



HAL
open science

Modélisation et simulation d'écoulements multiphasiques avec phases miscibles

Jean Bussac

► **To cite this version:**

Jean Bussac. Modélisation et simulation d'écoulements multiphasiques avec phases miscibles. Mathématiques [math]. Nantes Université, 2023. Français. NNT: . tel-04232670

HAL Id: tel-04232670

<https://theses.hal.science/tel-04232670>

Submitted on 9 Oct 2023

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.

Public Domain

THÈSE DE DOCTORAT

NANTES UNIVERSITÉ

ÉCOLE DOCTORALE N° 641
*Mathématiques et Sciences et Technologies
de l'Information et de la Communication*
Spécialité : *Mathématiques et leurs Interactions*

Jean BUSSAC

**Modélisation et simulation d'écoulements multiphasiques avec
phases miscibles**

Thèse présentée et soutenue à Nantes, le 4 septembre 2023
Unité de recherche : Laboratoire de Mathématiques Jean Leray

Rapporteurs avant soutenance :

Marc MASSOT Professeur, École Polytechnique
Vincent PERRIER Chargé de Recherche, INRIA Bordeaux

Composition du Jury :

| | | |
|--------------------|--------------------------|--|
| Président : | Christophe CHALONS | Professeur, Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines |
| Examineurs : | Christophe BERTHON | Professeur, Nantes Université |
| | Frédérique LAURENT-NÈGRE | Chargée de recherche, CNRS |
| | Maria Giovanna RODIO | Ingénieur de recherche, CEA Paris-Saclay |
| Dir. de thèse : | Jean-Marc HÉRARD | Chercheur Senior, E.D.F. R.&D. |
| Co-dir. de thèse : | Hélène MATHIS | Professeure, Université de Montpellier |

Remerciements

Trois années viennent de s'écouler, bien plus rapidement que prévu, c'est sans doute bon signe. Il convient de remercier l'ensemble des personnes ayant rendu ce travail possible dans d'excellentes conditions.

En premier lieu, je tiens à remercier Hélène et Jean-Marc, qui m'ont fourni un cadre de travail agréable et ont su me donner les outils pour affronter ces maths comme le monde de la recherche. Votre complémentarité et vos expériences m'ont beaucoup appris, et je ne manquerai pas de m'en inspirer si, par hasard, je poursuis ce travail de recherche dans les années à venir. Merci Hélène de m'avoir proposé ce stage de fin d'études puis de m'avoir fait confiance pour la thèse, malgré mon absentéisme aux TP de L3 et ma réticence à l'option "arts et science", que tu as sans aucun doute oubliés...! Jean-Marc, merci pour ta gentillesse, ta patience et ton humour, qui auront été précieux au milieu de ces problèmes pas tout à fait triviaux.

Le chapitre 4 est l'adaptation d'un travail de Khaled Saleh, qui m'a proposé de travailler avec lui deux jours à Lyon. Merci Khaled pour cet accueil et cet aperçu de ce que peut être la recherche à plusieurs, j'admire ton travail et ton humilité. Merci encore pour cette excellente adresse de restaurant à sushi, l'inconvénient étant que je n'en trouve pas d'équivalente ici.

Je remercie l'ensemble des membres du laboratoire de maths qui rendent ce lieu de travail agréable : secrétariat, documentalistes, enseignants-chercheurs, doctorants.

Plus particulièrement, j'ai une grande reconnaissance envers les enseignants formidables que j'ai pu avoir. Vos qualités humaines, scientifiques et pédagogiques ont fait (re?)naître chez moi cet intérêt pour la science et l'apprentissage des maths. Lors de ma reprise d'étude, je n'aurais pas imaginé une seconde prendre ce chemin.

J'aimerais remercier individuellement Friedrich Wagemann de m'avoir aidé à reprendre directement en L3 après mes années disons, d'interlude musicale, Sylvain Gervais et François Nicoleau pour leur préparation à l'agrégation et Anaïs Crestetto dont les TP de modélisation m'auront orienté vers les maths appliquées. Je remonte un peu plus le temps pour remercier mes trois professeures en deuxième année de prépa, Mesdames Brune, Henri et Pélissier.

J'ai aussi eu la chance d'avoir eu quelques coups de main : merci à Lucie Quibel qui a pris un moment au téléphone au début de ma thèse pour me parler de son travail et préciser quelques points techniques, merci à Clovis Chabertier pour ses réponses à mes questions sur les champs de vecteurs, merci à Mohamad Rachid qui, en insistant gentiment et avec innocence, m'a aidé à montrer le théorème du chapitre 5 et merci à Jeanne Lacroix pour son aide lorsque *Communications in Mathematical Science* trouvait mon anglais un peu limite.

Un grand merci à toi Juliette, pour ta patience et ta gentillesse remarquables, notamment les derniers jours de préparation de la soutenance.

Je suis heureux de rendre ma mère fière de ce parcours, qui préfère sans doute un fils docteur à un fils intermittent du spectacle. Je fais remarquer au lecteur que l'un n'empêche pas l'autre, et qu'il existe de beaux exemples. Je souhaite à mon frère de trouver son équilibre qui le rende aussi heureux que moi.

Quelques membres de ma famille, qui m'ont permis d'en arriver là : ma formidable tante et marraine Sophie, Christophe, ma grand-mère Annette, et mon oncle François, à qui j'aurais aimé pouvoir tendre ce manuscrit.

Enfin, quelques proches, amis, professeurs, musiciens... Esther, Luc-Antoine, Clément et François. Sven, Léo, Licia, Clovis. Une mention spéciale à Michel Grizard qui aura, avec une grande simplicité, joué un rôle essentiel dans ma vie de musicien. Évidemment, Mila, Laure (François et Cléo!), ainsi que Louis, Pascal, Pierre-Emmanuel et Romain. Angélique, et plus récemment Arthur, Étienne, Ronan, Théo, et les autres musiciens grâce qui j'ai pu changer d'air lors de quelques sessions... !

TABLE DES MATIÈRES

| | |
|---|-----------|
| Introduction | 9 |
| Contexte industriel | 9 |
| Contexte scientifique | 9 |
| Synthèse des travaux | 15 |
| Chapitre 1 : contexte thermodynamique | 15 |
| Chapitre 2 : étude de processus de relaxation dans un modèle diphasique | 17 |
| Chapitre 3 : simulation d'un modèle homogène diphasique hybride | 19 |
| Chapitre 4 : simulation d'un modèle multivitesse barotrope diphasique hybride | 22 |
| Chapitre 5 : généralisation d'un modèle multivitesse avec miscibilité | 24 |
| Publications | 25 |
| | |
| 1 Contexte thermodynamique | 27 |
| 1.1 Quelques fondamentaux de thermodynamique | 27 |
| 1.2 Descriptions thermodynamiques | 29 |
| 1.2.1 Description extensive et entropie d'un fluide monophasique | 29 |
| 1.2.2 Description d'un fluide monophasique | 31 |
| 1.2.3 Description d'un fluide multiphasique | 33 |
| 1.3 Équilibre thermodynamique : une approche mathématique | 37 |
| 1.4 Quelques lois d'état | 37 |
| | |
| 2 Étude de processus de relaxation dans un modèle diphasique | 41 |
| 2.1 Thermodynamique d'un mélange diphasique | 43 |
| 2.1.1 Entropie du mélange | 43 |
| 2.1.2 Équilibre thermodynamique | 46 |
| 2.2 Termes sources de type BGK | 47 |
| 2.3 Termes sources en gradient d'entropie | 50 |
| 2.4 Conclusion : comparaison des termes sources | 56 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3 | Simulation d'un modèle HRM pour un mélange diphasique hybride | 59 |
| 3.1 | Modèle | 61 |
| 3.1.1 | Thermodynamique du mélange | 61 |
| 3.1.2 | Dynamique du mélange | 65 |
| 3.1.3 | Termes sources | 67 |
| 3.2 | Approximation numérique par une méthode à pas fractionnaire | 73 |
| 3.2.1 | Partie convective | 74 |
| 3.2.2 | Calculs de l'énergie interne | 77 |
| 3.2.3 | Approximation des termes sources | 81 |
| 3.3 | Résultats numériques | 82 |
| 3.3.1 | Relaxation infiniment lente | 82 |
| 3.3.2 | Simulations complètes hors-équilibre | 88 |
| 3.4 | Conclusion | 92 |
| 3.5 | Annexe : Calcul de l'équilibre pour un mélange de trois gaz raides | 95 |
| 4 | Simulation d'un modèle multivitesse pour un mélange diphasique hybride | 99 |
| 4.1 | Modèle | 100 |
| 4.2 | Schémas numériques | 102 |
| 4.2.1 | Schéma de Rusanov non conservatif | 103 |
| 4.2.2 | Schéma de relaxation type Suliciu | 104 |
| 4.2.3 | Approximation des termes sources | 107 |
| 4.3 | Résultats numériques | 108 |
| 4.3.1 | Cas test 1 : discontinuité de contact | 108 |
| 4.3.2 | Cas test 2 : phase liquide évanescence avec des chocs | 109 |
| 4.3.3 | Couplage avec les termes sources | 109 |
| 4.4 | Conclusion | 114 |
| 4.5 | Annexe : résolution numérique du problème de Riemann de relaxation | 114 |
| 4.5.1 | Calcul des paramètres de relaxation | 116 |
| 4.5.2 | Résolution du problème de point fixe | 116 |
| 4.5.3 | Solution de la phase liquide | 117 |
| 4.5.4 | Solutions de la phase gazeuse | 117 |
| 4.5.5 | Calcul des flux numériques | 119 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 5 | Généralisation d'un modèle multivitesse avec miscibilité | 121 |
| 5.1 | Modèle | 122 |
| 5.1.1 | Cadre thermodynamique | 122 |
| 5.1.2 | Système d'équations | 124 |
| 5.1.3 | Définition des pressions interfaciales | 127 |
| 5.2 | Analyse | 134 |
| 5.2.1 | Hyperbolicité | 134 |
| 5.2.2 | Symétrisation | 137 |
| 5.3 | Termes sources admissibles | 139 |
| 5.4 | Conclusion | 142 |
| | Conclusion | 143 |
| | Bibliographie | 147 |

INTRODUCTION

Contexte industriel

Les écoulements multiphasiques prennent part dans de nombreuses situations physiques, leur compréhension est un enjeu contemporain fondamental. Une des principales applications industrielles est le nucléaire civil, où différentes configurations fluides apparaissent, que ce soit dans le régime de fonctionnement normal ou dans de potentielles situations accidentelles.

Le parc nucléaire français est exclusivement constitué de réacteurs à eau pressurisée (REP). Ils contiennent différents circuits permettant de contrôler les flux de chaleur, et ainsi entrainer la turbine qui produit l'électricité (voir figure 1, tirée de la page d'informations de l'IRSN [53]). Le circuit primaire transfère la chaleur produite par la réaction de fission vers le circuit secondaire. Dans ce premier, l'eau est radioactive et circule à plus de 300°C et 155 bars : sa sûreté est essentielle. Un scénario accidentel étudié est la perte de réfrigérant primaire (APRP, [35]), pouvant entrainer différentes complications majeures. La brèche dans le circuit primaire entrainerait une dépressurisation brutale de l'eau et son ébullition. L'explosion vapeur [5] est un autre scénario où le cœur du réacteur fondrait, menant à un mélange de combustible fondu, d'eau liquide et de vapeur.

Ces deux scénarii font intervenir plusieurs états physiques, principalement liquide et gazeux. L'étude des écoulements multiphasiques est donc centrale afin d'améliorer la sûreté des installations nucléaires. De plus, ces situations comprennent des mélanges miscibles, configuration physique qui sera un élément important de cette thèse.

Contexte scientifique

Vocabulaire

Comme nous l'avons mentionné précédemment, la prise en compte de la miscibilité dans nos modèles est un point central. Par exemple, une situation qui requiert cet aspect est un mélange où l'eau, sous forme liquide et vapeur, est au contact de l'air ambiant.

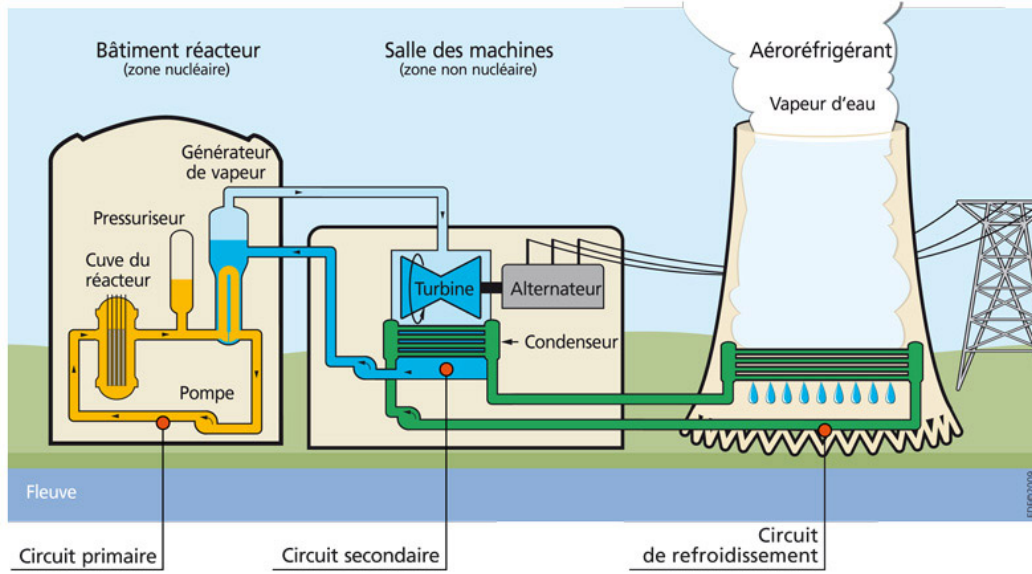


FIGURE 1 – Principe de fonctionnement d'une centrale nucléaire (IRSN, [53]).

Afin de clarifier les différentes configurations envisagées dans ce manuscrit, précisons les termes utilisés.

Le terme "phase" correspond à un état de la matière, "composant" à une substance chimique, et "champ" à un composant dans une phase donnée. Un gaz est dit incondensable s'il ne peut échanger de matière avec les autres composants du mélange. Enfin, nous utiliserons l'adjectif "hybride" en complément de N -phasique pour indiquer qu'une des phases contient de la miscibilité (et donc plusieurs champs). Ainsi, la configuration eau liquide-eau vapeur-air ambiant est un mélange diphasique hybride, ou plus précisément, diphasique à trois champs. L'air ambiant est un gaz incondensable, contrairement à la vapeur d'eau qui peut échanger de la masse avec l'eau sous forme liquide.

Modélisation de la dynamique

L'étude de tels écoulements nécessite d'une part, une description dynamique du fluide et d'autre part, une description thermodynamique. Cela se fait à l'aide d'une fonction inconnue $\mathcal{W}(t, x) \in \mathbb{R}^n$ dépendant du temps $t > 0$ et de l'espace $x \in \mathbb{R}^d$

$$\mathcal{W}: \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^n \quad (1)$$

$$(t, x) \mapsto \mathcal{W}(t, x). \quad (2)$$

Les équations de la dynamique que l'on étudiera appartiennent à la catégorie des équations aux dérivées partielles d'ordre un. Une grande partie de ces systèmes traduisent des conservations de quantités et sont de la forme

$$\partial_t \mathcal{W} + \partial_x f(\mathcal{W}) = 0, \quad (3)$$

où la fonction $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ est appelé flux physique. Ces systèmes sont appelés lois de conservation. Dans ce travail, la dynamique (globale ou par phases) reposera toujours sur le système d'Euler compressible qui appartient à cette catégorie. Il traduit les bilans de masse, quantité de mouvement et énergie sous formes dérivées, et décrit les évolutions de la masse volumique ρ , de la vitesse u et de l'énergie totale $E = e + u^2/2$, où e est l'énergie interne du fluide. Pour un fluide monophasique, il s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t(\rho) + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p) = 0, \\ \partial_t(\rho E) + \partial_x(\rho u E + up) = 0, \end{cases} \quad (4)$$

auquel on adjoint une loi d'état $p = p(\rho, e)$. La répartition entre les phases se fait à l'aide de fractions que l'on définira dans le paragraphe suivant. Dans certains de nos modèles, des termes supplémentaires feront perdre le caractère conservatif de ces équations et des résultats théoriques associés. Toutefois, tous vérifieront la propriété d'hyperbolicité. Cela signifie qu'à l'aide de changements de variables, ces systèmes peuvent s'écrire sous la forme

$$\partial_t \mathcal{W} + A(\mathcal{W}) \partial_x \mathcal{W} = 0, \quad (5)$$

avec $A(\mathcal{W})$ diagonalisable dans \mathbb{R} pour tout \mathcal{W} . Ce caractère hyperbolique définit un cadre de travail précis [68, 36] et permet notamment d'étudier rigoureusement des solutions comprenant des discontinuités.

Deux familles de modèles

Il existe deux grandes classes de modèles dédiés à la dynamique des écoulements multiphasiques que nous présentons dans cette partie.

La première classe est celle des modèles homogènes. Ce dernier terme concerne des quantités, relatives aux composants, qui sont supposées égales. La dynamique décrite est celle du mélange, à l'aide d'un système d'Euler. Les informations de chacun des champs sont connues par des fractions de masse, volume et énergie, qui correspondent au rapport

de la quantité phasique sur la quantité totale. Par exemple, la fraction de volume de liquide est $\alpha_l = V_l/V$. Il existe un panel large de modèles homogènes, avec différentes hypothèses. Nous nous concentrons sur les modèles homogènes de relaxation, dits HRM. Ils sont issus des modèles homogènes à l'équilibre (HEM), qui sont munis d'une loi de pression du mélange à l'équilibre. Bien que ces derniers bénéficient de bonnes propriétés analytiques, leur implémentation numérique est très complexe à cause de cette loi de pression. Les modèles HRM héritent des propriétés des modèles HEM et n'ont pas cet inconvénient pratique. La loi de pression est celle du fluide hors équilibre et elle se calcule explicitement à partir des lois d'état phasiques. Des termes sources viennent compenser cette hypothèse et modélisent l'évolution vers l'équilibre thermodynamique.

Dans les modèles homogènes que nous étudions, c'est la vitesse qui est supposée commune aux différents composants. Ainsi, il est possible d'écrire des équations de transport sur les fractions à cette unique vitesse. Enfin, la donnée des équations d'état phasiques suffit à fermer le système.

Ces modèles ont été introduits il y a plusieurs décennies et le cas diphasique a été beaucoup étudié récemment, on pourra notamment se référer à [6, 31, 54, 37, 4, 29, 47, 55]. L'extension au triphasique immiscible a été étudiée dans [48], et l'ajout de miscibilité dans [60].

La structure mathématique étant très proche de celle des équations d'Euler, la simulation de ces modèles est relativement accessible. Des travaux ont été menés dans [47, 48] en diphasique et triphasique, et dans [50] en diphasique hybride.

La seconde catégorie, plus récente, est issue du modèle de Baer et Nunziato [3], initialement conçu pour étudier un mélange diphasique compressible contenant des matériaux granulaires réactifs. Dans ces modèles, la répartition entre les champs se fait à l'aide de fractions statistiques donnant la probabilité à un temps et en un point donnés que ce champ soit présent. Chacun d'entre eux est décrit par un système d'Euler compressible auquel on adjoint des termes de couplage. Ces derniers contiennent des quantités dites interfaciales qui contribuent au système de façon non conservative, ce qui demande une analyse plus approfondie du système. La fraction statistique suit une équation de transport à la vitesse interfaciale. On doit définir des lois de fermeture pour ces termes interfaciaux, sous contraintes physiques, et dont les propriétés mathématiques du modèle dépendent. Ces modèles sont couramment appelés modèles multfluides ou multivitesse (par opposition à la première classe de modèles), ou modèles de Baer et Nunziato. Nous utiliserons régulièrement ces appellations dans tout ce manuscrit.

L'analyse du modèle original a été faite dans [27], et des propositions de fermeture ont été proposées dans [16] par exemple. Des généralisations à un plus grand nombre de phases ont été étudiées, d'abord en triphasique immiscible [40], puis pour un nombre quelconque de phases immiscibles [61]. Plus récemment, l'hypothèse de miscibilité a été rajoutée [45, 43].

Les propriétés mathématiques du modèle et ses termes non conservatifs rendent les applications numériques difficiles. On trouvera dans [32] des simulations du modèle de Baer-Nunziato. Plus récemment, un schéma de relaxation dédié à ces modèles a été proposé dans le cas barotrope dans [19] et dans le cas avec énergie [18].

Modélisation thermodynamique : lois d'état et relaxation

Les systèmes introduits précédemment sont généralement sous-déterminés. On dit aussi qu'il faut fournir des lois de fermeture, ou plus simplement fermer ces systèmes. Par exemple, le système d'Euler (4) requiert un choix de loi de pression $p = p(\rho, e)$.

Le premier type de fermeture à préciser concerne les lois d'état : elles sont des fonctions décrivant la thermodynamique du fluide et liant ainsi les variables. Parmi de nombreux choix possibles, on utilisera dans ce manuscrit la fonction d'entropie spécifique s dans le plan (τ, e) , où τ est le volume spécifique du fluide et e son énergie interne spécifique. On retiendra donc que se donner une description thermodynamique d'un fluide, c'est se donner une loi d'état de la forme

$$s : (\tau, e) \mapsto s(\tau, e). \quad (6)$$

L'équation (6) s'applique à un fluide monophasique, et elle permet de passer à une description multiphasique lorsque chaque phase possède sa loi d'état.

Néanmoins, la considération de fluides multiphasiques nécessite d'établir des relations de conservation et de considérer les échanges entre les phases :

- Les conservations de la masse, de l'énergie et du volume se traduisent en un ensemble de contraintes \mathcal{C} qui lient la variable du mélange aux variables des phases.
- Les échanges entre les phases se modélisent par l'adjonction de termes sources Γ sur les équations de la dynamique. Dans ce travail, ils modéliseront les transferts de masse, de volume et de chaleur.

Finalement, un modèle complet sera constitué de lois d'état $s_k(\tau_k, e_k)$ relatives aux phases k , de contraintes de conservation \mathcal{C} et d'un système d'équations aux dérivées partielles

$$\partial_t \mathcal{W} + \partial_x f(\mathcal{W}) = \Gamma(\mathcal{W}) \quad (7)$$

où $\Gamma(\mathcal{W})$ traduit le retour à l'équilibre thermodynamique du mélange.

Simulations numériques

Une partie importante de cette thèse concerne l'approximation numérique des modèles étudiés. En effet, la complexité de ces derniers ne permet pas de calculer des solutions explicites, d'où la nécessité de disposer de méthodes numériques permettant d'approcher les solutions théoriques.

Les simulations globales sur un système de la forme (7) seront faites à l'aide d'une méthode à pas fractionnaires [69], où l'on résout dans un premier temps la partie convective du système, c'est-à-dire sans termes sources

$$\partial_t \mathcal{W} + \partial_x f(\mathcal{W}) = 0. \quad (8)$$

Dans un second temps les termes sources sont pris en compte par la résolution d'une équation différentielle ordinaire

$$\partial_t \mathcal{W} = \Gamma(\mathcal{W}). \quad (9)$$

Selon la nature des termes sources et leur complexité, on disposera ou non des solutions exactes de cette équation différentielle. On pourra éventuellement utiliser des approximations numériques pour la résoudre dans les cas les plus complexes.

La partie convective sera approchée par des méthodes volumes finis [59, 36]. Elles consistent à approcher sur un maillage espace-temps la solution $\mathcal{W}(t^n, x_j)$ au temps t^n et sur la maille x_j par \mathbb{W}_j^n à l'aide de la relation

$$\mathbb{W}_j^{n+1} = \mathbb{W}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+\frac{1}{2}}^n(\mathbb{W}_j^n, \mathbb{W}_{j+1}^n) - F_{i-\frac{1}{2}}^n(\mathbb{W}_{j-1}^n, \mathbb{W}_j^n)), \quad (10)$$

où $F_{i\pm\frac{1}{2}}^n$ est un flux numérique. Dans le cas où le modèle est non conservatif, une adaptation sera requise. Les simulations dans ce manuscrit sont exclusivement faites en dimension un.

Il est essentiel de s'assurer de la pertinence des méthodes numériques que l'on implémente. Ce processus est appelé vérification et consiste à s'assurer que la méthode approche convenablement la solution exacte du problème. On étudiera ainsi la convergence en maillage de nos schémas sur des problèmes dont on connaît la solution. Ces derniers seront des problèmes de Riemann, qui sont des problèmes de Cauchy avec une donnée initiale $\mathcal{W}(0, x)$ constituée de deux états constants

$$\mathcal{W}(t = 0, x) = \begin{cases} \mathcal{W}_L & \text{si } x < 0, \\ \mathcal{W}_R & \text{si } x \geq 0. \end{cases} \quad (11)$$

Cela nous permet finalement d'étudier les schémas et de les comparer selon divers aspects : taux de convergence, stabilité, temps de calcul...

Lorsque ce sera possible, on simulera l'ensemble du modèle en couplant la partie convective et les termes sources.

Synthèse des travaux

Chapitre 1 : contexte thermodynamique

Ce premier chapitre a pour but de présenter quelques notions basiques de la thermodynamique et d'introduire les outils nécessaires pour les travaux présentés dans ce manuscrit.

On s'attache dans un premier temps à donner le vocabulaire et les notions essentielles. Le terme "phase" est précisé : il réfère à un état de la matière. On définit en conséquence le terme "champ" qui réfère à une substance chimique dans une phase donnée. Dans la littérature, les travaux traitant de fluides avec miscibilité peuvent s'accorder quelques libertés sur la terminologie, il est donc important de définir un cadre précis pour ce manuscrit. On énonce ensuite le second principe de la thermodynamique et on définit l'équilibre thermodynamique, qui seront des éléments incontournables dans ce travail.

La deuxième partie concerne la description thermodynamique d'un fluide multiphasique. Dans le cas d'un fluide monophasique, on donne les variables dites extensives : masse, volume et énergie. L'énergie interne est définie, et on introduit la fonction d'entropie, qui dépend exclusivement de ces variables et décrit totalement la thermodynamique du fluide. Ce travail est décliné en version intensive, c'est-à-dire par unité de masse. Ce sera la forme que l'on utilisera en général. Les potentiels dits intensifs sont définis : pression,

température, potentiel chimique. Enfin, ces définitions sont étendues au cas multiphasique, grâce notamment à l'introduction des fractions de masse, de volume et d'énergie propres à chaque phase.

On retiendra qu'un fluide multiphasique de vecteur d'état $w = (\tau, e, Y)$ est entièrement décrit par sa fonction d'entropie spécifique s , où τ est le volume massique, e l'énergie interne e et Y le vecteur des fractions décrivant la répartition des phases. Cette fonction est dite loi d'état :

$$s : (\tau, e, Y) \mapsto s(\tau, e, Y). \quad (12)$$

On peut en déduire la pression p , la température T et le potentiel chimique du fluide μ , dérivées partielles de cette fonction. En effet, l'entropie vérifie la relation de Gibbs, écrite ici sous forme intensive

$$Tds = de + pd\tau. \quad (13)$$

On étudie les propriétés de l'entropie thermodynamique, qui joueront régulièrement des rôles importants dans notre travail. En particulier, sa concavité est un point central pour la définition de l'équilibre thermodynamique, l'évolution du système selon le second principe et l'hyperbolicité de certains modèles.

La dernière partie donne des lois d'états $s_k(\tau_k, e_k)$ pour une phase k , en fonction du volume spécifique τ_k et de l'énergie interne e_k . Spécifier ces lois pour chaque phase k permet de connaître le comportement du mélange d'après la relation suivante

$$s(\tau, e, Y) = \sum_{k \in \mathcal{K}} y_k s_k(\tau_k, e_k), \quad (14)$$

où \mathcal{K} est l'ensemble des champs constituant le mélange. Ces lois seront utilisées pour les applications numériques au long de ce manuscrit, ainsi que pour quelques études théoriques. Certains aspects techniques sont abordés, et les paramètres numériques utilisés dans la suite de ce manuscrit sont donnés.

Chapitre 2 : étude de processus de relaxation dans un modèle diphasique

Dans ce premier chapitre, on se place dans le cadre diphasique afin de s'intéresser à la modélisation de la relaxation thermodynamique. Pour cela, on considère un modèle homogène de relaxation (HRM). C'est un modèle où les phases partagent la même vitesse et aucune hypothèse d'équilibre thermodynamique n'est faite. En contrepartie, des termes sources Γ modélisent l'évolution vers l'équilibre, par des relaxations thermique, mécanique et des échanges de masse. Le modèle admet la forme conservative

$$\partial_t \mathcal{W} + \partial_x f(\mathcal{W}) = \Gamma(\mathcal{W}). \quad (15)$$

Le système convectif (c'est-à-dire sans termes sources) est hyperbolique. Sa structure est semblable à celle des équations d'Euler et il admet une entropie de Lax liée à l'entropie physique σ concave.

Les termes sources sont l'objet central de notre étude. Ils dépendent du volume massique du fluide τ , de son énergie interne e et du vecteur de fractions Y . En pratique, l'approximation numérique de ce modèle se fait classiquement par une méthode à pas fractionnaires [69]. Elle consiste à résoudre dans un premier temps la partie convective du système, puis à prendre en compte les termes sources par le système d'équations différentielles ordinaires suivant

$$\frac{dY}{dt} = \Gamma(\tau, e, Y). \quad (16)$$

Ainsi, on étudiera particulièrement les trajectoires des solutions de ce système dynamique. Le choix de termes sources est contraint par le second principe de la thermodynamique : l'évolution qu'ils modélisent doit faire croître l'entropie physique du système. Une condition suffisante pour s'en assurer est

$$\Gamma(Y, \tau, e) \cdot \nabla_Y \sigma \geq 0, \quad (17)$$

condition que l'on appellera "éligibilité". De plus, les états asymptotiques du système dynamique (16) doivent correspondre à des équilibres. Cette condition sera appelée "consistance", et se traduit par

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} Y(t) = Y_{eq},$$

où Y_{eq} est défini en maximisant l'entropie du mélange par rapport aux fractions Y .

Nous rappelons dans une première partie les propriétés thermodynamiques du modèle, pour une équation d'état aux hypothèses classique (\mathcal{C}^2 , strictement concave), voir [30]. En illustrant ces propriétés avec le choix de lois d'état de gaz raides, on étudie le domaine de définition de l'entropie du mélange et l'on s'attarde sur ses propriétés de convexité. Ces dernières sont fondamentales du point de vue physique [14]. En effet, elles doivent permettre une définition de l'équilibre thermodynamique comme maximiseur de l'entropie et offrir des possibilités de termes sources en adéquation avec le second principe.

Les deux parties qui suivent présentent des termes sources étudiés. Pour chacun, on vérifie l'éligibilité et la consistance : ils doivent faire évoluer le système avec une croissance de l'entropie et vers un équilibre thermodynamique. Des échelles de temps de relaxation λ peuvent pondérer ces évolutions.

Le premier est un terme source de type BGK, très utilisé dans la littérature afférente au cadre diphasique homogène, voir par exemple [47, 48, 63]. Il est défini par

$$\Gamma_1(\tau, e, Y) = \lambda(Y_{eq}(\tau, e) - Y). \quad (18)$$

Son expression permet la résolution exacte de (16) et est ainsi un avantage considérable d'un point de vue numérique. L'évolution induite du système est simple. Néanmoins, il nécessite le calcul de l'équilibre thermodynamique, dont la difficulté dépend directement des lois d'état. Par exemple, un mélange diphasique hybride avec lois de gaz raides semble être la situation la plus réaliste que l'on sait traiter rigoureusement [63, 51]. Enfin, les échelles de temps doivent être les mêmes afin d'assurer le second principe de la thermodynamique, ce qui peut être physiquement délicat.

Le second terme source est défini à partir du gradient de l'entropie du mélange

$$\Gamma_2(\tau, e, Y) = \lambda \nabla_Y s(\tau, e, Y). \quad (19)$$

Ainsi, il vérifie directement les propriétés d'éligibilité et de consistance. L'intégration exacte est hors d'atteinte, mais on peut appliquer le théorème de Cauchy-Lipschitz et utiliser des solveurs en pratique. Les expériences numériques mènent à des évolutions complexes du système. La non-définition de l'entropie dans les cas monophasiques nécessite de vérifier le bon comportement de ce terme source. C'est l'objet d'une proposition qui exclue des convergences physiquement incohérentes. Contrairement au premier terme source, il est possible de choisir des échelles de temps distinctes par composantes. Ces

résultats, établis dans le cas d'un mélange de deux gaz raides, sont aussi déclinés dans le cas plus simple de deux gaz parfaits.

Ce travail est une mise à plat de certaines connaissances sur la relaxation thermodynamique dans le cadre d'un modèle homogène de relaxation. À notre connaissance, la grande majorité des travaux sur les écoulements multiphasiques portent sur la dynamique, et ce n'est que plus récemment que la question thermodynamique a été approfondie, voir par exemple [49]. Il permet de soulever certaines difficultés et d'éclaircir des points souvent occultés : définitions de l'équilibre et des termes sources, existence de solutions aux systèmes dynamiques, pertinence physique... En proposant une étude pour deux classes de termes sources, leurs définitions sont données, leurs propriétés sont établies et illustrées numériquement. Enfin, une partie de ce travail sera prolongée dans le cas diphasique hybride qui est l'objet du chapitre suivant.

L'ensemble des simulations numériques de ce chapitre a été réalisé à partir d'algorithmes Python utilisant des méthodes d'intégration semi-implicites du type Adams Bashforth.

Communications :

- ▶ Ce travail a donné lieu à un papier accepté dans les proceedings *ESAIM : Proceedings and Surveys* sous la référence :
Bussac Jean, "Study of relaxation processes in a two-phase flow model"
- ▶ Communications orales :
 - ▶ Third workshop on Compressible Multiphase Flows (Strasbourg, juin 2021, poster)

Chapitre 3 : simulation d'un modèle homogène diphasique hybride

Ce chapitre a pour objectif d'approcher numériquement un modèle diphasique hybride avec termes sources. On s'attachera d'une part à comparer les performances de deux schémas volumes finis sur la partie convective, et d'autre part à comparer les deux termes sources présentés dans le chapitre précédent.

Le modèle que l'on étudie ici est la version diphasique hybride du modèle présenté au chapitre 2. Il décrit un mélange d'eau liquide (l), de vapeur (v) et d'un gaz inerte (g). C'est un modèle homogène de relaxation (HRM) dont la dynamique est constituée

d'une part d'un système d'équations d'Euler sur le mélange, et d'autre part d'équations de transport sur les fractions $Y = (y_l, \alpha_l, z_l, z_g)$, où y_k , α_k et z_k sont respectivement les fractions de masse, de volume et d'énergie de la phase k . Ces dernières contiennent des termes sources $\Gamma(\tau, e, Y, y_g)$ modélisant les échanges thermodynamiques. Le système est le suivant

$$\begin{cases} \partial_t(\rho Y) + \partial_x(\rho Y u) = \rho \lambda \Gamma(\tau, e, Y, y_g), \\ \partial_t(\rho y_g) + \partial_x(\rho y_g u) = 0, \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p) = 0, \\ \partial_t(\rho E) + \partial_x((\rho E + p)u) = 0. \end{cases} \quad (20)$$

Notons que l'équation de transport sur la masse de gaz y_g ne contient pas de terme source. C'est la conséquence du caractère inerte du gaz, dont la masse reste constante et est uniquement soumise à la dynamique.

Dans un premier temps, la thermodynamique du mélange est présentée. Nous en donnons une description et les lois d'état qui seront utilisées dans les applications numériques. Un paragraphe est dédié aux propriétés de concavité de l'entropie. Enfin, une définition mathématique de l'équilibre thermodynamique est donnée dans ce cas précis. Ces notions et propriétés sont cruciales du point de vue physique.

Nous dérivons ensuite le modèle et étudions ses propriétés : il est hyperbolique, admet une entropie de Lax et possède trois champs caractéristiques analogues au cas du système d'Euler. On définit les deux types de termes sources utilisés, qui sont les versions diphasiques hybrides des termes sources étudiés dans le chapitre 2. Certaines des propriétés présentées dans ce dernier sont étendues au cas présent : admissibilité vis-à-vis du second principe de la thermodynamique, résolution de l'équation différentielle associée, étude des trajectoires des solutions approchées. Comme dans le chapitre précédent, cette partie clarifie des définitions et propriétés d'objets souvent utilisés.

L'approximation numérique du modèle est présentée, et s'appuie une nouvelle fois sur une méthode à pas fractionnaires [69]. Dans un premier temps, le traitement de la partie convective est effectué à l'aide de schémas volumes finis. On implémente des schémas de Rusanov, VFRoe-ncv [11] et un schéma de relaxation [15]. Ces deux derniers sont comparés sur des cas tests aux caractéristiques correspondant à accident de perte de réfrigérant [35].

Le travail est effectué pour deux types de mélanges : un premier contenant trois gaz raides, un second où la phase liquide suit une loi dite NASG-CK. Nous explicitons, dans ces deux configurations, les calculs de changement de variable pression/énergie qui concentrent une grande partie des difficultés numériques. Les équations à résoudre sont détaillées ainsi que les algorithmes associés.

Dans un second temps, la résolution des termes sources dans le cas d'un mélange de trois gaz raides est présentée. Les termes sources de type BGK nécessitent principalement le calcul de l'équilibre, dont on explicite la résolution dans cette situation. L'équation différentielle sur les termes sources en gradient d'entropie est résolue numériquement avec une méthode d'Euler implicite, couplée à une méthode de Broyden [10] qui résout la partie non linéaire.

La dernière partie présente les résultats numériques, en commençant par la comparaison des schémas convectifs. Le schéma de relaxation s'avère être plus rapide, robuste et précis, ce que l'on illustre par des courbes de convergence et une comparaison des coûts de calcul. Cette conclusion repose en partie sur les précédents changements de variables, coûteux et difficiles à réaliser. En effet, VFRoe-ncv en effectue de nombreux, contrairement au schéma de relaxation. Dans un second temps, le couplage avec les termes sources est effectué. Il permet d'illustrer certaines des propriétés établies sur ces derniers. En traçant les solutions pour différentes échelles de temps, on retrouve les propriétés de monotonie des termes sources. Dans l'ensemble, les termes sources rapprochent le système de l'équilibre comme attendu, mais le comportement global est très sensible. Cela mène parfois à des états à la limite du domaine de définition du modèle.

Dans ce travail, notre démarche a consisté à dresser une comparaison de schémas et termes sources, en précisant notamment certains points obscurs. L'étude numérique de la partie convective confirme des résultats connus dans des cas similaires [51]. Nous fournissons des informations supplémentaires sur les temps de calcul et les résolutions implicites apparaissant dans les changements de variables. Ce dernier point est notamment détaillé grâce à la présentation d'algorithmes. Ces opérations sont complexes et nécessitent une attention particulière dans le but d'avoir une résolution robuste. Un algorithme de calcul de l'équilibre pour un mélange de gaz raides est proposé. Enfin, les simulations numériques illustrent ces propriétés et permettent d'observer le couplage entre les parties convectives et les termes sources.

Les simulations numériques de ce chapitre ont été réalisées à l'aide d'un code Fortran

entièrement développé.

Communications :

- Ce travail a donné lieu à un papier accepté dans la revue *Computers & Mathematics with Applications* sous la référence :
Bussac Jean et Mathis Hélène, "Simulation of an homogeneous relaxation model for a three-phase mixture with miscible phases"
- Communications orales :
 - Congrès SMAI (La Grande-Motte, mai 2021)
 - Séminaire AFRImaths (mars 2022)
 - Séminaire d'équipe MACS (Nantes, avril 2022)

Chapitre 4 : simulation d'un modèle multivitesse barotrope diphasique hybride

Comme dans le chapitre précédent, on s'intéresse ici à la simulation d'un mélange eau liquide-vapeur-gaz. Il s'agit cette fois d'un modèle multivitesse qui est non conservatif, dont l'approximation numérique est un sujet plus difficile à aborder. Il se met sous la forme

$$\partial_t \mathcal{W} + \partial_x f(\mathcal{W}) + c(\mathcal{W}) \partial_x \mathcal{W} = 0. \quad (21)$$

Le fluide est supposé barotrope, c'est-à-dire que la pression phasique ne dépend que de la densité de la phase associée. Chaque champ est décrit par son propre système d'Euler barotrope. Ces systèmes sont couplés par des termes non conservatifs, dépendant des pressions p_k et de la vitesse de la phase liquide u_l , ainsi qu'à l'aide d'une équation de transport sur la fraction statistique du liquide α . Le système complet est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \alpha + u_l \partial_x \alpha = 0, \\ \partial_t(\alpha \rho_l) + \partial_x(\alpha \rho_l u_l) = 0, \\ \partial_t(\alpha \rho_l u_l) + \partial_x(\alpha \rho_l u_l^2 + \alpha p_l) - (p_v + p_g) \partial_x \alpha = 0, \\ \partial_t(\bar{\alpha} \rho_v) + \partial_x(\bar{\alpha} \rho_v u_v) = 0, \\ \partial_t(\bar{\alpha} \rho_v u_v) + \partial_x(\bar{\alpha} \rho_v u_v^2 + \bar{\alpha} p_v) + p_v \partial_x \alpha = 0, \\ \partial_t(\bar{\alpha} \rho_g) + \partial_x(\bar{\alpha} \rho_g u_g) = 0, \\ \partial_t(\bar{\alpha} \rho_g u_g) + \partial_x(\bar{\alpha} \rho_g u_g^2 + \bar{\alpha} p_g) + p_g \partial_x \alpha = 0, \end{array} \right. \quad (22)$$

où chaque champ k est décrit à l'aide de sa densité ρ_k , sa vitesse u_k et sa pression p_k . La fraction $\bar{\alpha} = 1 - \alpha$ est celle des deux champs v et g , dont les volumes sont égaux d'après l'hypothèse de miscibilité. Les lois des pressions barotropes $p_k = p_k(\rho_k)$ vérifient $p'_k(\rho_k) > 0$.

