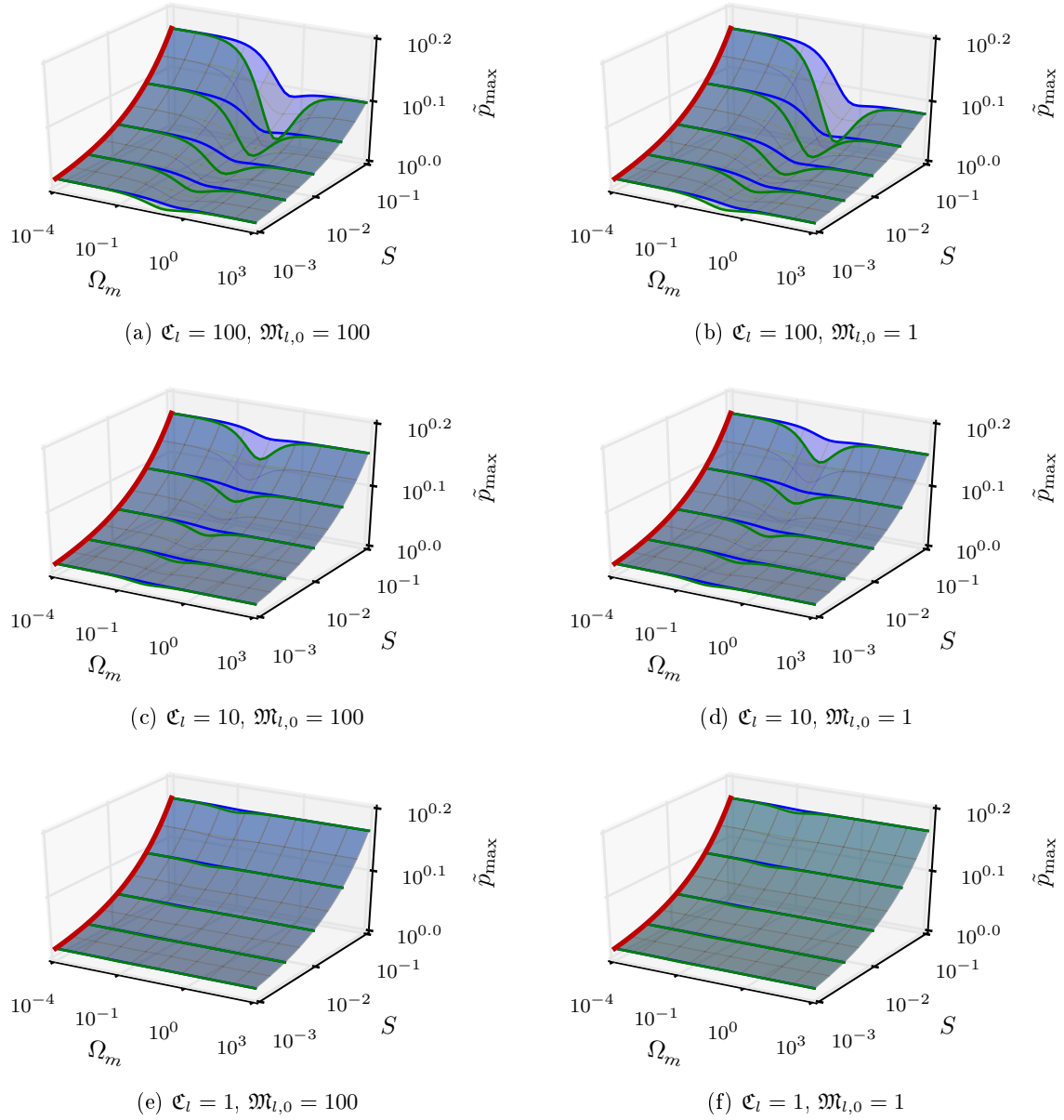


FIGURE 5.13 – Pression maximale adimensionnée pour le premier pic (bleu) et le second pic (vert) d'après (5.33) en fonction du nombre d'impact S et du temps caractéristique de relaxation adimensionné Ω_m en échelle logarithmique pour trois valeurs de \mathfrak{E}_l et deux valeurs de $\mathfrak{M}_{l,0}$, avec $\Omega_q = 0$, $\Lambda = 10$, $\gamma = 1.4$.

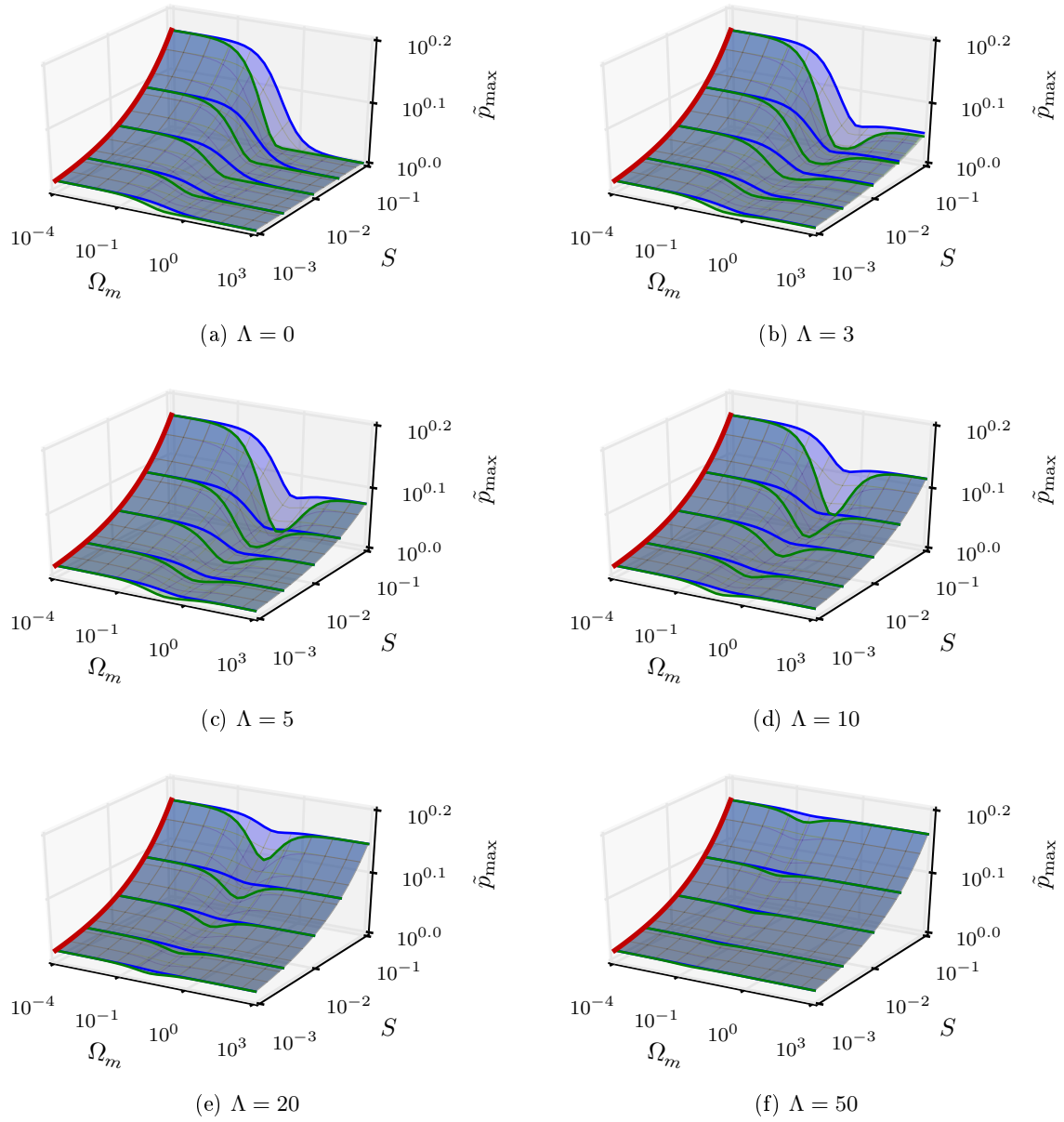


FIGURE 5.14 – Pression maximale adimensionnée pour le premier pic (bleu) et le second pic (vert) d’après (5.33) en fonction du nombre d’impact S et du temps caractéristique de relaxation adimensionné Ω_m en échelle logarithmique pour six valeurs de Λ , avec $\Omega_q = 0$, $\mathfrak{C}_l = 100$, $\mathfrak{M}_{l,0} = 100$, $\gamma = 1.4$.

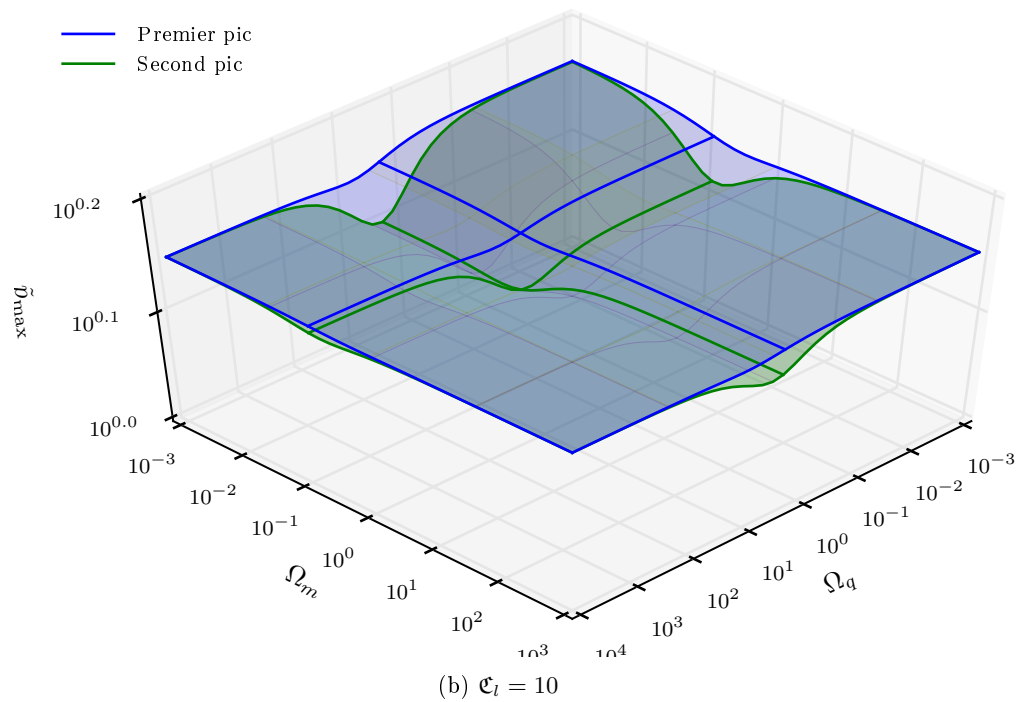
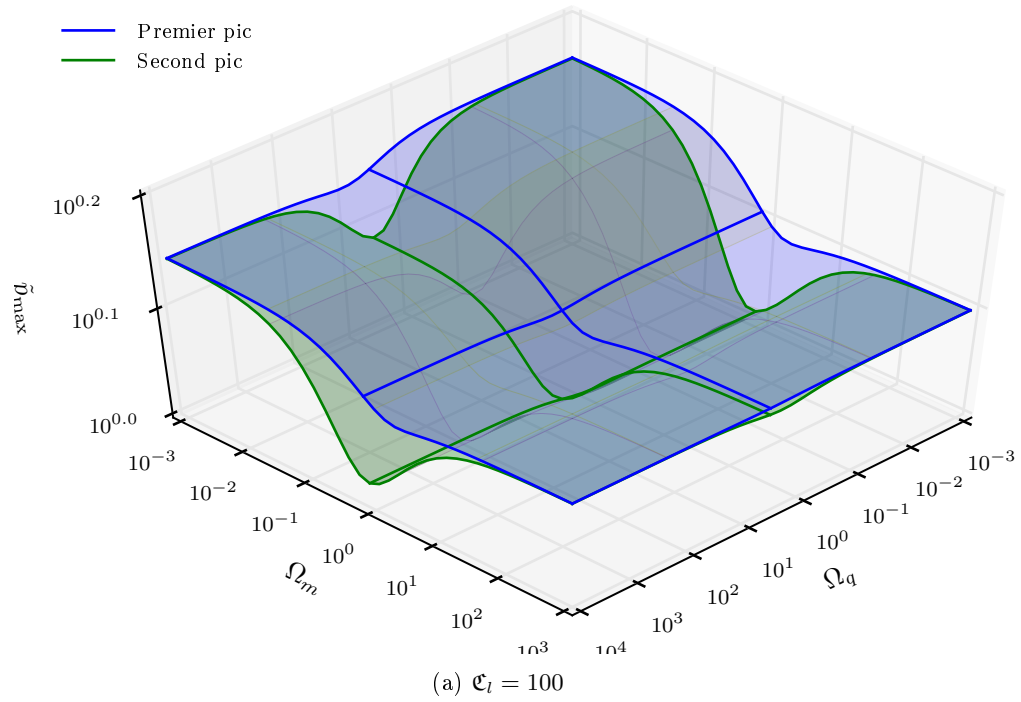


FIGURE 5.15 – Pression maximale adimensionnée pour le premier pic (bleu) et le second pic (vert) d’après (5.33) en fonction des temps caractéristiques de relaxation adimensionné thermique Ω_m et thermique Ω_q en échelle logarithmique pour deux valeurs de \mathfrak{C}_l , avec $S = 0.1$, $\mathfrak{M}_{l,0} = 100$, $\gamma = 1.4$.

5.2 Le problème du piston (Bagnold 1D)

Dans cette section, le même scénario d'un piston comprimant une poche de gaz sera simulé numériquement en 1D à l'aide du modèle bifluide avec changement de phase présenté dans les chapitres précédents de cette thèse.

5.2.1 Présentation

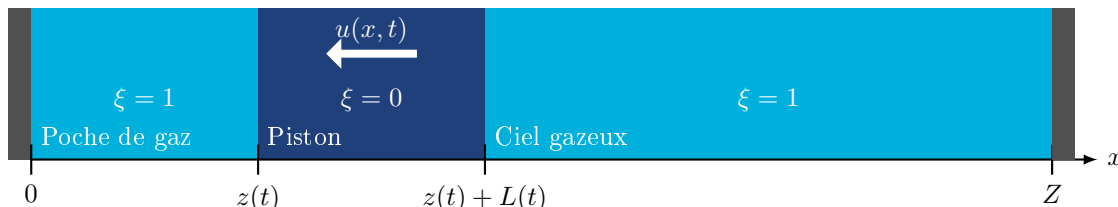


FIGURE 5.16 – Schéma du problème du piston en 1D.

Les conditions initiales du problème s'écrivent

$$z(t=0) = z_0, \quad L(t=0) = L_0, \quad (5.34a)$$

$$\forall x \in [0, z_0], \quad \xi(x, 0) = 1, \quad u(x, 0) = u_0 \frac{x}{z_0}, \quad (5.34b)$$

$$\forall x \in [z_0, z_0 + L_0], \quad \xi(x, 0) = 0, \quad u(x, 0) = u_0, \quad (5.34c)$$

$$\forall x \in [z_0 + L_0, Z], \quad \xi(x, 0) = 1, \quad u(x, 0) = u_0 \frac{Z - x}{Z - z_0 - L_0}, \quad (5.34d)$$

et par ailleurs

$$\forall x \in [0, Z], \quad p(x, 0) = p_0, \quad T(x, 0) = T_0. \quad (5.34e)$$

Les vitesses ont été choisies de manière à avoir $u = u_0$ dans le liquide, continuité de u à l'interface liquide-gaz et $u = 0$ aux parois. Avec l'orientation choisie pour l'axe x , la compression de la poche de gaz correspond à $u_0 < 0$.

On s'intéresse à la pression à la paroi $p_{\text{paroi}}(t) = p(x=0, t)$.