Ce modèle a été étudié, y compris dans sa version avec énergies, dans [45]. C'est un modèle faiblement hyperbolique de spectre $\{u_l, u_l \pm c_l, u_v \pm c_v, u_g \pm c_g\}$. En effet, l'égalité entre certaines de ces valeurs propres mène à une perte de l'hyperbolicité. Néanmoins, les écoulements apparaissant dans les contextes industriels ne sont pas sujets à ceci. Enfin, on peut définir une entropie mathématique du système qui permettra de caractériser les solutions faibles admissibles physiquement.

Dans ce travail, on adapte un schéma de relaxation du type Suliciu [8], fruit d'une construction pas à pas lors de ces dix dernières années [22, 19, 18, 65]. Il est spécialement dédié aux modèles de type Baer-Nunziato pour des mélanges immiscibles. C'est un schéma volumes finis non conservatif :

$$\mathbb{W}_j^{n+1} = \mathbb{W}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbb{F}^-(\mathbb{W}_j^n, \mathbb{W}_{j+1}^n) - \mathbb{F}^+(\mathbb{W}_{j-1}^n, \mathbb{W}_j^n)), \quad (23)$$

où \mathbb{W}_j^n est l'approximation de la solution au temps t^n et sur la maille j , et \mathbb{F}^\pm est le flux numérique non conservatif. Il vérifie des propriétés importantes. Il construit notamment des solutions entropiques, c'est-à-dire qui vérifient l'inégalité d'entropie au sens discret. De plus, il préserve la positivité des fractions statistiques et des densités.

Une adaptation de ce schéma au cas hybride est nécessaire et nous présentons cette stratégie. On pourra ainsi vérifier certains résultats observés en immiscible dans des travaux plus anciens. Il est comparé au schéma de Rusanov adapté au cas non conservatif [32], seule référence à notre connaissance pour ce type de modèle.

La convergence en maillage est observée ainsi que l'erreur en fonction du temps de calcul. Ce dernier point démontre une efficacité très convaincante en comparaison au schéma de Rusanov. En effet, à une erreur donnée, le schéma de Rusanov nécessite plusieurs centaines de fois plus de temps que le schéma de relaxation. Enfin, on s'intéresse à des régimes d'absence de phases en étudiant un problème de Riemann avec absence de liquide à gauche. Le schéma de relaxation fournit des solutions bien plus stables que celui de Rusanov.

Ce travail confirme dans un cas hybride les résultats obtenus en diphasique et triphasique [19, 65]. À notre connaissance, c'est la première fois qu'un modèle multivitesse

diphasique barotrope avec conditions de miscibilité est approché numériquement. Ces résultats sont encourageants compte tenu de la complexité de ces modèles, notamment dans la simulation numérique.

L'ensemble des simulations numériques de ce chapitre a été réalisé à l'aide d'une adaptation d'un code C++ de Khaled Saleh (Université de Lyon).

Communications :

- Ce travail a donné lieu à un papier accepté dans les proceedings de Finite Volumes for Complex Applications 10 (2023) sous la référence :

Bussac Jean et Saleh Khaled, "Numerical simulation of a barotropic two-phase flow model with miscible phases"

Chapitre 5 : généralisation d'un modèle multivitesse avec miscibilité

Ce dernier chapitre est consacré à l'extension de résultats d'existence et d'unicité de lois de fermeture pour des modèles hybrides de type Baer-Nunziato. Ces modèles totalement hors-équilibre, présentent des difficultés conséquentes compte tenu de leur description par composant. Par exemple, on rappelle qu'il est nécessaire de fournir des lois de fermeture pour les termes interfaciaux [16]. Elles doivent être physiquement pertinentes et permettre la gestion des termes non conservatifs en pratique. De plus, ce caractère non conservatif nécessite une analyse approfondie pour avoir un résultat d'existence de solutions [57].

La généralisation consiste à démontrer pour un mélange N -phasique hybride avec énergies un ensemble de propriétés connues dans les cas N -phasique immiscible, ou encore dans les cas diphasique et triphasique hybrides.

Dans un premier temps, on montre que pour une vitesse interfaciale définie comme la combinaison convexe des vitesses phasiques (voir [16]), les termes de pressions interfaciales sont bien définis et ce de façon unique. Pour y parvenir, on détermine un système linéaire dont elles sont les inconnues. La preuve met en commun des arguments utilisés dans le cas N -phasique immiscible [61] et des arguments des cas hybrides avec un nombre de phases donné [45, 43]. Elle consiste à écrire un ensemble de contraintes issues du second principe de la thermodynamique et les manipuler pour aboutir à un système linéaire. On démontre alors que ce système admet un unique jeu de pressions interfaciales à l'aide d'un

calcul de déterminant. Ce résultat est fondamental pour poursuivre l'étude de ce modèle et envisager des résolutions numériques.

Dans un second temps, l'analyse du modèle est effectuée. On démontre d'une part qu'il est hyperbolique sous conditions classiques de non-résonance [27]. D'autre part, on démontre son caractère symétrisable, résultat particulièrement important compte tenu du caractère non conservatif du système. Cette propriété permet, d'après le théorème de Kato [57], d'avoir l'existence d'une solution régulière locale en temps.

Enfin, on donne quelques classes de termes sources admissibles sous contrainte de garantir le second principe de la thermodynamique. Elles définissent un cadre à préciser dès que l'on se ramène à un cas pratique.

L'objectif de ce travail était d'assurer ces propriétés cruciales pour un mélange contenant un nombre quelconque de phases, avec miscibilité. Il permet donc de se tourner plus efficacement vers des situations pratiques où les nombres de phases et champs sont donnés.

Communications :

- ▶ Ce travail a donné lieu à un papier accepté dans la revue *Communications in Mathematical Science* sous la référence :
Bussac Jean, "A non-equilibrium multi-component model with miscible conditions"
- ▶ Communications orales :
 - ▶ Congrès CANUM (Évian, juin 2022)
 - ▶ Fourth workshop on Compressible Multiphase Flows (juin 2022)
 - ▶ Conférence de clôture de l'ANR MoHyCon (mars 2022, poster, synthèse avec le chapitre 3)

Publications

Les travaux présentés dans ce manuscrit ont fait l'objet des éléments de valorisation suivants :

- ▶ Les travaux du chapitre 2 ont été acceptés dans les proceedings *ESAIM : Proceedings and Surveys* sous la référence :
Bussac Jean, "Study of relaxation processes in a two-phase flow model" - HAL

- Les travaux du chapitre 3 ont été acceptés dans la revue *Computers & Mathematics with Applications* sous la référence [13]
Bussac Jean et Mathis Hélène, "Simulation of an homogeneous relaxation model for a three-phase mixture with miscible phases" - HAL
- Les travaux du chapitre 4 ont été acceptés dans les proceedings Springer (SPMS) du congrès Finite Volumes for Complex Applications 10 (30 octobre au 3 novembre 2023) sous la référence :
Bussac Jean et Saleh Khaled, "Numerical simulation of a barotropic two-phase flow model with miscible phases" - HAL
Un article au format plus long sera soumis prochainement.
- Les travaux du chapitre 5 ont été acceptés dans la revue *Communications in Mathematical Sciences* sous la référence :
Bussac Jean, "A non-equilibrium multi-component model with miscible conditions" - HAL

CONTEXTE THERMODYNAMIQUE

L'étude d'écoulements multiphasiques nécessite de coupler mécanique des fluides et thermodynamique. Dans ce contexte, différents états de la matière et composants chimiques interagissent les uns avec les autres. Ainsi, des échanges de matière et d'énergies (thermique ou mécanique) surviennent et contribuent à l'évolution globale (y compris dynamique) du système. La thermodynamique joue donc un rôle central dans ce travail, ce chapitre en introduit les notions nécessaires.

1.1 Quelques fondamentaux de thermodynamique

Notions de bases de thermodynamique (une brève approche physique)

Cette première partie donne une approche physique des descriptions de fluides multiphasiques qui nous seront utiles. On définit le vocabulaire de base et les hypothèses permettant de décrire de tels mélanges.

Vocabulaire

La diversité des mélanges que nous allons étudier demande un vocabulaire précis. Le terme "phase" correspondra à un état de la matière, "composant" à une substance chimique, et "champ" à un composant dans une phase donnée. Deux composants sont dits miscibles s'ils sont sous le même état physique et constituent une même phase sans distinction possible d'une interface. Ce choix de dénominations sous-entend que deux phases sont nécessairement immiscibles. Néanmoins, on emploiera occasionnellement "phases miscibles" dans certains contextes particuliers, tels qu'un mélange de gaz. On utilisera dans tout ce manuscrit le terme "inerte" pour qualifier un composant qui ne peut échanger de matière avec les autres phases. L'adjectif "hybride" sera utilisé en complément de " N -phasique" pour indiquer qu'une des phases contient plusieurs composants miscibles. Par exemple, la

configuration eau liquide-eau vapeur-air ambiant est un mélange diphasique hybride ou diphasique à trois champs. L'air ambiant joue le rôle de gaz incondensable, contrairement à la vapeur d'eau qui peut échanger de la masse avec l'eau sous forme liquide. On parlera également de gaz inerte.

Ce mélange sera souvent cité pour illustrer des situations théoriques dans ce manuscrit. En effet, c'est la configuration multiphasique avec miscibilité la plus commune.

Description d'un mélange et hypothèses

Les interfaces entre les différentes phases sont un sujet de modélisation à part entière, et déterminer leur évolutions est une tâche complexe. Selon les échelles et les types d'écoulements, différentes approches existent. Dans notre cas, les interfaces seront dites moyennées : la composition du fluide en un point donné sera décrite par une fraction, modélisation précise de l'interface.

D'autre part, nous faisons l'hypothèse de non-apparition de vide, phénomène pouvant apparaître lors de mélanges de composants particuliers. Ainsi, le volume du mélange s'écrira comme la somme des volumes de chaque phase. La miscibilité de deux composants se traduira par une égalité de leurs volumes. De plus, aucune réaction chimique ne sera envisagée.

Enfin, on envisagera uniquement des situations où la miscibilité n'apparaît que dans une phase. Celle-ci correspond évidemment à la phase gazeuse dans les applications pratiques. Bien que la miscibilité soit un phénomène répandu pour des composants liquides, les applications industrielles qui nous concernent ne nécessitent pas d'envisager cette situation. Remarquons tout de même qu'étendre nos travaux à ce cas ne représente aucune difficulté.

Postulats et principes

Le système considéré est isolé, c'est-à-dire qu'il n'échange ni matière, ni chaleur, ni travail avec l'extérieur. Les conséquences de cette hypothèse sont les conservations de la masse, du volume et de l'énergie. Cette dernière est aussi due au premier principe de la thermodynamique, qui stipule qu'aucune énergie ne se crée ou disparaît. Il existe une fonction d'état appelée entropie, qui décrit le désordre du système et caractérise l'irréversibilité des transformations spontanées. Dans cette thèse, on s'attachera à étudier les phénomènes d'évolution thermodynamique, conditionnés par le second principe.

Second principe de la thermodynamique [14] : *Toute évolution d'un système thermodynamique se fait avec une augmentation de l'entropie.*

Ainsi, la modélisation de l'évolution thermodynamique d'un système est étroitement liée à son entropie. Une autre notion centrale est l'équilibre thermodynamique, que l'on peut définir d'après [14] de la façon suivante.

Équilibre thermodynamique : *Tout système évolue spontanément vers un état déterminé par des facteurs intrinsèques, et non par des influences externes antérieures. Cet état est appelé équilibre thermodynamique, et il correspond à un maximum de l'entropie d'après le second principe.*

Autrement dit, un réarrangement s'opère entre les différents champs et phases constituant notre mélange.

Finalement, le travail de modélisation de ces phénomènes consistera à décrire cette évolution. À un état du mélange donné, il faudra définir le chemin qu'il parcourt pour aboutir à l'état d'équilibre.

Les notions et hypothèses principales étant à présent définies, nous pouvons nous tourner vers une approche mathématique.

1.2 Descriptions thermodynamiques

Cette partie présente l'approche mathématique générale des descriptions thermodynamiques que nous utiliserons dans ce manuscrit.

1.2.1 Description extensive et entropie d'un fluide monophasique

Dans un premier temps, nous présentons la description extensive d'un fluide quelconque. Elle peut se faire par la donnée d'une fonction d'entropie, dépendant de la masse $M > 0$, du volume $V > 0$ et de l'énergie interne $E > 0$ de ce système. En définissant le vecteur d'état $W = (M, V, E)$, on a

$$S : (\mathbb{R}^+)^3 \rightarrow \mathbb{R}$$
$$W \mapsto S(W) = S(M, V, E).$$

Ces variables sont dites extensives, c'est-à-dire qu'elles sont proportionnelles à la taille du système.

Hypothèses 1. *Hypothèses extensives sur l'entropie*

- (i) *L'ensemble des états admissibles : $C \subset (\mathbb{R}^+)^3$ est convexe non vide,*
- (ii) *$W \mapsto S(W)$ est concave sur C ,*
- (iii) *S est positivement homogène de degré 1, ou extensive :*

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}_*^+, \forall W \in C, S(\lambda W) = \lambda S(W),$$

- (iv) *S est de classe \mathcal{C}^2 sur C et de plus,*

$$\forall W \in C, \frac{\partial S}{\partial E} > 0.$$

L'hypothèse de concavité (ii) est fondamentale et plusieurs propriétés et définitions en dépendent dans la suite de ce travail. L'hypothèse (iii) est la traduction mathématique de l'extensivité, et l'hypothèse (iv) permet entre autre une bonne définition des potentiels intensifs suivants.

On définit la température T , la pression p et le potentiel chimique μ par

$$\frac{1}{T} = \left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{M,V}, \quad p = T \left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_{M,E}, \quad \mu = -T \left. \frac{\partial S}{\partial M} \right|_{V,E}. \quad (1.1)$$

On remarque que l'hypothèse (iv) correspond alors à supposer la température strictement positive. La relation fondamentale (extensive) de la thermodynamique est alors

$$TdS = dE + pdV - \mu dM. \quad (1.2)$$

Remarque 1. *(Relation d'Euler) L'entropie extensive S vérifie la relation d'Euler suivante, voir [25], qui permet d'exprimer le potentiel chimique μ en fonction des autres potentiels intensifs*

$$\begin{aligned} \nabla_W S \cdot W^T &= S, \\ \iff M\mu &= -TS + pV + E. \end{aligned} \quad (1.3)$$

En pratique, nous devons définir de telles fonctions d'entropie dans le but d'obtenir une description réaliste du fluide. Il est pertinent de décrire chaque composant par sa

propre entropie, et d'en déduire l'entropie du mélange. Cette approche est possible grâce à la propriété d'additivité de l'entropie.

Hypothèse 1. *Considérons un système thermodynamique d'entropie S composé d'un ensemble de champs \mathcal{K} . L'entropie est additive selon les composants [14]*

$$S = \sum_{k \in \mathcal{K}} S_k. \quad (1.4)$$

Autrement dit, une description des champs contient implicitement la description du mélange. Par exemple, dans un mélange eau liquide-vapeur-gaz, la donnée des entropies phasiques de ces trois champs suffit à connaître l'entropie du mélange, et ainsi son comportement thermodynamique.

1.2.2 Description d'un fluide monophasique

Dans cette partie, on considère un fluide monophasique constitué d'un unique composant. Son comportement thermodynamique est entièrement décrit par une fonction d'entropie. On présente deux descriptions dites intensives.

Description spécifique

La description spécifique consiste à travailler pour une unité de masse. C'est la plus utilisée dans les modèles. Les termes d'entropie massique ou spécifique sont équivalents. C'est donc l'entropie extensive rapportée à une unité de masse. Ainsi, pour un fluide de masse M , de volume V et d'énergie interne E , on a

$$s : (M, V, E) \mapsto \frac{1}{M} S(M, V, E) = S\left(1, \frac{V}{M}, \frac{E}{M}\right) = S(1, \tau, e), \quad (1.5)$$

où $\tau = V/M$ est le volume spécifique du fluide et $e = E/M$ son énergie interne spécifique. En pratique, il convient de définir l'entropie spécifique comme fonction de deux variables

$$s := s(\tau, e), \quad (1.6)$$

Des exemples de telles lois d'état seront présentés en partie 1.4.

On dit que c'est une équation d'état complète [30], c'est-à-dire que sa donnée suffit pour connaître toutes les caractéristiques thermodynamiques du fluide. Dans tout ce manuscrit, les fonctions d'entropie spécifique vérifient les hypothèses classiques suivantes, voir [55, 30].

Hypothèses 2. Soit $(\tau, e) \mapsto s(\tau, e)$ une fonction d'entropie spécifique définie sur $\Omega \subset (\mathbb{R}_*^+)^2$. Les propriétés suivantes sont vérifiées :

- ▶ Ω est un convexe fermé non vide,
- ▶ $s \in \mathcal{C}^2(\Omega)$ telle que $T(\tau, e) > 0$,
- ▶ La matrice hessienne de s est définie négative. En particulier, s est strictement concave sur Ω .

Remarquons qu'elles proviennent des hypothèses faites dans le cas extensif. La pression et la température s'expriment alors par les relations

$$\frac{1}{T(\tau, e)} = \left. \frac{\partial s}{\partial e} \right|_{\tau}, \quad p(\tau, e) = T \left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_e, \quad (1.7)$$

et sont liées à l'entropie spécifique par la relation fondamentale

$$T ds = de + pd\tau. \quad (1.8)$$

Enfin, le potentiel chimique se définit par la relation suivante

$$\mu = -Ts + p\tau + e. \quad (1.9)$$

Description volumique

La description volumique consiste à travailler pour une unité de volume. Elle est plus rarement utilisée, mais est particulièrement pertinente pour étudier un mélange miscible. Similairement à l'entropie spécifique, elle est définie par

$$\sigma : (M, V, E) \mapsto \frac{1}{V} S(M, V, E) = S\left(\frac{M}{V}, 1, \frac{E}{V}\right) = S(\rho, 1, \epsilon), \quad (1.10)$$

où $\rho = M/V$ est la densité ou masse volumique du fluide et $\epsilon = E/V$ son énergie interne volumique. On définira ici aussi l'entropie volumique comme fonction de deux variables

$$\sigma := \sigma(\rho, \epsilon). \quad (1.11)$$

Remarquons que l'on a $\sigma(\rho, \epsilon) = \rho s(\tau, e)$. C'est également une équation d'état complète, et l'on fait les hypothèses suivantes, voir [30].

Hypothèses 3. Soit $(\rho, \epsilon) \mapsto \sigma(\rho, \epsilon)$ une fonction d'entropie spécifique définie sur $\Omega \subset (\mathbb{R}_*^+)^2$. Les propriétés suivantes sont vérifiées :

- Ω est un convexe fermé non vide,
- $\sigma \in \mathcal{C}^2(\Omega)$ telle que $T(\rho, \epsilon) > 0$,
- La matrice hessienne de σ définie négative. En particulier, σ est strictement concave sur Ω .

La température et le potentiel chimique se définissent alors par

$$\frac{1}{T(\rho, \epsilon)} = \frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon} \Big|_{\rho}, \quad \mu(\rho, \epsilon) = -T \frac{\partial \sigma}{\partial \rho} \Big|_{\epsilon}, \quad (1.12)$$

et la pression par

$$p = T\sigma + \rho\mu - \epsilon. \quad (1.13)$$

Ces descriptions monophasiques étant données, nous pouvons à présent nous tourner vers le cas multiphasique.

1.2.3 Description d'un fluide multiphasique

Description intensive

Dans cette partie, on considère un fluide à plusieurs phases pouvant elles-mêmes contenir plusieurs champs. Autrement dit, on s'intéresse également aux situations de miscibilité. Soit N le nombre de phases de ce fluide et M le nombre de composants, dont l'ensemble sera noté \mathcal{K} . On suppose que toute la miscibilité est contenue dans la phase N , qui est donc constituée de $M - N + 1$ champs. Notre exemple canonique d'un mélange diphasique hybride eau liquide-eau vapeur-gaz correspond à $\{N = 2, M = 3\}$.

Donnons-nous un fluide de vecteur d'état du mélange $w = (\tau, e)$. Afin de décrire la répartition des différentes quantités physiques selon chaque composant, on introduit les fractions de masse, de volume et d'énergie. Pour $k \in \mathcal{K}$, on a

$$y_k = \frac{M_k}{M}, \quad \alpha_k = \frac{V_k}{V}, \quad z_k = \frac{E_k}{E}. \quad (1.14)$$

Dans le cas général, on utilisera les notations vectorielles suivantes sur les fractions

$$Y_k = (\alpha_k, y_k, z_k), \quad Y = ((\alpha_k)_{k \leq N-1}, (y_k)_{k \in \mathcal{K}}, (z_k)_{k \in \mathcal{K}}). \quad (1.15)$$

Dans les cas où des composants sont inertes, ces notations seront légèrement modifiées afin de distinguer les natures des variables (voir chapitre 3, partie 3.1.1). On rappelle que

la miscibilité de deux champs se traduit par une égalité de leurs volumes, voir partie 1.1. Les conservations de la masse et de l'énergie se traduisent par

$$\sum_{k \in \mathcal{K}} y_k = 1, \quad \sum_{k \in \mathcal{K}} z_k = 1, \quad (1.16)$$

et la conservation du volume par

$$\sum_{k \leq N} \alpha_k = 1, \quad \alpha_k = \alpha_N \text{ pour } k \geq N. \quad (1.17)$$

Les variables intensives définies dans la partie précédente pour une phase se définissent de la même manière pour un champ $k \in \mathcal{K}$ donné. Nous ne donnons que le pendant spécifique ici, le cas volumique étant similaire.

L'entropie phasique spécifique s_k d'un champ k est fonction du volume phasique spécifique $\tau_k = V_k/M_k$ et de l'énergie interne phasique spécifique $e_k = E_k/M_k$. En utilisant les relations suivantes

$$\tau_k = \frac{\alpha_k}{y_k} \tau, \quad e_k = \frac{z_k}{y_k} e, \quad (1.18)$$

on peut exprimer l'entropie phasique spécifique à l'aide des variables de mélange et des fractions

$$s_k(\tau_k, e_k) = s_k\left(\frac{\alpha_k}{y_k} \tau, \frac{z_k}{y_k} e\right) = s_k(\tau, e, Y_k). \quad (1.19)$$

Cette dernière égalité est un nouvel abus sur les variables, mais vise à mettre en avant les différents choix que l'on peut faire pour définir les fonctions. En particulier, ce sera important (et commode) pour définir l'entropie de mélange dans la partie suivante.

Entropie du mélange

Grâce à l'additivité de l'entropie extensive [14], l'entropie spécifique du mélange s s'écrit comme la somme des entropies spécifiques s_k pondérées par les fractions. En notant S l'entropie extensive du mélange et S_k celles des phases, on a

$$\begin{aligned}
 s : ((M_k, V_k, E_k)_k) &\mapsto \frac{1}{\sum_k M_k} S((M_k, V_k, E_k)_k) = \frac{1}{M} \sum_k S_k(M_k, V_k, E_k) \\
 &= \frac{1}{M} \sum_k M_k S_k\left(1, \frac{V_k}{M_k}, \frac{E_k}{M_k}\right) \\
 &= \sum_k \frac{M_k}{M} s_k\left(1, \frac{V_k}{M_k}, \frac{E_k}{M_k}\right) \\
 &= \sum_k y_k s_k(1, \tau_k, e_k).
 \end{aligned}$$

Ainsi, on préférera définir s comme fonction de (τ, e, Y) . Voici sa définition pour la suite du manuscrit :

Définition 1. (Entropie spécifique d'un mélange) *Considérons un mélange multiphasique de volume spécifique τ , d'énergie interne spécifique e et de vecteur de fractions Y . L'entropie spécifique du mélange est la fonction*

$$s(\tau, e, Y) = \sum_{k \in \mathcal{K}} y_k s_k(\tau_k, e_k) = \sum_{k \in \mathcal{K}} y_k s_k\left(\frac{\alpha_k}{y_k} \tau, \frac{z_k}{y_k} e\right). \quad (1.20)$$

Cette fonction est centrale dans notre travail, et nous reviendrons régulièrement sur ses propriétés dans des cas plus précis. Tout d'abord, elle induit les calculs de potentiels intensifs en pratique, dont la complexité et le réalisme dépendent. D'un point de vue théorique, elle doit permettre une définition rigoureuse de l'équilibre thermodynamique, ainsi qu'un comportement du modèle admissible pour le second principe. Enfin, une classe de termes source est définie explicitement à partir de l'entropie du mélange, leur pertinence dépend donc de cette dernière.

Ses propriétés seront étudiées dans différents cas pratiques au cours de ce manuscrit.

Remarque 2. (Entropie de mélange) *Bien que l'hypothèse d'additivité de l'entropie soit souvent considérée dans des travaux impliquant des phases miscibles [60, 52, 63], il faut noter que les mélanges de gaz sont sujets à une création d'entropie dite "de mélange" [34]. Ces effets non-idéaux peuvent être pris en compte par des modifications des lois d'états phasiques, voir par exemple [24].*

Concavité de l'entropie du mélange

Nous avons précédemment donné un cadre de travail comprenant des hypothèses de concavité sur les entropies phasiques. Tandis que ces dernières sont des fonctions de deux variables, les dépendances de l'entropie du mélange peuvent se distinguer ainsi :

- ▶ Les variables affectées par la thermodynamique : elles sont susceptibles d'évoluer spontanément vers l'équilibre. Dans le cas général, la majorité des fractions en font partie. Par exemple, dans un mélange diphasique hybride eau liquide-vapeur-air ambiant, les échanges de masse entre les deux phases d'eau correspondent à des variations des fractions de masse y_l et y_v .
- ▶ Les variables indépendantes de la thermodynamique : elles ne contribuent pas à l'évolution du mélange. Les variables de mélange (c'est-à-dire, non relatives à une phase) en font partie, telles que la densité et l'énergie interne du mélange. Dans le cas diphasique hybride précédent, la fraction de masse de gaz n'évolue pas non plus, puisque ce dernier est supposé inerte.

On s'intéresse aux propriétés de concavité de l'entropie du mélange s pour deux ensembles de variables. D'une part, la concavité en (τ, e) , et d'autre part, la concavité en Y .

Proposition 1. (Concavité de l'entropie) *Soit s une entropie spécifique suivant la définition 1, et on suppose que les entropies phasiques spécifiques s_k sont strictement concaves. On a les résultats de concavité suivants :*

- ▶ *Pour tout vecteur de fractions Y , la fonction $(\tau, e) \mapsto s(\tau, e, Y)$ est concave.*
- ▶ *Pour tout (τ, e) , la fonction $Y \mapsto s(\tau, e, Y)$ est concave.*

Nous verrons dans la suite que ces deux concavités jouent des rôles distincts. Celle en (τ, e) permet d'assurer l'hyperbolicité de certains modèles homogènes [47, 60], et celle en Y permet d'établir des propriétés concernant l'évolution thermodynamique. En particulier, elle est nécessaire (et pas suffisante) pour définir l'équilibre, qui est l'objet de la partie suivante.

1.3 Équilibre thermodynamique : une approche mathématique

La notion d'équilibre thermodynamique a été introduite en partie 1.1. On s'attache à présent à sa définition mathématique.

Lorsque l'équilibre thermodynamique est atteint, l'entropie du mélange atteint son maximum. Mathématiquement, il correspond à la détermination des fractions dites d'équilibre. On les définit de la façon suivante.

Définition 2. (Fractions d'équilibre) Fixons (τ, e) . En supposant que $Y \mapsto s(\tau, e, Y)$ est strictement concave, on définit les fractions d'équilibre Y_{eq} par

$$Y_{eq}(\tau, e) = \arg \max_{Y \in C_w} s(\tau, e, Y), \quad (1.21)$$

où C_w est le domaine de définition de $Y \mapsto s(\tau, e, Y)$ pour un état donné $w = (\tau, e)$.

Sans la stricte concavité de l'entropie en Y , on pourrait avoir plusieurs fractions pour lesquelles l'entropie atteint son maximum (le graphe de la fonction aurait un plateau, par exemple). Sans même aborder la question (complexe) de l'unicité de l'équilibre sous un angle physique, cela ne permettrait pas de définir Y_{eq} mathématiquement.

1.4 Quelques lois d'état

Dans les applications pratiques, on utilisera différentes lois d'état. Nous les définissons pour un champ k donné, et discutons de leurs propriétés. Leurs domaines de définition seront notés Ω_k .

Loi de gaz raide (SG)

La loi de gaz raide, *stiffened gas* en anglais (SG), est une extension de la loi de gaz parfait [58]. Elle est définie, pour un état $(\tau_k, e_k) \in \Omega_k$, par

$$s_k(\tau_k, e_k) = C_{v,k} \ln \left((e_k - Q_k - \Pi_k \tau_k) \tau_k^{\gamma_k - 1} \right) + s_k^0, \quad (1.22)$$

où $C_{v,k} > 0$ est la capacité calorifique à volume constant, $-\Pi_k$ est la pression minimale, Q_k est l'enthalpie de référence, $\gamma_k > 1$ est le coefficient adiabatique et $s_k^0 > 0$ est une entropie spécifique de référence. Le cas $\Pi_k = Q_k = 0$ correspond à la loi de gaz parfait.

Les températures et pressions phasiques, d'après (1.7), sont

$$p_k(\tau_k, e_k) = (\gamma_k - 1) \frac{e_k - Q_k}{\tau_k} - \gamma_k \Pi_k, \quad T_k = \frac{e_k - Q_k - \Pi_k \tau_k}{C_{v,k}}. \quad (1.23)$$

Les paramètres de cette loi, donnés en table 1.1, ont été calculés dans [63, chap. 2] à l'aide de données expérimentales. Plus précisément, ils ont été ajustés autour d'un point de référence ($p_{ref} = 80\text{bar}$, $T_{ref} = 425\text{K}$). Nous les utiliserons à plusieurs reprises.

| Paramètre | Eau liquide | Vapeur d'eau |
|--------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|
| γ_k (sans dimension) | 1.39864082368510 | 1.15442237458290 |
| $C_{k,l}$ ($JK^{-1}kg^{-1}$) | $3.19641035947920 \times 10^3$ | $2.91668522329726 \times 10^3$ |
| Q_k (Jkg^{-1}) | $-1.24606074764184 \times 10^6$ | $1.25942536895827 \times 10^6$ |
| Π_k Pa | $4.79690712132593 \times 10^8$ | $-3.24993579473092 \times 10^2$ |
| s_k^0 ($JK^{-1}kg^{-1}$) | -34597.52986978335 | -33792.18353359583 |

TABLE 1.1 – Paramètres SG pour l'eau.

| Paramètre | Phase gazeuse |
|--------------------------------|---------------|
| γ_k (sans dimension) | 1.4 |
| $C_{k,l}$ ($JK^{-1}kg^{-1}$) | 719 |
| Q_k (Jkg^{-1}) | 0 |
| Π_k Pa | 0 |

TABLE 1.2 – Paramètres SG correspondant à un gaz parfait pour l'air.

Loi Noble-Able Chemkin Stiffened Gas (NASG-CK)

La loi Noble-Able Stiffened Gas Chemkin (NASG-CK) est une extension de la loi de gaz raide, où la capacité calorifique dépend de la température. D'après [63, chap. 2], la loi NASG-CK fournit une description précise sur un domaine plus large qu'une loi de gaz raide. Cette précision a un coût induit par des résolutions implicites, voir partie 3.2.2.

Le potentiel chimique du liquide se définit de la façon suivante :

$$\mu_l(p_l, T_l) = \mu_l^0(T_l) + b_l p_l + C_l(T_l) \ln(p_l + \Pi_l), \quad (1.24)$$

où

$$\begin{aligned}\mu_l^0(T_l) &= RT_l \left(A_l(1 - \ln(T_l)) - \frac{B_l}{2}T_l - \frac{C_l}{6}T_l^2 - \frac{D_l}{12}T_l^3 - \frac{E_l}{20}T_l^4 + \frac{R_l}{T_l} - G_l \right), \\ C_l(T_l) &= C_{v,l}(\gamma_l - 1)T_l,\end{aligned}\quad (1.25)$$

avec $R = 0.4615228083134561$ la constante des gaz parfaits pour l'eau et b_l une modification du volume spécifique provenant de la loi NASG, voir [7]. Pour les simulations numériques, on utilisera les paramètres de la table 1.3 pour l'eau liquide.

| Paramètre | Valeur |
|--------------------------------|------------------------------------|
| γ_l (sans dimension) | 3.27113568773712 |
| $C_{v,l}$ ($JK^{-1}kg^{-1}$) | $7.24509640448929 \times 10^2$ |
| Π_k (Pa) | $1.24425779880749 \times 10^9$ |
| A_l (sans dimension) | $4.69738865636393 \times 10^1$ |
| B_l (K^{-1}) | $-4.19269571479452 \times 10^{-1}$ |
| C_l (K^{-2}) | $1.70702143968620 \times 10^{-3}$ |
| D_l (K^{-3}) | $-3.04805662517983 \times 10^{-6}$ |
| E_l (K^{-4}) | $2.02814588067819 \times 10^{-9}$ |
| F_l (K^{-5}) | $-2.519604765 \times 10^6/R$ |
| G_l (sans dimension) | $-5.573536947 \times 10^4/R$ |
| b_l (m^3kg^{-1}) | $5.66559849022606 \times 10^{-4}$ |

TABLE 1.3 – Paramètres NASG-CK pour l'eau liquide.

Les difficultés de calcul proviennent des expressions implicites de la pression p_l et de la température T_l dans le plan (τ_l, e_l) . Grâce aux relations dans le plan (τ_l, e_l) , on a :

$$p_l(\tau_l, T_l) = \frac{C_{v,l}(\gamma_l - 1)T_l}{\tau_l - b_l} - \Pi_l, \quad (1.26)$$

$$\begin{aligned}e_l(\tau_l, T_l) &= RT_l \left(A_l + \frac{B_l}{2}T_l + \frac{C_l}{3}T_l^2 + \frac{D_l}{4}T_l^3 + \frac{E_l}{5}T_l^4 + \frac{F_l}{T_l} \right) \\ &\quad - C_{v,l}(\gamma_l - 1)T_l + \Pi_l(\tau_l - b_l).\end{aligned}\quad (1.27)$$

Ainsi, pour un état (τ_l, e_l) , on calcule d'abord la température en résolvant implicitement (1.27), puis on déduit la pression grâce à (1.26).

Nous renvoyons à [63, chap.2] pour des présentations approfondies de ces deux lois et la détermination de ces paramètres.

ÉTUDE DE PROCESSUS DE RELAXATION DANS UN MODÈLE DIPHASIQUE

De nombreux modèles ont été développés pour décrire les dynamiques des écoulements diphasiques compressibles, ainsi que les déséquilibres thermodynamiques entre les champs, par exemple [3, 4, 16, 26, 56]. Plusieurs approches existent, nous nous concentrons dans ce chapitre sur la modélisation diphasiques à une vitesse. Le déséquilibre thermodynamique concerne seulement les échanges thermiques, mécaniques et les transferts de masse entre les phases. Ces modèles appartiennent à la classe des modèles homogènes, voir par exemple [4, 55, 47, 60]. Ils bénéficient de plusieurs avantages, notamment d’avoir une forme conservative et des relations de saut bien définies. Dans l’approche homogène, on peut considérer que les phases sont à l’équilibre thermodynamique, ce qui mène aux Modèles Homogènes à l’Équilibre (HEM) où la loi de pression $\bar{P}(\tau, e)$ ne dépend que des variables du mélange. Cette dernière est complexe et ainsi source de difficultés numériques, et un moyen de contourner cette difficulté est de relaxer la loi de pression en lui ajoutant une dépendance en les fractions Y en compensation. La loi obtenue est alors une fonction $P(\tau, e, Y)$ et on adjoint des lois de transports sur ces fractions avec des termes sources $\Gamma(\tau, e, Y)$ au système. Ces derniers décrivent la relaxation vers l’équilibre thermodynamique Y_{eq} , de sorte que

$$P(\tau, e, Y_{eq}) = \bar{P}(\tau, e).$$

Ces modèles appartiennent donc à la classe des Modèles Homogènes de Relaxation (HRM), dont on sait qu’ils fournissent une alternative pertinente aux modèles bifluïdes [47].

S’il y a un relatif consensus sur la partie convective des modèles HRM, la question des termes sources est toujours ouverte. En effet, les déséquilibres thermodynamiques sont

décrits en pratique par le système dynamique

$$\frac{dY}{dt}(t) = \Gamma(\tau, e, Y). \quad (2.1)$$

Ainsi, des termes sources admissibles doivent vérifier les deux contraintes majeures :

1. Second principe de la thermodynamique : l'évolution du système doit se faire avec une croissance de l'entropie thermodynamique $s(\tau, e, Y)$ du mélange

$$\Gamma(\tau, e, Y) \cdot \nabla_Y s(\tau, e, Y) \geq 0, \quad (2.2)$$

2. États asymptotiques : pour un état du fluide donné (τ, e) , les termes sources doivent capturer le bon équilibre thermodynamique

$$\lim_{t \rightarrow \infty} Y(t) = Y_{eq}, \quad (2.3)$$

où Y_{eq} est défini suivant la définition 2.

Le but de ce chapitre est de comparer deux formes possibles de termes sources. La première, récemment présentée comme de type BGK [49], correspond à une linéarisation au voisinage de l'état d'équilibre Y_{eq} . Son apparition remonte à [54, 37, 4] et est à présent utilisée dans différentes configurations multiphasiques avec des lois d'état complexes [48, 63].

Une alternative correspond à une forme en gradient d'entropie, vérifiant directement l'inégalité (2.2), voir [60].

Dans la partie 2.1, la thermodynamique du mélange diphasique est présentée, considérant que les deux phases sont immiscibles et satisfont une loi de gaz raide. L'équilibre thermodynamique est défini comme le résultat de la maximisation de l'entropie du mélange dont les propriétés standard sont rappelées.

Les parties 2.2 et 2.3 présentent les propriétés de ces deux termes sources pour un mélange de deux gaz raides. L'avantage de cette équation d'état particulière est qu'elle permet d'obtenir des résultats relativement pertinents tout en gardant un niveau de complexité acceptable. Dans les deux parties, on s'intéresse à l'éligibilité et à la consistance des termes sources, puis on liste leurs propriétés principales : états asymptotiques, trajectoires, résolutions numériques... Certaines remarques seront aussi données sur l'influence

des temps de relaxation.

Dans la conclusion 2.4, on dressera un bilan comparatif.

2.1 Thermodynamique d'un mélange diphasique

Cette partie concerne la description thermodynamique d'un mélange diphasique, et s'appuie sur les notions introduites au chapitre 1. On adopte ainsi une description intensive.

2.1.1 Entropie du mélange

Dans ce chapitre, les phases sont exclusivement décrites par des lois de gaz raides. On renvoie au chapitre précédent, partie 1.2.2 pour plus de détails sur la description phasique. Rappelons toutefois la définition de l'entropie d'un gaz raide pour la phase k

$$s_k(\tau_k, e_k) = C_k(\ln(e_k - Q_k - \Pi_k \tau_k) + (\gamma_k - 1) \ln(\tau_k)) + s_k^0. \quad (2.4)$$

Soit $w = (\tau, e)$ le vecteur d'état du mélange. Il est composé de deux phases de volumes spécifiques τ_k et d'énergies internes spécifiques e_k , tels que

$$\tau_k = \frac{\alpha_k}{y_k} \tau, \quad e_k = \frac{z_k}{y_k} e, \quad (2.5)$$

où $y_k \in]0; 1[$ est la fraction de masse de la phase k , $\alpha_k \in]0; 1[$ la fraction volumique et $z_k \in]0; 1[$ la fraction d'énergie. Les conservations de masse et d'énergie imposent

$$\begin{cases} y_1 + y_2 = 1, \\ z_1 + z_2 = 1. \end{cases} \quad (2.6)$$

De plus, les phases étant supposées immiscibles, la contrainte de volume est

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1. \quad (2.7)$$

On verra en partie ?? le cas miscible où la contrainte volumique est alors $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$.

Dans le but de simplifier les notations, on note $Y = (y, \alpha, z) = (y_1, \alpha_1, z_1)$ tel que

$$\begin{cases} y_2 = 1 - y, \\ \alpha_2 = 1 - \alpha, \\ z_2 = 1 - z. \end{cases}$$

L'entropie spécifique du mélange est donnée par

$$s(\tau, e, Y) = y s_1\left(\frac{\alpha}{y}\tau, \frac{z}{y}e\right) + (1 - y) s_2\left(\frac{1 - \alpha}{1 - y}\tau, \frac{1 - z}{1 - y}e\right). \quad (2.8)$$

Elle est définie sur un sous-ensemble convexe de $(\mathbb{R}_+)^2 \times]0; 1[^3$. Similairement à [55], dans le but de capturer les situations monophasiques $Y = (0, 0, 0)$ (vapeur pure) et $Y = (1, 1, 1)$ (liquide pur), on étend cette fonction sur

$$C := (\mathbb{R}_+)^2 \times (]0; 1[^3 \cup 0_{\mathbb{R}^3} \cup 1_{\mathbb{R}^3}),$$

avec les notations $0_{\mathbb{R}^3} = (0, 0, 0)$ et $1_{\mathbb{R}^3} = (1, 1, 1)$, par

$$s(\tau, e, Y) := \begin{cases} s_1(\tau, e), & \text{si } Y = 1_{\mathbb{R}^3}, \\ s_2(\tau, e), & \text{si } Y = 0_{\mathbb{R}^3}. \end{cases} \quad (2.9)$$

On rappelle les propriétés de concavité de l'entropie (voir partie 1.2.2) :

- Pour un Y donné, $(\tau, e) \mapsto s(\tau, e, Y)$ est concave,
- Pour un (τ, e) donné, $Y \mapsto s(\tau, e, Y)$ est concave.

Dans le cas d'un mélange de gaz raides, l'entropie s est

$$\begin{aligned} s(\tau, e, Y) = & y C_1 \left(\ln \left(\frac{z}{y} e - Q_1 - \Pi_1 \frac{\alpha}{y} \tau \right) + (\gamma_1 - 1) \ln \left(\frac{\alpha}{y} \tau \right) \right) \\ & + (1 - y) C_2 \left(\ln \left(\frac{1 - z}{1 - y} e - Q_2 - \Pi_2 \frac{1 - \alpha}{1 - y} \tau \right) + (\gamma_2 - 1) \ln \left(\frac{1 - \alpha}{1 - y} \tau \right) \right). \end{aligned}$$

Définition 3. L'ensemble des fractions admissibles pour un état intensif $w = (\tau, e) \in (\mathbb{R}_*^+)^2$ est

$$C_w = \{Y \in]0; 1[^3 \cup 0_{\mathbb{R}^3} \cup 1_{\mathbb{R}^3}, (\tau, e, Y) \in C\}. \quad (2.10)$$

Proposition 2. Pour tout $w = (\tau, e) \in (\mathbb{R}_*^+)^2$, C_w est un sous-ensemble du cube unité ouvert borné par deux plans \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_2

$$C_w = \{(y, \alpha, z) \in]0; 1[^3, z > \frac{Q_1}{e}y + \frac{\Pi_1\tau}{e}\alpha, (1-z) > \frac{Q_2}{e}(1-y) + \frac{\Pi_2\tau}{e}(1-\alpha)\},$$

où

$$\mathcal{P}_1 = \{(y, \alpha, z) \in \mathbb{R}^3, z = \frac{Q_1}{e}y + \frac{\Pi_1\tau}{e}\alpha\},$$

$$\mathcal{P}_2 = \{(y, \alpha, z) \in \mathbb{R}^3, (1-z) = \frac{Q_2}{e}(1-y) + \frac{\Pi_2\tau}{e}(1-\alpha)\}$$

De plus, $0_{\mathbb{R}^3} \in \mathcal{P}_1$ et $1_{\mathbb{R}^3} \in \mathcal{P}_2$.

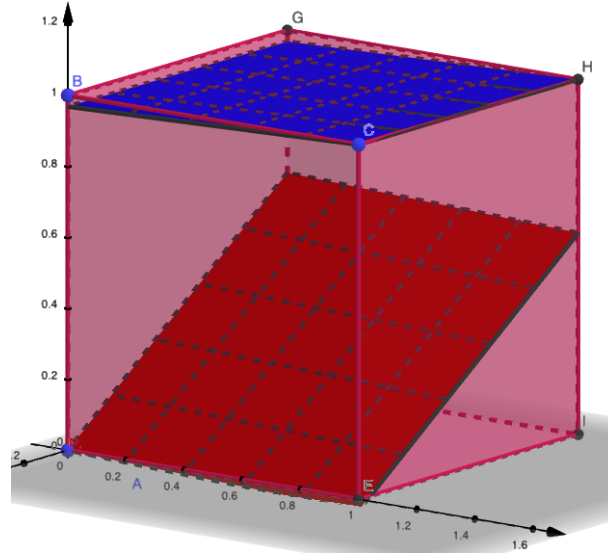


FIGURE 2.1 – Ensemble des fractions admissibles C_w pour $\tau = 0.01$, $e = 10^7$ et les paramètres de gaz raides donnés en table 1.1. L'état $0_{\mathbb{R}^3}$ appartient au plan \mathcal{P}_1 (en rouge) et l'état $1_{\mathbb{R}^3}$ au plan \mathcal{P}_2 (en bleu), voir la proposition 2.

La figure 2.1 représente l'ensemble des fractions admissibles C_w pour un état donné ($\tau = 0.01$, $e = 10^7$) et des lois de gaz raides s_k , $k = 1, 2$, avec des paramètres de la table 1.1. Les plans \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_2 sont représentés en rouge et bleu. On observe que les états purs $0_{\mathbb{R}^3}$ et $1_{\mathbb{R}^3}$ appartiennent aux plans \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_2 respectivement. Dans le cas de gaz parfaits, le plan \mathcal{P}_1 (resp. \mathcal{P}_2) coïncide avec le plan $\{z = 0\}$ (resp. $\{z = 1\}$).

2.1.2 Équilibre thermodynamique

Le second principe de la thermodynamique établit que pour toute évolution, l'entropie du mélange ne peut décroître et que l'équilibre thermodynamique correspond à un maximum de l'entropie.

Définition 4. *Pour un état donné $w = (\tau, e) \in (\mathbb{R}_+^*)^2$, la fraction d'équilibre $Y_{eq} \in C_w$ maximise l'entropie du mélange $Y \mapsto s(\tau, e, Y)$ sur C_w . Autrement dit*

$$Y_{eq}(w) = \arg \max_{Y \in C_w} s(\tau, e, Y). \quad (2.11)$$

L'étude de ce processus d'optimisation a été le sujet de nombreux travaux, en particulier pour des mélanges immiscibles avec lois de gaz raides [28, 47, 48, 63].

Lorsque le maximum est atteint à l'intérieur du domaine C_w , l'équilibre correspond à un état de saturation [54, 37].

Proposition 3. *Lorsque le maximum de l'entropie est atteint à l'intérieur de l'ensemble de contraintes C_w , il est caractérisé par l'égalité des pressions, températures et potentiels chimiques phasiques*

$$\begin{cases} P_1(\tau_1, e_1) = P_2(\tau_2, e_2), \\ T_1(\tau_1, e_1) = T_2(\tau_2, e_2), \\ \mu_1(\tau_1, e_1) = \mu_2(\tau_2, e_2). \end{cases} \quad (2.12)$$

Présentons les principales propriétés.

- Lorsque le maximum est atteint à l'intérieur de C_w , il n'est pas certain que Y_{eq} soit bien défini. En effet, l'entropie est seulement concave (et non strictement) sur C_w , et ainsi Y_{eq} n'est pas nécessairement uniquement défini, voir remarque 3.
- Le prolongement de l'entropie du mélange garantit que Y_{eq} peut prendre les valeurs $0_{\mathbb{R}^3}$ et $1_{\mathbb{R}^3}$, ce qui correspond aux équilibres monophasiques.
- La difficulté du calcul de Y_{eq} dépend directement de l'équation d'état. Pour un mélange de deux gaz raides, cela consiste en un problème algébrique, donné dans [47], mais pour des équations d'état plus complexes telles que les lois NASG ou NASG-CK [63], des changements de variables implicites apparaissent, et les difficultés s'accroissent lorsque l'on considère d'autres phases [50, 63].

- Dans [39], les auteurs affirment que l'équilibre est monophasique dans la plupart des cas. Ce serait intéressant de mener une étude statistique pour vérifier cela en choisissant un domaine pertinent pour (τ, e) .

Remarque 3. *Des tentatives de preuves concernant la stricte concavité de l'entropie du mélange ont été fournies, par exemple dans [50]. Celle-ci repose sur la concavité de l'entropie du mélange. L'idée est de montrer, pour un état extensif donné $W = (M, V, E)$ (de masse M , de volume V et d'énergie E), que l'entropie extensive de mélange S est une fonction strictement concave lorsque restreinte à l'ensemble $\mathcal{H}(M)$ des états dont la masse totale est égale à 1. Si cette propriété est vraie, alors l'entropie intensive de mélange est bien strictement concave.*

Dans le but de montrer la stricte concavité de S sur $\mathcal{H}(M)$, il faut montrer que $\ker \nabla_W^2 S(W) = \{aW, a \in \mathbb{R}_+^\}$ pour tout W .*

Dans ce cas, la restriction de S à $\mathcal{H}(M)$ est strictement concave puisque $\mathcal{H}(M) \cap \ker \nabla_W^2 S(W) = \{W\}$. Néanmoins, seulement l'inclusion $\{aW, a \in \mathbb{R}_+^\} \subset \ker \nabla_W^2 S(W)$ est démontrée dans [55]. On remarque que $\ker \nabla_W^2 S(W)$ est un sous-espace vectoriel de dimension 6 dans le cas diphasique. La seconde inclusion semble difficile à démontrer.*

2.2 Termes sources de type BGK

Ce premier type de termes sources correspond à un retour linéaire à l'équilibre, parfois appelé "BGK linéarisé". Cette dénomination sera utilisée de temps en temps pour des raisons pratiques. Il a été introduit dans la littérature homogène, d'abord dans le cas diphasique [54, 37, 4, 47] et plus récemment dans le contexte multiphasique [50, 63].

Pour un état donné $(\tau, e, Y) \in C$, en supposant que $Y \mapsto s(\tau, e, Y)$ est *strictement* concave, il existe une unique fraction d'équilibre Y_{eq} qui maximise l'entropie s , où Y_{eq} dépend uniquement de (τ, e) , voir la définition 4.

Définition 5. *Pour tout état $(\tau, e, Y) \in C$, on définit*

$$\Gamma_1(\tau, e, Y) = \lambda(Y_{eq}(\tau, e) - Y), \quad (2.13)$$

où $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ est un vecteur d'échelles de temps et λY représente le produit terme à terme.

Cette définition contient des échelles de temps λ qui en général, sont distinctes et

dépendent du temps. Elles correspondent respectivement aux temps de relaxation de transferts de masse, mécanique et thermique.

Éligibilité et Consistance. Soit $\lambda > 0$ tel que $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda$. Pour tout état $(\tau, e) \in (\mathbb{R}_*^+)^2$, on suppose que l'entropie $Y \mapsto s(\tau, e, Y)$ est une fonction strictement concave par rapport à Y . Alors, le terme source Γ_1 vérifie le critère de croissance de l'entropie (2.2). De plus, les états stationnaires du système dynamique (2.1)-(2.13) coïncident avec les équilibres thermodynamiques de la définition 4.

Démonstration. Il est clair qu'un état stationnaire pour Γ_1 est un vecteur Y_{eq} de la définition 4. Il reste à vérifier la croissance de l'entropie. Soit $(\tau, e, Y) \in C$ un état donné. On a

$$\begin{aligned} \Gamma_1(Y) \cdot \nabla_Y s(\tau, e, Y) &= (\lambda(Y_{eq} - Y)) \cdot \nabla_Y s(\tau, e, Y) \\ &= \lambda((Y_{eq} - Y) \cdot \nabla_Y s(\tau, e, Y)) \\ &\geq \lambda(s(\tau, e, Y_{eq}) - s(\tau, e, Y)) \\ &\geq 0, \end{aligned}$$

grâce à la concavité de $Y \mapsto s(\tau, e, Y)$. □

Notons qu'invoquer l'argument de concavité requiert de considérer un paramètre de relaxation unique λ . Récemment, une modification de ce type de termes sources autorisant des temps de relaxation distincts a été introduite dans [49].

Proposition 4. Soit $(\tau, e, Y_0) \in C$ un vecteur d'état initial. Le problème de Cauchy

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt}(t) = \Gamma_1(\tau, e, Y(t)), & t > 0, \\ Y(0) = Y_0, \end{cases} \quad (2.14)$$

admet une solution globale Y

$$\forall t \geq 0, Y(t) = e^{-\Lambda(t)}(e^{\Lambda(0)}Y(0) + Y_{eq} \int_0^t \lambda(s)e^{\Lambda(s)} ds), \quad (2.15)$$

où Λ est une primitive de λ . Dans le cas où le temps de relaxation λ est constant, on a

$$\forall t \geq 0, Y(t) = e^{-\lambda t}Y(0) + (1 - e^{-\lambda t})Y_{eq}. \quad (2.16)$$

Cette dernière expression peut être interprétée comme le barycentre de l'état initial $Y(0)$ et de l'état d'équilibre Y_{eq} . Les trajectoires des solutions sont des exponentielles décroissantes vers les fractions d'équilibre. La figure 2.2 illustre ce comportement pour un mélange de deux gaz raides de paramètres donnés en table 1.1. On observe l'évolution en temps des fractions $Y(t)$ pour un état initial $Y(0) = (0.5, 0.5, 0.5)$, avec un volume spécifique $\tau = 5.5 \cdot 10^{-3}$ et une énergie interne $e = 10^8$. L'échelle de temps est constante et vaut 1. Les fractions d'équilibre sont représentées en pointillés. Un autre point important est que le temps d'atteinte des états asymptotiques ne dépend pas de l'état initial du fluide.

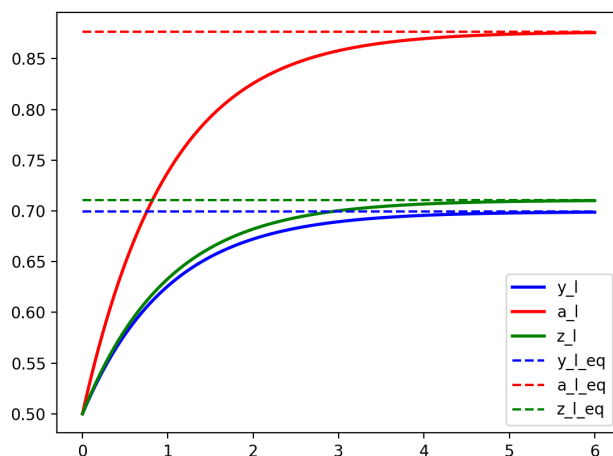


FIGURE 2.2 – Trajectoires du système Γ_1 pour la donnée $Y(0) = (0.5, 0.5, 0.5)$, $\tau = 5.5 \cdot 10^{-3}$, $e = 10^8$ et $\lambda = 1$. Les paramètres des lois d'état sont donnés dans 1.1. L'état d'équilibre est représentée par les lignes pointillées.

Un avantage majeur des termes sources de type BGK est leur intégration explicite. Néanmoins, ils nécessitent la détermination de l'état d'équilibre Y_{eq} pour chaque état considéré $(\tau, e, Y) \in C$, c'est-à-dire de résoudre le problème de maximisation (2.11). Pour un mélange diphasique, et particulièrement avec des lois d'état de gaz raides, la maximisation est explicite, voir [47]. Mais lorsque des équations d'état plus complexes et plus de phases sont considérées, la maximisation doit être réalisée à l'aide d'algorithmes appropriés. Un algorithme a été proposé dans le cas de trois gaz raides (voir chapitre 3), et dans le cas de deux gaz raides plus un liquide NASG-CK [63], on utilise une méthode de Broyden [10]. Lorsque l'on couple ceci avec la dynamique du fluide, avec une méthode de splitting en temps par exemple, cette maximisation doit être effectuée sur chaque maille

et à chaque pas de temps, ce qui mène à des coûts de calculs élevés, voir chapitre 3.

2.3 Termes sources en gradient d'entropie

Le deuxième type de termes sources correspond au gradient de l'entropie afin qu'il vérifie directement la condition d'éligibilité (2.2).

Définition 6. Pour tout $(\tau, e, Y) \in C$, le terme source Γ_2 est défini par

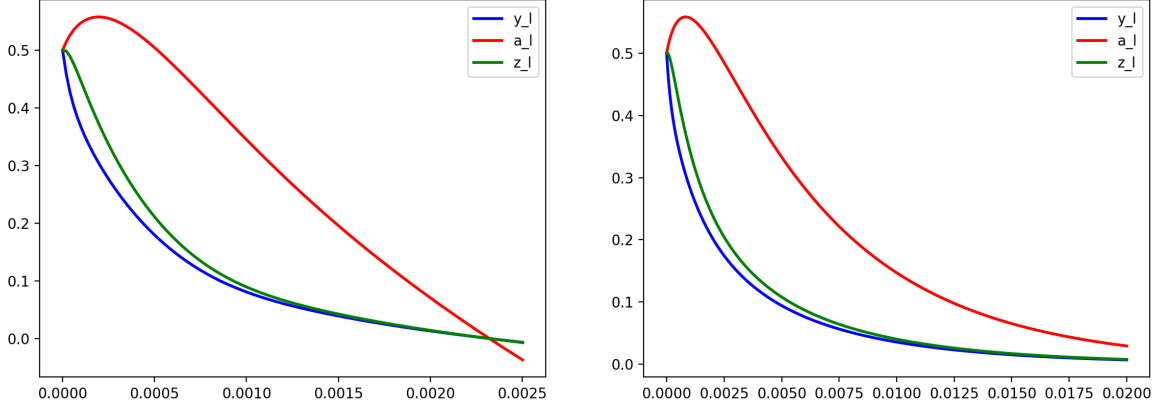
$$\Gamma_2(\tau, e, Y) = \lambda Y(1 - Y) \nabla_Y s(\tau, e, Y), \quad (2.17)$$

avec $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ les paramètres de relaxation. En utilisant la définition de l'entropie du mélange (2.8) et des potentiels phasiques (1.9), Γ_2 se réécrit

$$\Gamma_2 = \begin{pmatrix} \lambda_1 y(1 - y) \left(\frac{\mu_2}{T_2} - \frac{\mu_1}{T_1} \right) \\ \lambda_2 \alpha(1 - \alpha) \tau \left(\frac{P_1}{T_1} - \frac{P_2}{T_2} \right) \\ \lambda_3 z(1 - z) e \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \end{pmatrix}.$$

Dans le cas d'un mélange de deux gaz raides, le domaine de définition C_w de Γ_2 est représenté sur la figure 2.1. Le terme source Γ_2 correspond au terme source en gradient d'entropie multiplié par $Y(1 - Y)$ (au sens du produit terme à terme). Cette modification est obligatoire pour des raisons numériques. En effet, le domaine de définition de l'entropie du mélange $Y \mapsto s(Y)$ est C_w qui est inclus dans $]0; 1[^3$. Ainsi, une solution $(Y, I) \in]0; 1[^3 \times \mathbb{R}_+$ du système dynamique $Y'(t) = \nabla_Y s(\tau, e, Y)$ est telle que $Y(t) \in]0; 1[^3$, pour tout $t \in [0; T[$, avec $I = [0; T[$. Néanmoins, dans les simulations numériques, le principe du maximum n'est pas garanti, comme illustré dans la figure 2.3-gauche. C'est le cas d'un mélange de deux gaz raides de paramètres 1.1 décrit par le système dynamique $Y'(t) = \nabla_Y s(\tau, e, Y)$ d'état initial $Y(0) = (0.5, 0.5, 0.5)$, $\tau = 8.10^{-4}$, $e = 10^8$ et $\lambda = 1$. On observe que les fractions de volume deviennent négatives avant le temps $t < 0.0025$. Le terme de correction $Y(1 - Y)$ assure le principe du maximum, comme illustré dans la figure 2.3-droite. Bien entendu, cette modification modifie les trajectoires, en particulier les états d'équilibre monophasiques sont atteints en un temps plus long dans la figure 2.3.

Remarque 4. Le terme source Γ_2 fait intervenir la différence des pressions phasiques, agissant sur l'équation de la fraction de volume. Une telle expression est classique. Elle peut être trouvée dans la littérature diphasique, par exemple dans les modèles de type Baer-


 (a) Trajectoires pour $\Gamma_2 = \nabla_Y s$.

 (b) Trajectoires pour $\Gamma_2 = Y(1 - Y)\nabla_Y s$.

FIGURE 2.3 – Comparaison des trajectoires des solutions de $\dot{Y} = \nabla_Y s(\tau, e, Y)$ (gauche) et $\dot{Y} = Y(1 - Y)\nabla_Y s(\tau, e, Y)$ (droite) pour un mélange de gaz raides de paramètres 1.1. La donnée initiale est $Y(0) = (0.5, 0.5, 0.5)$, avec $\tau = 8 \cdot 10^{-4}$, $e = 10^8$ et $\lambda = 1$.

Nunziato [3] et la dérivation d'un tel terme de transfert mécanique est maintenant bien compris [33].

Éligibilité et Consistance. *Supposons qu'il existe $\lambda_0 > 0$ tel que $\forall t \geq 0$, $\forall k = 1, 2, 3$, $\lambda_k(t) > \lambda_0$. Pour tout état $(\tau, e) \in (\mathbb{R}_*^+)^2$, le terme source Γ_2 vérifie le critère de croissance de l'entropie (2.2).*

Démonstration.

$$\begin{aligned} \Gamma_2(Y) \cdot \nabla_Y s(\tau, e, Y) &= \lambda Y(1 - Y) \nabla_Y s \cdot \nabla_Y s \\ &= \sum_{k=1}^3 \lambda_k Y_k (1 - Y_k) (\partial_{Y_k} s)^2 \\ &\geq 0, \end{aligned}$$

dès qu'il existe un $k \in \{1, 2, 3\}$ tel que $Y_k \in]0; 1[$, ce qui conclut la preuve. \square

Contrairement au terme source du type BGK, résoudre exactement le système dynamique est hors d'atteinte. Néanmoins, le théorème de Cauchy-Lipschitz garantit l'existence et l'unicité d'une solution régulière locale.

Proposition 5. *Considérons $(\tau, e) \in (\mathbb{R}_*^+)^2$. Pour tout $Y_0 \in (\mathbb{R}_*^+)^3$ tel que $(\tau, e, Y_0) \in C$, il*

existe une unique solution maximale $(I, Y) \in \mathbb{R}_+ \times]0; 1[^3$, avec $Y : I \rightarrow]0; 1[^3$, du système (2.1)-(2.17).

Exclusion d'équilibres non admissibles

Le point suivant a pour objectif d'assurer que les états stationnaires du système dynamique (2.1)-(2.17), notés \bar{Y} telles que $\Gamma_2(\bar{Y}) = 0$, correspondent à un équilibre thermodynamique pertinent d'un point de vue physique, dans le sens (2.3).

Pour un état donné $(\tau, e) \in (\mathbb{R}_*^+)^2$, si $\bar{Y} \in]0; 1[^3$, alors $\Gamma_2(\bar{Y}) = 0$ implique que $\nabla_Y s(\tau, e, \bar{Y}) = 0$. Ainsi, \bar{Y} est tel que la proposition (3) est vérifiée et l'état stationnaire est un équilibre.

De plus, puisque Γ_2 n'est pas défini sur le bord du cube $[0, 1]^3$, on ne peut pas déterminer si les états monophasiques $\bar{Y} = 0_{\mathbb{R}^3}$ et $\bar{Y} = 1_{\mathbb{R}^3}$ sont des états stationnaires du système dynamique et s'ils sont attractifs (en utilisant des arguments comme la linéarisation de la jacobienne). D'une façon similaire, $(1, 0, 0)$ pourrait être un état stationnaire du système dynamique, même s'il n'a pas de sens physique. La proposition suivante établit que les trajectoires Y ne peuvent pas atteindre la bordure du cube $[0, 1]^3$ dans le cas d'un mélange de gaz raides avec paramètres donnés en table 1.1.

Proposition 6. (*Exclusion de la bordure*)

Soit $(\tau, e) \in (\mathbb{R}_*^+)^2$ un état donné. Pour toute donnée initiale $Y(0) \in]0, 1[^3$, une solution Y du système (2.1)-(2.17) ne peut converger vers un état asymptotique appartenant aux ensembles du cube suivants :

- faces : $\{y = 0\}$, $\{y = 1\}$, $\{\alpha = 0\}$, $\{\alpha = 1\}$,
- arêtes : $\{y = 0, \alpha = 0\}$, $\{y = 1, \alpha = 1\}$, $\{y = 0, \alpha = 1\}$, $\{y = 1, \alpha = 0\}$, $\{y = 0, z = 1\}$, $\{y = 1, z = 0\}$, $\{\alpha = 0, z = 1\}$, $\{\alpha = 1, z = 0\}$,
- sommets : $(1; 0; 0)$, $(0; 1; 0)$, $(1; 0; 1)$, $(0; 1; 1)$.

Démonstration. La preuve repose sur des arguments de champs de vecteurs. On étudie la limite de Γ_2 aux voisinages des ensembles considérés.

- $\forall (\alpha, z) \in]0; 1[^2$, $\lim_{y \rightarrow 0} \Gamma_2(Y) = (0, k_1, k_2)^\top$ avec $k_1 \in \mathbb{R}$ et $k_2 \in \mathbb{R}_*^-$. Puisque $k_2 \neq 0$, il n'y a pas d'équilibre possible sur la face $\{y = 0\}$. Ce cas est illustré dans la figure 2.4 pour différentes fractions initiales $Y(0) \in]0, 1[^3$ (points bleus) avec des trajectoires convergeant vers un état asymptotique (triangle rouge) correspondant à

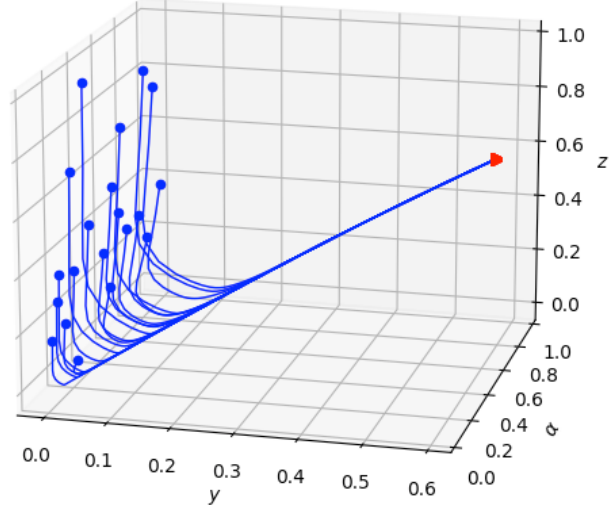


FIGURE 2.4 – Trajectoires du système (2.1)-(2.17) avec différentes fractions initiales $Y(0) = (1.10^{-10}, \alpha, z)$ où (α, z) est choisi aléatoirement dans $]0; 1[{}^2$. Les états initiaux sont représentés par les points bleus. Les paramètres thermodynamiques sont donnés en table 1.1, $\tau = 5.10^{-2}$, $e = 10^8$ et $\lambda = 1$. La donnée initiale $Y(0) \in]0, 1[{}^3$ est représentée par un point bleu et l'état asymptotique correspondant est représenté en rouge.

un état de saturation. Observons que, puisque $k_2 < 0$, les courbes sont des fonctions décroissantes de α au voisinage de la face $\{y = 0\}$.

- $\forall (\alpha, z) \in]0; 1[{}^2, \lim_{y \rightarrow 1} \Gamma_2(Y) = (0, k_1, k_2)^\top, k_1 \in \mathbb{R}, k_2 \in \mathbb{R}^*,$
- $\forall (y, z) \in]0; 1[{}^2, \lim_{\alpha \rightarrow 0} \Gamma_2(Y) = (-\infty, k_1, k_2)^\top, k_1 \in \mathbb{R}_+^*, k_2 \in \mathbb{R},$
- $\forall (y, z) \in]0; 1[{}^2, \lim_{\alpha \rightarrow 1} \Gamma_2(Y) = (+\infty, k_1, k_2)^\top, k_1 \in \mathbb{R}_-^*, k_2 \in \mathbb{R}.$

Concernant les plans $\{z = 0\}$, $\{z = 1\}$, il pourrait exister des couples (y, α) tels que les k_1, k_2 soient tous les deux nuls. En effet, on a

$$\forall (y, \alpha) \in]0; 1[{}^2, \lim_{z \rightarrow 0,1} \Gamma_2(Y) = (k_1, k_2, 0), (k_1, k_2) \in \mathbb{R}^2,$$

et donc rigoureusement, on ne peut conclure.

Introduisons la notation $\lim f = *$ qui signifie que f n'admet pas de limite, ou qu'elle ne peut être déterminée. On a pour les arêtes :

- $\forall z \in]0; 1[, \lim_{y, \alpha \rightarrow 0} \Gamma_2(Y) = (*, 0, k_1)^\top, k_1 \in \mathbb{R}_-^*,$
- $\forall z \in]0; 1[, \lim_{y, \alpha \rightarrow 1} \Gamma_2(Y) = (*, 0, k_1)^\top, k_1 \in \mathbb{R}_+^*,$

- ▶ $\forall y \in]0; 1[, \lim_{\alpha, z \rightarrow 0} \Gamma_2(Y) = (-\infty, k_1, 0)^\top, k_1 \in \mathbb{R}_+^*$,
- ▶ $\forall y \in]0; 1[, \lim_{\alpha, z \rightarrow 1} \Gamma_2(Y) = (+\infty, k_1, 0)^\top, k_1 \in \mathbb{R}_+^*$,
- ▶ $\forall z \in]0; 1[, \lim_{y \rightarrow 0, \alpha \rightarrow 1} \Gamma_2(Y) = (*, k_1, k_2)^\top, (k_1, k_2) \in (\mathbb{R}_-^*)^2$,
- ▶ $\forall z \in]0; 1[, \lim_{y \rightarrow 1, \alpha \rightarrow 0} \Gamma_2(Y) = (*, k_1, k_2)^\top, (k_1, k_2) \in (\mathbb{R}_+^*)^2$,
- ▶ $\forall y \in]0; 1[, \lim_{\alpha \rightarrow 0, z \rightarrow 1} \Gamma_2(Y) = (-\infty, k_1, k_2)^\top, (k_1, k_2) \in \mathbb{R}^2$,
- ▶ $\forall y \in]0; 1[, \lim_{\alpha \rightarrow 1, z \rightarrow 0} \Gamma_2(Y) = (+\infty, k_1, k_2)^\top, (k_1, k_2) \in \mathbb{R}^2$.

Quatre arêtes restent problématiques à cause de limites non déterminées.

Finalement, on peut exclure quatre des six coins :

- ▶ $\lim_{y \rightarrow 1, \alpha, z \rightarrow 0} \Gamma_2(Y) = (*, k_1, 0)^\top, k_1 \in \mathbb{R}_+^*$,
- ▶ $\lim_{y \rightarrow 0, \alpha, z \rightarrow 1} \Gamma_2(Y) = (*, k_1, 0)^\top, k_1 \in \mathbb{R}_-^*$,
- ▶ $\lim_{\alpha \rightarrow 1, y, z \rightarrow 0} \Gamma_2(Y) = (*, k_1, 0)^\top, k_1 \in \mathbb{R}_-^*$,
- ▶ $\lim_{\alpha \rightarrow 0, y, z \rightarrow 1} \Gamma_2(Y) = (*, k_1, 0)^\top, k_1 \in \mathbb{R}_+^*$.

Pour les deux restants $(1, 1, 0)$ et $(0, 0, 1)$, deux composantes de Γ_2 n'admettent pas de limite ou elle est indéterminée. \square

Soulignons que ces arguments ne s'appliquent pas pour les deux coins $(1, 1, 0)$ et $(0, 0, 1)$ et les deux faces $\{z = 0\}$ et $\{z = 1\}$. Ceci pourrait être précisé en considérant des paramètres Q_k et π_k spécifiques. Par exemple, les paramètres réalistes de la table 1.1 excluent certaines de ces situations, ce qu'on illustre sur la figure 2.1.

Lorsque le mélange est constitué de deux gaz parfaits, la preuve reste vraie et les coins et faces problématiques dans le cas précédent ne le sont plus.

Dans les simulations numériques, aucune trajectoire incohérente n'a été trouvée. Certaines trajectoires sont tracées dans la figure 2.5 dans le cas d'un mélange immiscible de deux gaz raides de paramètres 1.1, en utilisant les algorithmes semi-implicites Adams-Bashforth Python, suffisant pour deux gaz raides. Toutes les courbes correspondent à une solution du système dynamique (2.1)-(2.17) pour la donnée initiale $Y(0) = (0.5, 0.5, 0.5)$ avec $\lambda = 1$. L'énergie interne est $e = 10^8$ et différents volumes spécifiques sont considérés. La courbe verte correspond à $\tau = 1.10^{-3}$ et converge vers l'état $0_{\mathbb{R}^3}$, correspondant à un état monophasique pour la phase 2. La courbe bleue correspond au cas $\tau = 1.10^{-2}$ et

converge vers l'état monophasique $1_{\mathbb{R}^3}$ (constitué exclusivement de la phase 1 donc). La courbe rouge est obtenue pour $\tau = 5.5 \cdot 10^{-3}$ et correspond à l'état de saturation $Y_{eq} \in]0, 1[^3$ vérifiant (3).

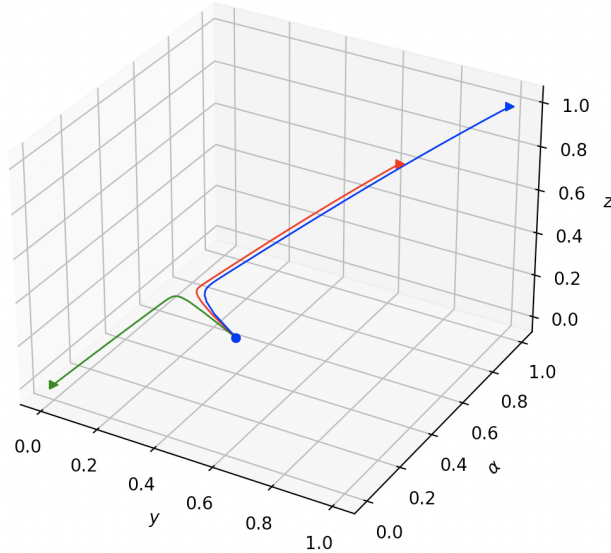


FIGURE 2.5 – Exemples de trajectoires du système dynamique Γ_2 avec une donnée initiale $Y(0) = (0.5, 0.5, 0.5)$ et $e = 10^8$. La courbe verte est obtenue pour $\tau = 1 \cdot 10^{-3}$ et converge vers l'état monophasique $0_{\mathbb{R}^3}$. La courbe bleue correspond à $\tau = 1 \cdot 10^{-2}$ et converge vers l'état monophasique $1_{\mathbb{R}^3}$. Enfin, la courbe rouge correspond à $\tau = 5.5 \cdot 10^{-3}$ et converge vers un état de saturation à l'intérieur du cube.

La figure 2.6 illustre des états asymptotiques possibles du système dynamique (2.1)-(2.17). Pour une énergie interne donnée $e = 10^8$, chaque trajectoire correspond à un état initial $(\tau, e, Y(0))$, où $Y(0)$ et τ sont déterminés aléatoirement respectivement dans $]0, 1[^3$ et $]5 \cdot 10^{-4}; 1 \cdot 10^{-2}[$. La fraction initiale $Y(0)$ est représentée par un point bleu et les états asymptotiques au temps final $t = 0.1$ sont tracés en bleu. On observe que les états asymptotiques sont distribués à l'intérieur du cube et que les coins $0_{\mathbb{R}^3}$ et $1_{\mathbb{R}^3}$ sont des points d'accumulation.

Remarque 5. Cas miscible Cette étude peut se décliner au cas d'un mélange diphasique miscible, où les deux champs partagent le même volume. On peut décrire l'ensemble de définition de l'entropie du mélange dans le plan et définir les termes sources comme précédemment. En raison de l'absence de réaction chimique, la seule fraction concernée par la thermodynamique est la fraction d'énergie z . L'équilibre thermodynamique est caractérisé par l'égalité des températures. Les termes sources n'ont alors qu'une composante

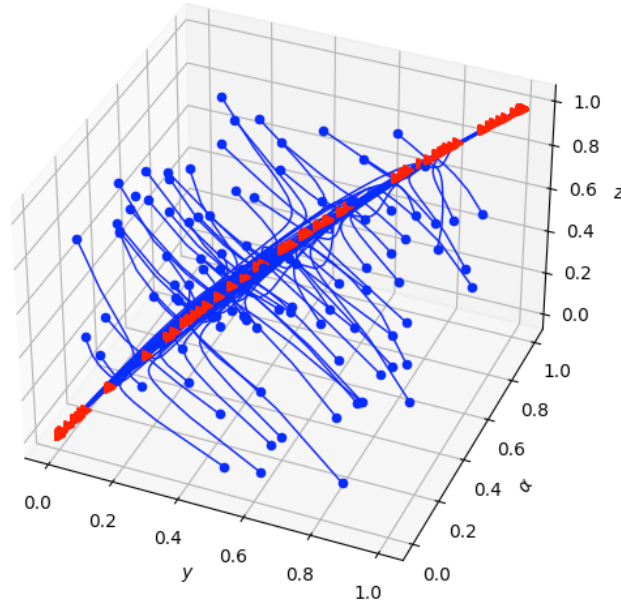


FIGURE 2.6 – Trajectoires du système dynamiques Γ_2 avec $e = 10^8$. Chaque trajectoire correspond à une paire aléatoirement choisie $(Y(0), \tau) \in]0, 1[^3 \times]5 \cdot 10^{-4}, 1 \cdot 10^{-2}[$ où la donnée initiale $Y(0)$ est représentée par un point bleu. L'état asymptotique correspondant est représenté en rouge.

et leur étude est très simple relativement au cadre immiscible.

2.4 Conclusion : comparaison des termes sources

Les termes sources de type BGK fournissent des solutions très simples, dès que l'état d'équilibre Y_{eq} est connu pour un état donné $(\tau, e) \in (\mathbb{R}_*^+)^2$. Les trajectoires sont des exponentielles décroissantes, le temps de retour à l'équilibre est en particulier toujours le même, peu importe l'état initial. Le second terme source ne permet pas d'avoir de solutions explicites au système dynamique. En général, les trajectoires obtenues sont bien plus complexes, non monotones, et le temps de retour à l'équilibre dépend de l'état initial.

La figure 2.7 présente des trajectoires pour un mélange de deux gaz raides de paramètres de la table 1.1. Elles sont obtenues, pour chaque terme source, pour un état $\tau = 5.5 \cdot 10^{-3}$, $e = 10^8$, avec un temps de relaxation $\lambda = 1$. Le même état initial $Y(0) = (0.5, 0.5, 0.5)$ est considéré. On observe que les trajectoires du terme source BGK ont les trajectoires exponentielles attendues. Au contraire, les trajectoires du terme source en gradient d'entropie sont non monotones. Notons enfin le temps d'atteinte de l'état

d'équilibre : le second terme source atteint ce dernier plus rapidement que le premier.

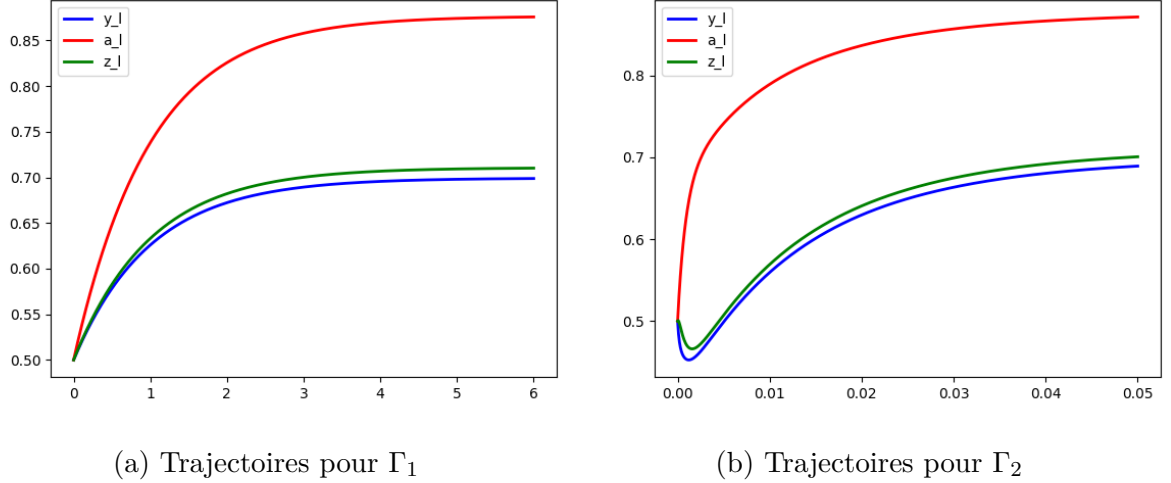


FIGURE 2.7 – Comparaison des trajectoires des modèles Γ_1 et Γ_2 pour la même donnée initiale $Y(0) = (0.5, 0.5, 0.5)$, $\tau = 5.5 \cdot 10^{-3}$, $e = 10^8$, $\lambda = 1$. Alors que les trajectoires de Γ_1 sont des exponentielles décroissantes, celles de Γ_2 ne sont pas monotones. Pour le second terme source, l'état asymptotique est atteint à $t = 0.05$, et approximativement $t = 3.5$ pour Γ_1 .