5.2.2 Adimensionnement

Dans les paragraphes qui suivent, le problème du piston va être réécrit sous forme adimensionnée. Le choix de l'adimensionnement s'inspire de celui de [BGGL13]. Les variables adimensionnées, notées par un tilde, seront donc définies de la manière suivante :

$$x = z_0 \tilde{x}, \quad t = \sqrt{\frac{\rho_{l,0}}{p_0}} z_0 L_0 \tilde{t}, \quad u = \sqrt{\frac{p_0 z_0}{\rho_{l,0} L_0}} \tilde{u}, \quad \rho = \rho_{l,0} \tilde{\rho}, \quad p = p_0 \tilde{p}, \quad T = T_0 \tilde{T}.$$

Les énergies spécifiques et les flux de masse seront adimensionnés respectivement comme u^2 et ρu .

$$e = \frac{p_0 z_0}{\rho_{l,0} L_0} \tilde{e}, \quad J = \sqrt{\frac{\rho_{l,0} p_0 z_0}{L_0}} \tilde{J}.$$

Les équations de conservation s'écrivent donc

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{p_0 \rho_{l,0}}{z_0 L_0}} [\partial_{\tilde{t}} \tilde{\rho} + \partial_{\tilde{x}}(\tilde{\rho} \tilde{u})] &= 0, \\ \frac{p_0}{L_0} \left[\partial_{\tilde{t}}(\tilde{\rho} \tilde{u}) + \partial_{\tilde{x}} \left(\tilde{\rho} \tilde{u}^2 + \frac{1}{a_0} \tilde{p} \right) \right] &= 0, \\ \frac{p_0}{z_0} \sqrt{\frac{p_0}{\rho_{l,0}}} \left[\partial_{\tilde{t}}(\tilde{\rho} \tilde{E}) + \partial_{\tilde{x}} \left(\left(\tilde{\rho} \tilde{E} + \frac{1}{a_0} \tilde{p} \right) \tilde{u} \right) \right] &= 0, \\ \sqrt{\frac{p_0 \rho_{l,0}}{z_0 L_0}} \left[\partial_{\tilde{t}}(\xi \tilde{\rho}) + \partial_{\tilde{x}}(\xi \tilde{\rho} \tilde{u}) - \tilde{J} \partial_{\tilde{x}} \xi \right] &= 0,\end{aligned}$$

où a_0 est le rapport d'aspect

$$a_0 = \frac{L_0}{z_0}.$$

Les conditions initiales adimensionnées s'écrivent

$$\forall \tilde{x} \in [0, 1], \quad \xi(\tilde{x}, 0) = 1, \quad u(\tilde{x}, 0) = -\sqrt{S} \tilde{x}, \quad (5.35a)$$

$$\forall \tilde{x} \in [1, 1 + a_0] \quad \xi(\tilde{x}, 0) = 0, \quad u(\tilde{x}, 0) = -\sqrt{S}, \quad (5.35b)$$

$$\forall \tilde{x} \in [1 + a_0, b_0], \quad \xi(\tilde{x}, 0) = 1, \quad u(\tilde{x}, 0) = -\sqrt{S} \frac{b_0 - \tilde{x}}{b_0 - 1 - a_0}, \quad (5.35c)$$

et par ailleurs

$$\forall \tilde{x} \in [0, b_0], \quad p(\tilde{x}, 0) = 1, \quad T(\tilde{x}, 0) = 1, \quad (5.35d)$$

où b_0 est le rapport d'aspect

$$b_0 = \frac{Z}{z_0},$$

et S est le nombre d'impact

$$S = \frac{\rho_{l,0} L_0 u_0^2}{p_0 z_0}.$$

L'enthalpie spécifique, adimensionnée comme e , s'écrit

$$\tilde{h} = \tilde{e} + \frac{1}{a_0} \frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}}.$$

Les lois d'état s'écrivent sous forme adimensionnée :

$$\tilde{\rho}_g(\tilde{p}, \tilde{T}) = \text{DR} \frac{\tilde{p}}{\tilde{T}}, \quad (5.36a)$$

$$\tilde{h}_g(\tilde{p}, \tilde{T}) = \frac{a_0}{\text{DR}} \frac{1}{1 - \chi_g} (\tilde{T} - 1) + a_0 \frac{\Lambda}{\text{DR}}, \quad (5.36b)$$

$$\tilde{\rho}_l(\tilde{p}, \tilde{T}) = \frac{1 + \frac{1 + \kappa_l \chi_l}{\kappa_l} (\tilde{p} - 1)}{\tilde{T}}, \quad (5.36c)$$

$$\tilde{h}_l(\tilde{p}, \tilde{T}) = a_0 \kappa_l (\tilde{T} - 1), \quad (5.36d)$$

où

$$\kappa_k = \frac{\rho_{k,0} \gamma_k \mathcal{C}_{vk} T_0}{p_0},$$

est la capacité thermique adimensionnée de la phase k et

$$\chi_k = \frac{p_0}{c_{k,0}^2 \rho_{k,0}} = \frac{p_0}{\gamma_k (\gamma_k - 1) \mathcal{C}_{vk} T_0 \rho_{k,0}}.$$

est son indice de compressibilité.

Pour un gaz parfait, les deux sont reliés par

$$\kappa_k = 1 + \kappa_k \chi_k.$$

Des valeurs pour ces coefficients thermodynamiques sont données à la Table 5.1.

La chaleur latente adimensionnée est comme précédemment définie par

$$\Lambda = \frac{\mathcal{L}\rho_{g,0}}{p_0}.$$

	Gaz (g)	Liquide (l)
χ	0.714	$9 \cdot 10^{-5}$
κ	3.4	3663
Λ	7.5	
DR	$2 \cdot 10^{-3}$	

TABLE 5.1 – Coefficients thermodynamiques adimensionnés approchant le méthane à 111 K.

Avec cet adimensionnement, le flux de masse adimensionné \tilde{J} s'écrit

$$\tilde{J}_{l \rightarrow g} = -\text{DR}\Omega_m \left(\tilde{p} - \tilde{p}^{\text{sat}}(\tilde{T}) \right),$$

où Ω_m est défini par (5.21) et \tilde{p}^{sat} par (5.30).

Remarque 5.13. L'omniprésence de a_0 et DR s'explique par le choix qui a été fait sur l'adimensionnement de u (ou de manière équivalent de t). Ce choix a pour but de faire apparaître le nombre S de Bagnold comme dans le modèle 0D. \triangleleft

Lien avec les nombres sans dimension de la Section 5.1. Les nombres sans dimension a_0 , DR et χ_l n'apparaissent pas dans le cas du piston incompressible. Le rapport d'aspect b_0 avait été choisi par souci de simplicité à la Section 5.1. L'indice de compressibilité χ_g joue le rôle de γ_g . Ils sont reliés par

$$\chi_g = \frac{1}{\gamma_g}.$$

Les nombres S , Λ et Ω_m jouent le même rôle que pour le modèle 0D. Le modèle 1D ne comprend pas d'échange thermique entre le liquide et le gaz, soit $\Omega_g = 0$. Enfin, le rôle de \mathfrak{C}_l et $\mathfrak{M}_{l,0}$ doit être joué par κ_l ainsi que par la conductivité thermique du liquide. Dans les calculs qui suivent, c'est la diffusion thermique qui domine et son effet n'a pas été quantifié précisément par un nombre sans dimension.

La Figure 5.17 compare quelques résultats numériques obtenus avec le modèle 1D au modèle 0D en l'absence de changement de phase. Pour des nombres d'impact élevés ($S > 10$) la compressibilité du liquide devient dominante, comme étudié dans [BGGL13]. L'effet du changement de phase dans ce domaine a été discuté dans [ABG16]. Dans la suite de ce chapitre, seul le domaine où le liquide est quasi incompressible ($S < 1$) sera discuté.

5.2.3 Oscillations sans changement de phase

Contrairement au modèle 0D présenté dans la section précédente, le modèle du piston 1D isentropique n'est pas nécessairement périodique. Le résultat présenté à la Figure 5.18 a été simulé avec le code Flux-IC-1D pour le modèle adimensionné présenté ci-dessus sans changement de phase. Une diminution de la hauteur des pics de pression peut être observée.

Ce phénomène peut s'expliquer par la description en 1D d'un ciel gazeux infini. (Pour ce calcul, une longueur de gaz $8z_0$ a été calculé au dessus du piston, puis une condition limite de type Neumann a été utilisée au bord du domaine de calcul.) Dans le petit modèle, le ciel gazeux infini était supposé avoir une pression constante et uniforme p_0 . Ce n'est pas le cas dans le modèle 1D, ni dans la réalité. Le mouvement du piston génèrent des ondes de pression qui partent dans le ciel gazeux (à la manière d'un batteur à houle générant des vagues). Ces ondes sont visibles sur la carte de pression présentée à la Figure 5.19 pour le même cas test. L'énergie portée par ces ondes est perdues par le système composé du piston et de la poche de gaz, ce qui explique l'amortissement des oscillations.

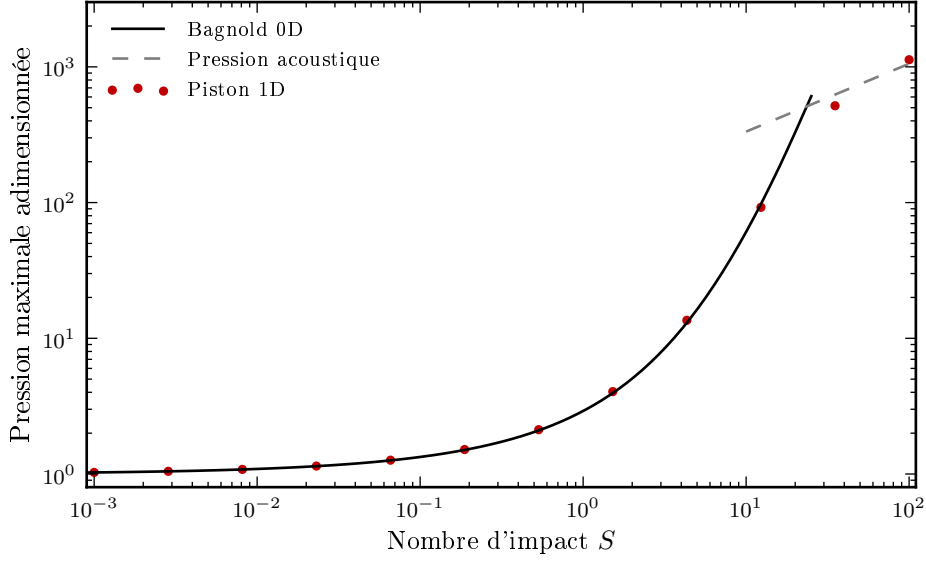


FIGURE 5.17 – Pression maximale adimensionnée en fonction du nombre d’impact pour le modèle 1D calculées avec le code Flux-IC-1D sans changement de phase. Les résultats sont comparés à la courbe obtenue pour le modèle 0D (voir Figure 5.4). Pour des nombres d’impacts très grands, c’est la pression acoustique qui domine, comme discuté dans [BGGL13].

Cette hypothèse peut être vérifiée en observant l’amortissement des oscillations pour des ciels gazeux de différentes tailles. Le résultat est tracé à la Figure 5.20. Trois régimes peuvent y être observés :

- Pour des domaines de petite taille $Z \lesssim 10 z_0$, la pression s’homogénéise presque instantanément dans le ciel gazeux, qui se comporte comme une deuxième poche de gaz.
- Pour des tailles supérieures $10 z_0 \lesssim Z \lesssim 100 z_0$, des ondes de pressions circulent dans le ciel gazeux. Selon la dimension du domaine, elles peuvent être en phase ou non avec les oscillations du piston et influencent donc positivement ou négativement les pressions à la paroi.
- Enfin, pour de très grands ciels gazeux $100 z_0 \lesssim Z$, les ondes de pression générées par le piston n’ont pas le temps de traverser tout le domaine, d’être réfléchies à la paroi supérieure et de revenir avant le deuxième pic de pression. Cependant, la pression à la paroi n’est pas complètement indépendante de Z en raison de la condition initiale (5.34d) qui dépend de Z . En prenant initialement une vitesse homogène indépendante de Z dans le ciel gazeux, l’amortissement entre le premier et le deuxième pic est bien indépendant de Z pour un ciel gazeux suffisamment grand.

Afin d’identifier l’effet amortissant du changement de phase dans la poche de gaz, les prochains calculs en 1D ne se feront pas avec un ciel gazeux infini.

Remarque 5.14. Dans le cas 1D, la solution au problème du piston avec gravité n’est en général pas périodique. Elle est la superposition des oscillations périodiques du piston avec une montée en pression due à l’établissement d’un gradient de pression dans le gaz. Dans le cas d’un ciel gazeux infini, la pression à la paroi tend vers l’infini quand t tend vers l’infini. Ceci vient perturber notre étude de l’amortissement des oscillations. Par simplicité, on a donc choisi de ne pas prendre en compte la gravité dans cette étude. \triangleleft

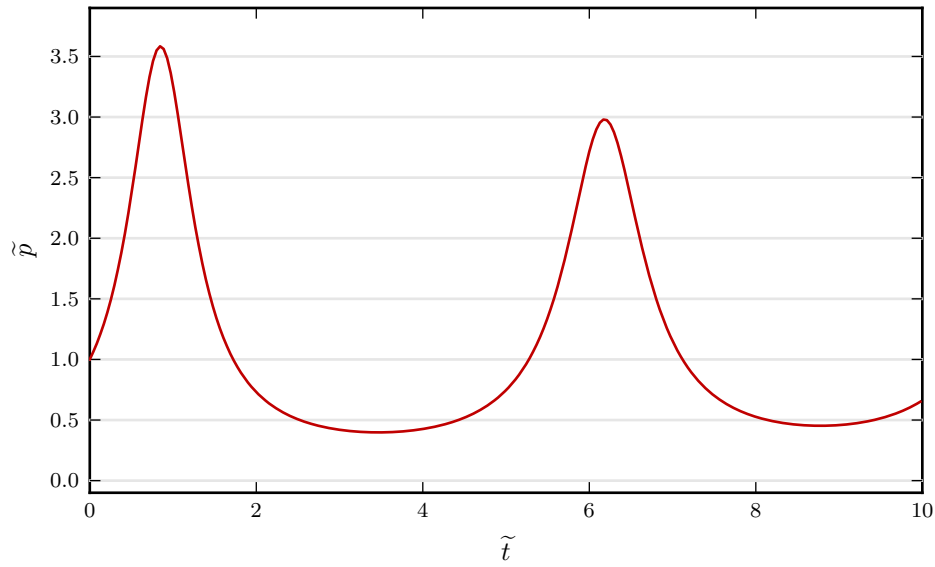


FIGURE 5.18 – Évolution de la pression adimensionnée à la paroi en fonction du temps adimensionné pour $S = 1$ et une condition limite ouverte (Neumann) dans le ciel gazeux. Le calcul a été effectué avec Flux-IC-1D sans changement de phase sur un maillage de 100 mailles de tailles 0.1 unités adimensionnées avec les grandeurs adimensionnées du méthane.

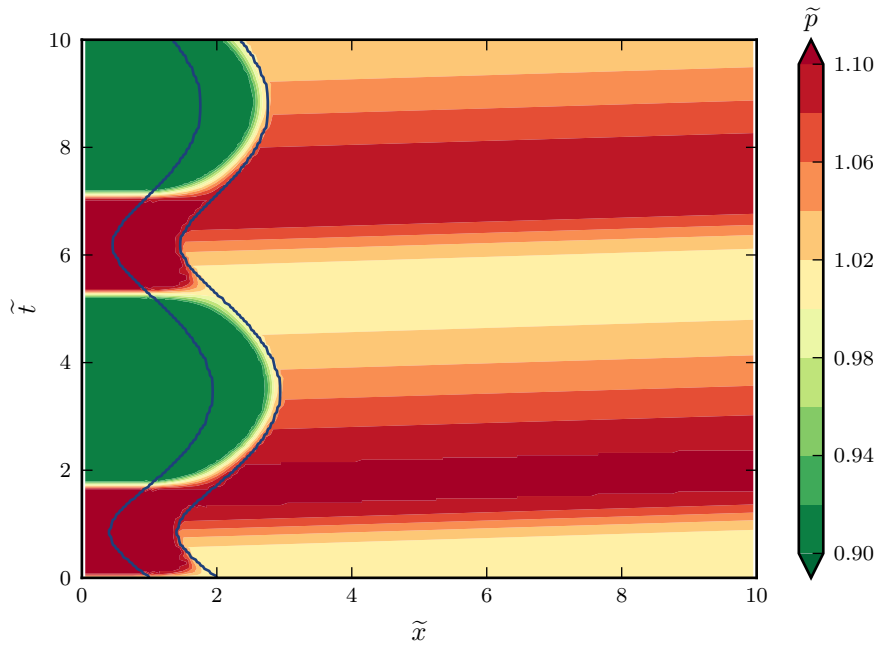


FIGURE 5.19 – Carte de pression (tronquée) en fonction de la position et du temps en variables adimensionnées pour $S = 1$ et une condition limite ouverte (Neumann) dans le ciel gazeux, (calcul de la Figure 5.18 avec Flux-IC-1D sans changement de phase). Les pressions ont été tronquées entre 0.9 et 1.1 pour mieux faire apparaître les ondes de pression dans le ciel gazeux. Les courbes bleues correspondent à la position des interfaces liquide-vapeur et donc du piston au cours du temps. Les droites isobares dans le ciel gazeux (pour $\tilde{x} > 2$) ont une pente correspondant à la vitesse du son du gaz.

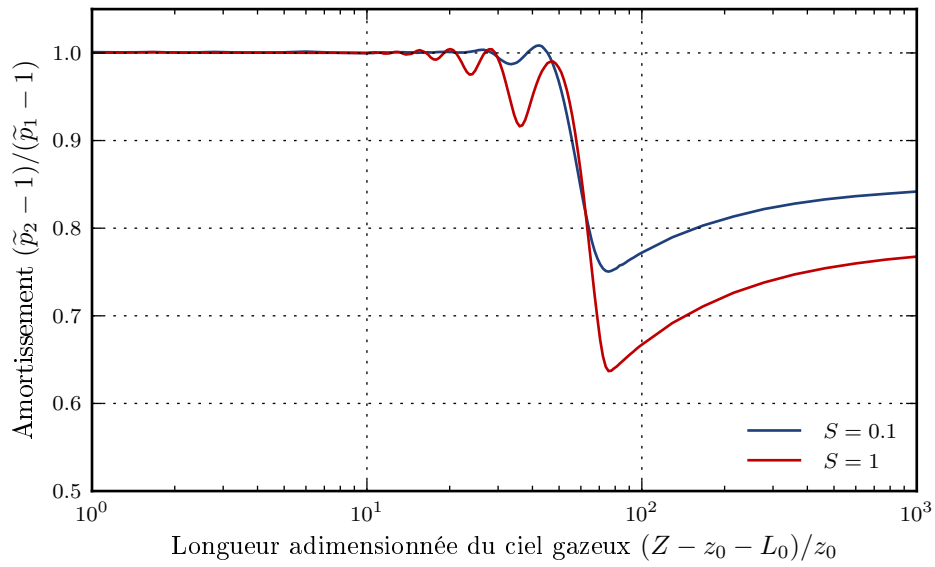


FIGURE 5.20 – Amortissement adiabatique en fonction de la longueur adimensionnée du ciel gazeux pour $S = 1$. L’amortissement est quantifié comme le rapport de la hauteur relative du second pic de pression $\tilde{p}_2 - 1$ sur la hauteur relative du premier pic de pression $\tilde{p}_1 - 1$. À la limite, quand la taille du ciel gazeux tends vers l’infini, on retrouve le même amortissement que pour la condition limite de type Neumann présentée à la Figure 5.18. Les calculs ont été effectués avec le code Flux-IC-1D sans changement de phase.

5.2.4 Changement de phase

Enfin, pour conclure ce chapitre, quelques résultats de simulation du problème du piston en 1D vont être présentés. Ils ont été calculés avec le code Flux-IC-1D appliqué aux équations adimensionnées présentées à la Section 5.2.1. Sauf mention contraire, les coefficients utilisés sont ceux de la Table 5.1 avec $a_0 = 1$ et $b_0 = 1$. Le maillage est composé de 150 mailles et le nombre CFL est fixé à 0.9.

Sur la Figure 5.21, l'évolution de la pression à la paroi en fonction du temps a été tracée pour différentes valeurs de Ω_m . Elle est comparée à l'évolution de la pression calculée par le modèle 0D de la section précédente. La chaleur latente adimensionnée a été choisie ici comme $\Lambda = 0$. L'accord entre les deux courbes est très bon.

Pour une chaleur latente non nulle, la capacité thermique adimensionnée \mathfrak{C}_l aurait du être choisie pour approcher la capacité thermique de la couche de liquide affectée par la diffusion thermique (numérique). Ceci est illustré par la Figure 5.22.

Les calculs avec un coefficient Ω_m supérieur à 10 présentent des instabilités. Une implication du terme de relaxation (ou à défaut, une diminution du pas de temps) est sans doute nécessaire dans de tels cas de relaxation raide.

La Figure 5.23 présente la hauteur des deux premiers pics de pression en fonction de S et Ω_m pour deux valeurs de Λ . Elles sont comparables aux Figures 5.11 et 5.13.

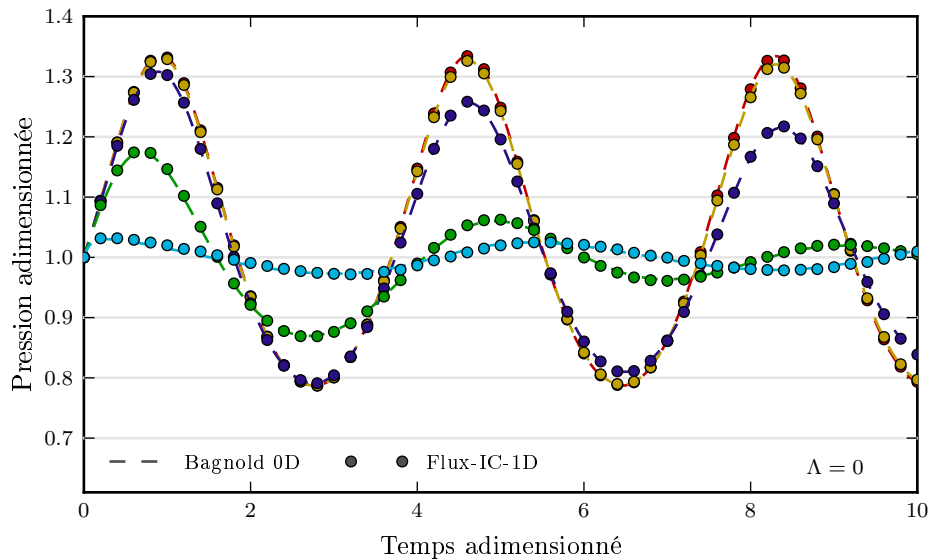


FIGURE 5.21 – Évolution de la pression adimensionnée en fonction du temps pour le modèle du piston 1D simulé avec Flux-IC-1D pour $S = 10^{-1}$ et cinq valeurs de Ω_m entre 10^{-3} et 10^1 , avec $\Lambda = 0$. Comparaison avec les résultats du modèle de Bagnold 0D avec changement de phase ($\mathfrak{C}_l = \infty$).

Enfin, la Figure 5.24 compare les profils avec et sans changement de phase au même instant $\tilde{t} = 0.5$ (compression de la poche de gaz). La pression dans la poche de gaz est inférieure avec changement de phase, comme attendu. À l'interface entre la poche de gaz et le piston, le profil de vitesse est discontinu, comme évoqué à la Section 2.1.2. Une partie du gaz est absorbée par le piston qui avance.

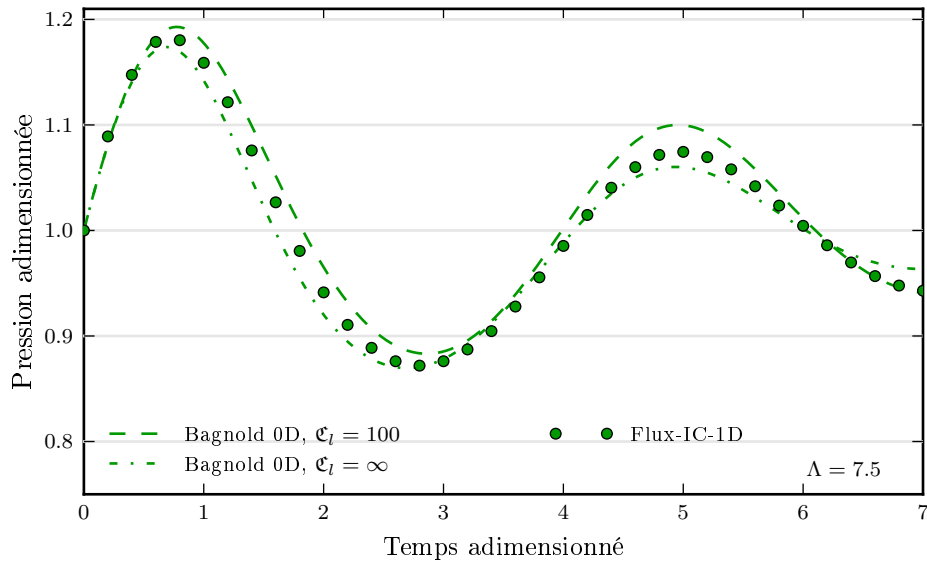


FIGURE 5.22 – Évolution de la pression adimensionnée en fonction du temps pour le modèle du piston 1D simulé avec Flux-IC-1D pour $S = 10^{-1}$ et $\Omega_m = 1$ avec $\Lambda = 7.5$. Comparaison avec les résultats du modèle de Bagnold 0D avec changement de phase pour deux valeurs de \mathfrak{C}_l .

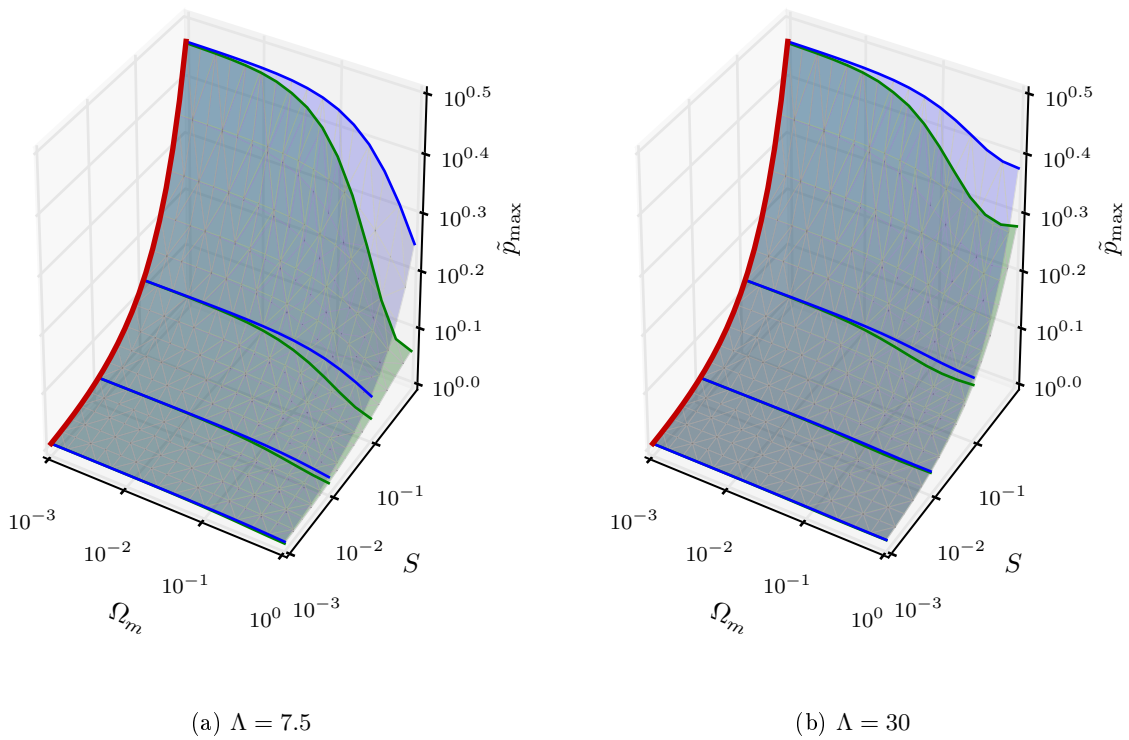


FIGURE 5.23 – Pressions maximales adimensionnées pour le premier et le second pic de pression, simulés avec le code Flux-IC-1D, en fonction de S et de Ω_m pour plusieurs valeurs de Λ .

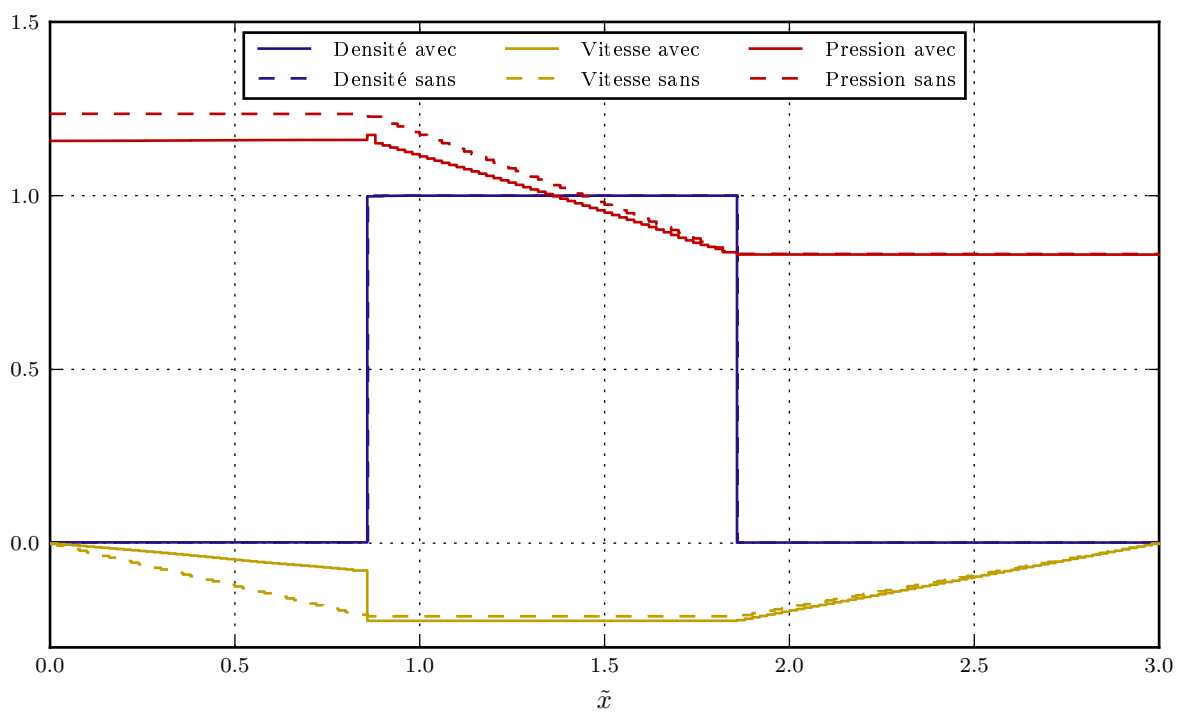


FIGURE 5.24 – Profils de plusieurs grandeurs adimensionnées à $\tilde{t} = \tilde{0.5}$ avec changement de phase ($\Omega_m = 1$) et sans changement de phase ($\Omega_m = 0$), pour $\Lambda = 0$ et $S = 10^{-1}$.

Chapitre 6

Conclusion

6.1 Bilan

Simulation du changement de phase

Dans ce mémoire, un modèle mathématique pour la simulation du changement de phase a été proposé. Il doit traiter le cas le plus général : le changement de phase hors-équilibre pour deux phases compressibles avec un petit rapport de densité. L'écriture du changement de phase comme un terme non-conservatif dans un système d'équations aux dérivées partielles hyperbolique le rend facile à linéariser pour une résolution numérique par un solveur de Riemann approché. Deux discrétisations de ce modèle ont été décrites : la première utilise un modèle moyenné pour décrire la maille où se trouve l'interface ; le second est basé sur un algorithme de reconstruction de l'interface franche.

Deux défis doivent être relevés pour la simulation du changement de phase à une interface franche :

- la gestion d'un faible rapport de densité entre les phases ;
- la gestion d'une chaleur latente très élevée.

À notre connaissance, aucun code existant ne modélise ces deux phénomènes couplés dans le cadre le plus général.

Le premier phénomène implique la possibilité de grandes variations de pression et de vitesse à l'interface quand une espèce change de phase. Le couplage du modèle de changement de phase aux équations d'Euler sous la forme d'un solveur de Riemann approché a permis de simuler sans problème des rapports de densité réalistes. Quelques cas tests ont permis de montrer le bon comportement des deux codes pour ce type de problème. Des schémas numériques similaires existent dans la littérature. Cependant l'écriture explicite d'équations de conservation avec changement de phase, pouvant être linéarisées suivant la philosophie d'un schéma de Roe, semble inédite.

Le second enjeu est la gestion de la chaleur latente impliquée dans le changement de phase. Physiquement la diffusion thermique doit jouer ici un rôle important. Numériquement, la diffusion numérique de notre schéma volume fini est suffisante pour stabiliser le système. Cependant, celle-ci est mal contrôlée et introduit des biais dans les résultats. Avec le code Flux-IC-1D, le passage de l'interface d'une maille à une autre (comme illustré à la Figure 3.4) peut par exemple entraîner un brusque changement de température à l'interface qui se traduit par un violent phénomène de changement de phase. Dans ce mémoire, la description de l'interface comme diffuse n'a été étudiée que dans le cas isotherme : la gestion de la chaleur latente pour ce type de schéma est une des difficultés du traitement rigoureux du cas non-isotherme.

Il semble nécessaire de mieux contrôler ce phénomène pour simuler le changement de phase de manière réaliste. Cela peut se faire par exemple par la résolution numérique de l'équation de la chaleur couplée aux équations de conservation avec changement de phase, comme à la Section 4.5.2.

D'autres alternatives sont envisageables. La difficulté du couplage de l'aspect thermique avec l'aspect mécanique peut être contournée, par exemple en diffusant le coût de la chaleur latente sur les mailles voisines, de manière analogue à ce qui est proposé pour la masse par [HW08] (voir aussi p. 25).