Enfin, il est important de faire une comparaison sur la complexité numérique. Les termes sources BGK requièrent le calcul de l'équilibre. Lorsque des lois d'état complexes sont utilisées, ou si l'on considère plus de phases, des algorithmes de résolutions d'équations non linéaires sont nécessaires [48, 63]. Dans un contexte global avec résolution de la dynamique du fluide, de tels algorithmes coûtent cher en temps de calcul, puisque utilisés à chaque itération en temps et en espace.

Cette complexité pourrait être contournée grâce au second terme source. Bien entendu, la résolution numérique du système dynamique associé dépend des lois d'états et du nombre de phases. Ainsi, des méthodes semi-implicites ou d'ordre élevées sont sans doute nécessaires.

Finalement, les termes sources en gradient d'entropie permettent de considérer une relaxation avec des échelles de temps distinctes pour les transferts mécaniques, thermiques ou massiques. Ce n'est pas le cas des termes sources type BGK qui nécessitent l'utilisation d'une échelle de temps commune, bien que cette contrainte a été revue dans [49].

SIMULATION D'UN MODÈLE HRM POUR UN MÉLANGE DIPHASIQUE HYBRIDE

Ce chapitre concerne un modèle d'écoulement multiphasique hybride, c'est-à-dire que le fluide est constitué de plusieurs phases dont certaines contiennent des composants miscibles. Des modèles récents pour ce type de configuration ont été proposés [60, 51, 52, 45, 43]. Ils décrivent la dynamique et le comportement thermodynamique d'un mélange composé d'un liquide, de sa vapeur et d'un gaz inerte ([43] considère une phase liquide additionnelle). Dans [45, 43], la dynamique du fluide est décrite par les équations de Baer-Nunziato. Dans [60, 51, 52], toutes les phases évoluent à la même vitesse, et c'est cette approche que nous considérons dans ce chapitre. Ces modèles HRM ont une structure similaire à celle des équations d'Euler. Ils contiennent des équations d'évolution sur les fractions de volume, masse et énergie des phases qui contiennent des termes sources de relaxation vers l'équilibre thermodynamique. La dérivation de ce modèle est proposée dans [60], basée sur une étude préliminaire [2]. Le modèle HRM correspond à la relaxation d'un Modèle Homogène à l'Équilibre (HEM), composé d'un système d'Euler avec une loi de pression complexe qui décrit le comportement thermodynamique du mélange. Lorsque l'on considère des équations d'état réalistes pour chaque phase, le calcul exact de cette pression d'équilibre est hors d'atteinte et rend le modèle HEM difficile à utiliser. La méthode de relaxation, utilisée par exemple dans [21, 54, 39], fournit un modèle HRM avec une structure simple du type Euler et une loi de pression explicite, héritant des propriétés d'hyperbolicité et des propriétés entropiques du modèle HEM. Néanmoins, il reste à fournir des termes sources pour fermer le système. Ces termes sources doivent non seulement être en accord avec le second principe de la thermodynamique, mais aussi capturer les équilibres thermodynamiques corrects. On étudiera un terme source du type BGK correspondant à la linéarisation autour de l'équilibre, et un second construit à l'aide du gradient de l'entropie. On considère des équations d'état réalistes pour chaque phase (voir [51, 52]) et des simulations numériques du modèle complet seront proposées avec ces

termes sources. Le but de ce chapitre est entre autre de le comparer avec le terme source en gradient d'entropie.

Il est organisé de la façon suivante.

Dans une première partie, la thermodynamique du mélange est présentée, en considérant que les trois phases sont décrites par des équations d'état complètes : des lois de gaz raides, ou des lois NASG-CK. L'entropie du mélange est présentée dans sa forme intensive (voir [60] pour une formulation extensive) et sa concavité est étudiée. Les principales difficultés du modèle sont les conditions de miscibilité et l'inertie du gaz (voir chapitre 1), qui ne peut pas échanger de masse avec les deux autres phases. Il en résulte des contraintes sur les fractions de masse et de volume. On définit l'équilibre thermodynamique similairement au chapitres précédents et en prenant compte ces hypothèses, ce qui mène à la définition 7. On mentionne notamment la question des disparitions de phases.

Dans une seconde partie, la dérivation des équations d'évolution est proposée, menant au modèle HRM attendu. Notons que cette dérivation diffère de l'approche par relaxation proposée dans [60]. Une brève étude de la structure hyperbolique est donnée.

La partie 3.1 se termine par une comparaison des termes sources de type BGK avec ceux en gradient d'entropie. Les propriétés des systèmes dynamiques associés sont données.

La partie 3.2 présente l'approximation numérique du modèle HRM à l'aide d'une méthode à pas fractionnaire. L'approximation de la partie convective est effectuée par une méthode volumes finis avec différents schémas numériques. À cause des lois d'état considérées, les calculs d'énergie interne ou de température peuvent être particulièrement difficiles, ainsi on fournit des algorithmes détaillés concernant le calcul d'énergie interne dans les deux configurations de lois d'état considérées.

Enfin, la partie 3.3 contient les résultats numériques. D'abord, des cas tests de validation (problèmes de Riemann) de la partie convective sont présentés pour un mélange de gaz raides et un mélange où le liquide suit une loi NASG-CK. Dans les deux configurations, des cas tests à basse et haute pression sont proposés. On présente enfin des cas tests où les termes sources sont pris en compte, afin d'observer leurs propriétés données précédemment.

3.1 Modèle

Cette section présente la modélisation du mélange diphasique hybride. On s'intéresse d'abord à sa thermodynamique. Comparé à [60], des résultats complémentaires sur la concavité de l'entropie et sur l'équilibre thermodynamique sont donnés. La question de la disparition de phase est notamment abordée. La dynamique du fluide est décrite par un système hyperbolique avec des termes sources de relaxation dont la dérivation est détaillée. Le cœur de la partie est la comparaison et l'analyse entre deux choix possibles de termes sources proposés dans [60], en procédant similairement au chapitre 2.

3.1.1 Thermodynamique du mélange

Le mélange est composé de trois phases : un liquide (noté l), sa vapeur (notée v) et un gaz inerte (noté g). Le gaz est supposé inerte dans le sens où il ne peut échanger de masse avec les deux autres phases. On considère que le vide ne peut apparaître. La caractéristique principale de ce modèle repose sur la miscibilité des deux phases gazeuses, tandis que la phase liquide est immiscible avec ces dernières.

Dans le but de décrire le comportement thermodynamique du mélange, on considère un état (τ, e) , avec τ le volume spécifique du mélange et e son énergie interne spécifique. La question abordée dans la partie 3.1.1 est la définition de la fonction d'entropie du mélange qui décrit entièrement le comportement de ce dernier. On présente les contraintes de conservation de masse et d'énergie ainsi que la contrainte volumique qui traduit la miscibilité des phases gazeuses. Cela permet d'exprimer l'entropie du mélange en fonction des fractions de masse, volume et énergie. D'après le second principe de la thermodynamique, l'équilibre thermodynamique est atteint au maximum de l'entropie et est défini ainsi, voir la définition 7. Ce processus de maximisation est réalisé sous les contraintes précédentes.

Contraintes intensives et entropie du mélange

Donnons la description thermodynamique du mélange. Soit $w = (\tau, e)$ un vecteur d'état du fluide. En suivant les notations du chapitre 1, les conservations de la masse totale et de l'énergie donnent :

$$\begin{cases} y_l + y_v = 1 - y_g, \\ z_l + z_v + z_g = 1, \end{cases} \quad (3.1)$$

tandis que la miscibilité des phases gazeuses et le comportement immiscible du liquide imposent

$$\begin{cases} \alpha_g = \alpha_v, \\ \alpha_l + \alpha_g = 1. \end{cases} \quad (3.2)$$

Notons que la fraction de masse de gaz y_g est fixée, puisque le gaz est inerte. La connaissance des fractions et du couple (τ, e) permettent de retrouver les états des phases (τ_k, e_k) puisque

$$\tau_k = \frac{\alpha_k}{y_k} \tau, \quad e_k = \frac{z_k}{y_k} e. \quad (3.3)$$

Pour un état du mélange donné (τ, e) , l'entropie du mélange est définie comme une combinaison convexe des entropies phasiques avec les poids $y_k \in [0, 1]$. En notant $Y = (y_l, \alpha_l, z_l, z_g)$, elle s'exprime par

$$s(\tau, e, Y, y_g) = \sum_{k=l,g,v} y_k s_k \left(\frac{\alpha_k}{y_k} \tau, \frac{z_k}{y_k} e \right). \quad (3.4)$$

Le domaine de définition Ω de l'entropie du mélange est un sous-ensemble convexe de $(\mathbb{R}_+)^2 \times]0; 1[$ ⁵, voir [55].

Remarque 6. (Stricte concavité de l'entropie du mélange) On peut montrer que $(\tau, e) \mapsto s(\tau, e, Y, y_g)$ et $Y \mapsto s(\tau, e, Y, y_g)$ sont des fonctions concaves [50, 60].

Des commentaires concernant la stricte concavité de l'entropie du mélange ont été fournis par exemple dans [50], dans le cas d'un mélange immiscible. Ils reposent sur l'étude de la concavité de l'entropie extensive du mélange.

L'idée est de montrer, pour un état extensif donnée $X = (M, V, E) \in (\mathbb{R}_+^*)^3$ de masse M , volume V et énergie E , que l'entropie extensive du mélange est une fonction strictement concave lorsqu'elle est restreinte à l'ensemble $\mathcal{H}(M)$ des états de masse totale M . Si cette propriété est vraie, alors l'entropie intensive du mélange est strictement concave.

Dans le but de prouver la stricte concavité de S sur $\mathcal{H}(M)$, l'idée est de montrer l'égalité [55] :

$$\forall X \in (\mathbb{R}_+^*)^3, \quad \ker \nabla_X^2 S(X) = \{kX, k \in \mathbb{R}\}.$$

Dans ce cas, la restriction de S à $\mathcal{H}(M)$ est strictement concave puisque

$$\mathcal{H}(M) \cap \ker \nabla_X^2 S(X) = \{X\}.$$

Néanmoins, seulement l'inclusion $\{kX, k \in \mathbb{R}\} \subset \ker \nabla_X^2 S(X)$ est montrée dans [55]. À ce jour, l'autre n'est pas démontrée. On remarque que $\ker \nabla_X^2 S(X)$ est un sous-espace vectoriel de dimension 9 dans le cas diphasique hybride.

En procédant comme dans [12], quelques vérifications numériques sur le signe de $\det \nabla_Y^2 s$ ont été faites pour des choix de (τ, e, y_g) , et aucun défaut de stricte concavité n'a été observé. Ces tests nous permettent de vérifier que dans nos cas pratiques, l'hypothèse de stricte concavité est raisonnable, mais l'ensemble des états présents dans les simulations numériques demanderait une étude systématique coûteuse.

Dans ce chapitre, on suppose que $Y \mapsto s(\tau, e, Y, y_g)$ est strictement concave.

D'après la relation de Gibbs (1.8) appliquées aux phases, les relations (3.3) ainsi que la définition du potentiel chimique (1.9), la forme différentielle de l'entropie du mélange est

$$ds = \sum_{k=l,g,v} \mu_k dy_k + \tau \sum_{k=l,g,v} \frac{p_k}{T_k} d\alpha_k + e \sum_{k=l,g,v} \frac{1}{T_k} dz_k + \sum_{k=l,g,v} z_k \frac{1}{T_k} de + \sum_{k=l,g,v} \alpha_k \frac{p_k}{T_k} d\tau.$$

En utilisant les contraintes intensives (3.1) et (3.2), on a

$$\begin{aligned} ds &= (\mu_l - \mu_v) dy_l + \tau \left(\frac{p_l}{T_l} - \left(\frac{p_v}{T_v} + \frac{p_g}{T_g} \right) \right) d\alpha_l \\ &+ e \left(\frac{1}{T_l} - \frac{1}{T_g} \right) dz_l + e \left(\frac{1}{T_v} - \frac{1}{T_g} \right) dz_v \\ &+ \left(\frac{z_l}{T_l} + \frac{z_v}{T_v} + \frac{z_g}{T_g} \right) de + \left(\alpha_l \frac{p_l}{T_l} + (1 - \alpha_l) \left(\frac{p_v}{T_v} + \frac{p_g}{T_g} \right) \right) d\tau. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Ainsi, on obtient que la pression et la température du mélange sont définies par

$$\begin{aligned} \frac{1}{T}(\tau, e, Y, y_g) &= \frac{z_l}{T_l} + \frac{z_v}{T_v} + \frac{z_g}{T_g}, \\ p(\tau, e, Y, y_g) &= \frac{\alpha_l \frac{p_l}{T_l} + (1 - \alpha_l) \frac{p_v}{T_v} + (1 - \alpha_l) \frac{p_g}{T_g}}{\frac{z_l}{T_l} + \frac{z_v}{T_v} + \frac{z_g}{T_g}}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

où les notations p_k (resp. T_k) correspondent à $p_k(\tau_k, e_k)$ (resp. $T_k(\tau_k, e_k)$) avec les relations (3.3).

Équilibre thermodynamique

Lorsque l'équilibre thermodynamique est atteint, l'entropie du mélange atteint son maximum. Ce processus de maximisation est fait sous les contraintes (3.1)-(3.2), et on rappelle ici que l'on suppose que $Y \mapsto s(\tau, e, Y, y_g)$ est strictement concave. Ainsi, on peut définir les fractions d'équilibre thermodynamique de la façon suivante.

Définition 7. (*Fractions d'équilibre*) Fixons (τ, e, y_g) . En supposant que l'application $Y \mapsto s(\tau, e, Y, y_g)$ est strictement concave, on définit les fractions d'équilibre Y_{eq} par

$$Y_{eq}(\tau, e, y_g) = \arg \max_{Y \in C_w} s(\tau, e, Y, y_g), \quad (3.7)$$

où C_w est le domaine de définition de $Y \mapsto s(\tau, e, Y, y_g)$ pour un (τ, e, y_g) donnée.

Mentionnons ici la disparition de phases. Selon la définition du modèle, on considère toujours un mélange avec une présence du gaz (sinon, cela implique que la vapeur ne peut être présente d'après leur fraction volumique commune). Ainsi, il y a seulement deux cas particuliers à envisager : la disparition du liquide ou celle de la vapeur.

- Si l'état d'équilibre correspond à un mélange liquide-gaz, les fractions d'équilibre devraient être $Y = (1 - y_g, \alpha_l, 1 - z_g, z_g)$.
- Si l'état d'équilibre correspond à un mélange vapeur-gaz, les fractions d'équilibre devraient être $Y = (0, 0, 0, z_g)$. Cette valeur particulière n'appartient pas au domaine de définition de s , mais elle doit absolument pouvoir être envisagée. Ce cas est par exemple illustré sur la figure 3.3.

Le cas d'un équilibre diphasique hybride correspond à un état de saturation caractérisé par les relations suivantes, voir [60]

$$\begin{cases} p_l = p_v = p_g, \\ T_l = T_v = T_g, \\ \mu_l = \mu_v. \end{cases} \quad (3.8)$$

La relation sur les pression dans (3.8) est la loi de Dalton. Notons qu'une approche pratique des disparitions de phase peut être trouvée dans [52], où ces cas sont gérés à l'aide de seuils.

3.1.2 Dynamique du mélange

Dans cette partie, on introduit les équations d'évolution du mélange, en considérant que chaque phase évolue avec la même vitesse u . Leur dérivation consiste à étudier l'évolution d'un élément de fluide isolé le long d'une ligne de courant. Notons que l'ensemble d'équations obtenu a déjà été donné dans [60] comme version relaxée du modèle diphasique hybride à l'équilibre.

Dérivation des équations d'évolution

Le but de cette partie est de dériver un système simple d'équations d'évolution sur les quantités observables du mélange au temps t et à la position x , en considérant que chaque phase évolue à la même vitesse u . La dérivation est faite pour $x \in \mathbb{R}^d$, bien que dans la suite on ne considère que le cas en dimension $d = 1$. Considérons un élément de fluide isolé, composé de trois phases, le long d'une ligne de courant. On effectue les hypothèses standard en suivant le formalisme dans [50]. D'abord, la masse totale de cet élément est conservée au cours du temps, comme la fraction de masse de gaz y_g . De plus, on considère que la variation de volume de l'élément est seulement due à la divergence du champ de vitesse. On obtient ainsi

$$d\tau = \tau \nabla \cdot u dt,$$

où la notation $d\varphi$ correspond à la dérivée le long de l'écoulement

$$d\varphi = \partial_t \varphi + u \cdot \nabla_x \varphi.$$

Considérant maintenant que la seule force agissant sur l'élément de fluide est due au gradient de pression, le principe fondamental de la mécanique établit que

$$du = -\tau \nabla_x p dt,$$

où la pression du mélange p correspond à la pression (3.6). La première loi de la thermodynamique relie alors l'énergie interne à la pression en considérant que l'élément de fluide n'est pas soumis à d'autres sources de chaleur

$$de = -pd\tau.$$

Suivant [21, 4, 50], on considère que les évolutions en temps des quantités phasiques sont de la forme

$$dY = \lambda \Gamma(\tau, e, Y, y_g) dt,$$

où λY est un produit terme à terme et λ correspond à un paramètre de temps de relaxation dont les composantes peuvent être distinctes.

En combinant les équations précédentes avec la définition de la densité du fluide $\rho = 1/\tau$, on aboutit à un système du type Euler compressible avec cinq équations additionnelles sur les fractions avec des possibles termes de relaxation. L'ensemble d'équations conservatives en dimension un est alors

$$\begin{cases} \partial_t(\rho Y) + \partial_x(\rho Y u) = \rho \lambda \Gamma(\tau, e, Y, y_g), \\ \partial_t(\rho y_g) + \partial_x(\rho y_g u) = 0, \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p) = 0, \\ \partial_t(\rho E) + \partial_x((\rho E + p)u) = 0, \end{cases} \quad (3.9)$$

où $E = u^2/2 + e$ désigne l'énergie interne totale du système et $p(\tau, e, Y, y_g)$ est la pression du mélange (3.6).

Propriétés du modèle homogène

L'hyperbolicité et la structure entropique du modèle ont été étudiées dans [60]. La concavité de s par rapport à (τ, e, Y, y_g) est équivalente à la convexité de $H = -\rho s$ par rapport aux variables conservatives $\mathcal{W} = (\rho Y, \rho, \rho u, \rho E)$. Alors $H(\mathcal{W}) = -\rho s$ est une entropie du Lax du système (3.9) et les solutions faibles du système satisfont

$$\partial_t H + \partial_x(Hu) \leq 0.$$

L'hyperbolicité est assurée dès que les trois phases sont présentes, où la vitesse du son c est alors strictement positive

$$\frac{c^2}{\tau^2} = p \partial_e p - \partial_\tau p = -T(p^2 \partial_{ee} s - 2p \partial_{\tau e} s + \partial_{\tau\tau} s). \quad (3.10)$$

La structure du système (3.9) est composée d'un champ linéairement dégénéré associé à la valeur propre u , et de deux champs vraiment non linéaires associés aux valeurs propres

$u \pm c$.

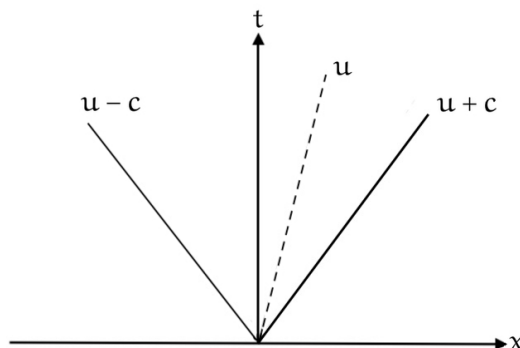


FIGURE 3.1 – Ondes du système (3.9).

La figure 3.1 présente la structure d'ondes dans le plan de phases (x, t) . La pression du mélange et la vitesse sont conservées autour du contact, contrairement aux fractions. Pour deux états \mathcal{W}_L et \mathcal{W}_R séparés par un champ vraiment non linéaire, les conditions de saut sont

$$\left\{ \begin{array}{l} [Y] = 0, \\ J = -\frac{[p]}{[u]}, \\ J^2 = -\frac{[p]}{[\tau]}, \\ [e] + [\tau] \frac{p_L + p_R}{2} = 0, \end{array} \right. \quad (3.11)$$

où $J = \rho u - \xi$, où ξ est la vitesse de l'onde et $[x] = x_R - x_L$. En particulier, les fractions sont constantes à travers les ondes vraiment non linéaires, en accord avec leurs équations d'évolution. Dans les validations numériques, on fournit des solutions analytiques de problèmes de Riemann, c'est-à-dire lorsque le système (3.9) possède une condition initiale $\mathcal{W}(0, x) = \mathcal{W}_L \mathbf{1}_{x < 0} + \mathcal{W}_R \mathbf{1}_{x \geq 0}$, voir partie 3.3.1. On utilise alors les relations de saut (3.11) pour calculer des solutions composées de quatre états constants séparés par un contact et un choc (voir aussi [52]).

3.1.3 Termes sources

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, le comportement thermodynamique du mélange n'est pas seulement décrit par la loi de pression p , mais aussi par les termes de

relaxation agissant sur les équations de transport en les fractions Y . On rappelle que le déséquilibre thermodynamique est pris en compte en pratique par le système

$$\frac{dY}{dt} = \lambda \Gamma(\tau, e, Y, y_g). \quad (3.12)$$

Bien qu'il ne semble pas y avoir de consensus sur le choix de ces termes, ils doivent vérifier des contraintes issues de la physique (voir chapitre 2) : d'abord, une évolution thermodynamique du système doit mener à la croissance de l'entropie, et l'état d'équilibre doit correspondre à son maximum. L'entropie du mélange vérifie l'équation d'évolution suivante

$$\partial_t s + u \partial_x s = \lambda \Gamma(Y, \tau, e) \cdot \nabla_Y s. \quad (3.13)$$

Ainsi, une condition suffisante pour que Γ assure la croissance de l'entropie est

$$\lambda \Gamma(Y, \tau, e) \nabla_Y \cdot s \geq 0. \quad (3.14)$$

De plus, les états asymptotiques doivent correspondre aux états d'équilibre du système

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} Y(t) = Y_{eq}.$$

Le cœur de cette partie est l'analyse de deux choix possibles de termes sources, similairement au chapitre 2. Le premier est du type BGK linéarisé autour de l'équilibre Y_{eq} . Introduit dans [21, 39, 4], il est utilisé dans des configurations multiphasiques avec des lois d'état complexes [52, 51]. L'alternative proposée dans [60] correspond au gradient de l'entropie du mélange qui satisfait directement la contrainte (3.13).

On rappelle qu'une analyse similaire et approfondie a été effectuée dans le chapitre 2 pour des mélanges diphasiques, permettant de fournir une représentation visuelle claire et impossible dans le cas présent.

Remarque 7. Les termes sources Γ contiennent des échelles de temps $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4) \in (\mathbb{R}_+)^4$ qui modélisent la vitesse de relaxation du système. On considérera qu'elles ne dépendent pas du temps dans ce chapitre.

Plus précisément, chaque λ_i est un facteur dans Γ_i , et concerne une fraction spécifique du système (3.9). D'un point de vue physique, λ_1 correspond au transfert de masse, λ_2 au transfert mécanique, λ_3 et λ_4 aux transferts thermiques.

Termes sources type BGK

Pour un état donné $(\tau, e, Y, y_g) \in \Omega$, en supposant que $Y \mapsto s(\tau, e, Y, y_g)$ est *strictement* concave, il existe un unique vecteur de fractions d'équilibre Y_{eq} qui maximise l'entropie s , où Y_{eq} dépend exclusivement de (τ, e, Y) (proposition 3.1.1).

Définition 8. *Pour un état $(\tau, e, Y, y_g) \in \Omega$, on définit*

$$\Gamma_1(\tau, e, Y, y_g) = \lambda(Y_{eq}(\tau, e, y_g) - Y), \quad (3.15)$$

où $\lambda \in (\mathbb{R}_*^+)^4$ est un vecteur d'échelles de temps.

Proposition 7. (Eligibilité) *Supposons que le vecteur d'échelles de temps λ est tel que $\lambda_1 = \dots = \lambda_4$. Pour un état donné $(\tau, e) \in (\mathbb{R}_*^+)^2$, supposons que la fonction d'entropie $Y \mapsto s(\tau, e, Y, y_g)$ est strictement concave par rapport à Y . Alors, le terme source Γ_1 vérifie le critère de croissance de l'entropie (3.14). De plus, les états stationnaires du système dynamique (3.12)-(3.15) coïncident avec les équilibres thermodynamiques de la définition 7.*

Démonstration. La preuve est identique au cas diphasique fait au chapitre précédent. \square

Proposition 8. *Soit $(\tau, e, Y_0, y_g) \in \Omega$ un état initial donné. Le problème de Cauchy*

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt}(t) = \Gamma_1(\tau, e, Y(t), y_g), & t > 0, \\ Y(0) = Y_0, \end{cases}$$

admet une solution globale Y donnée par

$$\forall t \geq 0, Y(t) = e^{-\Lambda(t)}(e^{\Lambda(0)}Y_0 + Y_{eq} \int_0^t \lambda(s)e^{\Lambda(s)} ds), \quad (3.16)$$

où Λ est une primitive de λ . Dans le cas de paramètres de relaxation constants λ , on a

$$\forall t \geq 0, Y(t) = e^{-\lambda t}Y(0) + (1 - e^{-\lambda t})Y_{eq}. \quad (3.17)$$

La preuve est directe et cette dernière expression peut être interprétée comme le barycentre de l'état initial $Y(0)$ et de l'état d'équilibre. De plus, il est garanti que $Y(t) \in [0, 1]^4$ pour tout $t \geq 0$.

Un avantage majeur des termes sources du type BGK est que l'équation différentielle associée se résout explicitement. Les trajectoires des solutions sont des exponentielles

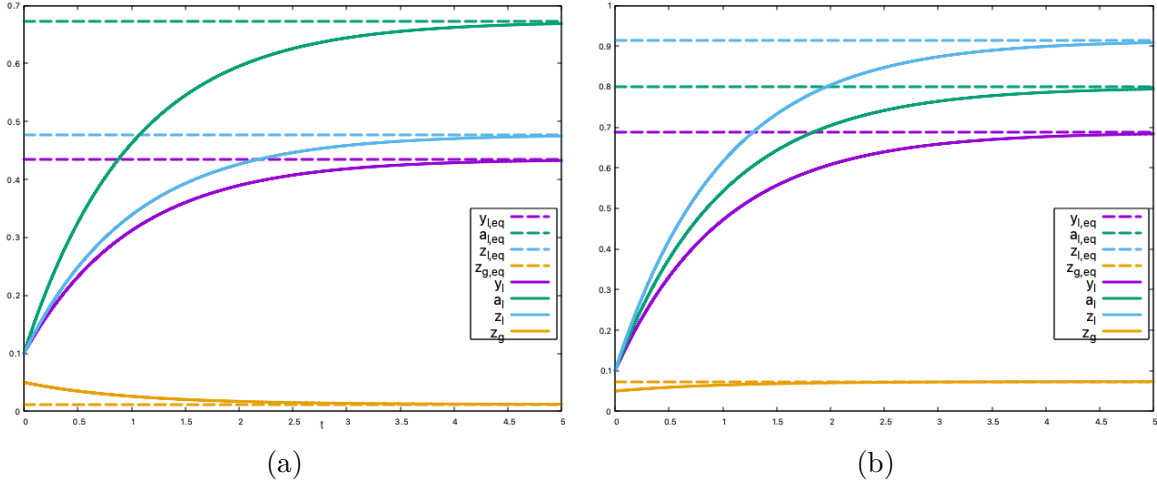


FIGURE 3.2 – Termes sources Γ_1 du type BGK pour un mélange de trois gaz raides. La figure (a) correspond à un équilibre à trois champs tandis que la figure (b) correspond à un équilibre eau liquide-gaz. Les fractions initiale sont données par $Y(0) = (0.1, 0.1, 0.1, 0.05)$, et l'énergie interne vaut $e = 10^8$. Sur la figure (a), $y_g = 0.05$ et $\tau = 5.10^{-3}$ alors que sur la figure (b), $y_g = 0.3$ et $\tau = 4.54.10^{-2}$.

décroissantes admettant pour asymptotes horizontales Y_{eq} . Néanmoins, ils requièrent le calcul de l'état d'équilibre pour chaque donnée initiale.

Pour un mélange diphasique avec des lois d'états classiques [47], ce calcul peut être fait explicitement. Dans notre contexte triphasique, il est plus complexe et nous explicitons le raisonnement pour un mélange de gaz raides dans la partie 3.2.2.

La figure 3.2 présente deux évolutions en temps des fractions $Y(t)$ pour un mélange de trois gaz raides de paramètres donnés en table 1.1. L'échelle de temps est constante et fixée à $\lambda = 1$.

Sur la figure 3.2-a, on observe l'évolution en temps des fractions $Y(t)$ pour un état initial $Y(0) = (0.1, 0.1, 0.1, 0.05)$, $y_g = 0.05$, de volume spécifique $\tau = 5.10^{-3}$ et d'énergie interne $e = 10^8$. L'état d'équilibre associé est un mélange des trois champs.

Sur la figure 3.2-b, on observe l'évolution en temps des fractions $Y(t)$ pour un état initial $Y(0) = (0.1, 0.1, 0.1, 0.05)$, $y_g = 0.3$, de volume spécifique $\tau = 4.54.10^{-2}$ et d'énergie interne $e = 10^8$. L'état d'équilibre associé est proche d'un mélange diphasique sans vapeur, où $y_{v,eq} \sim 10^{-2}$ et $z_{v,eq} \sim 10^{-2}$.

Un autre point important est que le temps d'atteinte à l'équilibre ne dépend pas de l'état initial du fluide. Ici, les fractions d'équilibre sont calculées grâce à l'algorithme donné en annexe 3.5.

On peut trouver dans [52] des calculs d'état d'équilibre pour une loi NASGCK pour le liquide. Ces résultats ont été obtenus par un solveur de Broyden en dimension 2.

Termes sources en gradient d'entropie

Ce second type de terme source repose sur le gradient d'entropie, et est défini de la façon suivante.

Définition 9. Pour tout $(\tau, e, Y, y_g) \in \Omega$, soit Γ_2 le terme source défini par

$$\Gamma_2(\tau, e, Y, y_g) = \lambda Y(1 - Y) \nabla_Y s(\tau, e, Y, y_g) = \begin{pmatrix} \lambda_1 y_l(1 - y_l) \partial_{y_l} s \\ \lambda_2 \alpha(1 - \alpha) \partial_\alpha s \\ \lambda_3 z_l(1 - z_l) \partial_{z_l} s \\ \lambda_4 z_g(1 - z_g) \partial_{z_g} s \end{pmatrix}.$$

Le produit λY est à lire au sens du produit terme à terme. En utilisant les potentiels intensifs, Γ_2 se réécrit

$$\Gamma_2 = \begin{pmatrix} \lambda_1 y_l(1 - y_l) \left(\frac{\mu_v}{T_v} - \frac{\mu_l}{T_l} \right) \\ \lambda_2 \alpha_l(1 - \alpha_l) \tau \left(\frac{P_l}{T_l} - \frac{P_v}{T_v} - \frac{P_g}{T_g} \right) \\ \lambda_3 z_l(1 - z_l) \left(\frac{1}{T_l} - \frac{1}{T_v} \right) \\ \lambda_4 z_g(1 - z_g) \left(\frac{1}{T_g} - \frac{1}{T_v} \right) \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Cette fonction correspond au gradient d'entropie multiplié par $Y(1 - Y)$ terme à terme. En effet, à (τ, e, y_g) donnés, le domaine de définition de l'entropie du mélange s est $C_w \subset]0; 1[$ (voir définition 7). Bien qu'une solution Y du système dynamique $Y'(t) = \nabla_Y s(\tau, e, Y, y_g)$ est telle que pour tout $t > 0$, $Y(t) \in]0; 1[$, ce principe du maximum n'est pas garanti dans les applications numériques, comme illustré sur la figure 3.3.

Les trajectoires des solutions sont représentées pour un mélange de trois gaz raides de paramètres 1.1 pour les conditions initiales $Y(0) = (0.1, 0.1, 0.1, 0.05)$, $y_g = 0.05$, avec un volume spécifique $\tau = 5.5 \cdot 10^{-3}$, une énergie interne $e = 10^8$ et $\lambda = (1, 1, 1, 1)^T$. Les lignes pointillées représentent les solutions sans modification et les lignes continues celles avec modification. On constate que sans modification, les solutions deviennent négatives à un temps $t < 0.0005$ s. Le terme de correction $Y(1 - Y)$ assure le principe du maximum. Bien sûr, cette correction modifie les trajectoires, on remarque sur cet exemple que le temps de retour à l'équilibre est rallongé. Enfin, les trajectoires pour ce second terme source dépendent directement de l'état initial.

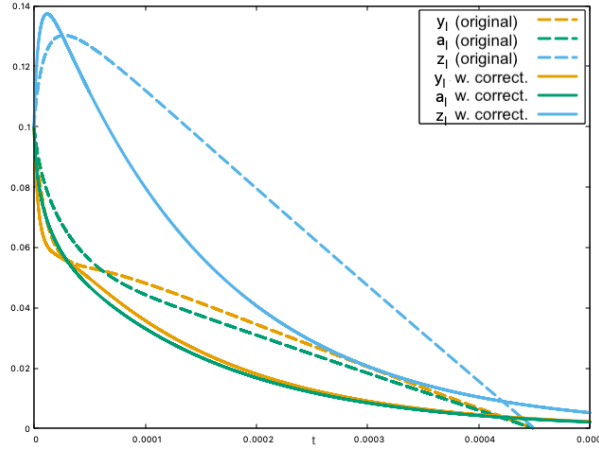


FIGURE 3.3 – Terme source en gradient d'entropie pour un mélange de gaz raides. Trajectoires des solutions sans la correction assurant le principe du maximum sur les fractions.(pointillés) et avec la correction (lignes continues).

Proposition 9. (Éligibilité) Soit $\lambda_0 = \min \lambda_i$ tel que $\lambda_0 > 0$. Alors, pour un état $(\tau, e, Y, y_g) \in \Omega$, le terme source Γ_2 vérifie le critère d'éligibilité (3.14) pour tout $t > 0$.

Démonstration. La preuve est identique au cas diphasique vu au chapitre précédent. \square

Contrairement au premier terme source, celui-ci ne requiert aucune condition sur les échelles de temps. On peut ainsi en choisir des distinctes. Nos observations montrent que pour des échelles de temps égales, les fractions évoluent vers l'équilibre à la même vitesse. Il serait intéressant d'arriver à estimer un temps caractéristique représentatif de cette évolution en fonction de l'état initial.

Enfin, résoudre exactement l'équation différentielle est hors d'atteinte. Néanmoins, le théorème de Cauchy-Lipchitz garantit l'existence d'une unique solution régulière.

Proposition 10. Considérons $(\tau, e) \in (\mathbb{R}_+^+)^2$. Pour tout $Y_0 \in (\mathbb{R}_+^+)^4$ tel que $(\tau, e, Y_0, y_g) \in \Omega$, il existe une unique solution maximale $(I, Y) \in \mathbb{R}_+ \times]0; 1[^4$, avec $Y : I \rightarrow]0; 1[^4$ du problème de Cauchy

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt}(t) = \Gamma_2(\tau, e, Y(t), y_g), & t > 0, \\ Y(0) = Y_0. \end{cases} \quad (3.19)$$

Le point suivant consiste à s'assurer que les états stationnaires du problème de Cauchy (3.19) correspondent à un équilibre physiquement admissible.

Pour un état donné $(\tau, e) \in (\mathbb{R}_+^+)^2$, si $\bar{Y} \in]0; 1[^4$, alors $\Gamma_2(\bar{Y}) = 0$ implique que $\nabla_Y s(\tau, e, \bar{Y}, y_g) = 0$. Ainsi \bar{Y} est tel que les conditions de saturation (3.8) sont vraies et

l'état d'équilibre est un état stationnaire.

D'autre part, puisque Γ_2 n'est pas défini sur le bord du cube $[0, 1]^4$, les états d'équilibre avec absence de phase ne peuvent pas être des états stationnaires et on ne peut pas déterminer s'il sont attractifs pour le système dynamique. Le résultat suivant rejette des possibilités d'états stationnaires sur le bord du cube non admissibles physiquement. Ce travail a été décrit précisément dans le cas diphasique au chapitre 2.

Proposition 11. (*Exclusion de la bordure*) Soit $(\tau, e) \in (\mathbb{R}_+^*)^2$ un état donné. Pour toute donnée initiale $Y(0) \in]0, 1[^3$, une solution $Y(t)$ du système (3.19) ne peut converger vers l'état sur le bord $Y_0 = (1 - y_g, 0, 0, 0)$.

Démonstration. L'étude du champ de vecteur au voisinage de $Y_0 = (1 - y_g, 0, 0, 0)$ permet d'exclure une possibilité de convergence vers ce point. En effet, on peut montrer que $\lim_{Y \rightarrow Y_0} \Gamma_{2,1}(Y) = -\infty$, où $\Gamma_{2,1}$ est la première composante de Γ_2 . On réfère au chapitre précédente pour une preuve détaillée dans le cas diphasique. \square

La forte non linéarité du terme source Γ_2 nécessite une méthode robuste pour approcher numériquement les solutions du système dynamique, particulièrement lorsque l'on considère des lois d'état complexes telles que la loi NASG-CK. La méthode que nous utilisons est donnée dans la partie 3.2.3.

3.2 Approximation numérique par une méthode à pas fractionnaire

La méthode à pas fractionnaire [69, 4] consiste à approcher la partie convective et les termes sources en deux étapes distinctes. L'approximation de la partie convective du modèle (3.9) est faite par une méthode volumes finis sur un maillage régulier de mailles $\Delta x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$, $i \in \mathbb{Z}$. Les pas de temps sont calculés sous condition CFL, avec la notation $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$. En notant $\mathcal{W} = (\rho Y, \rho, \rho u, \rho E)$ le vecteur conservatif, la première étape correspond à l'approximation de

$$\begin{cases} \partial_t \mathcal{W} + \partial_x \mathcal{F}(\mathcal{W}) = 0, \\ \mathcal{W}(0, x) = \mathcal{W}_0(x), \end{cases}$$

où $\mathcal{F}(\mathcal{W}) = u\mathcal{W} + pD$, avec $D = (0, 0, 1, u)^T$ et $\mathcal{W}_0(x)$ est un état initial donné. Soit $\mathcal{W}(t^n, x)$ le vecteur approché par

$$\mathbb{W}_i^n = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathcal{W}(t^n, x) dx. \quad (3.20)$$

En intégrant la partie convective sur le domaine espace-temps $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [t^n, t^{n+1,*})$, on a

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathcal{W}(t^{n+1,*}, x) - \mathcal{W}(t^n, x) dx + \int_{t^n}^{t^{n+1,*}} \mathcal{F}(\mathcal{W}(t, x_{i+1/2})) - \mathcal{F}(\mathcal{W}(t, x_{i-1/2})) dt = 0.$$

En utilisant la notation (3.20), la formulation volumes finis est

$$\mathbb{W}_i^{n+1,*} = \mathbb{W}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n), \quad (3.21)$$

où la notation $F_{i+1/2}^n$ désigne l'approximation à deux points du flux sur l'interface $x_{i+1/2}$, nommée $F_{i+1/2}^n = F(\mathbb{W}_i^n, \mathbb{W}_{i+1}^n)$. Il reste à fournir une discrétisation des termes sources.

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} Y(t) = \Gamma(\tau, e, Y, y_g), \\ \frac{d}{dt} \tilde{W}(t) = 0, \end{cases} \quad (3.22)$$

où $\tilde{W} = (\rho y_g, \rho, \rho u, \rho E)$. Finalement, \mathbb{W}_i^{n+1} est une solution approchée de (3.22) au temps $t = \Delta t$ avec la condition initiale $\mathbb{W}_i^{n+1,*}$, déduite de l'étape de convection.

3.2.1 Partie convective

Plusieurs schémas ont été considérés et deux d'entre eux vont être comparés dans cette partie. On se concentre sur des schémas standard, que l'on rappelle.