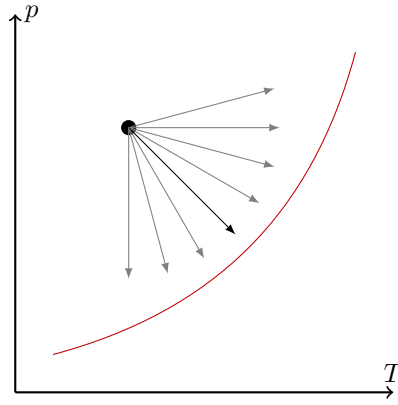


FIGURE 6.1 – Schéma du rôle de la thermique dans le retour à l'équilibre. Selon les propriétés thermiques du liquide et du gaz au voisinage de l'interface (par exemple, pour le modèle 0D de la Section 5.1.4, la capacité thermique adimensionnée \mathcal{C}_l et la chaleur latente adimensionnée Λ), l'état d'équilibre atteint sur la courbe de saturation sera différent. Un état différent correspond donc à une variation de pression différente.

Par ailleurs, pour un phénomène à la fois macroscopique et très bref comme un impact de vague, l'épaisseur de la couche limite thermique à l'interface liquide-vapeur est si faible qu'elle pourrait être décrite comme une densité d'énergie surfacique. Un tel modèle est une extension naturelle au modèle discuté au Chapitre 2. La description des grandeurs surfaciques demanderait cependant quelques ajustements de la discrétisation du modèle.

Application aux impacts avec poche de gaz

Les résultats de simulations numériques de poche de gaz avec changement de phase présentés au Chapitre 5 indiquent une diminution des pressions dans la poche de gaz et un possible amortissement des oscillations. Ces résultats sont en bon accord avec les tendances observées expérimentalement (voir par exemple la Figure 0.5 et [MB09]). Dans les simulations numériques, la disparition de masse dans la poche de gaz peut causer l'impact direct du piston sur la paroi dans certains cas extrêmes. Ce phénomène, qui n'a pas été observé expérimentalement, pourrait avoir d'importantes conséquences pour le dimensionnement de la membrane.

Cependant, pour des paramètres réalistes (de conduction thermique, voir aussi la Remarque 5.8), le changement de phase ne semble avoir qu'un effet faible voire négligeable sur les poches de gaz macroscopiques. Une forte aération du liquide pourrait amplifier l'effet du changement de phase et expliquer les résultats de [MB09].

Il a été mis en évidence que l'influence du changement de phases dépend de deux facteurs principaux.

D'une part, la vitesse de relaxation vers l'équilibre : si la réaction de changement de phase est très lente par rapport à l'impact, elle sera sans conséquence. À l'inverse, une réaction rapide imposera une pression d'équilibre dans la poche de gaz. Entre les deux, un phénomène de résonance apparaît sous la forme d'un amortissement des oscillations.

D'autre part, l'équilibre visé par la relaxation dépend des propriétés thermiques de la couche limite où un équilibre thermodynamique local doit se faire. Ainsi la présence d'une grande quantité de liquide conduit à une évolution quasi-isotherme qui se traduit par une variation de pression plus importante (voir Figure 6.1). Cet aspect du changement de phase dépend de plusieurs paramètres :

- la chaleur latente adimensionnée Λ , qui gouverne aussi la forme de la courbe de saturation ;
- le choix d'une répartition de la chaleur latente lors du changement de phase (voir aussi la Remarque 2.13 et 5.10) ;
- les capacités et conceptions thermiques des deux espèces autour de l'interface.

Ces deux derniers points sont sans aucun doute corrélés physiquement mais apparaissent séparément dans le modèle développé ici. L'interaction de ces aspects thermiques reste à étudier plus en détails.

Remarque 6.1. Sur la Figure 6.1, une des flèches indiquant un retour à l'équilibre correspond à une augmentation de pression. Il est en effet possible pour la condensation à masse totale, volume total et énergie totale constants, de causer une augmentation de pression. La chaleur latente libérée peut réchauffer le gaz, augmentant ainsi sa pression et compensant la baisse de pression due à l'aspect mécanique. (Voir aussi la Remarque B.4.) Dans les simulations présentées dans ce mémoire, la chaleur latente est supposée être capturée par le liquide et ce phénomène n'est pas présent.

Ce phénomène contre intuitif est en fait une autre forme de celui discuté au Paragraphe 0.3.2. Si un gaz pur se condensait sous l'effet d'une compression adiabatique, la chaleur latente libérée conduirait à une augmentation plus grande de sa pression, ce qui serait contraire au principe de Le Chatelier. À l'inverse, une décompression du gaz peut être compensée par de la condensation, en raison de l'augmentation de pression causée par la chaleur latente libérée. ◀

Les deux paramètres influençant le changement de phase sont difficiles à quantifier précisément, faute de données expérimentales de changement de phase rapide hors équilibre. Il est douteux qu'ils puissent facilement être mis à l'échelle pour des simulations expérimentales de *sloshing* à petite échelle.

Les simulations numériques (au moins celles présentées dans cette thèse) tendent à surestimer l'effet du changement de phase en raison de leur diffusion thermique numérique. Le scénario isotherme est le plus facile à simuler numériquement de manière quantitative. C'est aussi celui où l'effet du changement de phase est le plus important. Il peut servir de référence pour un dimensionnement « conservatif » de la membrane.

6.2 Perspectives

Impact 2D

L'étude de la poche de gaz en 1D n'est qu'un cas particulier de l'étude des impacts de vague. De premiers calculs d'impacts en 2D avec changement de phase ont été effectués [ABG16]. Bien qu'il soient grossiers, ils permettent de dégager de premières tendances.

Sur la Figure 6.3, la pression à la paroi inférieure du domaine pour le cas test de [BBDG09] (voir Figure 6.2) a été tracée avec et sans changement de phase. Le changement de phase entraîne une diminution de pression dans le gaz avant l'impact. Celui-ci a pour conséquence un plus faible ralentissement de la chute du liquide, ce qui cause un impact plus violent.

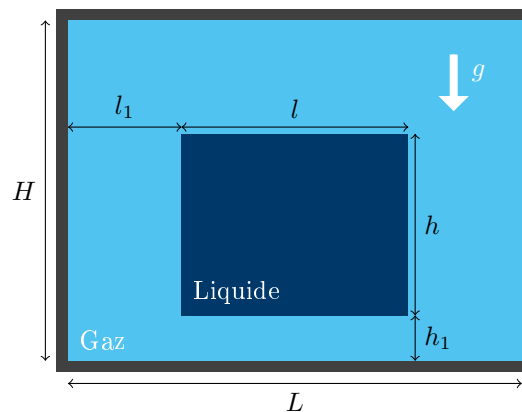


FIGURE 6.2 – Schéma du cas test d'impact simplifié de [BBDG09].

Il est maintenant nécessaire d'optimiser le code pour améliorer sa résolution et obtenir des résultats plus précis. En particulier, l'étude de l'influence du changement de phase sur un impact de forme plus réaliste reste à faire.

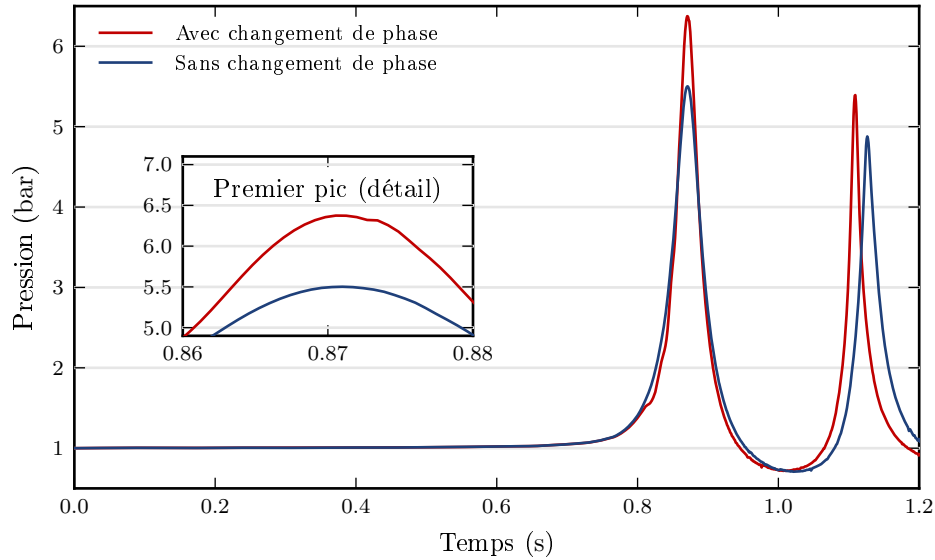


FIGURE 6.3 – Évolution de la pression au milieu de la paroi inférieure en fonction du temps pendant l’impact avec et sans changement de phase pour le cas test 2D schématisé à la Figure 6.2. Voir aussi [ABG16].

Le modèle de changement de phase présenté dans cette thèse est complexe : l’étude de l’évolution de la vague avec un modèle simplifié de disparition de gaz, par exemple par un terme source volumique, pourrait permettre de retrouver l’essentiel de l’effet qualitatif du changement de phase.

Évaporation dans les cuves de méthanier

L’évaporation du gaz dans la cuve, en raison de l’entrée de chaleur dans la cuve lors du transport du GNL, est un autre sujet d’intérêt pour GTT. Le modèle présenté dans cette thèse est assez général pour décrire ce type de phénomènes.

La Figure 6.4 présente un profil de température obtenu pour un cas test d’évaporation simplifié. Le fluide initialement de température homogène est chauffé par une source de chaleur volumique constante. Les conditions limites sont une paroi au fond de la cuve et une sortie à pression fixée au sommet de la cuve. À l’interface, le terme de changement de phase tend à maintenir la température égale à la température de saturation (ici 111 K). Le gaz s’évaporant à l’interface s’échappe par le haut du domaine.

Bien que le profil de température soit comparable avec des profils expérimentaux, ce résultat n’est aucunement représentatif d’un cas réel d’évaporation. Le modèle 1D n’inclus qu’un modèle grossier de conduction thermique sans rendre compte par exemple de la convection dans la cuve. Les ordres de grandeurs choisis ici n’ont aucun rapport avec un cas réel : le code, limité par la condition CFL sur la vitesse du son du liquide, n’est pas adapté à la simulation d’une évaporation durant plusieurs jours (voir aussi la Section 1.3). Une discrétisation du modèle de changement de phase plus adaptée à ce problème est nécessaire pour obtenir des résultats pertinents. Néanmoins, le résultat présenté à la Figure 6.4 laisse penser que le modèle mathématique décrit dans cette thèse reste pertinent pour de tels problèmes.

Physique manquante

Comme évoqué à la Section 0.3.3, l’état de l’art actuel pour la simulation numérique d’impacts de vague néglige certains phénomènes physiques comme par exemple les instabilités de surface libre ou l’aération du liquide. Ces phénomènes sont sans aucun doute fortement couplés au changement de phase. La formation d’instabilités de surface libre va augmenter la surface de l’interface liquide-vapeur et donc augmenter l’effet quantitatif du changement de phase. À l’inverse, le changement de phase peut influencer l’écoulement au voisinage de la surface libre et donc le développement d’instabilités.

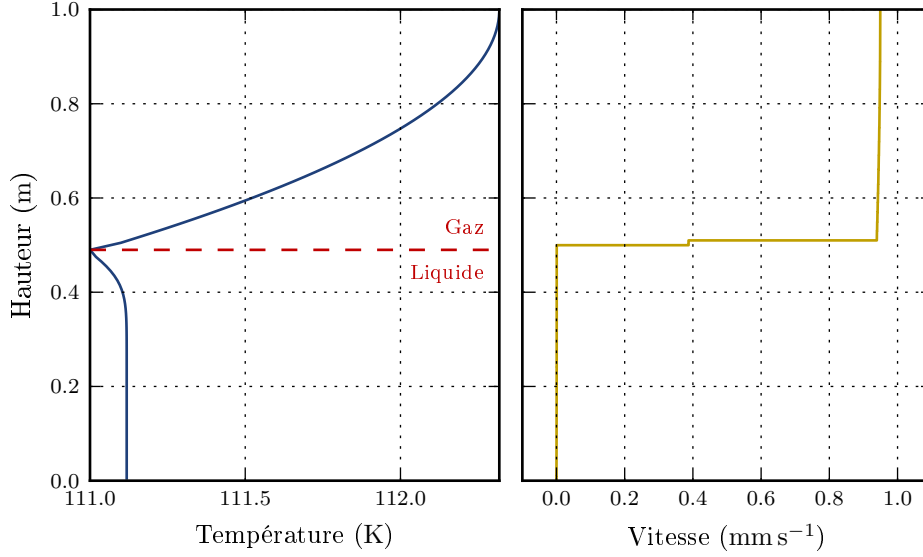


FIGURE 6.4 – Profil de température et de vitesse en fonction de la hauteur dans la cuve pour un modèle d’évaporation simplifié en 1D

À la Section 0.3.2, la possibilité de nucléation pendant les rebonds de la poche de gaz a été évoquée. Ce phénomène n’est pas inclus dans le modèle présenté dans cette thèse. Un modèle de nucléation grossier a été proposé dans [ABG16] sous la forme d’un terme source moyenné de la forme

$$M_{\text{nucl}} = J_{l \rightarrow g} \left[C \alpha (1 - \alpha) + \Pi \frac{1 - \text{sgn}(J_{l \rightarrow g})(2\alpha - 1)}{2} \right],$$

où α est la fraction volumique de gaz, C est un coefficient empirique constant et Π décrit la probabilité d’apparition d’un germe de nucléation. Le premier terme modélise le changement de phase causé par des bulles ou des gouttes existantes (comme déjà évoqué p. 27). Le second terme permet du changement de phase au sein d’une phase pure, si et seulement si elle est hors équilibre. Il est similaire à celui proposé par [LA12].

L’ordre de grandeur des coefficients C et Π n’est pas connu. Le taux de nucléation dépend de la substance chimique considérée mais aussi des conditions de l’expérience (état de surface des contenants, pureté des fluides en présence, ...). La présence de sites de nucléation à une paroi ou de micro-particules dans la phase pure devraient ainsi être modélisées par une plus grande valeur de Π .

Remarque 6.2. Avec un tel modèle, les états « métastables » ne sont pas à proprement parler métastables. En effets, ils ne sont pas dans un état d’équilibre local dont seule une perturbation suffisamment importante pourrait les faire sortir. Ils sont décrit ici comme des états instables, qui reviennent lentement à l’équilibre. Un taux moyen de perturbations causant des germes de nucléation a été implicitement intégré au modèle. ◀

D’après les résultats présentés dans [ABG16], ce modèle de nucléation peut être vu comme une amplification de l’effet amortissant du changement de phase durant les dépressions de la poche de gaz. Cette amplification provient notamment d’un effet d’évaporation dans le liquide. Ce phénomène peut par exemple écraser toute oscillation après un premier pic non amorti, ce qui peut aider à expliquer les résultats expérimentaux de la Figure 0.5. Le paramètre libre associé à la nucléation est difficile à estimer, d’autant plus qu’il dépend de nombreux facteurs expérimentaux. Un tel effet serait vérifiable visuellement lors d’une expérience d’impact.

Cependant, le modèle moyenné monovitesse présenté dans cette thèse n’est pas adapté pour la description d’écoulement multiphasiques complexes. D’une manière plus générale, l’utilisation de modèles moyennés pour décrire l’écoulement complexe au moment de l’impact peut être remise en cause. En effet, le dimensionnement de la membrane pour le *sloshing* demande l’étude des pressions extrêmes (plus précisément de la queue de la distribution statistique de pression) et pas seulement d’un effet moyen.

L'hypothèse d'un fluide pur, faite au début de ce mémoire, mérite d'être remise en cause. La présence d'espèce moins condensables dans le gaz va avoir des conséquences sur la masse échangée à l'interface. Une couche limite de fluide peu condensable peut se former à l'interface et isoler les deux phases. Comme la couche à l'équilibre décrite au cas test de la Section 4.5, sa taille sera régie par la diffusion chimique des espèces dans le mélange. Numériquement, l'enjeu est similaire à celui de la diffusion de l'effet de la chaleur latente.

Certaines des questions posées dans cette section seront traitées par le programme de recherche SLING (*Sloshing of LIquefied Natural Gas*). Cette collaboration entre universitaires et industriels, prévoit notamment la réalisation d'essais d'impacts de vague avec et sans changement de phase. Le programme de recherche comprend également des travaux numériques qui viendront prolonger et compléter les résultats de cette thèse.

Résumé des conclusions et recommandations

- Le changement de phase a pour conséquence
 - une réduction des pressions dans le gaz,
 - une possible augmentation des vitesses d'impacts directs du liquide sur la paroi.
- Pour le scénario d'un impact sans bulle, goutte ou instabilité de surface libre, cet effet est faible, voire peut-être négligeable.
- Les simulations numériques tendent à surestimer cet effet.
- Si l'essentiel de la contribution du changement de phase vient des bulles, gouttes ou instabilités de surface libre, il est inutile d'envisager des essais à petite échelle avec changement de phase sans une mise à l'échelle de ces phénomènes, ou au minimum une compréhension de leurs biais lors du changement d'échelle.

Annexe A

Conditions interfaciales avec viscosité

Cette annexe complète les résultats présentés à la section 2.1 en le généralisant au cas d'un fluide visqueux. Les équations d'Euler pour un tel fluide s'écrivent sous la forme

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \quad (\text{A.1a})$$

$$\partial_t (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u - \sigma) = 0 \quad (\text{A.1b})$$

$$\partial_t (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E u - \sigma u + q) = 0. \quad (\text{A.1c})$$

où σ est le tenseur des contraintes. Dans le cas d'un fluide newtonien, il est défini par

$$\sigma = -p \mathbb{I} + \lambda(T) (\nabla \cdot u) \mathbb{I} + \mu(T) (\nabla u + \nabla u^T).$$

où $\lambda(T)$ et $\mu(T)$ sont les coefficients de viscosité du fluide.

De la même manière que la diffusion thermique, l'ajout de la viscosité demande l'ajout d'une relation de fermeture interfaciale. Sans changement de phase, on prend typiquement

$$u_g \cdot \nu^\perp = u_l \cdot \nu^\perp, \quad (\text{A.2})$$

pour tout vecteur tangent à l'interface ν^\perp .

Bilan de masse

Le bilan de masse est inchangé par rapport au cas non-visqueux présenté au Paragraphe 2.1.2.

Bilan de quantité de mouvement

La condition de saut s'écrit

$$[\rho u \otimes (u - \omega) - \sigma] \nu_{l \rightarrow g} = 0, \quad (\text{A.3})$$

En utilisant les mêmes arguments que dans le cas non-visqueux au Paragraphe 2.1.3, on obtient

$$J_{g \rightarrow l}[u] + [\sigma] \nu_{l \rightarrow g} = 0 \quad (\text{A.4})$$

qui implique

$$J_{g \rightarrow l}^2[\tau] = ([\sigma] \nu_{l \rightarrow g}) \cdot \nu_{l \rightarrow g} \quad (\text{A.5a})$$

et

$$J_{g \rightarrow l}[u] \cdot \nu^\perp + ([\sigma] \nu_{l \rightarrow g}) \cdot \nu^\perp = 0. \quad (\text{A.5b})$$

Bilan d'énergie

La condition de saut s'écrit

$$J_{g \rightarrow l}[E] + [\sigma u] \cdot \nu_{l \rightarrow g} - [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0. \quad (\text{A.6})$$

Grâce à la symétrie de σ et la condition de saut (A.4), on peut écrire

$$\nu_{l \rightarrow g} \cdot [\sigma u] = \nu_{l \rightarrow g} \cdot [\sigma] \bar{u} + \nu_{l \rightarrow g} \cdot \bar{\sigma} [u] = -J_{g \rightarrow l} \left[\frac{|u|^2}{2} \right] + \nu_{l \rightarrow g} \cdot \bar{\sigma} [u].$$

L'introduction de cette expression dans (A.6) donne

$$J_{g \rightarrow l} [e] + [u] \cdot \bar{\sigma} \nu_{l \rightarrow g} - [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0. \quad (\text{A.7})$$

En notant $D = \sigma + p\mathbb{I}$, on déduit de (A.7) des expressions analogues au cas non visqueux présenté au Paragraphe 2.1.4 :

$$J_{g \rightarrow l} ([e] - \bar{p}[\tau]) + [u] \cdot \bar{D} \nu_{l \rightarrow g} - [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0, \quad (\text{A.8})$$

et

$$J_{g \rightarrow l} ([h] + \bar{v}[\tau]) + [u] \cdot \bar{D} \nu_{l \rightarrow g} - [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0. \quad (\text{A.9})$$

De plus, grâce à (A.6), on a

$$J_{g \rightarrow l} [E] + \nu_{l \rightarrow g} \cdot [D(u - \omega)] - [p(u - \omega)] + \nu_{l \rightarrow g} \cdot [\sigma] \omega - [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0,$$

ce qui donne avec l'aide de (A.4)

$$J_{g \rightarrow l} [H] + \nu_{l \rightarrow g} \cdot [D(u - \omega)] + J_{g \rightarrow l} [u] \cdot \omega - [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0,$$

c'est-à-dire

$$J_{g \rightarrow l} \left[h + \frac{|u - \omega|^2}{2} \right] + \nu_{l \rightarrow g} \cdot [D(u - \omega)] - [q] \cdot \nu_{l \rightarrow g} = 0. \quad (\text{A.10})$$

Entropie

La condition d'entropie reste dans le cas visqueux :

$$-J_{g \rightarrow l} [s] + \left[\frac{q}{T} \right] \cdot \nu_{l \rightarrow g} \geq 0 \quad (\text{A.11})$$

Si on définit le flux de quantité de mouvement total à l'interface avec l'aide de (A.4)

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= -J_{g \rightarrow l} (u_g - \omega) - \sigma_g \nu_{l \rightarrow g} \\ &= -J_{g \rightarrow l} (u_l - \omega) - \sigma_l \nu_{l \rightarrow g} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

et le flux d'énergie total à l'interface \mathcal{Q} grâce à (A.8)

$$\begin{aligned} \mathcal{Q} &= J_{g \rightarrow l} e_g - \mathcal{P} \cdot (u_g - \omega) - q_g \cdot \nu_{l \rightarrow g} \\ &= J_{g \rightarrow l} e_l - \mathcal{P} \cdot (u_l - \omega) - q_l \cdot \nu_{l \rightarrow g}, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

alors on peut réécrire la condition d'entropie à l'interface comme

$$-J_{g \rightarrow l} \left[\frac{f}{T} \right] + \mathcal{P} \cdot \left[\frac{u - \omega}{T} \right] + \mathcal{Q} \left[\frac{1}{T} \right] \geq 0. \quad (\text{A.14})$$

Annexe B

Étude de la matrice jacobienne pour le modèle eulérien

Soit le système d'équations aux dérivées partielles

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \quad (\text{B.1a})$$

$$\partial_t (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u + p \mathbb{I}) = 0, \quad (\text{B.1b})$$

$$\partial_t (\rho E) + \nabla \cdot ((\rho E + p) u) = 0, \quad (\text{B.1c})$$

$$\partial_t (\xi \rho) + \nabla \cdot (\xi (\rho u - J)) = 0. \quad (\text{B.1d})$$

où J est un vecteur constant de \mathbb{R}^n et $p = p(\rho, e, \xi)$.

On définit les variables conservatives v et les flux $F \cdot \nu$ dans la direction ν tels que

$$v = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \\ \rho \xi \end{pmatrix}, \quad F \cdot \nu = \begin{pmatrix} \rho(u \cdot \nu) \\ \rho(u \cdot \nu)u + p\nu \\ (\rho E + p)u \cdot \nu \\ \xi(\rho u - J) \cdot \nu \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

où ν est un vecteur unitaire.

Remarque B.1. Tous les résultats qui suivent peuvent être utilisés pour les équations d'Euler monofluide en posant $J = 0$, $\xi = \text{cst.}$ et $\frac{\partial p}{\partial \xi} = 0$. \triangleleft

B.1 Résultats thermodynamiques préliminaires

Lemme B.2. Soit p une fonction de ρ , e et ξ alors

$$\frac{\partial p}{\partial v} = \begin{pmatrix} c^2 - (H - |u|^2) \Gamma - \frac{\xi}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \right)_{\rho, e} \\ -u \Gamma \\ \Gamma \\ \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \right)_{\rho, e} \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

où la vitesse du son c et le coefficient de Grüneisen Γ sont définis par

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{s, \xi}, \quad \Gamma = \frac{1}{\rho T} \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_{\rho, \xi}.$$

Démonstration. Par définition de c et Γ , on a

$$dp = c^2 d\rho + \rho T T ds + \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \right)_{\rho, s} d\xi.$$

En y insérant la relation fondamentale de la thermodynamique, qui s'écrit

$$Tds = de - \frac{p}{\rho^2}d\rho + \left(\frac{\partial s}{\partial \xi}\right)_{\rho,e} d\xi,$$

on obtient

$$dp = \left(c^2 - \Gamma \frac{p}{\rho}\right) d\rho + \rho \Gamma de + \left(\frac{\partial p}{\partial \xi}\right)_{\rho,e} d\xi. \quad (\text{B.4})$$

En introduisant l'énergie totale spécifique $E = e + \frac{|u|^2}{2}$, on a

$$dp = \left(c^2 - \Gamma \frac{p}{\rho}\right) d\rho + \rho \Gamma dE - \rho \Gamma u \cdot du + \left(\frac{\partial p}{\partial \xi}\right)_{\rho,e} d\xi. \quad (\text{B.5})$$

Cette relation peut être réécrite sous la forme

$$dp = \left(c^2 - \Gamma \left(E + \frac{p}{\rho}\right) + \Gamma |u|^2 - \frac{\xi}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \xi}\right)_{\rho,e}\right) d\rho + \Gamma d\rho E - \Gamma u \cdot d\rho u + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \xi}\right)_{\rho,e} d\rho \xi$$

qui est le résultat voulu. \square

Le résultat précédent vaut pour n'importe quelle loi d'état reliant p , ρ , e et ξ . Dans la suite, le cas d'un mélange isobare isotherme de deux fluides sera étudié plus en détails. Les deux fluides seront symbolisés par les indices g et l en référence au cas liquide-vapeur qui nous intéresse, mais les mêmes résultats valent pour d'autres mélanges. La loi de mélange est donc supposée de la forme

$$e = \xi e_g(p, T) + (1 - \xi) e_l(p, T), \quad \tau = \xi \tau_g(p, T) + (1 - \xi) \tau_l(p, T), \quad (\text{B.6})$$

où τ_k ($k = g, l$) est le volume massique de la phase k , e_k son énergie spécifique et ξ est la fraction massique de l'espèce g .

Lemme B.3. *Pour une loi d'état de la forme (B.6), on a*

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \xi}\right)_{\rho,e} = \rho^2 c^2 (\tau_g(p, T) - \tau_l(p, T)) - \rho \Gamma (h_g(p, T) - h_l(p, T)). \quad (\text{B.7})$$

Démonstration. Les équations (B.6) impliquent

$$de = \xi de_g(p, T) + (1 - \xi) de_l(p, T) + (e_g - e_l) d\xi, \quad d\tau = \xi d\tau_g(p, T) + (1 - \xi) d\tau_l(p, T) + (\tau_g - \tau_l) d\xi$$

Par ailleurs, on a

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \xi}\right)_{\rho,e} d\xi = \left(\frac{\partial p}{\partial \xi}\right)_{\tau,e} d\xi = dp - \left(\frac{\partial p}{\partial \tau}\right)_{e,\xi} d\tau - \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_{\tau,\xi} de.$$

c'est-à-dire en remplaçant $d\tau$ et de

$$\left(\left(\frac{\partial p}{\partial \xi}\right)_{\tau,e} + (\tau_g - \tau_l) \left(\frac{\partial p}{\partial \tau}\right)_{e,\xi} + (e_g - e_l) \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_{\tau,\xi}\right) d\xi = \dots dp + \dots dT,$$

d'où

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \xi}\right)_{\tau,e} = -(\tau_g - \tau_l) \left(\frac{\partial p}{\partial \tau}\right)_{e,\xi} - (e_g - e_l) \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_{\tau,\xi}.$$

Or, d'après (B.4), on a

$$\left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_{\tau,\xi} = \rho \Gamma, \quad \left(\frac{\partial p}{\partial \tau}\right)_{e,\xi} = -\rho^2 c^2 + \Gamma \rho p.$$

Avec l'aide de la définition de $h = e + p\tau$, on peut conclure. \square

Remarque B.4. L'équation (B.7) est la variation de pression lors du changement de phase à volume constant et énergie constante. Dans le cas du changement de phase liquide-vapeur, on a $\tau_g > \tau_l$ et $h_g > h_l$. La pression est influencée par deux effets concurrents. Par exemple lors de l'évaporation, le terme $\rho^2 c^2 (\tau_g - \tau_l)$ tend à faire augmenter la pression, alors que $\rho \Gamma (h_g - h_l)$ tend à la diminuer, en raison du refroidissement causé par l'utilisation de la chaleur latente. Selon les conditions, chacun des deux termes peuvent dominer.

Pour le méthane à saturation à 111 K, on a d'une part

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \right)_{\rho, e} (\xi = 0) = \rho_l^2 c_l^2 (\tau_g - \tau_l) - \rho_l \Gamma_l (h_g - h_l) \simeq 10^{11} \text{ Pa} > 0.$$

(Une bulle apparaissant dans le liquide aura une pression gigantesque si elle ne peut se détendre pour retrouver une densité raisonnable pour un gaz.)

Mais d'autre part, on a

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \right)_{\rho, e} (\xi = 1) = \rho_g^2 c_g^2 (\tau_g - \tau_l) - \rho_g \Gamma_g (h_g - h_l) \simeq -10^5 \text{ Pa} < 0.$$

Dans ce cas, c'est l'effet de la chaleur latente qui domine. Voir aussi la Remarque 6.1. ◁

B.2 Étude de la matrice jacobienne

B.2.1 Calcul de la matrice jacobienne

Théorème B.5. La jacobienne de $F \cdot \nu$ par rapport à v s'écrit :

$$\frac{\partial F \cdot \nu}{\partial v} = \begin{pmatrix} 0 & \nu^T & 0 & 0 \\ - (u \cdot \nu)u + (c^2 - (H - |u|^2)\Gamma - \xi p_\xi)\nu & u \otimes \nu + (u \cdot \nu)\mathbb{I} - \Gamma \nu \otimes u & \Gamma \nu & p_\xi \nu \\ (u \cdot \nu)(-H + c^2 - (H - |u|^2)\Gamma - \xi p_\xi) & H \nu^T - \Gamma (u \cdot \nu)u^T & (1 + \Gamma)(u \cdot \nu) & p_\xi (u \cdot \nu) \\ - \xi \left(u - \frac{J}{\rho} \right) \cdot \nu & \xi \nu^T & 0 & \left(u - \frac{J}{\rho} \right) \cdot \nu \end{pmatrix}, \quad (\text{B.8})$$

où $H = h + \frac{|u|^2}{2}$, Γ est le coefficient de Grüneisen du mélange, c sa vitesse du son et

$$p_\xi = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \right)_{\rho, e}$$

Démonstration. Le flux $F \cdot \nu$ peut être réécrit comme fonction de v :

$$F(v) \cdot \nu = \begin{pmatrix} v_2 \cdot \nu \\ \frac{1}{v_1} (v_2 \cdot \nu) v_2 + p(v) \nu \\ \frac{1}{v_1} (v_3 + p(v)) v_2 \cdot \nu \\ \frac{v_4}{v_1} (v_2 - J) \cdot \nu \end{pmatrix}$$

La jacobienne de ce vecteur s'écrit

$$\frac{\partial F \cdot \nu}{\partial v} = \begin{pmatrix} 0 & \nu^T & 0 & 0 \\ - \frac{(v_2 \cdot \nu)}{v_1^2} v_2 + \frac{\partial p}{\partial v_1} \nu & \frac{v_2 \otimes \nu + (v_2 \cdot \nu)\mathbb{I}}{v_1} + \nu \otimes \frac{\partial p}{\partial v_2} & \frac{\partial p}{\partial v_3} \nu & \frac{\partial p}{\partial v_4} \nu \\ - \frac{(v_2 \cdot \nu)}{v_1^2} (v_3 + p) + \frac{(v_2 \cdot \nu)}{v_1} \frac{\partial p}{\partial v_1} & \frac{v_3 + p}{v_1} \nu^T + \frac{\partial p}{\partial v_2} \frac{(v_2 \cdot \nu)}{v_1} & \left(1 + \frac{\partial p}{\partial v_3} \right) \frac{(v_2 \cdot \nu)}{v_1} & \frac{\partial p}{\partial v_4} \frac{(v_2 \cdot \nu)}{v_1} \\ - \frac{v_4}{v_1^2} (v_2 - J) \cdot \nu & \frac{v_4}{v_1} \nu^T & 0 & \frac{1}{v_1} (v_2 - J) \cdot \nu \end{pmatrix}.$$

On a utilisé que, pour tout vecteur u , on a

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial u} ((u \cdot \nu)u) \right)_{ij} &= \frac{\partial}{\partial u_j} \left(\sum_k u_i u_k \nu_k \right) \\ &= \begin{cases} \frac{\partial}{\partial u_j} (u_i u_j \nu_j) & \text{si } i \neq j \\ \frac{\partial}{\partial u_j} (u_j u_j \nu_j + \sum_{k \neq j} u_j u_k \nu_k) & \text{si } i = j \end{cases} \\ &= \begin{cases} u_i \nu_j & \text{si } i \neq j \\ 2u_j \nu_j + \sum_{k \neq j} u_k \nu_k & \text{si } i = j \end{cases} \\ &= (u \otimes \nu + (u \cdot \nu)\mathbb{I})_{ij} \end{aligned}$$

En réinsérant les variables physiques dans l'expression de la jacobienne on a

$$\frac{\partial F \cdot \nu}{\partial v} = \begin{pmatrix} 0 & \nu^T & 0 & 0 \\ -(u \cdot \nu)u + \frac{\partial p}{\partial \rho} \nu & u \otimes \nu + (u \cdot \nu)\mathbb{I} + \nu \otimes \frac{\partial p}{\partial \rho u} & \frac{\partial p}{\partial \rho E} \nu & \frac{\partial p}{\partial \rho \xi} \nu \\ -(u \cdot \nu)H + \frac{\partial p}{\partial \rho} u & H \nu^T + \frac{\partial p}{\partial \rho u}^T (u \cdot \nu) & \left(1 + \frac{\partial p}{\partial \rho E}\right) (u \cdot \nu) & \frac{\partial p}{\partial \rho \xi} (u \cdot \nu) \\ -\xi \left(u - \frac{J}{\rho}\right) \cdot \nu & \xi \nu^T & 0 & \left(u - \frac{J}{\rho}\right) \cdot \nu \end{pmatrix}.$$

On obtient le résultat voulu grâce aux expressions de $\frac{\partial p}{\partial v}$ données par (B.3). \square

Corollaire B.6. *En 1D, la matrice jacobienne s'écrit*

$$\frac{\partial F}{\partial v} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -u^2 + (c^2 - (H - u^2)\Gamma - \xi p_\xi) & (2 - \Gamma)u & \Gamma & p_\xi \\ -uH + (c^2 - (H - u^2)\Gamma - \xi p_\xi)u & H - \Gamma u^2 & (1 + \Gamma)u & p_\xi u \\ -\xi \left(u - \frac{J}{\rho}\right) & \xi & 0 & u - \frac{J}{\rho} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.9})$$

B.2.2 Éléments propres

À l'aide d'un logiciel de calcul formel, les valeurs propres et vecteurs propres de la matrice (B.8) peuvent être calculés. Les valeurs propres sont $u \cdot \nu - c$, $u \cdot \nu$ (n fois), $\left(u - \frac{J}{\rho}\right) \cdot \nu$ et $u \cdot \nu + c$.