Schéma de Rusanov

En considérant deux états voisins \mathbb{W}_L et \mathbb{W}_R , le flux du schéma de Rusanov [64] est

$$F(\mathbb{W}_L, \mathbb{W}_R) = \frac{1}{2} (\mathcal{F}(\mathbb{W}_L) + \mathcal{F}(\mathbb{W}_R)) - \frac{\max(\Lambda_R, \Lambda_L)}{2} (\mathbb{W}_R - \mathbb{W}_L),$$

où $\Lambda_k = \Lambda_k(\mathbb{W}_k)$ est le rayon spectral de la matrice de convection $\nabla_{\mathbb{W}}\mathcal{F}(\mathbb{W}_k)$, et

$$\max(\Lambda_R, \Lambda_L) = \max_{k=L,R}(|u_k \pm c_k|),$$

où la vitesse du son c_k est donnée par $c_k = -\tau_k(p_k \partial_{e_k} p_k - \partial_{\tau_k} p_k)$. Chaque pas de temps t^n est calculé sous la contrainte CFL : $\Delta t^n = C \frac{\Delta x}{\max(\Lambda_R, \Lambda_L)}$, avec C tel que $0 < C < \frac{1}{2}$.

Schéma VFRoe-ncv

Le schéma de VFRoe-ncv [11] est une approximation du schéma de Godunov. Il consiste à considérer une linéarisation du modèle. En considérant un changement de variable pour des solutions régulières

$$\mathcal{W} \mapsto V = \Psi^{-1}(\mathcal{W}),$$

avec Ψ un \mathcal{C}^1 -difféomorphisme, le système se réécrit sous la forme non conservative

$$\partial_t V + A(V) \partial_x V = 0, \quad (3.23)$$

avec $A(V) = (\nabla_V \Psi)^{-1} \nabla_{\mathcal{W}} \mathcal{F}(\nabla_V \Psi)$ la nouvelle matrice de convection. Pour deux états donnés V_L et V_R , la linéarisation est effectuée avec la moyenne $\bar{V} = \frac{V_L + V_R}{2}$.

Ainsi le flux numérique est défini à partir de la solution exacte du problème de Riemann associé au système linéaire

$$\partial_t V + A(\bar{V}) \partial_x V = 0.$$

Notons $\mathcal{V}(\frac{x}{t} = 0; V_L, V_R)$ cette solution. On obtient le flux numérique :

$$F(\mathbb{W}_L, \mathbb{W}_R) = \mathcal{F}(\Psi(\mathcal{V}(x/t = 0, V_L; V_R))),$$

et la solution du système linéaire est

$$\mathcal{V}(x/t = 0, V_L; V_R) = V_L + \sum_{\bar{\beta}_i \leq 0} \bar{\gamma}_i \bar{r}_i,$$

où $(\bar{\beta}_i)_i$ sont les valeurs propres de $A(\bar{V})$, $(\bar{r}_i)_i$ ses vecteurs propres et $(\bar{\gamma}_i)_i$ les coefficients solutions du système $\Delta V = \sum_i \bar{\gamma}_i \bar{r}_i$, avec $\Delta V = V_R - V_L$. Pour éviter l'apparition de chocs

non physiques, le flux est corrigé par un terme diffusif [38], menant à

$$F(\mathbb{W}_L, \mathbb{W}_R) = \mathcal{F}(\Psi(\mathcal{V}(x/t = 0, V_L; V_R))) - \frac{\delta}{2}(\mathbb{W}_R - \mathbb{W}_L), \quad (3.24)$$

où

$$\delta = \begin{cases} \min(-(u+c)_L, (u+c)_R), & \text{si } (u+c)_L < 0 \text{ et } (u+c)_R > 0, \\ \min(-(u-c)_L, (u-c)_R), & \text{si } (u-c)_L < 0 \text{ et } (u-c)_R > 0, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.25)$$

Schéma de relaxation

Le principe de ce schéma de relaxation est d'augmenter le système et de relaxer la pression, qui contient la non linéarité du système, pour aboutir à une structure de champs exclusivement linéairement dégénérés. Ainsi, les calculs des solutions à un problème de Riemann sont explicites, et une relaxation permet de retrouver les solutions du problème initial. En suivant par exemple [15, Théorème 6], le système de relaxation est le suivant

$$\begin{cases} \partial_t(\rho Y) + \partial_x(\rho Y u) = 0, \\ \partial_t(\rho y_g) + \partial_x(\rho y_g u) = 0, \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + \Pi) = 0, \\ \partial_t(\rho \Sigma) + \partial_x(\rho u \Sigma + u \Pi) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathcal{T}) + \partial_x(\rho \mathcal{T} u) = \frac{1}{\epsilon} \rho(\tau - \mathcal{T}). \end{cases} \quad (3.26)$$

Ici la quantité \mathcal{T} est telle que pour tout x , $\mathcal{T}(0, x) = \tau(0, x)$ et ϵ est un paramètre de relaxation. La pression est relaxée par

$$\Pi(\tau, \mathcal{T}) = p(\mathcal{T}, e, Y, y_g) + a^2(\mathcal{T} - \tau), \quad (3.27)$$

alors que l'énergie relaxée est

$$\Sigma = e + \frac{u^2}{2} + \frac{\Pi^2 - (p(\mathcal{T}, e, Y, y_g))^2}{2a^2}, \quad (3.28)$$

avec a a un paramètre vérifiant

$$a > \max\left(\frac{c_l(\tau_l, e_l, Y_l, y_g)}{\tau_l}, \frac{c_r(\tau_r, e_r, Y_r, y_g)}{\tau_r}\right). \quad (3.29)$$

La condition (3.29) est dite condition de Whitham (voir [8]), qui assure l'hyperbolicité du système relaxé et des ondes bien ordonnées. Finalement, en considérant deux états \mathbb{W}_L et \mathbb{W}_R à une interface donnée, le flux numérique est

$$F(\mathbb{W}_L, \mathbb{W}_R) = \left(\frac{Yu}{\tau}, \frac{u}{\tau}, \frac{u^2}{\tau} + \Pi, \frac{u\Sigma}{\tau} + u\Pi \right), \quad (3.30)$$

où Y, τ, u, Σ sont les composantes de la solution de problème de Riemann augmenté.

3.2.2 Calculs de l'énergie interne

L'implémentation des schémas numériques ci-dessus nécessite des changements de variables entre les variables conservatives et non conservatives (ou observables) telles que la pression ou la température. Selon les équations d'état choisies, ces changements de variables peuvent être explicites ou non, et demandent un temps de calcul éventuellement long. Le but de cette partie est de préciser ces difficultés et de proposer des algorithmes pour effectuer ces calculs. On considère un état du mélange avec un volume spécifique $\bar{\tau}$, un vecteur de fraction \bar{Y} et une pression \bar{p} (parfois, on partira plutôt d'une température \bar{T}).

Selon les équations d'état, les algorithmes diffèrent. On se concentre d'abord sur un mélange de trois gaz raides, puis un mélange où le liquide est décrit par une loi NASG-CK.

Calcul pour un mélange de trois gaz raides

Soit $(\bar{\tau}, \bar{p}, \bar{Y})$ un état donné. On cherche à calculer l'énergie interne e de cet état, qui est la racine de la fonction \mathcal{P} définie par

$$\mathcal{P}(e) = p(\bar{\tau}, e, \bar{Y}, y_g) - \bar{p}. \quad (3.31)$$

En utilisant la définition de la pression du mélange (3.6) et les expressions des lois de gaz raides, on peut la réécrire comme un polynôme de degré trois

$$\mathcal{P}(e) = \bar{A}e^3 + \bar{B}e^2 + \bar{C}e + \bar{D}. \quad (3.32)$$

Précisons les coefficients exacts, pour $k, k', k'' \in \{l, g, v\}$ deux à deux distincts

$$\begin{aligned}
 \bar{A} &= \sum_{k,k',k''} z_k y_k (\gamma_k - 1) \frac{z_{k'} z_{k''}}{C_{k'} C_{k''}} \frac{1}{\tau}, \\
 \bar{B} &= \sum_{k,k',k''} -\alpha_k y_k \frac{1}{C_{k'} C_{k''}} \left(z_{k'} z_{k''} \left(\Pi_k \gamma_k + \frac{y_k Q_k (\gamma_k - 1)}{\alpha_k \tau} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{z_k (\gamma_k - 1)}{\alpha_k} \frac{1}{\tau} (z_{k'} \omega_{k''} + z_{k''} \omega_{k'}) \right) - z_k y_k \frac{z_{k'} z_{k''}}{C_{k'} C_{k''}}, \\
 \bar{C} &= \sum_{k,k',k''} \alpha_k y_k \frac{1}{C_{k'} C_{k''}} \left(\frac{z_k (\gamma_k - 1)}{y_k} \frac{1}{\tau} \omega_{k'} \omega_{k''} \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{y_k Q_k (\gamma_k - 1)}{\alpha_k} \frac{1}{\tau} + \Pi_k \gamma_k \right) (z_{k'} \omega_{k''} + z_{k''} \omega_{k'}) \right) \\
 &\quad + \left(z_k y_k \frac{1}{C_{k'} C_{k''}} (z_{k'} \omega_{k''} + z_{k''} \omega_{k'}) \right), \\
 \bar{D} &= \sum_{k,k',k''} -\alpha_k y_k \frac{1}{C_{k'} C_{k''}} \left(\frac{y_k Q_k (\gamma_k - 1)}{\alpha_k} \frac{1}{\tau} + \Pi_k \gamma_k \right) \omega_{k'} \omega_{k''} \\
 &\quad - y_k z_k \frac{1}{C_{k'} C_{k''}} \omega_{k'} \omega_{k''},
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

où $\omega_k = y_k Q_k + \alpha_k \Pi_k \tau$. Remarquons que les coefficients \bar{A} à \bar{D} sont définis explicitement par la donnée $(\bar{\tau}, \bar{p}, \bar{Y})$, la notation \bar{x} étant omise pour des raisons de clarté. On peut alors utiliser l'algorithme suivant.

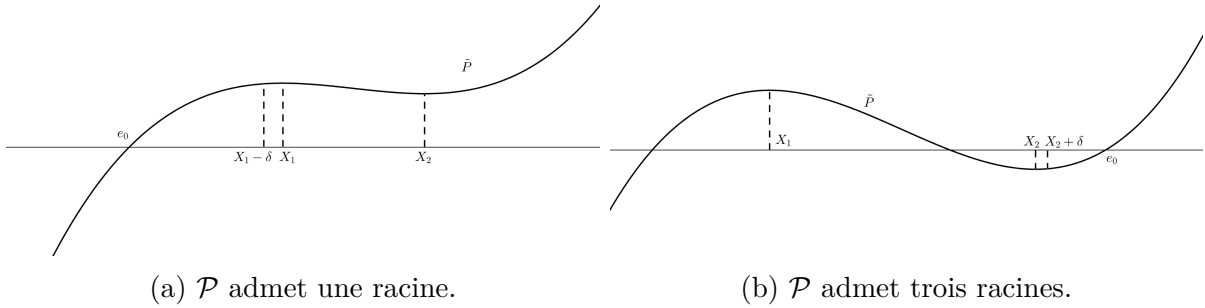


FIGURE 3.4 – Calcul de l'énergie interne pour un mélange de trois gaz raides. Graphe typique de la fonction \mathcal{P} dans les deux cas où $\Delta > 0$.

- Pour un état donné $(\bar{\tau}, \bar{p}, \bar{Y})$, on calcule les coefficients (3.33) de \mathcal{P} .
 - On calcule le discriminant Δ de la dérivée de \mathcal{P} .
 - I) Si $\Delta \leq 0$, l'équation (3.32) admet une unique solution calculée à partir d'une méthode de Newton,
 - II) Si $\Delta > 0$, soient X_1, X_2 les racines ordonnées de \mathcal{P}' , telles que $X_1 < X_2$. Elles correspondent aux extrema locaux de \mathcal{P} , voir la figure 3.4.
- Soit $\delta = 10^9$ et $\gamma = 100$ deux paramètres.
- i) Si $\mathcal{P}(X_2)\mathcal{P}(X_2 + \gamma) \leq 0$, il existe une unique racine e_0 telle que $e_0 > X_2$ (voir figure 3.4-droite). On utilise une méthode de Newton avec une condition initiale $X_2 + \delta$ et on vérifie que la solution est plus grande que X_2 . Si l'algorithme ne converge pas ou si la racine est plus petite que X_2 , on utilise une dichotomie sur $[X_2, X_2 + \gamma]$ pour garantir d'obtenir la racine dans l'intervalle voulu.
 - ii) Si $\mathcal{P}(X_2)\mathcal{P}(X_2 + \gamma) > 0$, \mathcal{P} admet une unique racine e_0 telle que $e_0 < X_1$ (voir figure 3.4-gauche). En effet, on ne peut avoir $X_1 < e_0 < X_2$ car la racine ne serait pas unique. On procède comme précédemment avec un algorithme de Newton initialisé en $X_2 - \delta$.

Les paramètres δ et γ sont fixés arbitrairement et peuvent être adaptés aux paramètres des lois. Notons que le cas II)-ii) exclue la possibilité d'avoir $\mathcal{P}(X_i) = 0$, $i = 1$ ou 2 . En effet, cette situation correspond à l'existence de deux racines, événement de probabilité nulle.

Calcul pour un mélange de deux gaz raides et un liquide NASG-CK

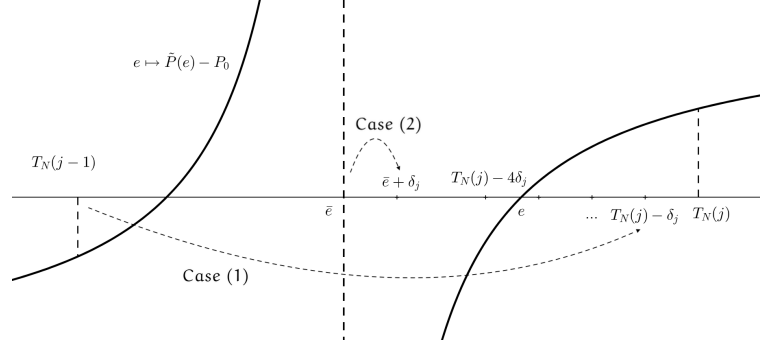


FIGURE 3.5 – Calcul de l'énergie interne pour un mélange de deux gaz raides et d'un liquide NASG-CK. Graphe typique de \mathcal{P} .

Dans cette configuration, l'expression de $\mathcal{P}(e) = P(\bar{\tau}, e, \bar{Y}) - \bar{p}$ n'est plus explicite à cause de la loi NASG-CK. Calculer la racine de $\mathcal{P}(e)$ est difficile car le graphe de \mathcal{P} a une allure d'hyperbole (voir figure 3.5). Pour gérer cette difficulté, une méthode de dichotomie est préférée pour gérer les intervalles de recherche de racine. L'algorithme est le suivant.

- ▶ Considérons l'intervalle pour l'énergie interne $[e_{\min}, e_{\max}]$.
- ▶ Discrétisons $[e_{\min}, e_{\max}]$ avec $e_j = e_{\min} + j\Delta e$, $\Delta e = (e_{\max} - e_{\min})/N$.
- ▶ Fixons $\delta_j = \frac{e_j - e_{j-1}}{d}$.
- ▶ Pour $j = N, N-1, \dots, 2$, on cherche le premier indice j_0 tel que $\mathcal{P}(e_{j_0-1})\mathcal{P}(e_{j_0}) < 0$.
- ▶ On effectue une dichotomie sur $[e_{j_0-1}, e_{j_0}]$.
- ▶ Si elle échoue, il doit exister un réel $\tilde{e} \in [e_{j_0-1}, e_{j_0}]$ où \mathcal{P} n'est pas définie. Deux cas peuvent alors être considérés.
 1. Si les dernières itérations indiquent que \bar{e} est au voisinage de e_{j_0-1} (resp. e_{j_0}), on relance la dichotomie sur $[e_{j_0-1}, e_{j_0-1} + \delta_j]$, $[e_{j_0-1} + \delta_j, e_{j_0-1} + 2\delta_j]$... jusqu'à obtenir la convergence (resp. $[e_{j_0}, e_{j_0} - \delta_j]$, $[e_{j_0} - \delta_j, e_{j_0} - 2\delta_j]$...).
 2. Sinon, la dernière itération e_∞ fournit une approximation de \bar{e} . Si $e_\infty < \bar{e}$ (resp. $e_\infty > \bar{e}$), on relance la dichotomie sur $[e_{j_0-1}, e_\infty]$ (resp. on $[e_\infty, e_{j_0}]$).

En pratique on choisit $d = 10$ et $N = 10^3$. De plus grandes valeurs de N peuvent être nécessaires sur des simulations à haute pression, voir la partie 3.3, figure 3.11.

Remarque 8. Dans le but de réduire les coûts de ces algorithmes, on peut repérer les états constants et alors lancer une dichotomie au voisinage de la dernière solution trouvée. Soient e_{old} et e_{new} les valeurs des énergies internes trouvées sur deux cellules consécutives. On commence le calcul suivant de l'énergie interne en testant si $|e_{old} - e_{new}| < 1$. Dans ce cas, on lance une dichotomie sur $[e_{new} - 10; e_{new} + 10]$. Si la solution est négative ou si l'algorithme ne converge pas, on retourne à l'algorithme précédent.

3.2.3 Approximation des termes sources

La seconde étape de la méthode de splitting correspond à l'approximation des termes sources.

Concernant les termes sources BGK, les trajectoires peuvent être explicitement définies (voir proposition 8), dès que l'on connaît le vecteur des fractions d'équilibre Y_{eq} . Deux difficultés apparaissent. Le calcul de cet équilibre peut être très complexe. On réfère à [52] pour l'utilisation d'un algorithme de Broyden pour le calcul de l'équilibre avec une loi NASG-CK pour le liquide. Dans le cas de trois gaz raides, notre algorithme proposée en annexe 4.5 convient.

On se concentre dans cette partie sur le terme source en gradient d'entropie. On propose une méthode d'Euler implicite, à l'aide d'un algorithme de Broyden [10] pour évaluer la partie non linéaire.

Au temps $[t^{n+1,*}, t^{n+1}]$, on considère le problème de Cauchy (3.22) avec la condition initiale $\mathbb{W}^{n+1,*}$ calculée par l'étape convective. La méthode d'Euler implicite nécessite le calcul de la solution de l'équation non linéaire $G : [0, 1]^4 \rightarrow \mathbb{R}^4$

$$G(Y) = Y - \Delta t Y (1 - Y) \nabla_Y s(\tau_{n+1;*}, e_{n+1;*}, Y, y_g) - Y_{n+1;*}, \quad (3.34)$$

On utilise alors la méthode de Broyden qui nécessite le calcul de la jacobienne $J(Y)$ de $G(Y)$ avec les coefficients

$$(J(Y))_{i,j} = \partial_{Y_j} Y_i - \Delta t \lambda_i \partial_{Y_j} [Y_i (1 - Y_i) \partial_{Y_i} s(\tau_{n+1;*}, e_{n+1;*}, Y, y_g)], \quad 1 \leq i, j \leq 4, \quad (3.35)$$

où Y_i (resp. λ_i) correspond au i -ème coefficient de Y (resp. λ). Seule l'initialisation requiert un calcul de la jacobienne. L'algorithme construit ensuite une suite $(Y_k)_{k \in \mathbb{N}}$ donnée

par

$$\begin{cases} Y_k = Y_{k-1} - J_{k-1}^{-1} G(Y_{k-1}), \\ J_k^{-1} = J_{k-1}^{-1} + \frac{\Delta Y_k - J_{k-1}^{-1} \Delta G_k}{\Delta Y_k^T J_{k-1} \Delta G_k} (\Delta Y_k)^T J_{k-1}^{-1}, \\ \Delta Y_k = Y_k - Y_{k-1}, \\ \Delta G_k = G(Y_k) - G(Y_{k-1}), \end{cases} \quad (3.36)$$

jusqu'à ce que $\|Y_k - Y_{k-1}\|_\infty < \eta$, où η est une tolérance ($\eta = 10^{-10}$ en pratique). L'initialisation demande de choisir Y_0 comme le Y_n calculé à l'itération en temps précédente.

3.3 Résultats numériques

Cette partie fournit deux types de tests numériques. D'abord, des cas tests de validation assurent la bonne approximation de la partie convective du modèle (3.9). Ils consistent en la résolution de problèmes de Riemann à basse et haute pression, pour les deux mélanges considérés. On notera parfois le mélange de trois gaz raides "3 SG" et le mélange de deux gaz raides et un liquide NASG-CK par "2 SG + 1 NASG-CK".

Une comparaison des temps de calcul est présentée dans la partie 3.3.1, mettant en avant les performances du schéma de relaxation comparé au schéma VFRoe-ncv.

Finalement, une simulation globale avec les termes sources est présentée.

3.3.1 Relaxation infiniment lente

Ces cas tests correspondent à la validation de l'approximation de la partie convective (lorsque les termes sources sont inactifs). Pour les deux différentes configurations d'équations d'état, on compare les résultats des différents flux numériques présentés en partie 3.2.1 sur des problèmes de Riemann à basse et haute pression. Dans les deux cas, ces derniers sont construits pour vérifier les relations de saut (3.11). En considérant un état initial \mathbb{W}_L , l'état \mathbb{W}_1 est calculé en considérant une absence de la première onde. On calcule ensuite l'état \mathbb{W}_2 à travers le contact, et on considère un choc de vitesse ξ pour aboutir à l'état \mathbb{W}_R .

Mélange de trois gaz raides

Les tables 3.1-3.2 donnent les données du problème de Riemann basse et haute pression pour un mélange de trois gaz raides de paramètres de la table 1.1. Les quatre états

constants sont décrits en leurs variables primitives $\mathbb{Z} = (y_l, y_g, \alpha_l, z_l, z_g, \tau, u, p)^T$.

| $\mathbb{Z}_L = \mathbb{Z}_1$ | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z}_R |
|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|
| 0.91826194646564185 | 0.89784395822033747 | 0.89784395822033747 |
| $5.0000000000000003 \times 10^{-2}$ | $5.9999999999994613 \times 10^{-2}$ | $5.9999999999994613 \times 10^{-2}$ |
| $1.6767800121816667 \times 10^{-2}$ | $1.000000000001008 \times 10^{-2}$ | $1.000000000001008 \times 10^{-2}$ |
| 0.41969031490727782 | 0.3000000000002064 | 0.3000000000002064 |
| $8.8350466782145878 \times 10^{-2}$ | $9.899999999997021 \times 10^{-2}$ | $9.899999999997021 \times 10^{-2}$ |
| $5.4427805491776261 \times 10^{-2}$ | $6.8863503931918257 \times 10^{-2}$ | $7.0000000000000007 \times 10^{-2}$ |
| 10.0 | 10.0 | -1.5263757834575244 |
| $1.8668002620104561 \times 10^5$ | $1.8668002620104561 \times 10^5$ | $6.9779191756698478 \times 10^4$ |

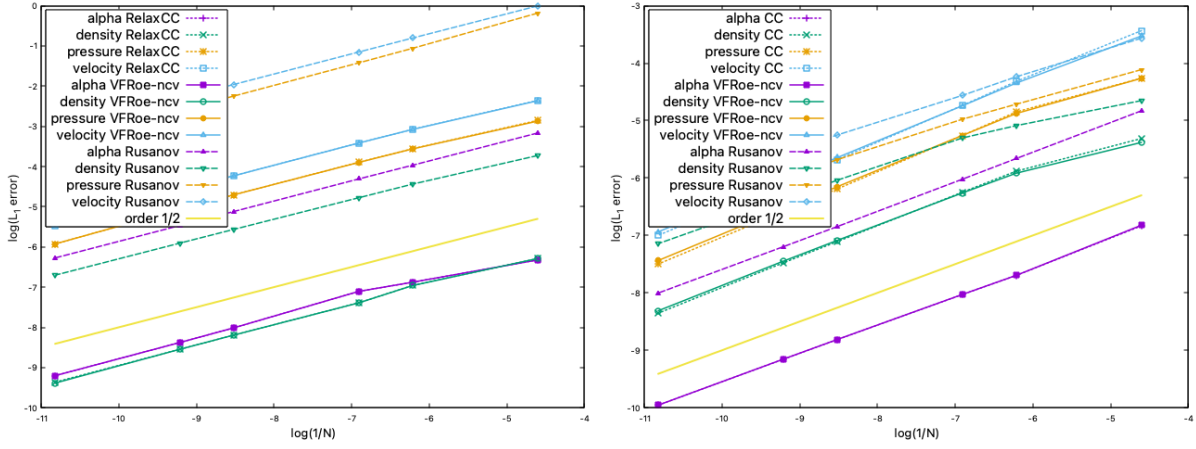
TABLE 3.1 – Mélange de trois gaz raides. Données pour le problème de Riemann à basse pression. Choc $u + c$ de vitesse $\xi = 708.41563589800251$.

| $\mathbb{Z}_L = \mathbb{Z}_1$ | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z}_R |
|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|
| 0.39999999999999997 | 0.37999999999999906 | 0.37999999999999906 |
| 0.29999999999999999 | 0.33000000000000052 | 0.33000000000000052 |
| $8.0000000000000071 \times 10^{-2}$ | $6.999999999999840 \times 10^{-2}$ | $6.999999999999840 \times 10^{-2}$ |
| 0.25000000000000011 | 0.21999999999999936 | 0.21999999999999936 |
| $9.999999999999978 \times 10^{-2}$ | 0.12000000000000005 | 0.12000000000000005 |
| $6.0000000000000010 \times 10^{-3}$ | $5.0000000000000062 \times 10^{-3}$ | $5.3000000000000000 \times 10^{-3}$ |
| 100.0 | 100.0 | 71.298995659385199 |
| $1.4999999999999996 \times 10^7$ | $1.4999999999999996 \times 10^7$ | $1.2254174499466641 \times 10^7$ |

TABLE 3.2 – Mélange de trois gaz raides. Données pour le problème de Riemann à haute pression. Choc $u + c$ de vitesse $\xi = 578.35007234359045$.

Les trois flux numériques sont comparés avec la même CFL fixée à 0.45, sur différents cas tests sur le domaine $[0; 1]$. Les figures 3.7-3.8-3.10-3.11 ont été obtenues avec 500 cellules. Les résultats de convergence, obtenus pour le temps final $t = 10^{-3}$, voir figure 3.6, montrent une convergence d'ordre $1/2$ pour les deux schémas. C'est le résultat attendu pour un cas test faisant intervenir une onde de contact.

La figure 3.7 présente les profils de densité, vitesse, pression et les fractions obtenues par le schéma de relaxation dans la configuration à basse pression. On observe la bonne approximation des fractions. Des oscillations sont présentes sur la pression et la vitesse, et sont certainement dues aux fortes non linéarités des équations d'état. Elles apparaissent aussi dans le cas haute pression, voir figure 3.8, alors que les profils de fractions sont toujours bien capturés.



(a) Problème de Riemann à basse pression. (b) Problème de Riemann à haute pression.

 FIGURE 3.6 – Mélange de trois gaz raides. Convergence en norme L^1 pour les problèmes de Riemann à basse et haute pression.

Mélange de deux gaz raides avec un liquide NASG-CK

Les tables 3.3 et 3.4 donnent la solution exacte du problème de Riemann dans les cas basse et haute pression en considérant que le liquide suit une loi NASG-CK de paramètres 1.3.

| $\mathbb{Z}_L = \mathbb{Z}_1$ | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z}_R |
|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|
| 0.91841879730033971 | 0.89999999102958528 | 0.89999999102958528 |
| 5.0000000000000003E-002 | 5.5000004933728031E-002 | 5.5000004933728031E-002 |
| 1.6376791114071865E-002 | 1.4999998527357117E-002 | 1.4999998527357117E-002 |
| 0.92743215703897408 | 0.90000000855046036 | 0.90000000855046036 |
| 1.1475280368993632E-002 | 9.9999991449539437E-003 | 9.9999991449539437E-003 |
| 0.19492558898696019 | 0.19500001720076998 | 0.19700000000000001 |
| 100.0 | 100.0 | 90.488583338128308 |
| $2.4530790395664933 \times 10^5$ | $2.4530790395664933 \times 10^5$ | $2.0007399146972221 \times 10^5$ |

 TABLE 3.3 – Mélange de deux gaz raides avec une phase liquide NASG-CK. Données pour le problème de Riemann à basse pression. Choc droit de vitesse $\xi = 1027.3711820835272$.

Les résultats de convergence, voir sur la figure 3.9, sont obtenus avec la même discrétisation et la condition CFL du paragraphe 3.3.1. On observe des taux de convergence similaires de 1/2, ce qui est optimal pour des calculs typiques de tube à choc faisant intervenir des discontinuités de contact.

Les profils de densité, vitesse, pression, température et les fractions sont donnés dans

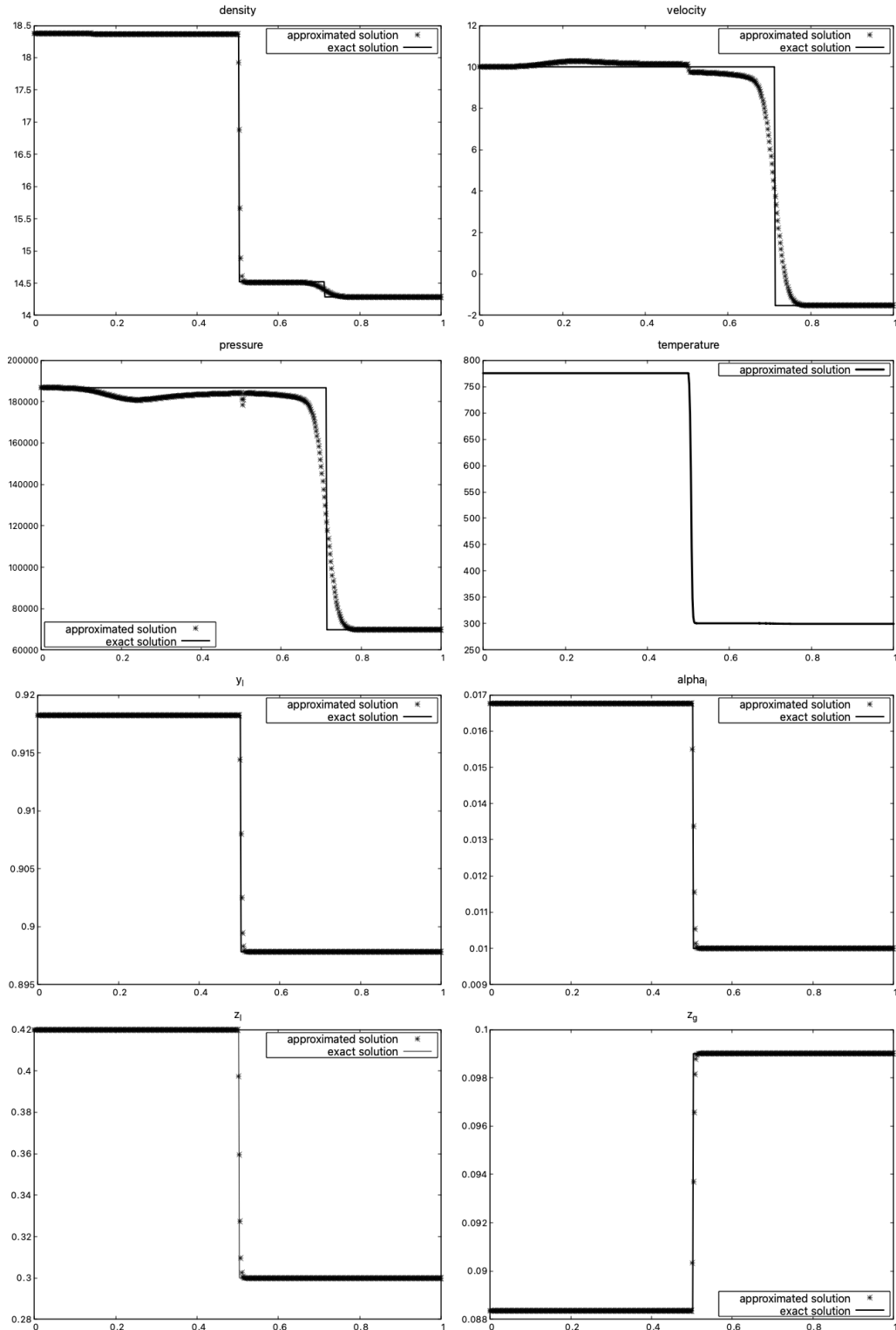


FIGURE 3.7 – Mélange de trois gaz raides. Cas test à basse pression. De gauche à droite et de haut en bas, profils de densité, vitesse, pression, température, y_l , α_l , z_l et z_g .

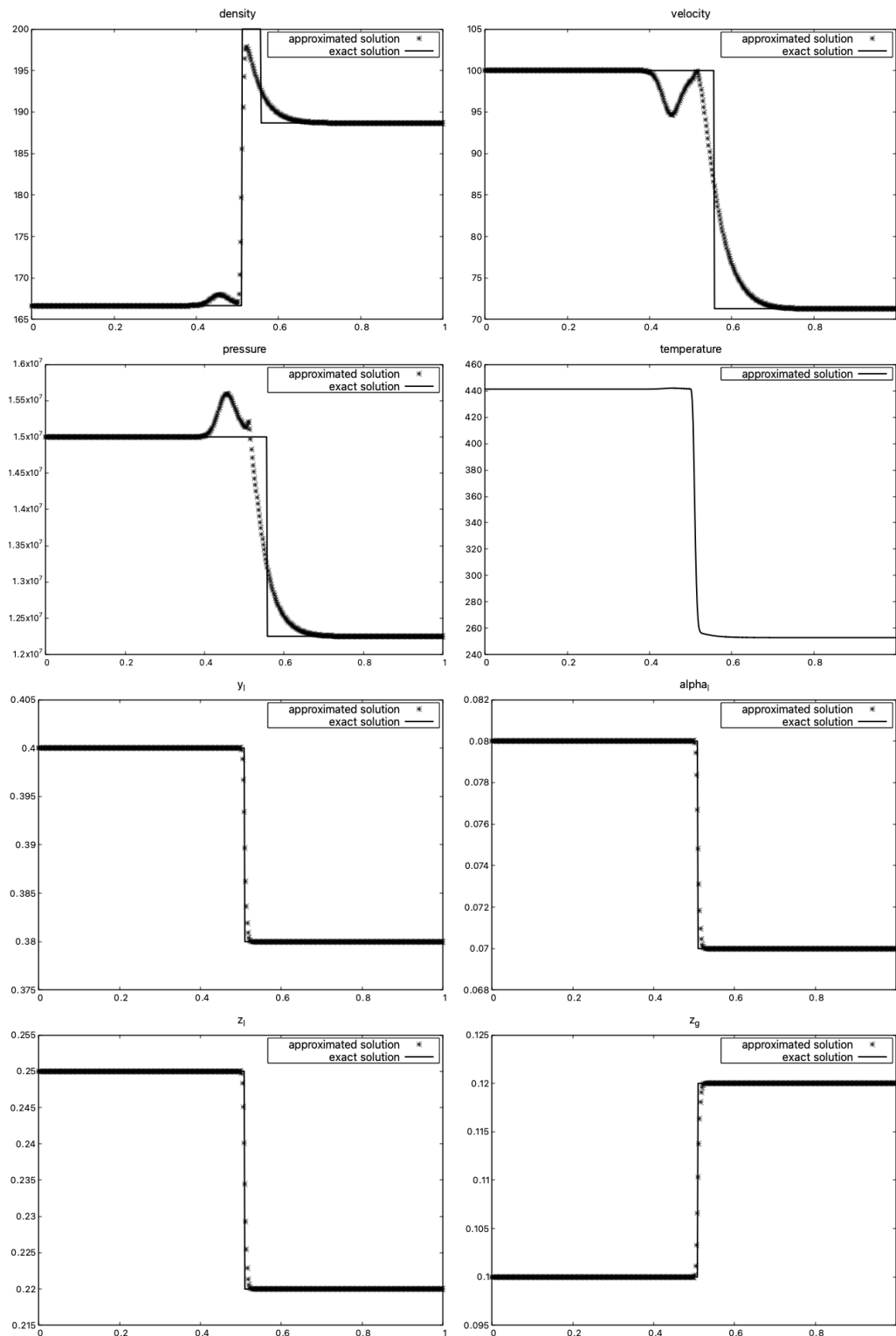
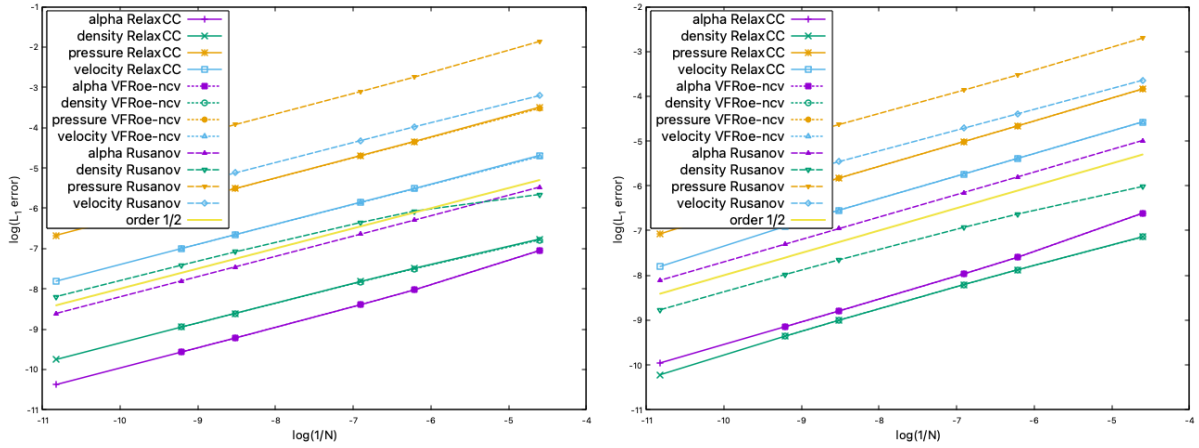


FIGURE 3.8 – Mélange de trois gaz raides. Cas test à haute pression. De gauche à droite et de haut en bas, profils de densité, vitesse, pression, température, y_l , α_l , z_l et z_g .

| $\mathbb{Z}_L = \mathbb{Z}_1$ | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z}_R |
|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|
| 0.92020382010222246 | 0.89999998651866320 | 0.89999998651866320 |
| $5.0000000000000003 \times 10^{-2}$ | $5.3000007145108524 \times 10^{-2}$ | $5.3000007145108524 \times 10^{-2}$ |
| 0.68595071360084603 | 0.59999996404976996 | 0.59999996404976996 |
| 0.95997763551798010 | 0.9000000093700905 | 0.9000000093700905 |
| $6.5876209523389063 \times 10^{-3}$ | $7.9999999250392681 \times 10^{-3}$ | $7.9999999250392681 \times 10^{-3}$ |
| $4.8078440722228851 \times 10^{-3}$ | $5.0000002246889472 \times 10^{-3}$ | $5.0699999999999999 \times 10^{-3}$ |
| 100.0 | 100.0 | 79.113750095130015 |
| $1.7275285041205704 \times 10^7$ | $1.7275285041205704 \times 10^7$ | $1.1043330250633653 \times 10^7$ |

TABLE 3.4 – Mélange de deux gaz raides avec une phase liquide NASG-CK. Données pour le problème de Riemann à haute pression. Choc droit de vitesse $\xi = 1591.8798489453186$.



(a) Problème de Riemann à basse pression. (b) Problème de Riemann à haute pression.

FIGURE 3.9 – Mélange de deux gaz raides et un liquide NASG-CK. Convergence en norme L^1 pour les problèmes de Riemann à basse et haute pression.

les figures 3.10 (resp. figure 3.11) pour les tests à basse et haute pression, avec le schéma de relaxation. Des observations similaires au cas précédent peuvent être faites. Les fractions sont bien approchées. Des oscillations apparaissent, et elles semblent plus amples à cause de la loi NASG-CK, en tout cas pour le cas à basse pression.

Comparaison entre VFRoe-ncv et le schéma de relaxation

Bien que la section précédente montre des taux de convergence similaires pour ces deux schémas, on peut faire quelques remarques supplémentaires sur leurs performances.

Concernant le temps de calcul, une comparaison est proposée dans la figure 3.12 pour les deux types de mélanges considérés. Il est clair que le schéma de VFRoe-ncv est plus coûteux. C'est une conséquence de ses nombreux changements de variables qui demandent des calculs d'énergie interne. Ils sont faits avec les algorithmes fournis dans la partie 3.2.2. Au contraire, le schéma de relaxation ne fait ces changements de variables qu'en début et fin de simulation ce qui le rend moins gourmand en terme de temps CPU.

On observe sur la figure 3.12 (3 gaz raides) que pour un nombre donné de cellules, le schéma de VFRoe-ncv a besoin d'en moyenne deux fois plus de temps de calcul que le schéma de relaxation pour parvenir à la même précision.

Dans le cas du liquide NASG-CK, (voir 3.12), l'écart est bien entendu plus grand et le facteur va de 20 (pour les maillages les plus fins) à 100 (pour les maillages les plus grossiers). Ces variations sont certainement dues à l'algorithme de calcul d'énergie interne qui a plus de difficultés sur les maillages grossiers (voir partie 3.2.2).

Étant donné que les calculs de lois d'état sont le cœur du sujet, la figure 3.13 représente le temps CPU par rapport au nombre d'évaluations des lois d'état. Ainsi, pour un nombre d'évaluations donné, le mélange 2 SG + 1 NASG-CK requiert environ vingt fois plus de temps que dans le cas 3 SG.

3.3.2 Simulations complètes hors-équilibre

Cette partie finale fournit des résultats numériques avec la méthode à pas fractionnaire, en utilisant le schéma de relaxation pour résoudre la partie convective, et l'algorithme de Broyden pour les termes sources. Les deux termes sources de la partie 3.1.3 sont comparés et plusieurs échelles de temps sont testées. On se concentre sur le mélange de trois gaz raides dans une configuration à basse pression. La condition initiale est celle du problème de Riemann donné dans la table 3.1. Le domaine est constitué de 1000 cellules et la CFL

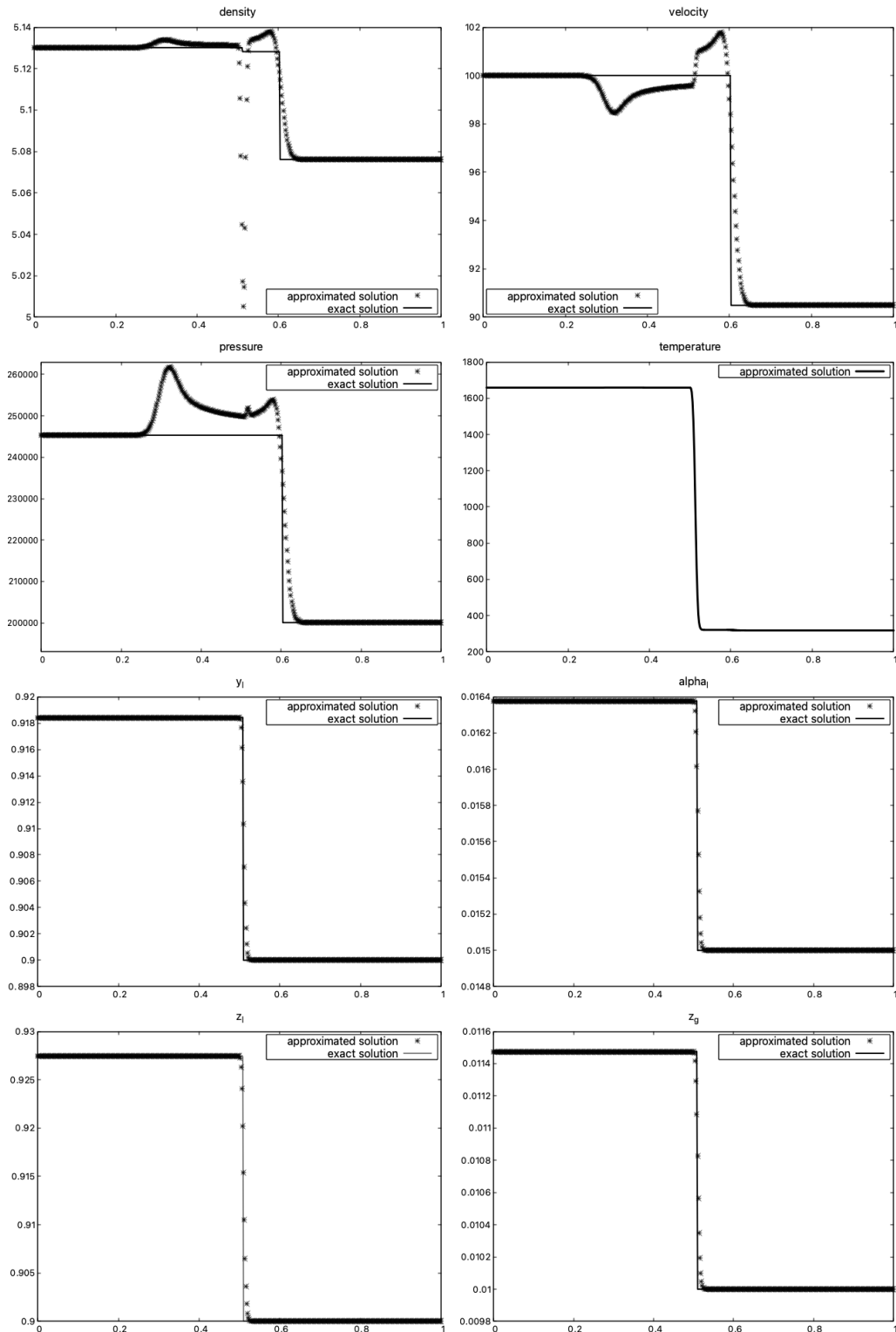


FIGURE 3.10 – Mélange de deux gaz raides avec un liquide NASG-CK De gauche à droite et de haut en bas, profils de densité, vitesse, pression, température, y_l , α_l , z_l et z_g .

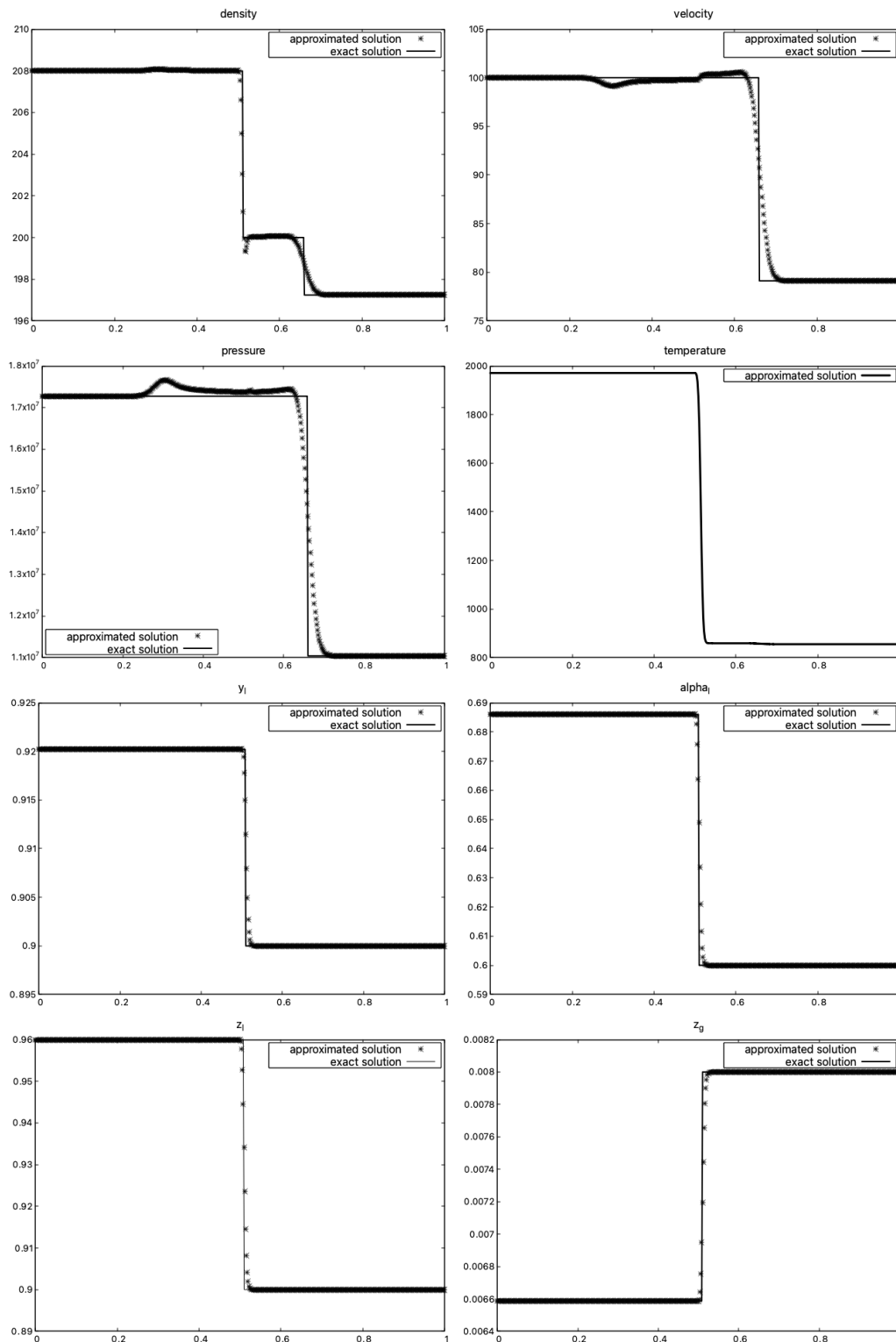


FIGURE 3.11 – Mélange de deux gaz raides avec un liquide NASG-CK. De gauche à droite et de haut en bas, profils de densité, vitesse, pression, température, y_l , α_l , z_l et z_g .

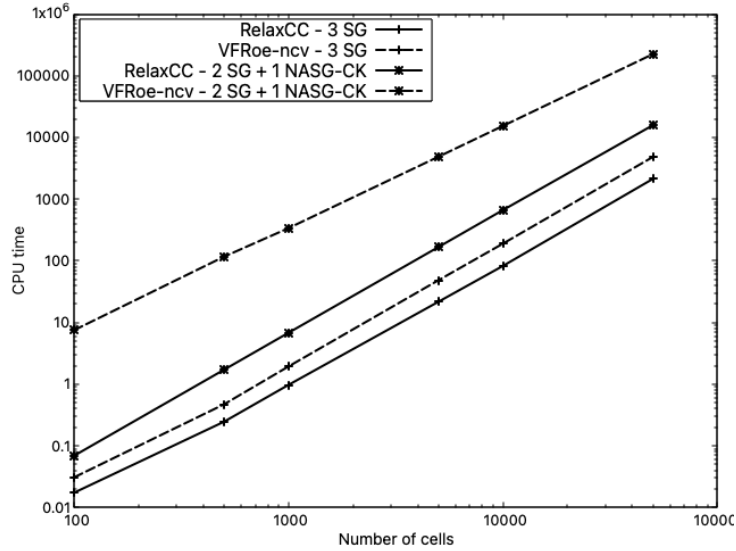


FIGURE 3.12 – Comparaison des coûts CPU par rapport au nombre de cellules pour les schémas de VFRoe-ncv et de relaxation, sur le problème de Riemann à basse pression.

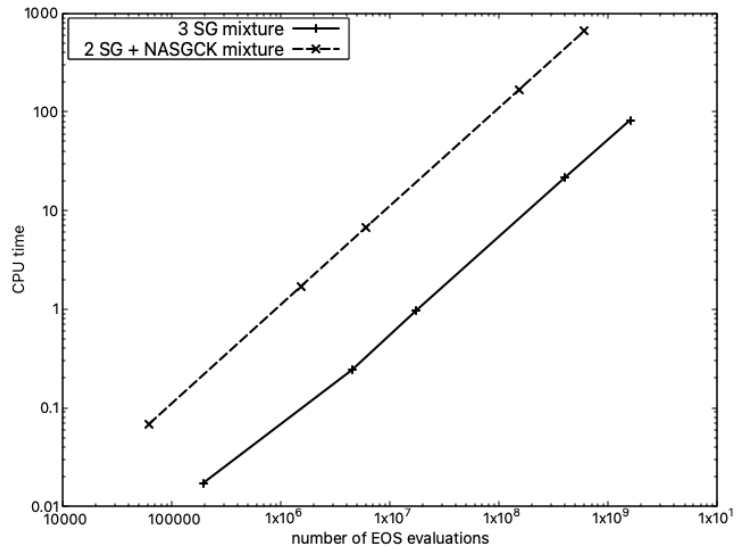


FIGURE 3.13 – Comparaison des coûts CPU par rapport au nombre d'évaluations de lois d'état sur le problème de Riemann à basse pression approché par le schéma de relaxation.

est fixée à 0.45. Le temps final est $t = 10^{-4}$. Le terme source Γ_1 requiert une échelle de temps plus petite que 5.10^3 afin d'éviter l'apparition d'états non admissibles.

On observe sur la figure 3.14 un comportement attendu des solutions par rapport aux échelles de temps λ . En effet, la propriété de monotonie des solutions du système dynamique (3.12) est retrouvée. Plus λ augmente, plus la solution s'éloigne de la solution hors-équilibre, qui correspond à l'absence de termes sources ($\lambda = 0$). C'est donc mathématiquement et physiquement pertinent. Néanmoins, la limite supérieure de λ nous empêche d'obtenir des solutions plus proches de l'équilibre. Cela est dû à l'apparition d'états non admissibles au voisinage de la discontinuité de contact, comme on l'observe sur le tracé de la vitesse, certainement la variable la plus sensible sur ce cas test. Finalement, les états constants gauche et droite sur les fractions nous permettent d'évaluer la "distance" à l'équilibre. Au temps final $T = 0.001$ et pour $\lambda = 5.10^3$, le système a fait approximativement 40% du trajet vers l'équilibre. C'est cohérent avec les observations de la partie 3.1.3.

Concernant Γ_2 , la figure 3.15 illustre le caractère non monotone des solutions pour ce terme source. Par exemple, on peut noter les intersections entre les profils de vitesse pour $\lambda = 1$ et $\lambda = 1.1$. À cause de la forte non linéarité de Γ_2 , il est difficile et peut-être hors d'atteinte de donner des informations quantitatives sur les trajectoires possibles. En comparant ces profils à ceux du terme source Γ_1 , il apparaît clairement que le présent terme source donne des états intermédiaires très complexes. Les comportements sur les profils de densité, vitesse et pression autour du contact sont particulièrement désordonnés. En particulier, cela semble avoir des conséquences sur l'état constant droit en pression (pour n'importe quelle valeur de λ), qui sont loins de ceux obtenus pour le terme source du type BGK. On peut néanmoins supposer que la non monotonie est la cause et que ce phénomène s'atténue en temps long. Enfin, les états constants droit et gauche de y_l illustrent que le temps d'atteinte vers l'équilibre dépend de l'état initial (en supposant que leurs évolutions sont monotones dans ce cas, ce qui semble raisonnable).

3.4 Conclusion

Ce chapitre se concentre sur la simulation numérique d'un modèle homogène de relaxation pour un écoulement diphasique avec une phase contenant deux composants miscibles. Le travail effectué sur la partie convective aboutit à une préférence du schéma de relaxation pour des raisons de temps de calcul et de robustesse, bien que les résultats de

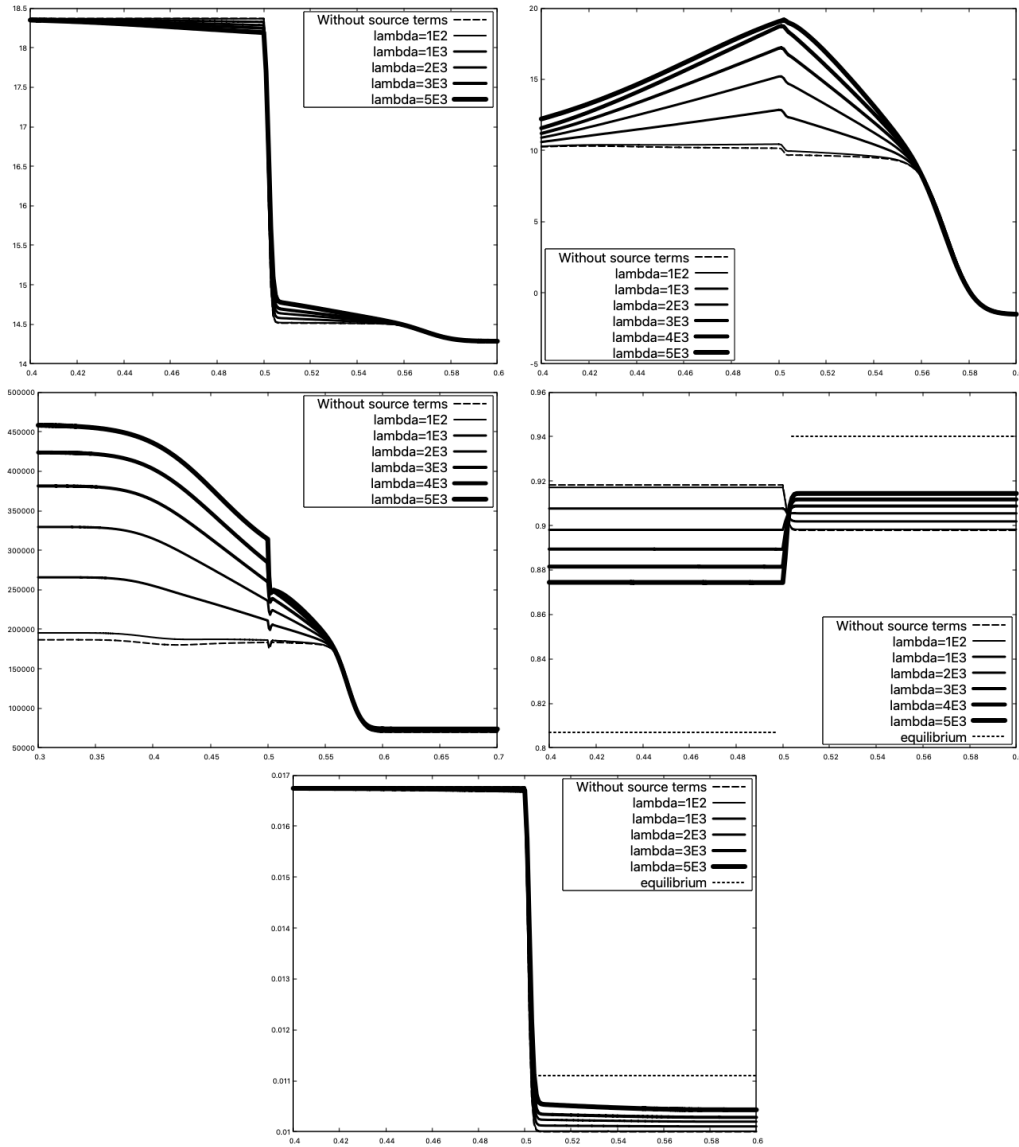


FIGURE 3.14 – Simulation globale pour un mélange de trois gaz raides à basse pression, avec les termes sources Γ_1 de type BGK. De haut en bas et de gauche à droite, comparaison de l'influence des temps de relaxation sur la densité, vitesse, pression, y_i et α_i .

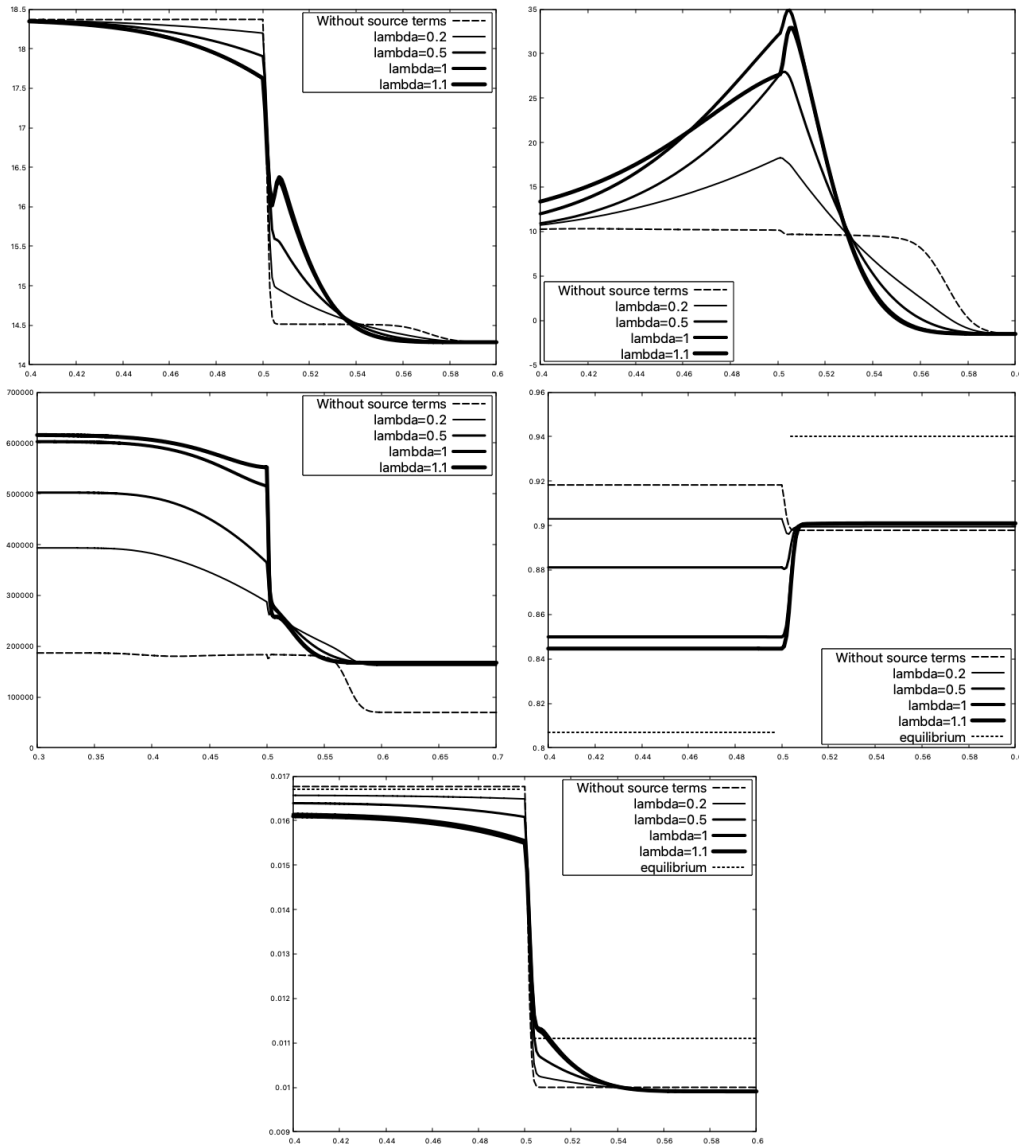


FIGURE 3.15 – Simulation globale pour un mélange de trois gaz raides à basse pression, avec les termes sources Γ_2 en gradient d'entropie. De haut en bas et de gauche à droite, comparaison de l'influence des temps de relaxation sur la densité, vitesse, pression, y_l et α_l .

convergence soient similaires avec le schéma de VFRoe-ncv avec correction entropique. Le calcul de l'énergie interne joue un rôle majeur, c'est pourquoi les algorithmes ont été détaillés. Deuxièmement, l'équilibre thermodynamique d'un tel mélange et la relaxation vers ce dernier sont analysés. La bonne définition des fractions d'équilibre est fondamentale. On aborde notamment les équilibres avec disparition de phases. Deux types de termes sources sont présentés et comparés. Le terme source de type BGK fournit une simulation efficace dès que l'on peut calculer l'équilibre, qui reste une contrainte forte. De plus, il requiert des temps de relaxations égaux. Le terme source en gradient d'entropie est plus polyvalent grâce à des échelles de temps pouvant être distinctes, mais son analyse est très difficile. En conséquence, l'approximation numérique est un sujet à part entière. Ces avantages et inconvénients sont illustrés dans les simulations globales.

3.5 Annexe : Calcul de l'équilibre pour un mélange de trois gaz raides

Soit (τ, e, y_g) un état donné. On considère que l'équilibre Y_{eq} est atteint à l'intérieur de $[0, 1]^4$, tel qu'il est caractérisé par (3.8). En suivant [2, annexe B], on caractérise l'équilibre en considérant l'équilibre thermique, puis mécanique et enfin l'égalité entre les potentiels chimiques. Selon la définition (1.23) des températures de gaz raides, la somme des températures phasiques pondérées par les fractions de masse donne

$$\sum_{k=l,g,v} y_k C_k T_k = e - \sum_k y_k Q_k - \sum_k \alpha_k \Pi_k \tau, \quad (3.37)$$

où les contraintes de conservation ont été utilisées. L'équilibre thermique $T_l = T_g = T_v = \bar{T}$ permet d'obtenir

$$\bar{T}(y_v, \alpha_v) = \frac{e - Q(y_v) - \Pi(\alpha_v)\tau}{C(y_v)}, \quad (3.38)$$

où $C(y_v) = \sum_k y_k C_k$, $Q(y_v) = \sum_k y_k Q_k$ et $\Pi(\alpha_v) = \sum_k \alpha_k \Pi_k$. En utilisant les contraintes intensives (3.1)-(3.2), on observe que les coefficients $C(y_v)$ et $Q(y_v)$ sont des fonctions de y_v , tandis que $\Pi(\alpha_v)$ dépend seulement de α_v . Alors l'équilibre en température $\bar{T}(y_v, \alpha_v)$ ne dépend plus des fractions d'énergie. Ceci permet de séparer le calcul en deux étapes : on détermine d'abord le couple (y_v, α_v) puis les fractions d'énergie (z_l, z_g) .

Regardons à présent l'équilibre mécanique, afin d'exprimer α_v en fonction de y_v . En effet, l'équilibre mécanique correspond à $p_l - (p_g + p_v) = 0$ ou de façon équivalente à $\alpha_v(1 -$

$\alpha_v)[p_l - (p_g + p_v)] = 0$. Alors, on utilise le fait que $F_{y_v}(\alpha_v) = \alpha_v(1 - \alpha_v)[p_l - (p_g + p_v)]$ est un polynôme de degré deux en α_v

$$F_{y_v}(\alpha_v) = A_F \alpha_v^2 + B_F \alpha_v + C_F, \quad (3.39)$$

avec pour coefficients

$$\begin{aligned} A_F &= (\beta + 1)\Pi_0, \\ B_F &= -\Pi_0(\beta_v + \beta_g + 1) - \beta(\rho(e - Q) - \Pi_l), \\ C_F &= (\beta_v + \beta_g)(\rho(e - Q) - \Pi_l), \\ \Pi_0 &= \Pi_g + \Pi_v - \Pi_l, \\ \beta_k &= (\gamma_k - 1)C_k y_k, \\ \beta &= \sum_k \beta_k. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Il reste à déterminer la racine α_v de F_{y_v} , qui dépend uniquement de y_v , selon la définition des coefficients (3.40). Dans le but d'assurer la positivité de la température de mélange $\bar{T}(y_v, \alpha_v)$, cette fraction α_v doit vérifier certaines contraintes. En considérant que $\Pi_g = 0$, $\Pi_v < 0$ et $\Pi_v - \Pi_l < 0$ (ce qui est par exemple le cas pour les données pratiques données en table 1.1), la positivité de la température est équivalente à $\rho(e - Q(y_v) - \Pi(y_v)) \geq 0$, qui donne

$$\alpha_v \geq \frac{\rho(e - Q) - \Pi_l}{\Pi_v - \Pi_l} =: \delta(y_v).$$

On doit alors chercher $\alpha_v \in [\alpha_{v,inf}; 1]$, avec $\alpha_{v,inf} = \max(0, \min(1, \delta(y_v))) \in [0; 1]$.

Généralement, l'équation $F_{y_v}(x) = 0$ n'admet pas de solution dans cet intervalle. Si cela arrive, on doit déterminer quel cas limite $\alpha_v = \alpha_{v,inf}$ ou $\alpha_v = 1$ maximise l'entropie.

Grâce à la concavité de $\alpha_v \mapsto s$, il suffit d'étudier le signe de $\frac{\partial s}{\partial \alpha_v}$ sur le bord, ce signe étant le même que celui de $\Delta p = p_v + p_g - p_l$. On a alors

- Si $\lim_{\alpha_v \rightarrow \alpha_{v,inf}} \Delta p(\alpha_v) < 0$, $\alpha_v = \alpha_{v,inf}$ correspond à un état stable,
- Si $\lim_{\alpha_v \rightarrow 1} \Delta p(\alpha_v) > 0$, $\alpha_v = 1$ correspond à un état stable constitué de gaz uniquement.

Dans les simulation numériques, on choisit de résoudre d'abord $F_{y_v}(x) = 0$, puis de vérifier si on a une unique solution α_v dans $[0; 1]$ telle que $\bar{T}(y_v, \alpha_v) \geq 0$, et sinon on considère les cas limites.

Enfin, l'équilibre chimique $\mu_l = \mu_v$ permet de déterminer $(\bar{y}_v, \bar{\alpha}_v)$ de façon implicite,

grâce à F_{y_v} . On peut déjà définir $y_{v,max} \in [0; 1 - y_g]$ comme la plus grande fraction de masse de vapeur telle que la température est positive.

Puis on doit résoudre l'équation suivante sur $[0; y_{v,max}]$

$$\Delta\mu(y_v) = \Delta\mu(y_v, \alpha_v(y_v)) = \mu_l(y_v, \alpha_v(y_v)) - \mu_v(y_v, \alpha_v(y_v)) = 0, \quad (3.41)$$

où

$$\begin{cases} \mu_l(y_v, \alpha_v(y_v)) = Q_l + C_l + \bar{T}(y_v, \alpha_v) \left(\gamma_l - \ln(C_l T) - \frac{s_l^0}{C_l} - (\gamma_l - 1) \ln\left(\frac{(1-\alpha_v)\tau}{1-y_v-y_g}\right) \right) \\ \mu_v(y_v, \alpha_v(y_v)) = Q_v + C_v + \bar{T}(y_v, \alpha_v) \left(\gamma_v - \ln(C_v T) - \frac{s_v^0}{C_v} - (\gamma_v - 1) \ln\left(\frac{\alpha_v \tau}{y_v}\right) \right) \end{cases},$$

et $\alpha_v(y_v)$ est la solution de $F_{y_v}(x) = 0$. Comme précédemment, il est possible de ne pas trouver de solutions $y_v \in]0; y_{v,max}[$ et α_v à cette équation. On utilise cette fois la concavité de $y_v \rightarrow s$ et le fait que le signe de $\frac{\partial s}{\partial y_v}$ est celui de $\Delta\mu$ pour étudier les cas limites :

- Si $\lim_{y_v \rightarrow 0} \Delta\mu(y_v) < 0$, $y_v = 0$ correspond à un état stable, avec du liquide et du gaz inerte *i.e.* $y_l = 1 - y_g$.
- Si $\lim_{y_v \rightarrow y_{v,max}} \Delta\mu(y_v) > 0$, $y_v = y_{v,max}$ correspond à un état stable avec seulement des gaz *i.e.* $y_l = 0$.

Finalement, une fois que $(\bar{y}_v, \bar{\alpha}_v)$ est déterminé, on peut calculer (\bar{z}_v, \bar{z}_g) avec les relations suivantes

$$\bar{z}_k = \frac{(\bar{T}(\bar{y}_v, \bar{\alpha}_v) C_k + Q_k) \bar{y}_k + \Pi_k \bar{\alpha}_k \tau}{e}. \quad (3.42)$$

SIMULATION D'UN MODÈLE MULTIVITESSES POUR UN MÉLANGE DIPHASIQUE HYBRIDE

Ce chapitre s'intéresse à la simulation d'un modèle d'écoulements diphasiques hybrides. La composition du fluide est la même qu'au chapitre précédent (et correspond à un mélange d'eau liquide, de vapeur d'eau et d'air ambiant), mais le modèle est du type multivitesse barotrope et est étudié dans [45].

Ces modèles requièrent des lois de fermeture afin de poursuivre leur étude et de les approcher numériquement. On considère ici les fermetures de la référence précédente [45] pour la vitesse interfaciale et les termes de pression.

On notera la phase liquide (l), la phase gazeuse est composée de vapeur d'eau notée (v) et d'air ambiant noté (g), ce dernier composant étant inerte (il n'échange pas de matière avec les autres). La fraction statistique du champ k est notée $\alpha_k \in (0, 1)$. L'hypothèse de miscibilité se traduit par la relation

$$\alpha_v = \alpha_g = 1 - \alpha_l. \quad (4.1)$$

Ainsi, le seul transfert de masse possible est entre l'eau liquide et sa vapeur. Néanmoins, on ne modélisera pas ce type de transfert dans ce travail.

Le modèle obtenu est un système de sept équations comprenant des termes de couplages non conservatifs. Ses valeurs propres sont réelles et il est faiblement hyperbolique, avec des conditions classiques de non-résonance. Des termes sources sont adjoints, modélisant des transferts mécaniques incluant les contributions de trainée.

La simulation de ce type de modèles est un défi scientifique d'actualité, en particulier à cause de certaines difficultés théoriques. Principalement, le nombre de champs caractéristiques peut être grand et ces champs sont a priori non ordonnés. La définition des

termes non conservatifs au sens faible est subtile. On peut trouver des études numériques dans le cas diphasique avec splitting convection-termes sources [17, 32, 42], en triphasique immiscible barotrope [9] et plus récemment en diphasique barotrope avec une approche par décomposition acoustique-transport [1].

Le cœur du chapitre est l'application du schéma de relaxation développé ces dix dernières années [19, 22, 65], qui est spécialement conçu pour ces modèles multifluides. Ces travaux mènent à un schéma entropique pour un fluide immiscible avec un nombre quelconque de phases. De plus, il est robuste pour les régimes à basses fractions et performant en coût de calcul.

La structure du chapitre est la suivante. Dans un premier temps, on rappelle le cadre en présentant le modèle et ses propriétés. La seconde partie est principalement dédiée à la présentation du schéma de relaxation, et enfin la dernière est consacrée aux simulations numériques. On présentera notamment des premiers résultats prenant en compte des termes sources modélisant les relaxation en vitesses et en pression.

4.1 Modèle

Dans le cadre de la dimension un, le système convectif est constitué des systèmes phasiques d'équations aux dérivées partielles suivants

$$\begin{cases} \partial_t \alpha_l + u_l \partial_x \alpha_l = 0, \\ \partial_t (\alpha_l \rho_l) + \partial_x (\alpha_l \rho_l u_l) = 0, \\ \partial_t (\alpha_l \rho_l u_l) + \partial_x (\alpha_l \rho_l u_l^2 + \alpha_l p_l(\rho_l)) - (p_v(\rho_v) + p_g(\rho_g)) \partial_x \alpha_l = 0, \end{cases} \quad (4.2)$$

et pour $k = g, v$:

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k \rho_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) = 0, \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k(\rho_k)) + p_k(\rho_k) \partial_x \alpha_l = 0. \end{cases} \quad (4.3)$$

Pour $k \in \{l, v, g\}$, $\rho_k > 0$ et $u_k \in \mathbb{R}$ sont respectivement la densité et la vitesse du champ k . La pression du champ k dépend uniquement de la densité correspondante et est donnée par une équation d'état barotrope (voir [16, 45]) $p_k : \rho_k \mapsto p_k(\rho_k)$, en considérant que $p'_k(\rho_k) > 0$. Finalement, $\alpha_k \in (0, 1)$ est la fraction statistique du champ k .

En considérant la contrainte volumique (4.1), le système complet avec termes sources

contient sept équations et s'écrit sous la forme compacte

$$\partial_t \mathcal{W} + \partial_x f(\mathcal{W}) + c(\mathcal{W}) \partial_x \mathcal{W} = s(\mathcal{W}), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad (4.4)$$

où

$$\mathcal{W} = \begin{pmatrix} \alpha_l \\ \alpha_l \rho_l \\ \alpha_l \rho_l u_l \\ \alpha_v \rho_v \\ \alpha_v \rho_v u_v \\ \alpha_g \rho_g \\ \alpha_g \rho_g u_g \end{pmatrix}, \quad f(\mathcal{W}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_l \rho_l u_l \\ \alpha_l \rho_l u_l^2 + \alpha_l p_l(\rho_l) \\ \alpha_v \rho_v u_v \\ \alpha_v \rho_v u_v^2 + \alpha_v p_v(\rho_v) \\ \alpha_g \rho_g u_g \\ \alpha_g \rho_g u_g^2 + \alpha_g p_g(\rho_g) \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

et

$$c(\mathcal{W}) = \begin{pmatrix} u_l \\ 0 \\ -(p_v + p_g) \\ 0 \\ p_v \\ 0 \\ p_g \end{pmatrix} \partial_x \alpha_l, \quad s(\mathcal{W}) = \begin{pmatrix} K(p_l - (p_v + p_g)) \\ 0 \\ \sum_{k \neq l} d_{kl}(u_k - u_l) \\ 0 \\ \sum_{k \neq v} d_{kv}(u_k - u_v) \\ 0 \\ \sum_{k \neq g} d_{kg}(u_k - u_g) \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Ces termes sources $s(\mathcal{W})$ ne prennent pas en compte les transferts de masse, et sont choisis selon [45]. Ils contiennent une échelle de temps de relaxation mécanique $K \geq 0$ et des coefficients de traînée (d_{kl}) vérifiant la relation

$$d_{kl} = d_{lk}.$$

Un vecteur d'état \mathcal{W} doit appartenir à l'espace physique

$$\Omega_{\mathcal{W}} = \{\mathcal{W} \in \mathbb{R}^7, \quad 0 < \alpha_l < 1 \text{ et } \alpha_k \rho_k > 0 \text{ pour } k \in \{l, v, g\}\}. \quad (4.7)$$

Proposition 12. *Le système (4.4) est faiblement hyperbolique et admet les valeurs propres suivantes*

$$\sigma_1(\mathcal{W}) = u_l, \quad \sigma_{2,3}(\mathcal{W}) = u_l \pm c_l, \quad \sigma_{4,5}(\mathcal{W}) = u_v \pm c_v, \quad \sigma_{6,7}(\mathcal{W}) = u_g \pm c_g,$$

où $c_k(\rho_k) = \sqrt{p'_k(\rho_k)}$ est la vitesse du son du champ k . Tous les champs caractéristiques sont vraiment non linéaires à l'exception de σ_1 qui est linéairement dégénéré. L'ensemble des vecteurs propres engendre \mathbb{R}^7 si, et seulement si,

$$\alpha_l \neq 0, \quad \alpha_v = \alpha_g \neq 0, \quad |u_k - u_l| \neq c_k(\rho_k) \quad \text{pour } k = g, v. \quad (4.8)$$

Remarque 9. $\alpha_k = 0$ doit être compris dans le sens $\alpha_k \rightarrow 0$. Ces régimes à basses fractions sont importants dans les applications pratiques. Il est déjà connu dans les situations immiscibles que le schéma de relaxation de Suliciu a de très bon résultats comparé à des schémas standards [19, 65].

Remarque 10. La perte d'hyperbolicité (4.8) peut être due à la présence d'une phase évanescence $\alpha_k \rightarrow 0$, ou d'une interaction entre l'onde de couplage associée à $\sigma_1 = u_l$ et une onde acoustique $u_k \pm c_k$. Cette seconde condition de non-résonance ne doit pas apparaître dans les applications industrielles concernées, où les écoulements ont de faibles vitesses relatives subsoniques, i.e. un nombre de Mach bien inférieur à un :

$$M_k = \frac{|u_l - u_k|}{c_k(\rho_k)} \ll 1 \quad \text{pour } k = g, v.$$

Définissons l'énergie totale spécifique du champ k par $E_k = e_k + u_k^2/2$, où l'énergie interne spécifique vérifie $e'_k(\rho_k) = p_k(\rho_k)/\rho_k^2$. On peut démontrer que la fonction $\mathcal{W} \mapsto (\alpha_k \rho_k E_k)(\mathcal{W})$ est (non strictement) convexe (voir [66]). Les solutions faibles entropiques du système (4.4) sont les solutions faibles qui vérifient l'inégalité suivante au sens faible

$$\partial_t \left(\sum_{k=l,g,v} \alpha_k \rho_k E_k \right) + \partial_x \left(\sum_{k=l,g,v} (\alpha_k \rho_k E_k u_k + \alpha_k p_k(\rho_k) u_k) \right) \leq 0. \quad (4.9)$$

Pour les solutions régulières de (4.4), (4.9) est une égalité.

4.2 Schémas numériques

En suivant [19, 65], on compare le schéma de relaxation au schéma de Rusanov non conservatif [32], qui est (à notre connaissance) le seul schéma disponible pour ce type de modèle multiphasique.

On rappelle les notations usuelles pour les schémas volumes finis. On considère un maillage régulier constitué de cellules $(x_{i-\frac{1}{2}}; x_{i+\frac{1}{2}})$, Δt est le pas de temps et Δx est la

longueur de la cellule. La solution est approchée sur la cellule j au temps $t^n = n\Delta t$ par \mathbb{W}_j^n , où \mathbb{W} est l'analogue discret du vecteur des variables conservatives \mathcal{W} .