On note $(\nu_k^\perp)_{k=1 \dots n-1}$ une base de vecteurs orthogonaux à ν . Une matrice des vecteurs propres à droite s'écrit

$$R = \frac{1}{c} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & p_\xi & 1 \\ u - c\nu & u & \nu_1^\perp & \cdots & \nu_{n-1}^\perp & p_\xi \left(u - \frac{J \cdot \nu}{\rho}\right) & u + c\nu \\ H - (u \cdot \nu)c & H - \frac{c^2}{\Gamma} & u \cdot \nu_1^\perp & \cdots & u \cdot \nu_{n-1}^\perp & p_\xi \left(H - (u \cdot \nu) \frac{J \cdot \nu}{\rho}\right) & H + (u \cdot \nu)c \\ \xi & \xi & 0 & \cdots & 0 & \frac{(J \cdot \nu)^2}{\rho^2} + \xi p_\xi - c^2 & \xi \end{pmatrix}, \quad (\text{B.10})$$

soit en 1D :

$$R = \frac{1}{c} \begin{pmatrix} 1 & 1 & p_\xi & 1 \\ u - c & u & p_\xi \left(u - \frac{J}{\rho}\right) & u + c \\ H - uc & H - \frac{c^2}{\Gamma} & p_\xi \left(H - u \frac{J}{\rho}\right) & H + uc \\ \xi & \xi & \frac{J^2}{\rho^2} + \xi p_\xi - c^2 & \xi \end{pmatrix}. \quad (\text{B.11})$$

La matrice des vecteurs propres à gauche associée s'écrit

$$L = \frac{1}{2c} \begin{pmatrix} (u+c)c - \Gamma(H-u^2) - \xi \frac{\rho c}{\rho c - J \cdot \nu} p_\xi & -c - \Gamma u^T & \Gamma & \frac{\rho c}{\rho c - J \cdot \nu} p_\xi \\ 2\Gamma(H-u^2) & 2\Gamma u^T & -2\Gamma & 0 \\ -2c^2 u \cdot \nu_1^\perp & 2c^2 (\nu_1^\perp)^T & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -2c^2 u \cdot \nu_{n-1}^\perp & 2c^2 (\nu_{n-1}^\perp)^T & 0 & 0 \\ 2\xi \frac{\rho^2 c^2}{\rho^2 c^2 - (J \cdot \nu)^2} & 0 & 0 & -2 \frac{\rho^2 c^2}{\rho^2 c^2 - (J \cdot \nu)^2} \\ -c(u-c) - \Gamma(H-u^2) + \xi \frac{\rho c}{\rho c + J \cdot \nu} p_\xi & c - u^T \Gamma & \Gamma & -\frac{\rho c}{\rho c + J \cdot \nu} p_\xi \end{pmatrix}, \quad (\text{B.12})$$

soit en 1D :

$$L = \frac{1}{2c} \begin{pmatrix} (u+c)c - \Gamma(H-u^2) - \xi \frac{\rho c}{\rho c - J} p_\xi & -c - \Gamma u & \Gamma & \frac{\rho c}{\rho c - J} p_\xi \\ 2\Gamma(H-u^2) & 2\Gamma u & -2\Gamma & 0 \\ 2\xi \frac{\rho^2 c^2}{\rho^2 c^2 - J^2} & 0 & 0 & -2 \frac{\rho^2 c^2}{\rho^2 c^2 - J^2} \\ -(u-c)c - \Gamma(H-u^2) + \xi \frac{\rho c}{\rho c + J} p_\xi & c - \Gamma u & \Gamma & -\frac{\rho c}{\rho c + J} p_\xi \end{pmatrix} \quad (\text{B.13})$$

Annexe C

Étude de la matrice jacobienne pour le modèle lagrangien

Soit le système d'équations aux dérivées partielles en une dimension d'espace suivant :

$$d_t \tau + \partial_x (-u + J\tau) = 0 \quad (\text{C.1a})$$

$$d_t u + \partial_x (p + Ju) = 0 \quad (\text{C.1b})$$

$$d_t E + \partial_x (pu + JE) = 0 \quad (\text{C.1c})$$

$$d_t \xi = 0 \quad (\text{C.1d})$$

où J est une constante.

Il se réécrit sous la forme

$$d_t v + \partial_x F = 0$$

où

$$v = \begin{pmatrix} \tau \\ u \\ E \\ \xi \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} -u + J\tau \\ p + Ju \\ pu + JE \\ 0 \end{pmatrix},$$

c'est-à-dire

$$F(v) = \begin{pmatrix} -v_2 + Jv_1 \\ p(v_1, v_2, v_3, v_4) + Jv_2 \\ p(v_1, v_2, v_3, v_4)v_2 + Jv_3 \\ 0 \end{pmatrix},$$

Lemme C.1. Soit p une fonction de ρ , e et ξ alors

$$\frac{\partial p}{\partial v} = \begin{pmatrix} \rho^2 c^2 - \Gamma \rho p \\ -\rho \Gamma u \\ \rho \Gamma \\ \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \right)_{\rho, e} \end{pmatrix}$$

où la vitesse du son c et le coefficient de Grüneisen Γ sont définis par

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{s, \xi}, \quad \Gamma = \frac{1}{\rho T} \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_{\rho, \xi}.$$

Démonstration. Voir l'équation (B.5) au chapitre précédent. □

La matrice jacobienne peut facilement en être déduite.

Théorème C.2. La matrice jacobienne s'écrit

$$\frac{\partial F}{\partial v} = \begin{pmatrix} J & -1 & 0 & 0 \\ p\rho\Gamma - \rho^2 c^2 & -\rho u\Gamma + J & \rho\Gamma & \rho p_\xi \\ u(p\rho\Gamma + \rho^2 c^2) & p - \rho u^2\Gamma & \rho u\Gamma + J & \rho u p_\xi \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.2})$$

À l'aide d'un logiciel de calcul formel, on calcule ses éléments propres. Les valeurs propres valent $J - \rho c$, J , 0 , $J + \rho c$, associées respectivement à l'onde sonique vers la gauche, la discontinuité de contact, l'interface de changement de phase et l'onde sonique vers la droite.

Une base de vecteur propre possible est

$$R = \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho c} & 1 & p_\xi & -\frac{1}{\rho c} \\ 1 & 0 & Jp_\xi & 1 \\ u - \frac{p}{\rho c} & \frac{\rho c^2}{\Gamma} - p & (Ju - p)p_\xi & u + \frac{p}{\rho c} \\ 0 & 0 & \rho^2 c^2 - J^2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.3})$$

Les vecteurs propres à gauche associés s'écrivent

$$L = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(\rho c - \frac{p\Gamma}{c} \right) & \frac{1}{2} \left(1 + \frac{u\Gamma}{c} \right) & -\frac{1}{2} \frac{\Gamma}{c} & \frac{1}{2} p_\xi \frac{1}{\rho c - J} \\ \frac{p\Gamma}{\rho c^2} & -\frac{u\Gamma}{\rho c^2} & \frac{\Gamma}{\rho c^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho^2 c^2 - J^2} \\ -\frac{1}{2} \left(\rho c - \frac{p\Gamma}{c} \right) & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{u\Gamma}{c} \right) & \frac{1}{2} \frac{\Gamma}{c} & \frac{1}{2} p_\xi \frac{1}{\rho c + J} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.4})$$

Annexe D

Inversion de la loi d'état pour un mélange de deux gaz raidis

On considère la loi de mélange isobare isotherme suivante :

$$\frac{1}{\rho(p, T, \xi)} = \frac{\xi}{\rho_g(p, T)} + \frac{1 - \xi}{\rho_l(p, T)}, \quad (\text{D.1a})$$

$$e(p, T, \xi) = \xi e_g(p, T) + (1 - \xi) e_l(p, T), \quad (\text{D.1b})$$

avec les lois d'état de gaz raidis

$$\rho_g(p, T) = \frac{p + p_g^\infty}{(\gamma_g - 1) \mathcal{C}_{vg} T}, \quad \rho_l(p, T) = \frac{p + p_l^\infty}{(\gamma_l - 1) \mathcal{C}_{vl} T}, \quad (\text{D.2a})$$

$$h_g(T) = \gamma_g \mathcal{C}_{vg} (T - T_0) + \mathcal{L}, \quad h_l(T) = \gamma_l \mathcal{C}_{vl} (T - T_0). \quad (\text{D.2b})$$

Ces relations sont écrites ici sous la forme $(p, T, \xi) \mapsto (\rho, h, \xi)$. L'inversion de cette application peut se faire à l'aide du résultat suivant :

Lemme D.1. *Pour cette loi de mélange et ces deux lois d'états, la pression p est solution d'un polynôme de degré 2 qui s'écrit*

$$p^2 \mathcal{C}_{vm} + p [\mathcal{C}_{pm} (p_g^\infty + p_l^\infty) - (\mathcal{C}_{pm} - \mathcal{C}_{vm}) (\mathcal{E} + p_m^\infty)] + [\mathcal{C}_{pm} p_l^\infty p_g^\infty - p_m^\infty (\mathcal{C}_{pm} - \mathcal{C}_{vm}) \mathcal{E}] = 0 \quad (\text{D.3})$$

où

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{vm} &= \xi \mathcal{C}_{vg} + (1 - \xi) \mathcal{C}_{vl}, & \mathcal{C}_{pm} &= \xi \gamma_g \mathcal{C}_{vg} + (1 - \xi) \gamma_l \mathcal{C}_{vl}, \\ p_m^\infty &= \frac{p_l^\infty \xi (\gamma_g - 1) \mathcal{C}_{vg} + p_g^\infty (1 - \xi) (\gamma_l - 1) \mathcal{C}_{vl}}{\mathcal{C}_{pm} - \mathcal{C}_{vm}}, \end{aligned}$$

et enfin

$$\mathcal{E} = \rho (e + \mathcal{C}_{pm} T_0 - \xi \mathcal{L}).$$

Démonstration. L'enthalpie spécifique du mélange s'écrit

$$e + \frac{p}{\rho} = h = \xi h_g + (1 - \xi) h_l$$

En insérant les expressions de l'enthalpie pour chacune des deux lois d'état, on obtient

$$e + \frac{p}{\rho} = \xi (\gamma_g \mathcal{C}_{vg} (T - T_0) + \mathcal{L}) + (1 - \xi) \gamma_l \mathcal{C}_{vl} (T - T_0)$$

d'où

$$\rho T = \frac{\mathcal{E} + p}{\mathcal{C}_{pm}} \quad (\text{D.4})$$

Par ailleurs, la définition de la masse volumique moyenne ρ est

$$\frac{1}{\rho} = \frac{\xi}{\rho_g} + \frac{1 - \xi}{\rho_l}.$$

En insérant les lois d'état dans cette expression, on obtient

$$(p + p_g^\infty)(p + p_l^\infty) = (p + p_l^\infty)\rho\xi(\gamma_g - 1)\mathcal{C}_{vg}T + (p + p_g^\infty)\rho(1 - \xi)(\gamma_l - 1)\mathcal{C}_{vl}T.$$

Avec les notations définies ci-dessus, on a

$$(p + p_g^\infty)(p + p_l^\infty) = \rho T(p + p_m^\infty)(\mathcal{C}_{pm} - \mathcal{C}_{vm}) \quad (\text{D.5})$$

En combinant les deux expressions, on obtient :

$$(p + p_g^\infty)(p + p_l^\infty) = (\mathcal{E} + p)(p + p_m^\infty)\frac{\mathcal{C}_{pm} - \mathcal{C}_{vm}}{\mathcal{C}_{pm}}$$

soit

$$p^2 \left[1 - \frac{\mathcal{C}_{pm} - \mathcal{C}_{vm}}{\mathcal{C}_{pm}} \right] + p \left[p_g^\infty + p_l^\infty - \frac{\mathcal{C}_{pm} - \mathcal{C}_{vm}}{\mathcal{C}_{pm}}(\mathcal{E} + p_m^\infty) \right] + \left[p_l^\infty p_g^\infty - p_m^\infty \mathcal{E} \frac{\mathcal{C}_{pm} - \mathcal{C}_{vm}}{\mathcal{C}_{pm}} \right] = 0,$$

ce qui permet de retrouver l'expression voulue. \square

En pratique, une et une seule des racines de (D.3) correspond à un état physique ($p > 0, T > 0, \rho_g > 0, \rho_l > 0$). Pour un mélange de trois gaz raidis ou plus, on pourra se rapporter à [FMM11].