4.2.1 Schéma de Rusanov non conservatif

Ce schéma nécessite une adaptation pour prendre en compte les termes non conservatifs du système (4.4). Dans le cas général, une adaptation de schéma volumes finis à un cadre non conservatif peut mener à des difficultés numériques, voir [46]. Ici, puisque les termes concernés sont uniquement actifs dans le champ linéairement dégénéré u_l et qu'ils sont bien définis (voir [19, 2.2]), le schéma de Rusanov suivant convient. **Dans cette sous-partie, on notera $\alpha = \alpha_l$ pour des raisons de lisibilité.**

$$\begin{aligned} \alpha_j^{n+1} = & \alpha_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_l)_j^n (\alpha_{j+\frac{1}{2}}^n - \alpha_{j-\frac{1}{2}}^n) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} r_{j+\frac{1}{2}} (\alpha_{j+1}^n - \alpha_j^n) - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} r_{j-\frac{1}{2}} (\alpha_j^n - \alpha_{j-1}^n), \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$r_j = \max_{k=l,g,v} (|(u_l)_j^n|, |(u_k)_j^n| + |(c_k)_j^n), \quad r_{j+\frac{1}{2}} = \max(r_j, r_{j+1}), \quad (4.11)$$

$$(\mathbb{W}_k)_j^{n+1} = (\mathbb{W}_k)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{j+\frac{1}{2}}^n - F_{j-\frac{1}{2}}^n) + \Phi \frac{\Delta t}{\Delta x} (\Pi_k)_j^n (\alpha_{j+\frac{1}{2}}^n - \alpha_{j-\frac{1}{2}}^n), \quad (4.12)$$

où

$$\alpha_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{\alpha_{j+1}^n + \alpha_j^n}{2}, \quad \Phi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} \Pi_k = p_k & \text{si } k = v, g \\ \Pi_k = -p_v - p_g & \text{si } k = l \end{cases} \quad (4.13)$$

et

$$(F_k)_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{2} ((\mathbb{H}_k)_j^n + (\mathbb{H}_k)_{j+1}^n) - \frac{1}{2} r_{j+\frac{1}{2}} ((\mathbb{W}_k)_{j+1}^n - (\mathbb{W}_k)_j^n), \quad (4.14)$$

où \mathbb{W}_k est le vecteur des variables conservatives et \mathbb{H}_k est le flux physique associé à la phase k

$$\mathbb{W}_k = \begin{pmatrix} \alpha_k \rho_k \\ \alpha_k \rho_k u_k \end{pmatrix}, \quad \mathbb{H}_k = \begin{pmatrix} \alpha_k \rho_k u_k \\ \alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p_k \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

4.2.2 Schéma de relaxation type Suliciu

Les solutions de (4.4) sont formellement retrouvées à la limite des solutions du système augmenté suivant, comprenant des inconnues supplémentaires \mathcal{T}_k , dans le régime $\epsilon \rightarrow 0$

$$\begin{cases} \partial_t \alpha_l + u_l \partial_x \alpha_l = 0, \\ \partial_t (\alpha_l \rho_l) + \partial_x (\alpha_l \rho_l u_l) = 0, \\ \partial_t (\alpha_l \rho_l u_l) + \partial_x (\alpha_l \rho_l u_l^2 + \alpha_l \pi_v(\tau_l, \mathcal{T}_l)) \\ \quad - (\pi_v(\tau_v, \mathcal{T}_v) + \pi_g(\tau_g, \mathcal{T}_g)) \partial_x \alpha_l = 0, \\ \partial_t (\alpha_l \rho_l \mathcal{T}_l) + \partial_x (\alpha_l \rho_l \mathcal{T}_l u_l) = \frac{1}{\epsilon} \alpha_l \rho_l (\tau_l - \mathcal{T}_l), \end{cases} \quad (4.16)$$

et pour $k = g, v$:

$$\begin{cases} \partial_t (\alpha_k \rho_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k) = 0, \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k u_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k \pi_k(\tau_k, \mathcal{T}_k)) + \pi_k(\tau_k, \mathcal{T}_k) \partial_x \alpha_l = 0, \\ \partial_t (\alpha_k \rho_k \mathcal{T}_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k \mathcal{T}_k u_k) = \frac{1}{\epsilon} \alpha_k \rho_k (\tau_k - \mathcal{T}_k), \end{cases} \quad (4.17)$$

où, en notant $\tau_k = 1/\rho_k$ le volume spécifique du champ k , on introduit les lois de pression linéarisées

$$\pi_k(\tau_k, \mathcal{T}_k) = P_k(\mathcal{T}_k) + a_k^2(\mathcal{T}_k - \tau_k), \quad k = l, g, v,$$

où $\tau \mapsto P_k(\tau) = p_k(\tau^{-1})$ et $a_k \in \mathbb{R}^+$ est un coefficient phasique de relaxation.

Le schéma de relaxation de Suliciu consiste en la construction d'un solveur de Riemann exact pour la partie convective du système (4.16)-(4.17), qui est plus facile à résoudre grâce à ses champs uniquement linéairement dégénérés. De telles solutions de Riemann ont été calculées dans [19, 18] pour un écoulement diphasique et ont été étendues pour des mélanges immiscibles barotropes dans [65].

$$\alpha_g(t=0) := 1 - \alpha_l(t=0) - \alpha_v(t=0).$$

L'extension au cas du modèle barotrope diphasique à trois champs (4.4) est relativement directe. Elle consiste à résoudre l'équation de transport pour α_l tandis que $\alpha_g = \alpha_v$ est calculée en imposant l'initialisation

$$\alpha_g(t=0) = \alpha_v(t=0) := 1 - \alpha_l(t=0).$$

Puisque dans les cas immiscibles et miscibles, les fractions α_k vérifient l'équation de transport

$$\partial_t \alpha_k + u_l \partial_x \alpha_k = 0,$$

l'expression de la solution de Riemann reste inchangée. Donnons à présent la structure du système relaxé (4.16)-(4.17), qui s'écrit sous la forme compacte suivante

$$\partial_t \mathcal{U} + \partial_x \mathbf{g}(\mathcal{U}) + \mathbf{c}(\mathcal{U}) \partial_x \mathcal{U} = \frac{1}{\epsilon} \mathcal{R}(\mathcal{U}), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad (4.18)$$

où $\mathcal{U} \in \Omega_{\mathcal{U}} \subset \mathbb{R}^{10}$ est le vecteur de relaxation des variables conservatives, tel que $\mathcal{U} = (\alpha, \alpha_l \rho_l, \alpha_l \rho_l u_l, \alpha_v \rho_v, \alpha_v \rho_v u_v, \alpha_g \rho_g, \alpha_g \rho_g u_g, \alpha_l \rho_l \mathcal{T}_l, \alpha_v \rho_v \mathcal{T}_v, \alpha_g \rho_g \mathcal{T}_g)^T$, et où

$$\mathbf{g}(\mathcal{U}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_l \rho_l u_l \\ \alpha_l \rho_l u_l^2 + \alpha_l \pi_l \\ \alpha_v \rho_v u_v \\ \alpha_v \rho_v u_v^2 + \alpha_v \pi_v \\ \alpha_g \rho_g u_g \\ \alpha_g \rho_g u_g^2 + \alpha_g \pi_g \\ \alpha_l \rho_l u_l \mathcal{T}_l \\ \alpha_v \rho_v u_v \mathcal{T}_v \\ \alpha_g \rho_g u_g \mathcal{T}_g \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}(\mathcal{U}) = \begin{pmatrix} u_l \\ 0 \\ -(\pi_v + \pi_g) \\ 0 \\ \pi_v \\ 0 \\ \pi_g \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \partial_x \alpha_l, \quad \mathcal{R}(\mathcal{U}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \alpha_l \rho_l (\mathcal{T}_l - \mathcal{T}_l) \\ \alpha_v \rho_v (\mathcal{T}_v - \mathcal{T}_v) \\ \alpha_g \rho_g (\mathcal{T}_g - \mathcal{T}_g) \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Proposition 13. *La partie convective du système de relaxation (4.18) est faiblement hyperbolique et admet les valeurs propres suivantes*

$$\sigma_{1,8,9,10}(\mathcal{W}) = u_l, \quad \sigma_{2,3}(\mathcal{W}) = u_l \pm a_l \tau_l, \quad \sigma_{4,5}(\mathcal{W}) = u_v \pm a_v \tau_v, \quad \sigma_{6,7}(\mathcal{W}) = u_g \pm a_g \tau_g.$$

Tous les champs caractéristiques sont linéairement dégénérés. Les vecteurs propres associés engendrent \mathbb{R}^7 si, et seulement si

$$\alpha_l \neq 0, \quad \alpha_v = \alpha_g \neq 0, \quad |u_k - u_l| \neq a_k \tau_k \quad \text{pour } k = g, v. \quad (4.20)$$

Afin de résoudre numériquement ce système de relaxation, on utilise une méthode à pas fractionnaires. La première étape avance en temps en utilisant la solution exacte pour la partie convective (4.16)-(4.17). La seconde étape consiste en une relaxation instantanée

vers le système à l'équilibre (4.4) en imposant $\mathcal{T}_k = \tau_k$ dans la solution obtenue à la première étape. Le schéma peut s'écrire sous forme non conservative (voir [65] pour des détails).

Rappelons que \mathbb{W} désigne le vecteur des variables conservatives discrètes du système à l'équilibre, et notons \mathbb{U} l'analogue discret du vecteur \mathcal{U} des variables conservatives du système relaxé. Les ensembles $\Omega_{\mathbb{W}} \subset \mathbb{R}^7$ et $\Omega_{\mathbb{U}} \subset \mathbb{R}^{10}$ sont respectivement les domaines de définition de ces vecteurs. Le schéma est le suivant

$$\mathbb{W}_j^{n+1} = \mathbb{W}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{F}^-(\mathbb{W}_j^n, \mathbb{W}_{j+1}^n) - \mathbf{F}^+(\mathbb{W}_{j-1}^n, \mathbb{W}_j^n)), \quad (4.21)$$

où Δt doit vérifier la condition CFL suivante

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max_{k \in \{l, g, v\}} \max_{j \in \mathbb{Z}} \max\{|(u_k - a_k \tau_k)_j^n|, |(u_k + a_k \tau_k)_j^n|\} < \frac{1}{2}. \quad (4.22)$$

Les coefficients de relaxation phasiques a_k doivent vérifier la condition de Whitham (d'autres conditions seront précisées par la suite). Les flux numériques \mathbf{F}^- et \mathbf{F}^+ sont

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^-(\mathbb{W}_L, \mathbb{W}_R) &= \mathcal{P}\mathbf{g}(\mathcal{W}_R(0^-; \mathcal{M}(\mathbb{W}_L), \mathcal{M}(\mathbb{W}_R))) + \mathcal{P}\mathbf{D}^*(\mathcal{M}(\mathbb{W}_L), \mathcal{M}(\mathbb{W}_R))\mathbf{1}_{\{u_l^* < 0\}}, \\ \mathbf{F}^+(\mathbb{W}_L, \mathbb{W}_R) &= \mathcal{P}\mathbf{g}(\mathcal{W}_R(0^+; \mathcal{M}(\mathbb{W}_L), \mathcal{M}(\mathbb{W}_R))) - \mathcal{P}\mathbf{D}^*(\mathcal{M}(\mathbb{W}_L), \mathcal{M}(\mathbb{W}_R))\mathbf{1}_{\{u_l^* > 0\}}, \end{aligned}$$

où \mathcal{W}_R est la solution exacte du problème de Riemann du problème de relaxation, \mathbf{D}^* correspond à la partie non conservative du flux [65, Def 3.1] et est

$$\mathbf{D}^*(\mathbb{U}_L, \mathbb{U}_R) = (u_l^* \Delta \alpha_l, 0, 0, 0, -(\pi_v + \pi_g) \Delta \alpha_l, \pi_v \Delta \alpha_l, \pi_g \Delta \alpha_l, 0, 0, 0)^T \quad (4.23)$$

et les applications \mathcal{P} et \mathcal{M} correspondent au processus de relaxation et sont définies par

$$\begin{aligned} \mathcal{M} : \Omega_{\mathbb{W}} &\longrightarrow \Omega_{\mathbb{U}} \\ (x_i)_{1 \leq i \leq 7} &\mapsto (x_1, \dots, x_7, x_1, 1 - x_1, 1 - x_1). \\ \mathcal{P} : \Omega_{\mathbb{U}} &\longrightarrow \Omega_{\mathbb{W}} \\ (x_i)_{1 \leq i \leq 10} &\mapsto (x_1, \dots, x_7). \end{aligned}$$

On rappelle que la situation hybride présente correspond à [65, Prop. 2.3] où $N = 3$, sans la seconde équation de transport sur α_2 dans cette référence. La seule différence réside dans l'application \mathcal{M} et ses deux dernières coordonnées. Le reste du schéma est identique. Le solveur \mathcal{W}_R est donné en annexe et sa construction est complètement détaillée dans [65, Prop. 3.4 et 3.6].

Donnons finalement les propriétés intéressantes de ce schéma.

Proposition 14. (*Propriétés du schéma de relaxation de Suliciu*)

- *Sous la condition CFL [65, (51)], le schéma préserve les valeurs positives des fractions et densités.*
- *Les discrétisations des masses partielles et moments partiels sont conservatives.*
- *Sous la condition de Whitham sur les paramètres a_k (voir [65, (16)], [8]), la solution numérique satisfait une version discrète de l'inégalité d'entropie (4.9).*

4.2.3 Approximation des termes sources

Dans la résolution globale du système (4.4) avec termes sources, la seconde partie de la méthode à pas fractionnaires consiste en la résolution du système d'équations différentielles ordinaires suivantes

$$\begin{cases} \partial_t \alpha_l = K(p_l - (p_v + p_g)), \\ \partial_t m_k = 0, \\ \partial_t (m_k u_k) = S_k, \end{cases} \quad (4.24)$$

où $m_k = \alpha_k \rho_k$, pour $k = l, g, v$, sur l'intervalle de temps $[t^n; t^{n+1}]$, avec $S_k = \sum_{j \neq k} d_{jk} (u_j - u_k)$.

Soit $\mathbb{W}^{n,*}$ la solution de la partie convective au temps t^{n+1} et notons $\Delta u_{kl} = u_k - u_l$.

Le schéma est semi-implicite et la première étape est

$$\frac{\alpha_l^{n+1} - \alpha_l^{n,*}}{\Delta t} = K^{n,*} \left(p_l \left(\frac{m_l^{n,*}}{\alpha_l^{n+1}} \right) - p_v \left(\frac{m_v^{n,*}}{1 - \alpha_l^{n+1}} \right) - p_g \left(\frac{m_g^{n,*}}{1 - \alpha_l^{n+1}} \right) \right), \quad (4.25)$$

tandis que la seconde est

$$m_k^{n,*} \frac{u_k^{n+1} - u_k^{n,*}}{\Delta t} = \sum_{j \neq k} d_{jk}^{n,*} \Delta u_{jk}^{n+1}, \quad k = l, g, v, \quad (4.26)$$

menant ainsi à un système linéaire d'inconnue $\Delta u^{n+1} = \begin{pmatrix} \Delta u_{lv}^{n+1} \\ \Delta u_{lg}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_l^{n+1} - u_v^{n+1} \\ u_l^{n+1} - u_g^{n+1} \end{pmatrix}$, qui s'écrit

$$(I_2 + \Delta t M) \Delta u^{n+1} = \Delta u^n, \quad (4.27)$$

avec M la matrice inversible définie par

$$M = \begin{pmatrix} \frac{d_{lv}^n}{m_l} + \frac{d_{lv}^n}{m_v} + \frac{d_{vg}^n}{m_v} & \frac{d_{lg}^n}{m_l} - \frac{d_{vg}^n}{m_v} \\ \frac{d_{lv}^n}{m_l} - \frac{d_{vg}^n}{m_g} & \frac{d_{lg}^n}{m_l} + \frac{d_{lg}^n}{m_g} + \frac{d_{vg}^n}{m_g} \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

Finalement, la conservation de la quantité de mouvement totale donne la relation

$$\left(\sum_k m_k^n \right) u_l^{n+1} = \sum_k m_k^n u_k^n + \sum_k m_k^n \Delta u_{lk} \quad (4.29)$$

qui permet de déterminer les vitesses phasiques.

4.3 Résultats numériques

Le schéma de relaxation est comparé au schéma non conservatif de Rusanov [32], qui est à notre connaissance, le seul schéma disponible pour ce type de modèle multiphasique. Dans la suite, on note $\mathbb{U} = (\alpha_l, \rho_l, u_l, \rho_v, u_v, \rho_g, u_g)$ le vecteur des inconnues non conservatives. On présente deux cas tests et on trace les solutions approchées sur un maillage de 100 cellules, ce qui correspond à un maillage réaliste de 10^6 cellules en dimension trois pour des applications industrielles. La CFL est fixée à 0.45.

4.3.1 Cas test 1 : discontinuité de contact

La donnée initiale est la suivante

$$\begin{aligned} \mathbb{U}_L &= (0.1, 3.0, 0.2, 0.3, 1.0, 0.4, 1.0), \\ \mathbb{U}_R &= (0.4, 2.0724212862957074, 0.2, 0.28339834471128433, \\ & 1.4702967632600488, 0.34584269153214842, 1.5879142504747157). \end{aligned} \quad (4.30)$$

On présente les solutions approchées dans la figure 4.1. L'erreur L^1 par rapport au pas d'espace Δx et par rapport au coût de calcul est tracée dans la figure 4.2. Les oscillations classiques sur les ondes acoustiques sont plutôt faibles pour le schéma de relaxation. La

discontinuité de contact est bien moins lissée avec le schéma de relaxation qu'avec le schéma de Rusanov, ce qui suggère une meilleure précision. En effet, la figure 4.2 montre qu'on a besoin de cent fois plus de temps avec le schéma de Rusanov pour atteindre la même erreur qu'avec le schéma de relaxation.

4.3.2 Cas test 2 : phase liquide évanescence avec des chocs

Dans ce cas test, la donnée initiale à gauche n'a pas de liquide, ce qui correspond à $\alpha_l = 0$ (en pratique $\alpha_l = 10^{-10}$). On considère une structure d'ondes choc-contact-choc pour le champ de vapeur, tandis que les autres champs sont juste soumis au contact. La structure est donnée dans la figure 4.3. La donnée initiale est la suivante

$$\begin{aligned} \mathbb{U}_L &= (1.0 \cdot 10^{-10}, 1.0, 0.3, 0.8, 0.5, 0.6, 0.5,), \\ &\quad - 0.66086132955857257, 0.54048985831522922, 1.4101040855979630), \\ \mathbb{U}_R &= (0.8, 2.1958716914805883, 0.3, 0.9, \\ &\quad - 0.49798559025814237, 0.54048985831522922, 1.4101040855979630). \end{aligned} \quad (4.31)$$

Les solutions approchées sur la figure 4.3 donnent une comparaison intéressante. D'une part, le schéma de relaxation suit le contact bien mieux que le schéma de Rusanov et n'oscille pas sur l'état gauche constant, qui correspond à un régime de fraction statistique faible. D'autre part, les états intermédiaires proches du champ de vapeur sont plutôt bien capturés par le schéma de relaxation, même pour un maillage de 100 cellules. Au contraire, on voit que le schéma de Rusanov approxime mal ces états.

4.3.3 Couplage avec les termes sources

La figure 4.4 présente des résultats numériques qui intègrent partie convective (résolue avec le schéma de relaxation) et termes sources. On regarde l'influence des temps de relaxation K concernant les transferts mécaniques uniquement, les coefficients d_{kl} sont fixés à 1.

On observe l'éloignement des solutions de la solution hors équilibre ($K = d_{kl} = 0$) lorsque K augmente. Bien que les différentes solutions s'intersectent et montrent ainsi que l'on n'a pas de propriété de monotonie sur les solutions de l'équation différentielle (4.24), la solution semble se régulariser lorsque K atteint ses plus grandes valeurs.

De plus, on retrouve bien des états à l'équilibre en pression (loi de Dalton : $p_l = p_v + p_g$)

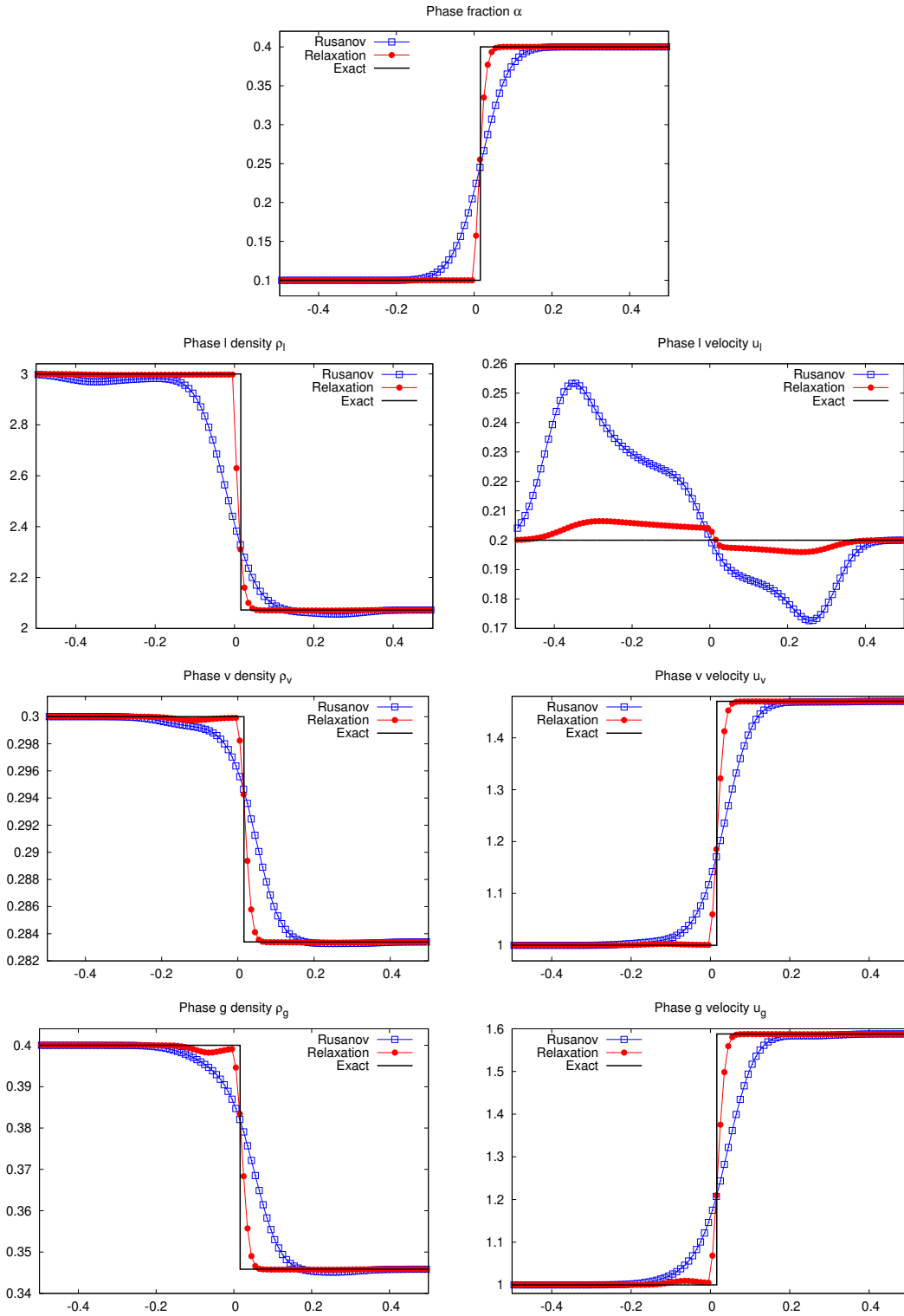


FIGURE 4.1 – Cas test 1 : solution pour 100 mailles à $t = 0.08$. Onde de contact de vitesse $u_I = 0.2$. Donnée initiale donnée dans (4.30).

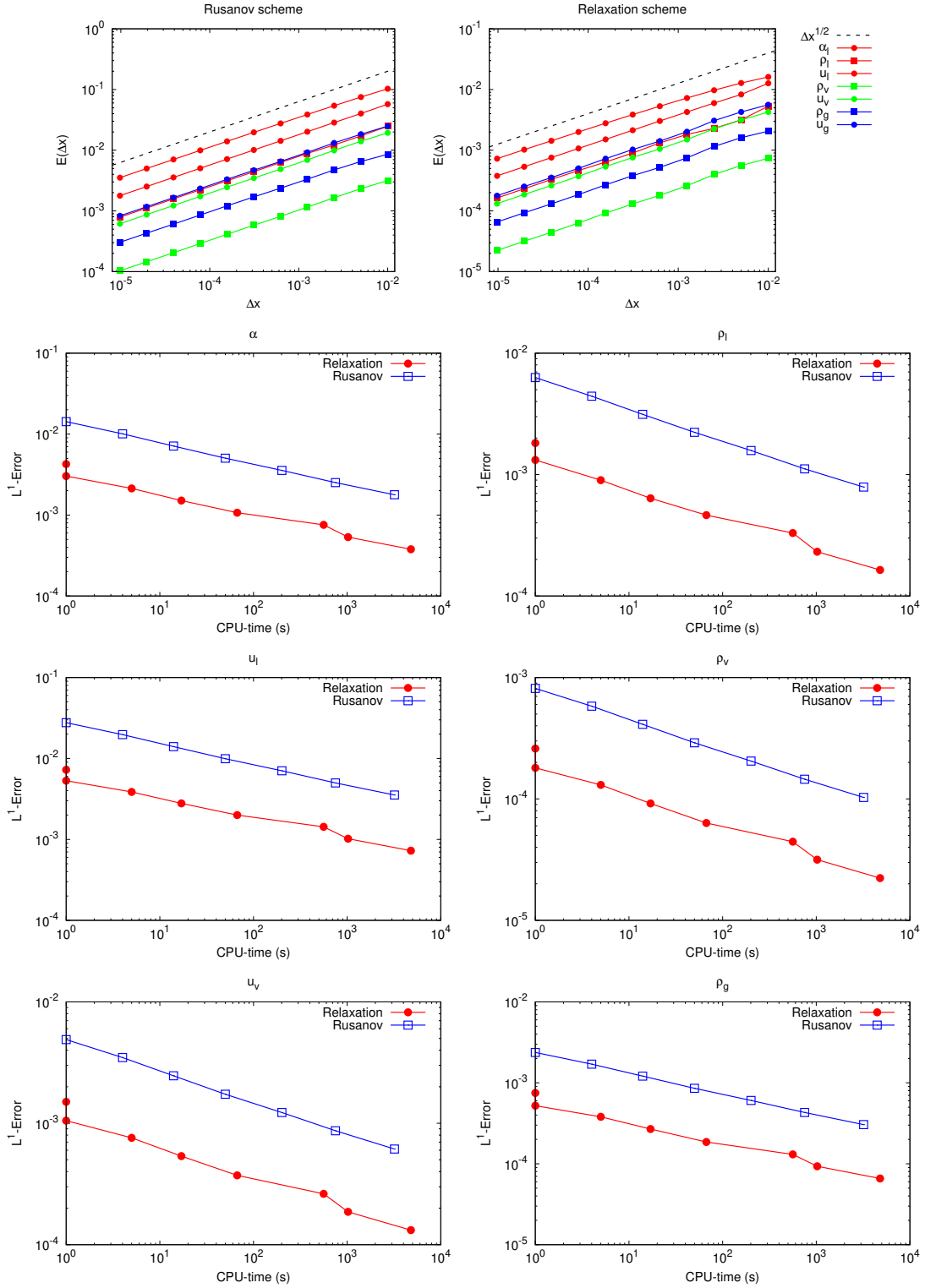


FIGURE 4.2 – Cas test 1 : erreur L^1 par rapport à Δx et erreur L^1 par rapport au coût de calcul. Le tracé de u_g n'est pas représenté, car très proche de celui de u_v .

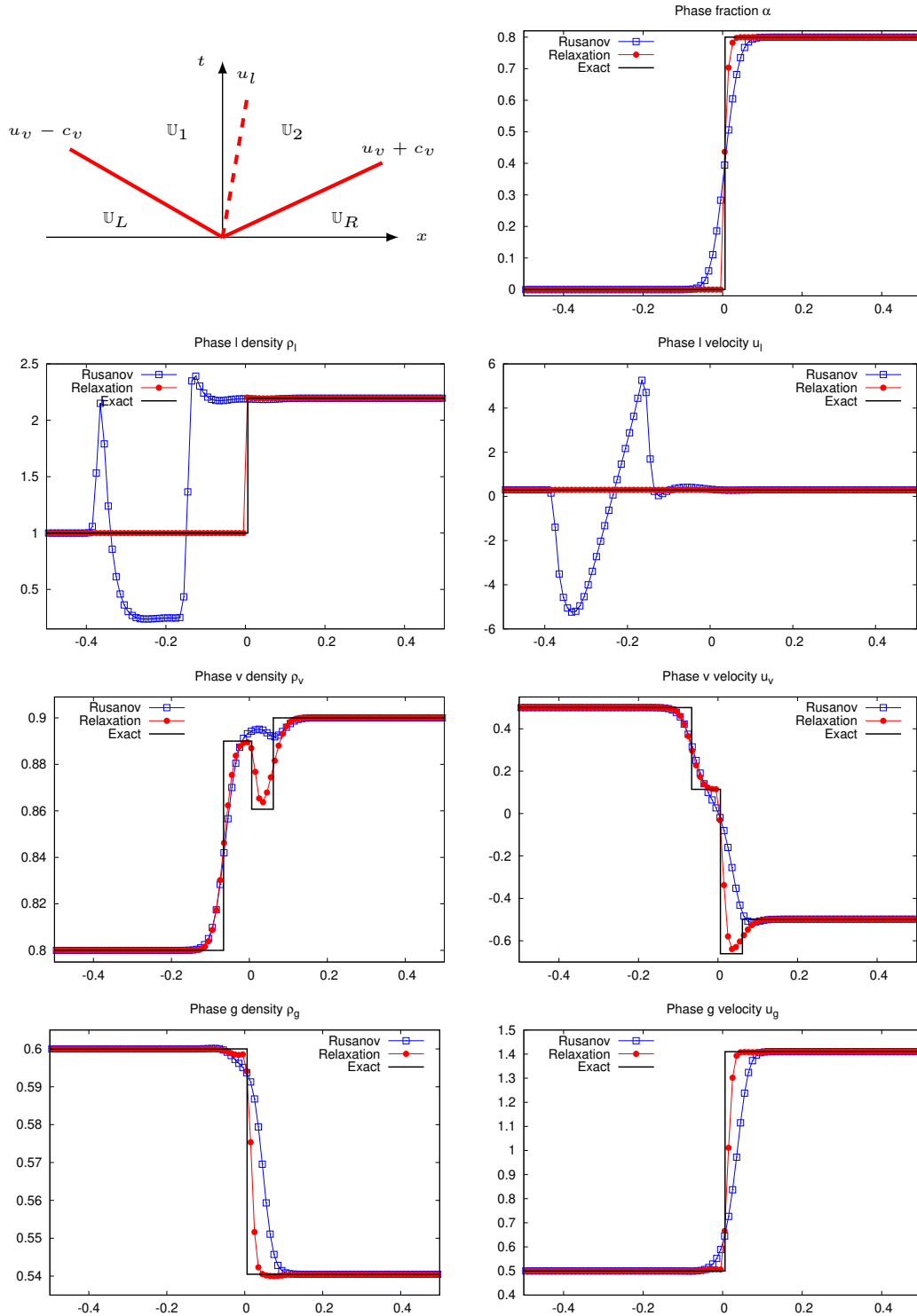


FIGURE 4.3 – Cas test 2 : solution pour 100 mailles à $t = 0.02$. Onde de contact de vitesse $u_l = 0.3$, choc $u_v - c_v$ de vitesse -3.3155813734376762 et choc $u_v + c_v$ de vitesse 3.0689467170729379 . Donnée initiale donnée dans (4.31).

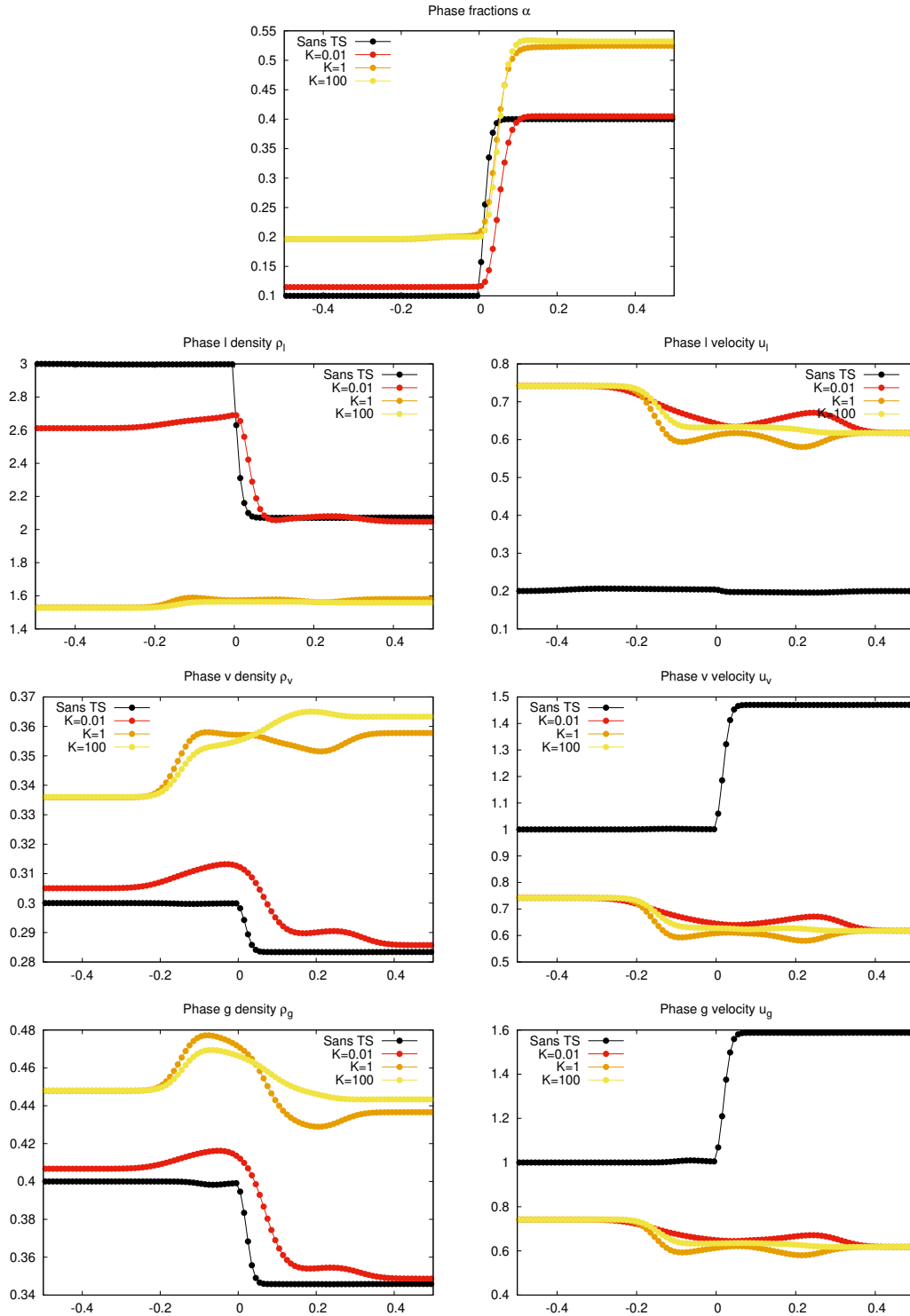


FIGURE 4.4 – Influence des temps de relaxation K sur le problème de Riemann 4.30. La partie convective est résolue avec le schéma de relaxation et les termes sources par le schéma présenté en partie 4.2.3

et en vitesse sur les états constants gauche et droit.

4.4 Conclusion

Ce travail confirme le comportement convaincant du schéma de relaxation déjà connu pour les mélanges diphasiques (et triphasiques [65]), dont l'adaptation est quasiment directe. Pour une erreur donnée, il est bien plus performant que le schéma de Rusanov (un ordre 100 sur le temps de calcul), ce qui est discriminant dans une approche industrielle. De plus, les régimes à fractions statistiques faibles sont approchés avec robustesse. Enfin, les premières simulations globales donnent des résultats cohérents et encourageants.

4.5 Annexe : résolution numérique du problème de Riemann de relaxation

On détaille dans cette annexe les éléments nécessaires à la mise en œuvre du schéma de relaxation.

Définitions et notations

Dans le but d'alléger les notations, on note dans cette section $\alpha = \alpha_l$ et $\bar{\alpha} = 1 - \alpha$. On notera aussi $\Delta\alpha = \alpha_R - \alpha_L = -\Delta\bar{\alpha}$.

Les solutions classiques du problème de relaxation vérifient des équations d'énergie (de relaxation) similaires au cadre original. On réfère à [65, Sec.3] pour plus de détails.

Soit $(\mathbb{U}_L, \mathbb{U}_R) \in \Omega_{\mathbb{U}}^2$ une paire d'états initiaux dans le cadre relaxé. On introduit les notations suivantes, dépendant uniquement de ces derniers états, qui permettront de définir les solutions.

$$\begin{aligned}
 u_k^\# &= \frac{1}{2}(u_{k,L} + u_{k,R}) - \frac{1}{2a_k}(\pi_k(\tau_{k,R}, \mathcal{T}_{k,R}) - \pi_k(\tau_{k,L}, \mathcal{T}_{k,L})), \\
 \pi_k^\# &= \frac{1}{2}(\pi_k(\tau_{k,R}, \mathcal{T}_{k,R}) + \pi_k(\tau_{k,L}, \mathcal{T}_{k,L})) - \frac{a_k}{2}(u_{k,R} - u_{k,L}), \\
 \tau_{k,L}^\# &= \tau_{k,L} + \frac{1}{a_k}(u_k^\# - u_{k,L}), \\
 \tau_{k,R}^\# &= \tau_{k,R} - \frac{1}{a_k}(u_k^\# - u_{k,R}).
 \end{aligned}$$

Le théorème principal [65, 3.7] établit que si les paramètres de relaxation a_k sont assez grands, tels que pour $k = l, v, g$, $\tau_{k,L}^\# > 0$ et $\tau_{k,R}^\# > 0$, alors le problème de relaxation admet des solutions si, et seulement si

$$\Theta\left(\max_k\{u_{k,L} - a_k\tau_{k,L}^\#\}\right) < \sum_{k=g,v} (\pi_l^\# - \pi_k^\#)\Delta\bar{\alpha} < \Theta\left(\min_k\{u_{k,R} + a_k\tau_{k,R}^\#\}\right), \quad (4.32)$$

où

$$\Theta(x) = \theta_l(x) + \theta_v(x) + \theta_g(x), \quad (4.33)$$

avec

$$\begin{aligned}
 \theta_k(u_l^*) &= a_k(\alpha_{k,L} + \alpha_{k,R})(u_l^* - u_k^\#) \\
 &+ 2a_k^2 \begin{cases} \alpha_{k,L}\tau_{k,L}^\# \mathcal{M}_0\left(\frac{\alpha_{k,L}}{\alpha_{k,R}}, \frac{1-\mathcal{M}_k^*}{1+\mathcal{M}_k^*}\right), & \text{avec } \mathcal{M}_k^* = \frac{u_k^\# - u_l^*}{a_k\tau_{k,L}^\#} \text{ si } u_k^\# \geq u_l^*, \\ \alpha_{k,R}\tau_{k,R}^\# \mathcal{M}_0\left(\frac{\alpha_{k,R}}{\alpha_{k,L}}, \frac{1-\mathcal{M}_k^*}{1+\mathcal{M}_k^*}\right), & \text{avec } \mathcal{M}_k^* = \frac{u_k^\# - u_l^*}{a_k\tau_{k,R}^\#} \text{ si } u_k^\# \leq u_l^*. \end{cases}
 \end{aligned}$$

La fonction \mathcal{M}_0 est définie par

$$\mathcal{M}_0(\nu, \omega) = \frac{1}{2}\left(\frac{1+\omega^2}{1-\omega^2}\left(1 + \frac{1}{\nu}\right) - \sqrt{\left(\frac{1+\omega^2}{1-\omega^2}\right)^2\left(1 + \frac{1}{\nu}\right)^2 - \frac{4}{\nu}}\right), \quad (4.34)$$

avec l'extension par continuité à $\omega = 1$ par $\mathcal{M}_0(\nu, 1) = 0$.

Lorsque la condition (4.32) est vérifiée, il existe un unique u_l^* solution du problème de

point fixe suivant

$$\Theta(u_l^*) = \sum_{k=g,v} (\pi_l^\# - \pi_k^\#) \Delta \bar{\alpha}. \quad (4.35)$$

Remarque 11. (*Solutions dissipant l'énergie*) Précisons que cette unique solution au problème de point fixe peut mener à plusieurs solutions au problème de Riemann, selon le taux de dissipation d'énergie renseigné par l'utilisateur. En effet, dans le but d'assurer la positivité des densités dans les états intermédiaires pour des valeurs extrêmes des fractions, il est parfois obligatoire d'imposer une dissipation stricte d'énergie à travers l'onde u_l . Ainsi, il existe toujours une unique solution au problème de point fixe (4.35). Sous cette hypothèse, il y a plusieurs solutions au problème de Riemann, mais une seule pour un taux de dissipation donné. On renvoie à [65, Rem. 3.6] pour un exemple précis, et à [19, Sec. 4.6] pour une explication complète et la construction de ces solutions.

Dans la suite, on ne considère pas les cas avec dissipation d'énergie et on réfère aux papiers cités dans la remarque. Le champ $k \in \{l, v, g\}$ est décrit par son vecteur phasique de relaxation $\mathbb{U}_k = (\alpha_k, \alpha_k \rho_k, \alpha_k \rho_k u_k, \alpha_k \rho_k \mathcal{T}_k)$.