Remarque D.2. Quand les deux fluides sont des gaz parfaits, (c'est-à-dire $p_g^\infty = p_l^\infty = 0$), l'équation (D.3) se réduit à

$$p \left(p - \left(\frac{\mathcal{C}_{pm}}{\mathcal{C}_{vm}} - 1 \right) \mathcal{C}_{vm} T \right) = 0$$

En omettant la solution non physique $p = 0$, on retrouve l'équation d'état d'un gaz parfait de coefficient isentropique $\mathcal{C}_{pm}/\mathcal{C}_{vm}$ et de capacité thermique isochore \mathcal{C}_{vm} . \triangleleft

Remarque D.3. Le coefficient \mathcal{C}_{pm} du Lemme D.1 est la capacité thermique isobare du mélange, au sens où

$$\left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_{p,\xi} = \mathcal{C}_{pm}$$

Cependant, le coefficient noté \mathcal{C}_{vm} n'est en général pas la capacité thermique isochore du mélange

$$\left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_{\rho,\xi} \neq \mathcal{C}_{vm}$$

sauf quand les deux fluides sont des gaz parfaits comme évoqué à la remarque précédente. \triangleleft

Corollaire D.4. Dans le cas isotherme, on pourra utiliser l'équation (D.5)

$$(p + p_g^\infty)(p + p_l^\infty) = \rho T_0(p + p_m^\infty)(\mathcal{C}_{pm} - \mathcal{C}_{vm}).$$

Table des notations

Symbole	Unité	Définition
A		(<i>Chapitre 1</i>) Paramètre de la relation de Hertz-Knudsen.
A	$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$	(<i>Chapitre 4</i>) Amplitude du flux de masse interfacial oscillant.
A		(<i>Chapitre 3</i>) Matrice jacobienne.
B		(<i>Chapitre 3</i>) Matrice jacobienne des flux conservatifs.
C		(<i>Chapitre 3</i>) Matrice (resp. tenseur) des termes non-conservatifs.
C_v	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	Paramètre des lois d'état gaz parfaits et gaz raidis.
\mathcal{C}_i		(<i>Chapitre 5</i>) Capacité thermique adimensionnée.
CFL		Nombre de Courant.
DR		Rapport de densité, gaz sur liquide.
e	J kg^{-1}	Énergie interne spécifique du fluide.
E	J kg^{-1}	Énergie totale (interne et cinétique) spécifique du fluide.
\mathcal{E}	J	(<i>Chapitre 5</i>) Énergie totale.
f	J kg^{-1}	Énergie libre spécifique.
F		Flux.
g	J kg^{-1}	Enthalpie libre spécifique.
G		(<i>Chapitre 2 et 5</i>) Coefficient de transfert.
G		(<i>Chapitre 3</i>) Terme non-conservatif linéarisé.
$J_{l \rightarrow g}$	$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$	Flux de masse interfacial compté positif pour l'évaporation.
J	$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$	Flux de masse interfacial porté par la normale à l'interface.
k	$\text{J m}^{-1} \text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$	Conductivité thermique.
L		Matrice des vecteurs propres à gauche de la jacobienne des flux.
\mathcal{L}	J kg^{-1}	Chaleur latente.
m		Nombre de variables conservatives.
M	kg	(<i>Chapitre 3</i>) Masse totale.
\mathcal{M}	kg mol^{-1}	Masse molaire.
Ma		Nombre de Mach.
$\mathfrak{M}_{l,0}$		(<i>Chapitre 5</i>) Masse totale de liquide adimensionnée.
n		Nombre de dimensions d'espace ($n \in \{1, 2, 3\}$).
p	Pa	Pression.
p^∞	Pa	Paramètre de la loi d'état des gaz raidis.
p^{sat}	Pa	Pression de saturation.
q	$\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1}$	Flux de chaleur par diffusion thermique.
Q	$\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1}$	Flux d'énergie surfacique à l'interface liquide-vapeur.
R		Matrice des vecteurs propres à droite de la jacobienne des flux.
S		(<i>Chapitre 5</i>) Nombre d'impact.
u	m s^{-1}	Vitesse du fluide.
v		Variables conservatives.
$\mathcal{V}(K)$		Ensemble des mailles voisines de la maille K .
w		Variables de calcul.
z	m	(<i>Chapitre 5</i>) Taille de la poche de gaz.
α		Fraction volumique.
γ		Paramètre des lois d'état des gaz parfaits et des gaz raidis.
Γ		Coefficient de Grüneisen.
κ		(<i>Chapitre 5</i>) Capacité thermique adimensionnée.
λ		Valeur propre de la jacobienne des flux.
Λ		(<i>Chapitre 3</i>) Matrice diagonale des valeurs propres de la jacobienne des flux.
Λ		(<i>Chapitre 5</i>) Chaleur latente adimensionnée.
μ	J kg^{-1}	(<i>Chapitre 2</i>) Potentiel chimique.
μ		(<i>Chapitre 3</i>) État moyen à l'interface entre deux mailles.
$\nu_{l \rightarrow g}$		Vecteur unitaire normal à l'interface liquide-vapeur.
$\nu_{K,L}$		Vecteur unitaire normal à la face du maillage entre les mailles K et L .
ρ	kg m^{-3}	Masse volumique.
σ	Pa	Tenseur des contraintes.
τ	$\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$	Volume massique.

ξ		Fraction massique.
ϕ		Flux numérique.
ψ		Flux numérique en formalisme lagrangien.
χ		(<i>Chapitre 2</i>) Fonction caractéristique de la phase.
χ		(<i>Chapitre 5</i>) Coefficient de compressibilité isentropique.
ω	m s^{-1}	Vitesse de l'interface.
ω	s^{-1}	(<i>Chapitre 4</i>) Pulsation du flux de masse interfacial oscillant.
Ω		Temps caractéristique inverse adimensionné.
Indice		Signification.
D		Droite.
G		Gauche.
g		Gaz.
l		Liquide.
int		À l'interface.

Bibliographie

- [AK91] R. ABEYARATNE et J. K. KNOWLES. “Kinetic relations and the propagation of phase boundaries in solids”. In : *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 114.2 (1991), p. 119–154 (cf. p. 24).
- [Abg96] R. ABGRALL. “How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : a quasi conservative approach”. In : *Journal of Computational Physics* 125.1 (1996), p. 150–160 (cf. p. 79).
- [AF11] B. C. ABRAHAMSEN et O. M. FALTINSEN. “The effect of air leakage and heat exchange on the decay of entrapped air pocket slamming oscillations”. In : *Physics of Fluids* 23.10 (2011), p. 102107 (cf. p. 115).
- [ACK02] G. ALLAIRE, S. CLERC et S. KOKH. “A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids”. In : *Journal of Computational Physics* 181.2 (2002), p. 577–616 (cf. p. 25).
- [AW11] H. W. ALT et G. WITTERSTEIN. “Distributional equation in the limit of phase transition for fluids”. In : *Interfaces and Free Boundaries* 13.4 (2011), p. 531–554 (cf. p. 50).
- [ABG12] M. ANCELLIN, L. BROSSET et J.-M. GHIDAGLIA. “Influence of phase transition on sloshing impact pressures described by a generalized Bagnold’s model”. In : *Proc. of the 22nd Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2012, p. 300–310 (cf. p. 9, 11, 109, 111, 126).
- [ABG16] M. ANCELLIN, L. BROSSET et J.-M. GHIDAGLIA. “Preliminary numerical results on the influence of phase change on wave impacts loads”. In : *Proc. of the 26th Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2016, p. 886–893 (cf. p. 57, 132, 141–143).
- [BKDD07] V. K. BADAM, V. KUMAR, F. DURST et K. DANOV. “Experimental and theoretical investigations on interfacial temperature jumps during evaporation”. In : *Experimental Thermal and Fluid Science* 32.1 (2007), p. 276–292 (cf. p. 29).
- [BN86] M. R. BAER et J. W. NUNZIATO. “A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 12.6 (1986), p. 861–889 (cf. p. 28).
- [Bag39] R. A. BAGNOLD. *Interim report on wave-pressure research*. The Institution of Civil Engineers, 1939, p. 202–226 (cf. p. 109).
- [BH05] T. BARBERON et P. HELLUY. “Finite volume simulation of cavitating flows”. In : *Computers & Fluids* 34.7 (2005), p. 832–858 (cf. p. 28).
- [Bed10] D. BEDEAUX. *Non-equilibrium thermodynamics for engineers*. World Scientific, 2010. 273 p. (cf. p. 39).
- [BHY90] D. BEDEAUX, L. J. F. HERMANS et T. YTREHUS. “Slow evaporation and condensation”. In : *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* 169.2 (1990), p. 263–280 (cf. p. 39).
- [BK99] D. BEDEAUX et S. KJELSTRUP. “Transfer coefficients for evaporation”. In : *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* 270.3 (1999), p. 413–426 (cf. p. 29).
- [BK04] D. BEDEAUX et S. KJELSTRUP. “Irreversible thermodynamics—a tool to describe phase transitions far from global equilibrium”. In : *Chemical Engineering Science* 59.1 (2004), p. 109–118 (cf. p. 39).
- [BK10] D. BEDEAUX et S. KJELSTRUP. “Heat, mass and charge transport, and chemical reactions at surfaces”. In : *International Journal of Thermodynamics* 8.1 (2010), p. 25–41.

- [BGHB16] P. BEHRUZI, D. GAULKE, D. HAAKE et L. BROSSET. “Modeling of impact waves in LNG ship tanks”. In : *Proc. of the 26th Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2016, p. 851–864 (cf. p. 9).
- [BKRS14] P. BEHRUZI, M. KONOPKA, F. de ROSE et G. SCHWARTZ. “Cryogenic slosh modeling in LNG ship tanks and spacecrafts”. In : *Proc. of the 24th Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2014, p. 209–217 (cf. p. 9).
- [BDF+14] M. BERNARD, S. DELLACHERIE, G. FACCANONI, B. GREC et Y. PENEL. “Study of a low Mach nuclear core model for two-phase flows with phase transition I : stiffened gas law”. In : *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 48.6 (2014), p. 1639–1679 (cf. p. 18, 26, 31).
- [BPMG14] A. BERNARD-CHAMPMARTIN, O. POUJADE, J. MATHIAUD et J.-M. GHIDAGLIA. “Modelling of an homogeneous equilibrium mixture model (HEM)”. In : *Acta Applicandae Mathematicae* 129.1 (2014), p. 1–21 (cf. p. 26, 53).
- [BD14] A. BERNARD-CHAMPMARTIN et F. DE VUYST. “A low diffusive Lagrange-remap scheme for the simulation of violent air-water free-surface flows.” In : *Journal of Computational Physics* 274 (2014), p. 19–49 (cf. p. 25, 50, 53, 54).
- [Bes90] D. BESTION. “The physical closure laws in the CATHARE code”. In : *Nuclear Engineering and Design* 124.3 (1990), p. 229–245 (cf. p. 27, 30, 31, 50).
- [BGK02] Z. BILICKI, M. GIOT et R. KWIDZINSKI. “Fundamentals of two-phase flow by the method of irreversible thermodynamics”. In : *International journal of multiphase flow* 28.12 (2002), p. 1983–2005 (cf. p. 27, 31, 40).
- [BKM96] Z. BILICKI, R. KWIDZIŃSKI et S. A. MOHAMMADEIN. “Evaluation of the relaxation time of heat and mass exchange in the liquid-vapour bubble flow”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 39.4 (1996), p. 753–759 (cf. p. 27).
- [BLBK10] H. BOGAERT, S. LÉONARD, L. BROSSET et M. KAMINSKI. “Sloshing and scaling : results from the Sloshe project”. In : *Proc. of the 20th Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2010, p. 88–97 (cf. p. 7).
- [BS04] M. BOND et H. STRUCHTRUP. “Mean evaporation and condensation coefficients based on energy dependent condensation probability”. In : *Physical Review E* 70.6 (2004), p. 061605 (cf. p. 29).
- [BBR03] D. BOUCHE, G. BONNAUD et D. RAMOS. “Comparison of numerical schemes for solving the advection equation”. In : *Applied mathematics letters* 16.2 (2003), p. 147–154 (cf. p. 65).
- [Bra07] J.-P. BRAEUNIG. “A pure eulerian method with interface capturing for multi-material fluid flows in dimension 1, 2 and 3”. Thèse de doct. École normale supérieure de Cachan, 2007 (cf. p. 74, 76).
- [BBDG09] J.-P. BRAEUNIG, L. BROSSET, F. DIAS et J.-M. GHIDAGLIA. “Phenomenological study of liquid impacts through 2D compressible two-fluid numerical simulations”. In : *Proc. of the 19th Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2009, p. 21–29 (cf. p. 9, 141).
- [BBDG10] J.-P. BRAEUNIG, L. BROSSET, F. DIAS et J.-M. GHIDAGLIA. “On the effect of phase transition on impact pressures due to sloshing”. In : *Proc. of the 20th Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2010, p. 53–61 (cf. p. 44).
- [BGGL13] L. BROSSET, J.-M. GHIDAGLIA, P.-M. GUILCHER et L. LE TARNEC. “Generalized Bagnold model”. In : *Proc. of the 23rd Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2013, p. 209–223 (cf. p. 9, 111, 112, 130, 132, 133).
- [BCP06] M. BURGER, V. CAPASSO et L. PIZZOCCHERO. “Mesoscale averaging of nucleation and growth models”. In : *Multiscale Modeling & Simulation* 5.2 (2006), p. 564–592 (cf. p. 27).
- [Cag89] G. CAGINALP. “Stefan and Hele-Shaw type models as asymptotic limits of the phase-field equations”. In : *Physical Review A* 39.11 (1989), p. 5887 (cf. p. 22, 31).
- [CS11] J. P. CAPUTA et H. STRUCHTRUP. “Interface model for non-equilibrium evaporation”. In : *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* 390.1 (2011), p. 31–42 (cf. p. 29).
- [Car04] F. CARO. “Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide-vapeur”. Thèse de doct. École Polytechnique, 2004 (cf. p. 14, 21).

- [Cha12] D. CHAUVEHEID. “Multimaterial and multiphysics flows : a colocated eulerian finite volume solver with interface capturing, analysis and simulations”. Thèse de doct. École normale supérieure de Cachan, 2012 (cf. p. 74, 76).
- [Cos15] J. COSTES. “Développement de méthodes de résolution d’équations aux dérivées partielles : du schéma numérique à la simulation d’une installation industrielle”. Thèse de doct. École normale supérieure de Cachan, 2015 (cf. p. 28).
- [Daf10] C. M. DAFERMOS. *Hyperbolic conservation laws in continuum physics*. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften 325. Springer, 2010 (cf. p. 61).
- [DLM95] G. DAL MASO, P. G. LEFLOCH et F. MURAT. “Definition and weak stability of nonconservative products”. In : *Journal de mathématiques pures et appliquées* 74.6 (1995), p. 483–548 (cf. p. 44, 66).
- [DM84] S. DE GROOT et P. MAZUR. *Non-Equilibrium Thermodynamics*. Dover Publications Inc. Dover Books on Physics. 1984 (cf. p. 39).
- [DGL05] F. DE VUYST, J.-M. GHIDAGLIA et G. LE COQ. “On the numerical simulation of multiphase water flows with changes of phase and strong gradients using the Homogeneous Equilibrium Model”. In : *International Journal on Finite Volumes* 2.1 (2005), p. 1–36 (cf. p. 28).
- [Del74] J. M. DELHAYE. “Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 1.3 (1974), p. 395–409 (cf. p. 33).
- [DDG10] F. DIAS, D. DUTYKH et J.-M. GHIDAGLIA. “A two-fluid model for violent aerated flows”. In : *Computers & Fluids* 39.2 (2010), p. 283–293 (cf. p. 28).
- [DBBF96] P. DOWNAR-ZAPOLSKI, Z. BILICKI, L. BOLLE et J. FRANCO. “The non-equilibrium relaxation model for one-dimensional flashing liquid flow”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 22.3 (1996), p. 473–483 (cf. p. 26, 27).
- [FKA12] G. FACCANONI, S. KOKH et G. ALLAIRE. “Modelling and simulation of liquid-vapor phase transition in compressible flows based on thermodynamical equilibrium”. In : *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 46.5 (2012), p. 1029–1054 (cf. p. 18).
- [FZ06] A. FAGHRI et Y. ZHANG. *Transport phenomena in multiphase systems*. Elsevier Academic Press, 2006. 1030 p. (cf. p. 14, 17, 33).
- [Fan00] H. FAN. “On a model of the dynamics of liquid/vapor phase transitions”. In : *SIAM Journal on Applied Mathematics* 60.4 (2000), p. 1270–1301 (cf. p. 22).
- [FT98] M. FANFONI et M. TOMELLINI. “The Johnson-Mehl-Avrami-Kohnogorov model : A brief review”. In : *Il Nuovo Cimento D* 20.7 (1998), p. 1171–1182 (cf. p. 27).
- [FW99] G. FANG et C. A. WARD. “Temperature measured close to the interface of an evaporating liquid”. In : *Physical Review E* 59.1 (1999), p. 417–428 (cf. p. 30).
- [FG11] S. FAURE et J.-M. GHIDAGLIA. “Violent flows in aqueous foams I : Physical and numerical models”. In : *European Journal of Mechanics - B/Fluids* 30.4 (2011), p. 341–359 (cf. p. 31, 50).
- [Fis37] R. A. FISHER. “The wave of advance of advantageous genes”. In : *Annals of Eugenics* 7 (1937), p. 355–369 (cf. p. 21).
- [FMM11] T. FLÄTTEN, A. MORIN et S. MUNKEJORD. “On solutions to equilibrium problems for systems of stiffened gases”. In : *SIAM Journal on Applied Mathematics* 71.1 (2011), p. 41–67 (cf. p. 156).
- [FL11] T. FLÄTTEN et H. LUND. “Relaxation two-phase flow models and the subcharacteristic condition”. In : *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 21.12 (2011), p. 2379–2407 (cf. p. 26).
- [GSM09] E. GERVAISE, P.-E. de SÈZE et S. MAILLARD. “Reliability-based methodology for sloshing assessment of membrane LNG vessels”. In : *Proc. of the 19th Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2009, p. 183–191 (cf. p. 6).
- [Ghi02] J.-M. GHIDAGLIA. “Flux schemes for solving nonlinear systems of conservation laws”. In : *Innovative Methods for Numerical Solution of Partial Differential Equations*. Sous la dir. de M. M. HAFEZ et J.-J. CHATTOT. World Scientific. 2002, p. 232–242 (cf. p. 63).

- [GKL01] J.-M. GHIDAGLIA, A. KUMBARO et G. LE COQ. “On the numerical solution to two fluid models via a cell centered finite volume method”. In : *European Journal of Mechanics - B/Fluids* 20.6 (2001), p. 841–867 (cf. p. 64, 66, 67).
- [GP02] J.-M. GHIDAGLIA et F. PASCAL. *On boundary conditions for multidimensional hyperbolic systems of conservation laws in the finite volume framework*. École normale supérieure de Cachan, 2002 (cf. p. 65).
- [GCNB07] F. GIBOU, L. CHEN, D. NGUYEN et S. BANERJEE. “A level set based sharp interface method for the multiphase incompressible Navier–Stokes equations with phase change”. In : *Journal of Computational Physics* 222.2 (2007), p. 536–555 (cf. p. 24).
- [GBCL12] P.-M. GUILCHER, L. BROSSET, N. COUTY et D. LE TOUZÉ. “Simulations of breaking wave impacts on a rigid wall at two different scales with a two phase fluid compressible SPH model”. In : *Proc. of the 22nd Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2012, p. 460–472 (cf. p. 9).
- [GJC+14] P.-M. GUILCHER, Y. JUS, N. COUTY, L. BROSSET, Y.-M. SCOLAN et D. LE TOUZÉ. “2D Simulations of breaking wave impacts on a flat rigid wall – Part 1 : influence of the wave shape”. In : *Proc. of the 24th Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2014, p. 232–245 (cf. p. 9).
- [GWW09] J. E. GUYER, D. WHEELER et J. A. WARREN. “FiPy : partial differential equations with Python”. In : *Computing in Science & Engineering* 11.3 (2009), p. 6–15. URL : <http://www.ctcms.nist.gov/fipy> (cf. p. 22).
- [HDW13] M. HANTKE, W. DREYER et G. WARNECKE. “Exact solutions to the Riemann problem for compressible isothermal Euler equations for two-phase flows with and without phase transition”. In : *Quarterly of Applied Mathematics* 71.3 (2013), p. 509–540 (cf. p. 24, 31, 38, 94–96).
- [HT14] M. HANTKE et F. THEIN. *Why condensation by compression in pure water vapor cannot occur in an approach based on Euler equations*. 2014. arXiv : 1406.1377 (cf. p. 10).
- [HW08] S. HARDT et F. WONDRA. “Evaporation model for interfacial flows based on a continuum-field representation of the source terms”. In : *Journal of Computational Physics* 227.11 (2008), p. 5871–5895 (cf. p. 25, 31, 139).
- [Her82] H. HERTZ. “Ueber die Verdunstung der Flüssigkeiten, insbesondere des Quecksilbers, im luftleeren Raume”. In : *Annalen der Physik* 253.10 (1882), p. 177–193 (cf. p. 29).
- [Hun07] J. D. HUNTER. “Matplotlib : A 2D graphics environment”. In : *Computing In Science & Engineering* 9.3 (2007), p. 90–95.
- [Hüt01] M. HÜTTER. “Thermodynamically consistent incorporation of the Schneider rate equations into two-phase models”. In : *Physical Review E* 64.1 (2001) (cf. p. 28).
- [IH11] M. ISHII et T. HIBIKI. *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. Springer New York, 2011. 527 p. (cf. p. 26, 33, 49, 50).
- [JLCD01] D. JAMET, O. LEBAGUE, N. COUTRIS et J. M. DELHAYE. “The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid–vapor flows with phase change”. In : *Journal of Computational Physics* 169.2 (2001), p. 624–651 (cf. p. 21, 31).
- [JOP+01] E. JONES, T. OLIPHANT, P. PETERSON et al. *SciPy : Open source scientific tools for Python*. 2001–. URL : <http://www.scipy.org/>.
- [JT96] D. JURIC et G. TRYGGVASON. “A front-tracking method for dendritic solidification”. In : *Journal of Computational Physics* 123.1 (1996), p. 127–148 (cf. p. 23).
- [JT98] D. JURIC et G. TRYGGVASON. “Computations of boiling flows”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 24.3 (1998), p. 387–410 (cf. p. 30, 31).
- [KBGK15] M. KARIMI, L. BROSSET, J.-M. GHIDAGLIA et M. KAMINSKI. “Effect of ullage gas on sloshing, Part I : Global effects of gas–liquid density ratio”. In : *European Journal of Mechanics - B/Fluids* 53 (2015), p. 213–228 (cf. p. 6).
- [KBGK14] M. KARIMI, L. BROSSET, J.-M. GHIDAGLIA et M. KAMINSKI. “A study on conservatism of Froude scaling for sloshing model tests”. In : *Proc. of the 24th Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2014, p. 306–315 (cf. p. 6).

- [KL10] S. KOKH et F. LAGOUTIÈRE. “An anti-diffusive numerical scheme for the simulation of interfaces between compressible fluids by means of a five-equation model”. In : *Journal of Computational Physics* 229.8 (2010), p. 2773–2809 (cf. p. 25).
- [KK10] J. J. KREEFT et B. KOREN. “A new formulation of Kapila’s five-equation model for compressible two-fluid flow, and its numerical treatment”. In : *Journal of Computational Physics* 229.18 (2010), p. 6220–6242 (cf. p. 25, 50, 53, 79).
- [Krö97] D. KRÖNER. *Numerical schemes for conservation laws*. Wiley, 1997 (cf. p. 61).
- [Kun11] C. KUNKELMANN. “Numerical modeling and investigation of boiling phenomena”. Thèse de doct. TU Darmstadt, 2011 (cf. p. 25, 31, 45).
- [LGRF17] C. LABOURDETTE, J.-M. GHIDAGLIA, J. A. REDFORD et S. FAURE. “Accurate state variables for fluid flow simulation using Quicksteam and Quickmethane”. In : *European Journal of Mechanics - B/Fluids* 65 (2017), p. 132–140 (cf. p. 5, 20).
- [LBB12] W. LAFEBER, L. BROSSET et H. BOGAERT. “Elementary Loading Processes (ELP) involved in breaking wave impacts : findings from the Sloskel project”. In : *Proc. of the 22nd Int. Offshore and Polar Eng. Conf.* Vol. 3. ISOPE, 2012, p. 265–276 (cf. p. 7).
- [Lar91] B. LARROUTUROU. “How to preserve the mass fractions positivity when computing compressible multi-component flows”. In : *Journal of Computational Physics* 95.1 (1991), p. 59–84 (cf. p. 70).
- [LSN14] S. LE MARTELOT, R. SAUREL et B. NKONGA. “Towards the direct numerical simulation of nucleate boiling flows”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 66 (2014), p. 62–78 (cf. p. 31).
- [LMS04] O. LE MÉTAYER, J. MASSONI et R. SAUREL. “Élaboration des lois d’état d’un liquide et de sa vapeur pour les modèles d’écoulements diphasiques”. In : *International Journal of Thermal Sciences* 43.3 (2004), p. 265–276 (cf. p. 19).
- [LMS05] O. LE MÉTAYER, J. MASSONI et R. SAUREL. “Modelling evaporation fronts with reactive Riemann solvers”. In : *Journal of Computational Physics* 205.2 (2005), p. 567–610 (cf. p. 27, 41).
- [Lhu03] D. LHUILLIER. “A mean-field description of two-phase flows with phase changes”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 29.3 (2003), p. 511–525 (cf. p. 27, 31).
- [LA12] H. LUND et P. AURSAND. “Two-phase flow of CO2 with phase transfer”. In : *Energy Procedia* 23 (2012), p. 246–255 (cf. p. 30, 143).
- [LF10] H. LUND et T. FLÄTTEN. “Equilibrium conditions and sound velocities in two-phase flows”. In : *Proceedings of the SIAM Annual Meeting*. SIAM, 2010 (cf. p. 26).
- [MB09] S. MAILLARD et L. BROSSET. “Influence of density ratio between liquid and gas on sloshing model test results”. In : *International Journal of Offshore and Polar Engineering* 19.4 (2009), p. 271–279 (cf. p. 7–9, 140).
- [MS01] R. MAREK et J. STRAUB. “Analysis of the evaporation coefficient and the condensation coefficient of water”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 44.1 (2001), p. 39–53 (cf. p. 29).
- [Mat10] H. MATHIS. “Étude théorique et numérique des écoulements avec transition de phase”. Thèse de doct. Université de Strasbourg, 2010 (cf. p. 18).
- [MP89] R. MENIKOFF et B. J. PLOHR. “The Riemann problem for fluid flow of real materials”. In : *Reviews of Modern Physics* 61.1 (1989), p. 75–130 (cf. p. 14, 18, 37).
- [MR07] C. MERKLE et C. ROHDE. “The sharp-interface approach for fluids with phase change : Riemann problems and ghost fluid techniques”. In : *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 41.6 (2007), p. 1089–1123 (cf. p. 18, 24).
- [Mor14] A. MORO. “Shock dynamics of phase diagrams”. In : *Annals of Physics* 343 (2014), p. 49–60 (cf. p. 17).
- [MV06] S. MÜLLER et A. VOSS. “The Riemann Problem for the Euler Equations with Nonconvex and Nonsmooth Equation of State : Construction of Wave Curves”. In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 28.2 (2006), p. 651–681 (cf. p. 18).

- [Per08] V. PERRIER. “The Chapman–Jouguet closure for the Riemann problem with vaporization”. In : *SIAM Journal on Applied Mathematics* 68.5 (2008), p. 1333–1359 (cf. p. 41).
- [RZ14] C. ROHDE et C. ZEILER. “A relaxation Riemann solver for compressible two-phase flow with phase transition and surface tension”. In : *Applied Numerical Mathematics* 95 (2014), p. 267–279 (cf. p. 24, 31).
- [Rov06] J.-M. ROVARCH. “Solveurs tridimensionnels pour les écoulements diphasiques avec transferts d’énergie”. Thèse de doct. École normale supérieure de Cachan, 2006. 240 p. (cf. p. 50, 69, 79, 82).
- [SPA08] R. SAUREL, F. PETITPAS et R. ABGRALL. “Modelling phase transition in metastable liquids : application to cavitating and flashing flows”. In : *Journal of Fluid Mechanics* 607 (2008), p. 313–350 (cf. p. 31, 50).
- [Sch53] R. SCHRAGE. *A Theoretical study of interphase mass transfer*. Columbia University Press, 1953 (cf. p. 29).
- [SR05] O. SÉRO-GUILLAUME et N. RIMBERT. “On thermodynamic closures for two-phase flow with interfacial area concentration transport equation”. In : *International Journal of Multiphase Flow* 31.8 (2005), p. 897–920 (cf. p. 27, 31, 44, 50).
- [SW91] U. SETZMANN et W. WAGNER. “A new equation of state and tables of thermodynamic properties for methane covering the range from the melting line to 625 K at pressures up to 1000 MPa”. In : *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 20.6 (1991), p. 1061–1155 (cf. p. 20).
- [SS99] J. R. SIMOES-MOREIRA et J. E. SHEPHERD. “Evaporation waves in superheated dodecane”. In : *Journal of Fluid Mechanics* 382 (1999), p. 63–86 (cf. p. 10, 27).
- [SBK+06] J.-M. SIMON, D. BEDEAUX, S. KJELSTRUP, J. XU et E. JOHANNESSEN. “Interface film resistivities for heat and mass transfers integral relations verified by non-equilibrium molecular dynamics”. In : *The Journal of Physical Chemistry B* 110.37 (2006), p. 18528–18536 (cf. p. 21).
- [Smo94] J. SMOLLER. *Shock waves and reaction-diffusion equations*. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften 258. Springer, 1994 (cf. p. 61).
- [Ste90] J. STEFAN. “Über die Theorie der Eisbildung”. In : *Monatshefte für Mathematik und Physik* 1.1 (1890), p. 1–6 (cf. p. 22).
- [SW84] H. B. STEWART et B. WENDROFF. “Two-phase flow : Models and methods”. In : *Journal of Computational Physics* 56.3 (1984), p. 363–409 (cf. p. 26).
- [Tan11] O. TANGE. “GNU Parallel - The Command-Line Power Tool”. In : *login : The USENIX Magazine* 36.1 (2011), p. 42–47. URL : <http://www.gnu.org/s/parallel>.
- [TCL82] Z.-H. TENG, A. J. CHORIN et T.-P. LIU. “Riemann problems for reacting gas, with applications to transition”. In : *SIAM Journal on Applied Mathematics* 42.5 (1982), p. 964–981 (cf. p. 24, 38).
- [Tor09] E. F. TORO. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics : a practical introduction*. 3rd ed. Springer, 2009 (cf. p. 48, 61).
- [Tou92] I. TOUMI. “A weak formulation of Roe’s approximate riemann solver”. In : *Journal of Computational Physics* 102.2 (1992), p. 360–373 (cf. p. 18, 44).
- [UWWS05] Y. UTTURKAR, J. WU, G. WANG et W. SHYY. “Recent progress in modeling of cryogenic cavitation for liquid rocket propulsion”. In : *Progress in Aerospace Sciences* 41.7 (2005), p. 558–608 (cf. p. 28).
- [Wel95] S. W. J. WELCH. “Local simulation of two-phase flows including interface tracking with mass transfer”. In : *Journal of Computational Physics* 121.1 (1995), p. 142–154 (cf. p. 23).
- [WW00] S. W. J. WELCH et J. WILSON. “A volume of fluid based method for fluid flows with phase change”. In : *Journal of Computational Physics* 160.2 (2000), p. 662–682 (cf. p. 24).
- [Wit10] G. WITTERSTEIN. “Sharp interface limit of phase change flows”. In : *Advances in Mathematical Sciences and Applications* 20.2 (2010), p. 585–629 (cf. p. 22, 31, 50).
- [YSS01] W. YUAN, J. SAUER et G. H. SCHNERR. “Modeling and computation of unsteady cavitation flows in injection nozzles”. In : *Mécanique & industries* 2.5 (2001), p. 383–394 (cf. p. 28).

- [Zei10] A. ZEIN. “Numerical methods for multiphase mixture conservation laws with phase transition”. Thèse de doct. Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2010 (cf. p. 26).
- [Zha17] L. ZHANG. “Modélisation, analyse et simulations d’écoulements en thermohydraulique par modèles à six équations”. Thèse de doct. École normale supérieure Paris-Saclay, 2017 (cf. p. 65).

Titre : Sur la modélisation physique et numérique du changement de phase interfacial lors d'impacts de vagues

Mots clefs : Changement de phase, Mécanique des fluides, Impact de vague, Simulation numérique, Équations aux dérivées partielles, Volumes finis

Résumé : Dans le cadre du stockage de Gaz Naturel Liquéfié (GNL) dans des réservoirs flottants, tels que les méthaniers, les contraintes imposées à la cuve par le ballottement de la cargaison doivent être quantifiées. La plupart des études expérimentales ou numériques actuelles ne prennent pas en compte la possibilité de changement de phase entre le GNL et sa vapeur lors d'un impact du liquide sur la paroi. L'objectif de cette thèse est l'ajout de ce phénomène physique dans un code de mécanique des fluides numérique pour la simulation de l'impact d'une vague déferlante sur une paroi.

Dans ce but, un état de l'art des différentes modélisations possibles du changement de phase en mécanique des fluides est présenté. Il a été choisi de modéliser le changement de phase entre le liquide et le gaz à une interface franche sans hypothèse d'équilibre thermodynamique à l'interface. Un système hyperbolique de lois de conservation incluant le changement de phase interfacial hors-équilibre est présenté.

Deux approches sont utilisées pour la résolution numérique de ce système. La première utilise un modèle de mélange pour décrire les mailles contenant l'interface liquide-vapeur. Dans la seconde méthode, l'interface est reconstruite et évolue de manière lagrangienne. Les deux approches sont basées sur un schéma volume fini de type Roe.

L'enjeu de la simulation numérique du changement de phase interfacial est la capacité du code à gérer un rapport de densité loin de 1 et une chaleur latente élevée, qui entraînent respectivement de fortes variations de pression et de température à l'interface. L'aspect thermique est le phénomène limitant dans le cadre de la simulation d'impacts de vagues avec changement de phase. Seule une fine couche limite thermique autour de l'interface tend à revenir à l'équilibre thermodynamique liquide vapeur, ce qui limite l'effet quantitatif du changement de phase.

Title : On the physical and numerical modeling of interfacial phase change during wave impacts

Keywords : Phase change, Fluid mechanics, Wave impact, Numerical simulation, Partial differential equations, Finite volumes

Abstract : In the context of Liquefied Natural Gas (LNG) transportation in floating tanks, such as in LNG carriers, the constraints imposed by the sloshing of the liquid cargo on the tank have to be estimated. Most experimental and numerical studies until now do not take into account the possibility of phase change between the LNG and its vapor during the impact of liquid on the wall. The goal of this thesis is to include this physical phenomenon into a CFD code for the simulation of a breaking wave impact on a wall.

A state of the art of the different modelisations of phase change in fluid mechanics is thus presented. This work focus on the modeling of phase change between the liquid and the gas at a sharp interface, without any equilibrium hypothesis. An hyperbolic system of balance laws including non-equilibrium interfacial phase change is presented.

Two approaches are used to solve numerically this system. The first one relies on a mixture model for the description of the finite volume cells containing the interface, whereas in the second approach the interface is reconstructed and evolves in a Lagrangian way. Both methods are based on a Roe-type finite volume scheme.

The challenge of the numerical simulation of interfacial phase change is the capacity of the code to deal with a density ratio far from 1 and a high latent heat, as they lead to high temperature and pressure variations at the interface. The thermal aspect is the limiting phenomenon for wave impact simulations with phase change. Only a thin boundary layer around the interface tends to return to thermodynamical equilibrium, thus limiting the quantitative effect of phase change.