4.5.1 Calcul des paramètres de relaxation

Dans le but d'assurer la condition de Whitham, la positivité des états intermédiaires et l'existence d'une solution au problème de point fixe, les paramètres de relaxation a_k peuvent être calculés de la façon suivante, où $\eta > 0$ est un petit paramètre fixé à 0.01 par exemple.

1. Sur chaque cellule j , définir $a_j = (1 + \eta) \max(\rho_{j,L} c_j(\rho_{j,L}), \rho_{j,R} c_j(\rho_{j,R}))$,
2. Sur chaque cellule j , faire $\{a_j = (1 + \eta) a_j\}$ tant que $(\tau_{j,L}^\# \leq 0$ ou $\tau_{j,R}^\# \leq 0)$,
3. Faire $\{\forall j, a_j = (1 + \eta) a_j\}$ tant que la condition (4.32) n'est pas vérifiée.

On renvoie à [65, App. B.1] pour plus de détails sur ces calculs.

4.5.2 Résolution du problème de point fixe

- On calcule les paramètres a_k afin de vérifier (1) et (2),
- On définit les fonctions M_0 et Θ de (4.34)-(4.33),

- Si (4.32) est vérifiée, le problème de point fixe (4.35) peut être résolu en utilisant une méthode de Newton ou de dichotomie. Sinon, les paramètres de relaxation doivent être mis à jour en suivant l'étape (3) décrite ci-dessus.

4.5.3 Solution de la phase liquide

La phase liquide (voir [65, Prop. 3.4]) est constituée de quatre états donnés sur la figure 4.5a

$$\begin{aligned}\alpha_l^- &= \alpha_{l,L}, & \tau_l^- &= \tau_{l,L}^\# + \frac{1}{a_l}(u_l^* - u_l^\#), & u_l^- &= u_l^*, & \mathcal{T}_l^- &= \mathcal{T}_{l,L}, \\ \alpha_l^+ &= \alpha_{l,R}, & \tau_l^+ &= \tau_{l,R}^\# - \frac{1}{a_l}(u_l^* - u_l^\#), & u_l^+ &= u_l^*, & \mathcal{T}_l^+ &= \mathcal{T}_{l,R}.\end{aligned}$$

Cette solution préserve l'énergie phasique de relaxation.

4.5.4 Solutions de la phase gazeuse

Les solutions pour les champs v et g , voir [65, Prop. 3.6], ont trois états intermédiaires avec trois configurations d'ondes possibles, selon les positions relatives de u_l^* et u_k , $k = v, g$. Les autres configurations ne sont pas envisagées et n'apparaissent pas sous nos hypothèses, on renvoie à [65, 3.1] pour plus de détails.

- Si $u_k^\# > u_l^*$, la configuration d'ondes est donnée sur la figure 4.5b.

On calcule $\nu_k = \frac{\bar{\alpha}_L}{\bar{\alpha}_R}$, $\mathcal{M}_k^* = (u_k^\# - u_l^*)/(a_k \tau_{k,L}^\#)$ et $\mathcal{M}_k = \mathcal{M}_0(\nu_k, \frac{1 - \mathcal{M}_k^*}{1 + \mathcal{M}_k^*})$. Les états intermédiaires sont alors les suivants

$$\begin{aligned}\alpha_k^- &= \alpha_{k,L}, & \tau_k^- &= \tau_{k,L}^\# \frac{1 + \mathcal{M}_k^*}{1 - \mathcal{M}_k}, & u_k^- &= u_l^* + a_k \mathcal{M}_k \tau_k^-, & \mathcal{T}_k^- &= \mathcal{T}_{k,L}, \\ \alpha_k^+ &= \alpha_{k,R}, & \tau_k^+ &= \tau_{k,L}^\# \frac{1 + \mathcal{M}_k^*}{1 + \nu_k \mathcal{M}_k}, & u_k^+ &= u_l^* + \nu_k a_k \mathcal{M}_k \tau_k^+, & \mathcal{T}_k^+ &= \mathcal{T}_{k,L}, \\ \alpha_{k,R^*} &= \alpha_{k,R}, & \tau_{k,R^*} &= \tau_{k,R}^\# + \tau_{k,L}^\# \frac{\mathcal{M}_k^* - \nu_k \mathcal{M}_k}{1 + \nu_k \mathcal{M}_k}, & u_{k,R^*} &= u_l^* + \nu_k a_k \mathcal{M}_k \tau_k^+, & \mathcal{T}_{k,R^*} &= \mathcal{T}_{k,R}.\end{aligned}$$

- Si $u_k^\# < u_l^*$, la configuration d'ondes est donnée sur la figure 4.5c.

On calcule $\nu_k = \frac{\bar{\alpha}_R}{\bar{\alpha}_L}$, $\mathcal{M}_k^* = -(u_k^\# - u_l^*)/(a_k \tau_{k,R}^\#)$ et $\mathcal{M}_k = \mathcal{M}_0(\nu_k, \frac{1 - \mathcal{M}_k^*}{1 + \mathcal{M}_k^*})$. Les états intermédiaires sont alors les suivants

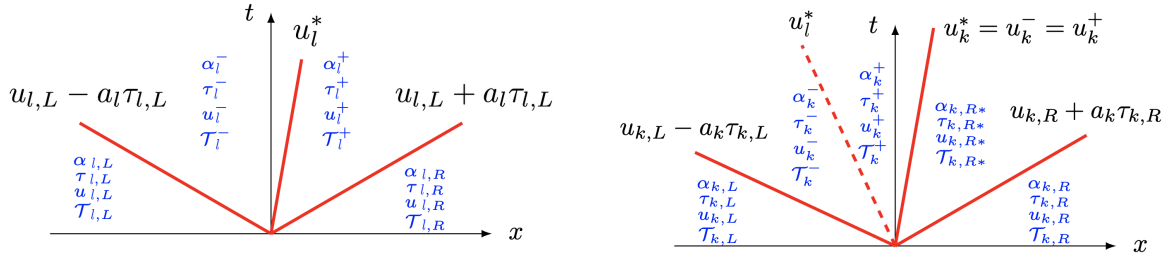
$$\begin{aligned} \alpha_{k,L^*} &= \alpha_{k,L}, \quad \tau_{k,L^*} = \tau_{k,L}^\# + \tau_{k,R}^\# \frac{\mathcal{M}_k^* - \nu_k \mathcal{M}_k}{1 + \nu_k \mathcal{M}_k}, \quad u_{k,L^*} = u_l^* - \nu_k a_k \mathcal{M}_k \tau_k^-, \quad \mathcal{T}_{k,L^*} = \mathcal{T}_{k,L}, \\ \alpha_k^- &= \alpha_{k,L}, \quad \tau_k^- = \tau_{k,R}^\# \frac{1 + \mathcal{M}_k^*}{1 + \nu_k \mathcal{M}_k}, \quad u_k^- = u_l^* - \nu_k a_k \mathcal{M}_k \tau_k^-, \quad \mathcal{T}_k^- = \mathcal{T}_{k,R}, \\ \alpha_k^+ &= \alpha_{k,R}, \quad \tau_k^+ = \tau_{k,R}^\# \frac{1 - \mathcal{M}_k^*}{1 - \mathcal{M}_k}, \quad u_k^+ = u_l^* - a_k \mathcal{M}_k \tau_k^+, \quad \mathcal{T}_k^+ = \mathcal{T}_{k,R}. \end{aligned}$$

► Si $u_k^\# = u_l^*$, la configuration d'ondes est donnée sur la figure 4.5d.

Les états intermédiaires sont alors les suivants

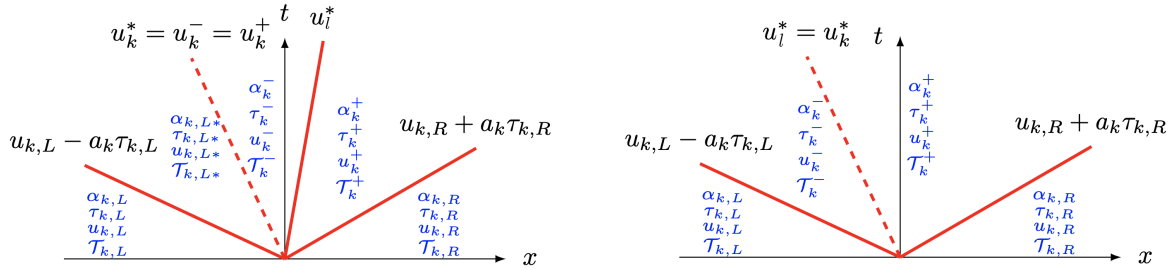
$$\begin{aligned} \alpha_k^- &= \alpha_{k,L}, \quad \tau_k^- = \tau_{k,L}^\#, \quad u_k^- = u_k^* = u_k^\#, \quad \mathcal{T}_k^- = \mathcal{T}_{k,L}, \\ \alpha_k^+ &= \alpha_{k,R}, \quad \tau_k^+ = \tau_{k,R}^\#, \quad u_k^+ = u_k^* = u_k^\#, \quad \mathcal{T}_k^+ = \mathcal{T}_{k,R}. \end{aligned}$$

Dans ces trois cas, la solution vérifie une inégalité d'énergie pouvant prendre en compte une éventuelle dissipation, voir remarque 11.



(a) Configuration d'ondes relative à la phase liquide

(b) Configuration d'ondes relative aux phases $k = v, g$ avec $u_k > u_l^*$



(c) Configuration d'ondes relative aux phases $k = v, g$ avec $u_k < u_l^*$

(d) Configuration d'ondes relative aux phases $k = v, g$ avec $u_k = u_l^*$

FIGURE 4.5 – Configurations d'ondes phasiques

4.5.5 Calcul des flux numériques

Une fois que la solution du problème de Riemann relaxé $\xi \mapsto \mathcal{W}_R(\xi, \mathcal{M}(\mathbb{W}_L), \mathcal{M}(\mathbb{W}_R))$ est connue, les flux dans le cadre original sont donnés par

$$\mathbf{F}^\pm(\mathbb{W}_L, \mathbb{W}_R) = \begin{pmatrix} (u_l^*)^\pm \Delta \alpha \\ \alpha \rho_l u_l \\ \bar{\alpha} \rho_v u_v \\ \bar{\alpha} \rho_g u_g \\ \alpha \rho_l u_l^2 + \alpha_l \pi_l + \frac{(u_l^*)^\pm}{u_l^*} (\pi_v + \pi_g) \Delta \alpha \\ \bar{\alpha} \rho_v u_v^2 + \bar{\alpha} \pi_v - \frac{(u_l^*)^\pm}{u_l^*} \pi_v \Delta \bar{\alpha} \\ \bar{\alpha} \rho_g u_g^2 + \bar{\alpha} \pi_g - \frac{(u_l^*)^\pm}{u_l^*} \pi_g \Delta \bar{\alpha} \end{pmatrix} \left(\mathbb{W}_R(\xi, \mathcal{M}(\mathbb{W}_L), \mathcal{M}(\mathbb{W}_R)) \right), \quad (4.36)$$

où u_l^* est la solution du problème de point fixe (4.35), avec la notation $(u_l^*)^+ = \max(u_l^*, 0)$, $(u_l^*)^- = \min(u_l^*, 0)$. Les fonctions $x \mapsto (x)^\pm/x$ sont prolongées par 0 en $x = 0$. Finalement, $\pi_k^* \Delta \alpha_k = \pi_k^\# \Delta \alpha_k + \theta_k(u_l^*)$.

GÉNÉRALISATION D'UN MODÈLE MULTIVITESSES AVEC MISCIBILITÉ

Ce chapitre s'intéresse à la généralisation d'un modèle du type Baer-Nunziato pour un écoulement multiphasique hybride contenant un nombre arbitraire de phases.

Dans cette approche multifluides, la dynamique de chaque composant est décrite par un modèle de type Euler et les différents systèmes sont couplés à l'aide de termes non conservatifs contenant des quantités dites interfaciales. Des termes sources modélisent le retour à l'équilibre thermodynamique et en vitesse. Des lois de fermeture ont été étudiées dans [16, 40] respectivement dans les cas diphasique et triphasiques. Plus récemment, des techniques alternatives sur ce sujet ont été proposées comme l'utilisation de calcul formel [23] ou une modélisation stochastique [62]. L'analyse de ce modèle pour un écoulement diphasique a été faite par exemple dans [20, 27], et une généralisation de ces propriétés a été proposée dans [61] dans le cas d'un mélange immiscible. Plus récemment, ces résultats ont été étudiés dans des cas hybrides [43, 45]. Dans la continuité de ces travaux, ce chapitre est une généralisation de [61] en ajoutant des composants miscibles, et de [43, 45] en considérant un nombre arbitraire de phases.

Pour des raisons de clarté, on rappelle que le terme "phase" réfère à un état de la matière, "composant" à une substance chimique et "champ" à un composant dans une phase donnée. Ainsi, un mélange diphasique hybride composé d'eau liquide, de sa vapeur et d'un gaz est un mélange diphasique à trois champs et deux composants, voir [45]. Cet exemple sera utilisé au long du chapitre pour illustrer des résultats.

Ce travail se concentre sur la modélisation d'un mélange de N phases et M champs, avec $N \leq M$, où toute la miscibilité est contenue dans la N ième phase. Cette situation correspond à une dernière phase gazeuse, sans miscibilité dans les autres états de la matière. Les composants miscibles sont supposés partager le même volume, et ainsi leurs

fractions statistiques sont les mêmes

$$\forall k \geq N, \alpha_k = \alpha_N. \quad (5.1)$$

Puisque l'on considère que le vide ne peut apparaître, la contrainte de volume globale est

$$\sum_{k=1}^N \alpha_k = 1, \quad (5.2)$$

avec $\alpha_k \in [0; 1]$ pour tout $k = 1, \dots, N$. Les équations d'évolutions sont écrites en dimension un pour des raisons de clarté. Ce travail peut être étendu au cas multidimensionnel.

La structure de ce chapitre est la suivante.

La première partie présente le modèle en introduisant le cadre thermodynamique, le système d'équations et l'équation d'évolution de l'entropie du mélange. On démontre ensuite l'unicité des termes de pressions interfaciales sous une hypothèse classique sur la vitesse d'interface (égale à une combinaison convexe des vitesses phasiques). Dans la troisième partie, l'analyse de la partie convective est faite en étudiant son hyperbolicité et sa symétrisation. Finalement on présente les contraintes que doivent satisfaire les termes sources de sorte à satisfaire le second principe.

5.1 Modèle

5.1.1 Cadre thermodynamique

Le fluide est composé de $N \geq 2$ phases qui sont immiscibles, où seule la dernière phase N peut contenir $K \geq 1$ composants. Le fluide est alors composé de $M = N + K - 1$ champs. En d'autres termes, on considère un mélange de N phases et M champs, où la phase N contient tous les composants miscibles du fluide. On définit \mathcal{K} l'ensemble des champs, et on a alors $\#\mathcal{K} = M$.

| | | | | |
|---|---|---|-----|----------------|
| 1 | 2 | 3 | ... | N, N+1, ..., M |
|---|---|---|-----|----------------|

Dans le cas diphasique hybride, M est égal à 3, N à 2 et la représentation schématique précédente est

| | |
|---|------|
| 1 | v, g |
|---|------|

. Plus tard, on se réfèrera à cette situation comme le cas $\{N = 2, M = 3\}$, où $l = 1$, $v = 2$ et $g = 3$.

Équations d'état

Chaque champ $k \in \mathcal{K}$ est décrit par son volume spécifique $\tau_k > 0$ et son énergie interne spécifique $e_k > 0$. Le comportement thermodynamique de chacun est décrit par sa fonction d'entropie intensive $(\tau_k, e_k) \mapsto s_k(\tau_k, e_k)$ définie sur $\Omega_k \subset (\mathbb{R}_*^+)^2$, qui est une équation d'état complète. Dans la suite, une telle fonction sera supposée concave. On rappelle la forme différentielle suivante

$$T_k ds_k = de_k + p_k d\tau_k, \quad (5.3)$$

où la température phasique $T_k = T_k(\tau_k, e_k)$ et la pression phasique $p_k = p_k(\tau_k, e_k)$ sont définies par

$$\frac{1}{T_k} = \left. \frac{\partial s_k}{\partial e_k} \right|_{\tau_k}, \quad p_k = T_k \left. \frac{\partial s_k}{\partial \tau_k} \right|_{e_k}, \quad (5.4)$$

et le potentiel chimique par la relation

$$\mu_k = -T_k s_k + p_k \tau_k + e_k. \quad (5.5)$$

Les températures phasiques T_k seront supposées strictement positives.

Contraintes volumiques et entropie du mélange

On donne à présent la description du comportement thermodynamique du mélange. La conservation du volume et les hypothèses de miscibilité donnent les relations suivantes sur les fractions statistiques

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^N \alpha_k = 1, \\ \alpha_k = \alpha_N \text{ pour } k \geq N, \end{cases} \quad (5.6)$$

et les dérivées satisfont

$$\sum_{k=1}^{N-1} \partial_x \alpha_k = -\partial_x \alpha_N. \quad (5.7)$$

Dans la suite, plusieurs arguments reposeront sur ces contraintes. On définit le vecteur d'état du champ k par

$$\mathbf{Y}_k = (\alpha_k, \rho_k, v_k, e_k),$$

où $\rho_k = 1/\tau_k$ et v_k est la vitesse de la phase. Pour un état du mélange donné (ρ, e) , l'entropie du mélange est définie comme la combinaison des entropies phasiques avec les poids $m_k = \alpha_k \rho_k$. En notant $\mathbf{Y} = \bigcup_{k \in \mathcal{K}} \mathbf{Y}_k$, elle s'écrit

$$\sigma(\mathbf{Y}) = \sum_{k \in \mathcal{K}} m_k s_k(\mathbf{Y}_k). \quad (5.8)$$

Finalement, l'énergie totale spécifique de la phase k est notée $E_k = e_k + v_k^2/2$.

5.1.2 Système d'équations

Soit \mathbf{W} le vecteur d'inconnues, défini par

$$\mathbf{W} = (\alpha_1, \dots, \alpha_N, \mathbf{W}_1, \dots, \mathbf{W}_M)^T, \quad \mathbf{W}_k = \begin{pmatrix} m_k \\ m_k v_k \\ m_k E_k \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

En procédant comme dans [45, 40, 43, 61], les équations du fluide contiennent N équations de transport sur α_k , pour $k = 1, \dots, N$

$$\partial_t \alpha_k + V_I(\mathbf{Y}) \partial_x \alpha_k = \Phi_k(\mathbf{Y}), \quad (5.10)$$

avec, pour $k \in \mathcal{K}$, les systèmes du type Euler suivants

$$\partial_t \mathbf{W}_k + \partial_x \mathbf{f}(\mathbf{W}_k) + \mathbf{C}_k \partial_x \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{S}_k, \quad (5.11)$$

où

$$\mathbf{f}(\mathbf{W})_k = \begin{pmatrix} m_k v_k \\ m_k v_k^2 + \alpha_k p_k \\ m_k v_k (E_k + \frac{p_k}{\rho_k}) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_M \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

et

$$\mathbf{C}_k = \begin{pmatrix} 0 & \dots & \dots & 0 & \dots & \dots & 0 \\ P_{k,1} & \dots & P_{k,k-1} & 0 & P_{k,k+1} & \dots & P_{k,M} \\ V_I P_{k,1} & \dots & V_I P_{k,k-1} & 0 & V_I P_{k,k+1} & \dots & V_I P_{k,M} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_k = \begin{pmatrix} \Gamma_k \\ S_{q,k} \\ S_{E,k} \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

où la k ième colonne contient des termes nuls. Dans la suite, on notera également $\mathbf{Y} = \bigcup_{k \in \mathcal{K}} \mathbf{Y}_k$.

Dans le but d'identifier ce modèle à des cas pratiques, on réfère à [45] pour le cas $\{N = 2, M = 3\}$ et [43] pour le cas $\{N = 3, M = 4\}$.

Des termes sources Φ_k , Γ_k , $S_{q,k}$, $S_{E,k}$ doivent être choisis en accord avec le second principe de la thermodynamique. Précisons que les termes $(\Phi_k)_{k=1,\dots,N}$ sont seulement définis pour les N premières fractions statistiques.

Les échanges entre les différents champs sont modélisés par des termes non conservatifs dans les équations (5.10) et (5.11), contenant la vitesse interfaciale V_I et les pressions interfaciales $(P_{k,l})$, définies pour $k \neq l$. Ces termes doivent être précisés dans le but de fermer le système, ce qui sera fait dans la partie 5.1.3.

L'ensemble d'équations pour le cas eau-gaz $\{N = 2, M = 3\}$ est

$$\partial_t \alpha_l + V_I(\mathbf{Y}) \partial_x \alpha_l = \Phi_l(\mathbf{Y}),$$

et

$$\begin{cases} \partial_t(m_l) + \partial_x(m_l v_l) = \Gamma_l(\mathbf{Y}), \\ \partial_t(m_l v_l) + \partial_x(m_l v_l^2 + \alpha_l p_l) + (P_{l,v}(\mathbf{Y}) + P_{l,g}(\mathbf{Y})) \partial_x \alpha_l = S_{q,l}(\mathbf{Y}), \\ \partial_t(m_l E_l) + \partial_x(m_l v_l (E_l + \frac{p_l}{\rho_l})) + (P_{l,v}(\mathbf{Y}) + P_{l,g}(\mathbf{Y})) V_I(\mathbf{Y}) \partial_x \alpha_l = S_{E,l}(\mathbf{Y}), \end{cases}$$

$$\begin{cases} \partial_t(m_v) + \partial_x(m_v v_v) = \Gamma_v(\mathbf{Y}), \\ \partial_t(m_v v_v) + \partial_x(m_v v_v^2 + \alpha_v p_v) - (P_{v,l}(\mathbf{Y}) + P_{v,g}(\mathbf{Y})) \partial_x \alpha_l = S_{q,v}(\mathbf{Y}), \\ \partial_t(m_v E_v) + \partial_x(m_v v_v (E_v + \frac{p_v}{\rho_v})) - (P_{v,l}(\mathbf{Y}) + P_{v,g}(\mathbf{Y})) V_I(\mathbf{Y}) \partial_x \alpha_l = S_{E,v}(\mathbf{Y}), \end{cases}$$

$$\begin{cases} \partial_t(m_g) + \partial_x(m_g v_g) = \Gamma_g(\mathbf{Y}), \\ \partial_t(m_g v_g) + \partial_x(m_g v_g^2 + \alpha_g p_g) - (P_{g,l}(\mathbf{Y}) + P_{g,v}(\mathbf{Y})) \partial_x \alpha_l = S_{q,g}(\mathbf{Y}), \\ \partial_t(m_g E_g) + \partial_x(m_g v_g (E_g + \frac{p_g}{\rho_g})) - (P_{g,l}(\mathbf{Y}) + P_{g,v}(\mathbf{Y})) V_I(\mathbf{Y}) \partial_x \alpha_l = S_{E,g}(\mathbf{Y}), \end{cases}$$

où $\Gamma_g(\mathbf{Y}) = 0$ puisque le gaz est inerte.

Remarque 12. *Similairement à [43, 45], on considère que les termes sources et les fer-*

metures interfaciales ne dépendent que de \mathbf{Y} . Ils pourraient aussi dépendre des dérivées de \mathbf{Y} , comme suggéré par exemple dans [41, 67].

Puisque l'on considère un système fermé, la masse totale, le moment et l'énergie doivent s'équilibrer et ainsi les termes sources vérifient

$$\sum_{k \in \mathcal{K}} \Gamma_k(\mathbf{Y}) = 0, \quad \sum_{k \in \mathcal{K}} S_{q,k}(\mathbf{Y}) = 0, \quad \sum_{k \in \mathcal{K}} S_{E,k}(\mathbf{Y}) = 0. \quad (5.14)$$

Puisque l'on ne considère pas d'apparition de vide, les termes sources sur les fractions vérifient

$$\sum_{k=1}^N \Phi_k(\mathbf{Y}) = 0. \quad (5.15)$$

De plus, les termes de pressions interfaciales ($P_{k,l}$) doivent s'annuler

$$\sum_{k \in \mathcal{K}} \sum_{\substack{l \in \mathcal{K} \\ l \neq k}} P_{k,l}(\mathbf{Y}) \partial_x \alpha_l = 0, \quad (5.16)$$

dans le but de préserver les équations conservatives du mélange sur le moment et l'énergie.

Production d'entropie

L'entropie du mélange a été définie dans (5.8), et en manipulant les équations d'évolution sur les densités phasiques, énergies cinétiques et énergies internes [43, Appendix A], on obtient l'équation suivante

$$\partial_t \sigma(\mathbf{Y}) + \partial_x f_\sigma(\mathbf{Y}) = \mathcal{A}_\sigma(\mathbf{Y}, \partial_x \mathbf{Y}) + RHS_\sigma(\mathbf{Y}), \quad (5.17)$$

où $f_\sigma(\mathbf{Y}) = \sum_{k \in \mathcal{K}} m_k s_k v_k$ est le flux d'entropie et les termes de production sont définis par

$$\mathcal{A}_\sigma(\mathbf{Y}, \partial_x \mathbf{Y}) = \sum_{k \in \mathcal{K}} \frac{1}{T_k} (v_k - V_I) \left(\sum_{\substack{l \in \mathcal{K} \\ l \neq k}} P_{k,l}(\mathbf{Y}) \partial_x \alpha_l + p_k \partial_x \alpha_k \right), \quad (5.18)$$

qui correspond à la contribution interfaciale, et

$$\begin{aligned}
RHS_\sigma(\mathbf{Y}) = & \sum_{k \in \mathcal{K}} \frac{1}{T_k} \left(S_{E,k}(\mathbf{Y}) - \Gamma_k(\mathbf{Y}) e_k - v_k (S_{q,k}(\mathbf{Y}) \right. \\
& \left. - \frac{1}{2} \Gamma_k(\mathbf{Y}) v_k) + \rho_k \frac{\partial e_k}{\partial \rho_k} (\rho_k \Phi_k(\mathbf{Y}) - \Gamma_k(\mathbf{Y})) \right) \\
& + \sum_{k \in \mathcal{K}} \left(s_k \Gamma_k(\mathbf{Y}) + \rho_k \frac{\partial s_k}{\partial \rho_k} (\Gamma_k(\mathbf{Y}) - \rho_k \Phi_k(\mathbf{Y})) \right),
\end{aligned}$$

qui correspond à la contribution des termes sources. D'après le second principe de la thermodynamique, ces termes de production doivent être positifs. En suivant [16, 40] dans le cas diphasique et triphasique, notre but est de déterminer des contraintes telles que

$$\mathcal{A}_\sigma(\mathbf{Y}, \partial_x \mathbf{Y}) = 0, \quad (5.19)$$

qui définit le modèle dit de dissipation minimale d'entropie [45], ce qui est l'objet de la partie suivante. Le second terme RHS_σ concerne les termes sources et sera étudié en partie 5.3.

5.1.3 Définition des pressions interfaciales

Le système d'équations aux dérivées partielles (5.10)-(5.11) requiert une unique définition des termes de pressions interfaciales. Ceci a été fait pour des écoulements à deux, trois et N phases dans [16, 40, 61], ou plus récemment dans des mélanges hybrides dans [43, 45].

Dans ce but, on postule que la vitesse interfaciale est une combinaison convexe (en postulant l'invariance Galiléenne) des vitesses phasiques

$$V_I(\mathbf{Y}) = \sum_{k \in \mathcal{K}} \beta_k(\mathbf{Y}) v_k, \quad (5.20)$$

avec

$$\begin{cases} \sum_{k \in \mathcal{K}} \beta_k(\mathbf{Y}) = 1 \\ \beta_k(\mathbf{Y}) \geq 0 \quad \forall k \in \mathcal{K} \end{cases}. \quad (5.21)$$

Déterminer ces pressions interfaciales ($P_{k,l}$) comme c'est fait dans [61] est hors d'atteinte à cause des hypothèses de miscibilité qui correspondent mathématiquement à ajou-

ter des inconnues sans ajouter d'équations. Néanmoins, ces contraintes permettent de faire ce travail pour un autre ensemble de termes de pression que l'on définit ici.

Introduisons les termes interfaciaux $(K_{k,l})$, définis pour $k = 1, \dots, M$ et $l = 1, \dots, N - 1$. Pour des raisons de clarté, on s'autorise à écrire les termes initiaux $(P_{k,l})$ pour $k = l$.

Définition 10. Pour $k = 1, \dots, M$ et $l = 1, \dots, N - 1$, on définit

$$K_{k,l} = P_{k,l}(1 - \delta_{k,l}) - \sum_{j=N}^M P_{k,j}(1 - \delta_{k,j}). \quad (5.22)$$

Les coefficients $(\chi_{k,l})$ sont définis pour les mêmes indices par

$$\chi_{k,l} = \delta_{k,l} - \sum_{j=N}^M \delta_{k,j} = \begin{cases} 0 & \text{si } k \leq N - 1 \text{ et } k \neq l, \\ 1 & \text{si } k = l, \\ -1 & \text{si } k \geq N \text{ pour tout } l \leq N - 1, \end{cases} \quad (5.23)$$

où $\delta_{k,l}$ est le symbole de Kronecker.

Pour le cas diphasique hybride $\{N = 2, M = 3\}$, il y a seulement trois coefficients $K_{k,l}$ qui sont :

$$K_{l,l} = -(P_{l,v} + P_{l,g}), \quad K_{v,l} = P_{v,l} - P_{v,g}, \quad K_{g,l} = P_{g,l} - P_{g,v}. \quad (5.24)$$

On introduit à présent le lemme suivant 1 qui donne une réécriture très importante dans la suite de ce travail.

Lemme 1. Pour tout $k = 1, \dots, M$, on a les deux relations

$$\sum_{\substack{l \in \mathcal{K} \\ l \neq k}} P_{k,l} \partial_x \alpha_l = \sum_{l=1}^{N-1} K_{k,l} \partial_x \alpha_l, \quad (5.25)$$

$$\sum_{\substack{l \in \mathcal{K} \\ l \neq k}} P_{k,l} \partial_x \alpha_l + p_k \partial_x \alpha_k = \sum_{l=1}^{N-1} (K_{k,l} + \chi_{k,l} p_k) \partial_x \alpha_l. \quad (5.26)$$

Démonstration. En utilisant les contraintes de miscibilité (5.6) et les relations (5.7), on peut réécrire la somme

$$\begin{aligned}
\sum_{\substack{l \in \mathcal{K} \\ l \neq k}} P_{k,l} \partial_x \alpha_l &= \sum_{l=1}^{N-1} P_{k,l} (1 - \delta_{k,l}) \partial_x \alpha_l + \sum_{j=N}^M P_{k,j} (1 - \delta_{k,j}) \partial_x \alpha_j \\
&= \sum_{l=1}^{N-1} P_{k,l} (1 - \delta_{k,l}) \partial_x \alpha_l + \partial_x \alpha_N \sum_{j=N}^M P_{k,j} (1 - \delta_{k,j}) \\
&= \sum_{l=1}^{N-1} P_{k,l} (1 - \delta_{k,l}) \partial_x \alpha_l - \sum_{l=1}^{N-1} \partial_x \alpha_l \sum_{j=N}^M P_{k,j} (1 - \delta_{k,j}) \\
&= \sum_{l=1}^{N-1} \left(P_{k,l} (1 - \delta_{k,l}) - \sum_{j=N}^M P_{k,j} (1 - \delta_{k,j}) \right) \partial_x \alpha_l \\
&= \sum_{l=1}^{N-1} K_{k,l} \partial_x \alpha_l,
\end{aligned} \tag{5.27}$$

où $K_{k,l}$ a été défini dans (5.22).

La seconde relation peut être déduite de la première, il suffit d'exprimer le terme $p_k \partial_x \alpha_k$ comme une fonction de $(\partial_x \alpha_l)_{1 \leq l \leq N-1}$, qui est

$$p_k \partial_x \alpha_k = \sum_{l=1}^{N-1} \chi_{k,l} p_k \partial_x \alpha_l, \tag{5.28}$$

où $\chi_{k,l}$ est défini par (5.23). On en déduit alors (5.26). \square

Ces relations nous permettent de réécrire les expressions faisant intervenir $(\partial_x \alpha_l)_{1 \leq l \leq M}$ en fonction des $N - 1$ premières quantités $(\partial_x \alpha_l)_{l \leq N-1}$.

En utilisant le lemme 1, les équations sur l'énergie et le moment (5.11) se réécrivent

$$\partial_t (\alpha_k \rho_k v_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k v_k^2 + \alpha_k p_k) + \sum_{k=1}^{N-1} K_{k,l} \partial_x \alpha_l = 0, \tag{5.29}$$

$$\partial_t (\alpha_k \rho_k E_k) + \partial_x (\alpha_k \rho_k v_k (E_k + p_k / \rho_k)) + \sum_{k=1}^{N-1} K_{k,l} V_I \partial_x \alpha_l = 0. \tag{5.30}$$

Ainsi, nous avons réduit le nombre d'inconnues interfaciales. En effet, il y avait $M(M - 1)$ coefficients $(P_{k,l})$ et à présente, il y a $M(N - 1)$ coefficients $(K_{k,l})$. On peut maintenant réécrire la condition de dissipation minimale d'entropie (5.19) en fonction des $(K_{k,l})$.

Lemme 2. Le terme $\mathcal{A}_\sigma(\mathbf{Y}, \partial_x \mathbf{Y})$ s'écrit

$$\mathcal{A}_\sigma(\mathbf{Y}, \partial_x \mathbf{Y}) = \sum_{k \in \mathcal{K}} \frac{1}{T_k} (v_k - V_I) \sum_{l=1}^{N-1} (K_{k,l} + \chi_{k,l} p_k) \partial_x \alpha_l, \quad (5.31)$$

avec $(\chi)_{k,l}$ défini par (5.23).

Démonstration. Cela consiste à réécrire (5.19) en fonction des $N - 1$ premiers $(\partial_x \alpha_k)$, grâce au lemme 1. \square

Donnons à présent le résultat principal de ce chapitre

Proposition 15. (Production minimale d'entropie par les états interfaciaux)

Supposons que (5.16) est vérifiée. Si toutes les températures phasiques sont strictement positives, alors pour toute combinaison convexe (5.20), les termes de pressions interfaciales $(K_{k,l})$ sont définis de façon unique.

Démonstration. La structure de la preuve est similaire à [61]. On détermine des équations grâce à :

1. L'indépendance des dérivées $N - 1$ premières dérivées $(\partial_x \alpha_k)$
2. L'indépendance des vitesses relatives $(v_{k+1} - v_k)$

On obtient alors $N - 1$ systèmes linéaires, un pour chaque $l = 1, \dots, N - 1$, en les variables $(K_{k,l})_{k=1, \dots, M}$. Tous sont définis par la même matrice, il suffit alors de montrer que cette dernière est inversible en calculant son déterminant.

Selon (5.7), les $(\partial_x \alpha_l)_{1 \leq l \leq N-1}$ doivent être indépendantes. En utilisant cela et le lemme 2, imposer $\mathcal{A}_\sigma(\mathbf{Y}, \partial_x \mathbf{Y}) = 0$ est équivalent à écrire pour $l = 1, \dots, N - 1$ les relations suivantes

$$\sum_{k \in \mathcal{K}} \frac{1}{T_k} (v_k - V_I) (K_{k,l} + \chi_{k,l} p_k) = 0. \quad (5.32)$$

En utilisant la combinaison convexe (5.20), on réécrit les différences $v_k - V_I$ comme

$$v_k - V_I = \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=1}^i (-\beta_j) (v_i - v_{i+1}) + \sum_{i=k}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M (\beta_j) (v_i - v_{i+1}), \quad (5.33)$$

ce qui nous permet de réarranger (5.32) en fonction des différences indépendantes $(v_i - v_{i+1})$. Introduisons les coefficients c_i et c^i définis pour $i = 1, \dots, M - 1$

$$c_i = \sum_{j=1}^i \beta_j, \quad c^i = \sum_{j=i+1}^M \beta_j. \quad (5.34)$$

On obtient les relations suivantes

$$\sum_{k=1}^i \frac{1}{T_k} c^i K_{k,l} - \sum_{k=i+1}^M \frac{1}{T_k} c_i K_{k,l} = \sum_{k=1}^i \frac{1}{T_k} c^i \chi_{k,l} p_k - \sum_{k=i+1}^M \frac{1}{T_k} c_i \chi_{k,l} p_k, \quad (5.35)$$

pour $l = 1, \dots, N - 1$ et $i = 1, \dots, M - 1$. On définit, pour les mêmes indices

$$d_l^i = \sum_{k=1}^i a_k c^i \chi_{k,l} p_k - \sum_{k=i+1}^M a_k c_i \chi_{k,l} p_k \text{ et } a_i = \frac{1}{T_i}.$$

On obtient le système défini par les équations suivantes pour $l = 1, \dots, N - 1$ et $i = 1, \dots, M - 1$

$$\sum_{k=1}^i c^i a_k K_{k,l} - \sum_{k=i+1}^M c_i a_k K_{k,l} = d_l^i. \quad (5.36)$$

Autrement dit, pour $l = 1, \dots, N - 1$, il y a $M - 1$ équations pour M inconnues qui sont les $(K_{k,l})_{1 \leq k \leq M}$. Ce peut être compensé en considérant la contrainte (5.16) qui donne, en utilisant (5.22) et l'indépendance des $(\partial_x \alpha_l)_{l \leq N-1}$, pour $l = 1, \dots, N - 1$

$$\sum_{k \in \mathcal{K}} K_{k,l} = 0. \quad (5.37)$$

On a alors $N - 1$ systèmes linéaires de taille $M \times M$, pour chaque $l \in \{1, \dots, N - 1\}$, qui sont

$$\mathbf{A} \mathbf{K}_l = \mathbf{d}_l, \quad (5.38)$$

avec

$$\blacktriangleright \mathbf{A} = \begin{pmatrix} c^1 a_1 & -c_1 a_2 & -c_1 a_3 & \cdots & -c_1 a_M \\ c^2 a_1 & c^2 a_2 & -c_2 a_3 & \cdots & -c_2 a_M \\ \vdots & & & & \vdots \\ c^{M-1} a_1 & c^{M-1} a_2 & \cdots & c^{M-1} a_{M-1} & -c_{M-1} a_M \\ 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

$$\blacktriangleright \mathbf{K}_l = (K_{1,l}, K_{2,l}, \dots, K_{M,l})^\top,$$

$$\blacktriangleright \mathbf{d}_l = (d_l^1, d_l^2, \dots, d_l^M)^\top.$$

Finalement, on doit montrer que \mathbf{A} est inversible et ainsi que les $(K_{k,l})$ sont définis de façon unique.

Notons

$$D = \det \mathbf{A}. \quad (5.39)$$

L'idée de la preuve est de développer ce déterminant le long de la dernière ligne, puis d'exprimer les mineurs de taille $M - 1$ avec un déterminant 2×2 grâce à $M - 3$ développements.

Deux relations doivent être rappelées ici. Pour $i = 1, \dots, M - 1$, on a

$$c_i + c^i = 1, \quad c^{i+1} - c^i = -\beta_i. \quad (5.40)$$

En développant D sur la dernière ligne et en factorisant par \bar{a}_i , on a

$$D = \sum_{i=1}^M (-1)^{M+i} \bar{a}_i D_i, \quad (5.41)$$

où D_i est le mineur formé en retirant la dernière ligne et la i ème colonne, et $\bar{a}_i = \prod_{j \neq i}^M a_j$. Pour $i = 1, \dots, M - 1$, on a

$$D_i = \det \begin{pmatrix} c^1 & -c_1 & \cdots & -c_1 & -c_1 & \cdots & -c_1 \\ c^2 & c^2 & & \cdots & \cdots & & -c_2 \\ & & \ddots & -c_{i-1} & -c_{i-2} & & \\ \vdots & & & \ddots & c^{i-1} & -c_{i-1} & \vdots \\ & & & & c^i & -c_i & \\ & & & & c^{i+1} & c^{i+1} & \\ & & & & \vdots & \vdots & \ddots \\ c^{M-1} & c^{M-1} & \cdots & c^{M-1} & c^{M-1} & \cdots & -c_{M-1} \end{pmatrix}, \quad (5.42)$$

ainsi, en écrivant la colonne $\mathcal{C}_j = (-c_1, \dots, -c_{j-1}, c^j, \dots, c^{M-1})^\top \in \mathbb{R}^{M-1}$, on a

$$D_i = \det \left(\mathcal{C}_1 \quad \mathcal{C}_2 \quad \cdots \quad \mathcal{C}_{i-1} \quad \mathcal{C}_{i+1} \cdots \quad \mathcal{C}_M \right). \quad (5.43)$$

Alors, D_i peut être réduit à un déterminant d'ordre deux avec $M - 3$ opérations :

- $\mathcal{C}_1 \leftarrow \mathcal{C}_1 - \mathcal{C}_2$ et un développement le long de \mathcal{C}_1 est fait $i - 2$ fois,
- $\mathcal{C}_n \leftarrow \mathcal{C}_n - \mathcal{C}_{n-1}$ et un développement le long de \mathcal{C}_n est fait $M - (i + 1)$ fois, où n est la taille du mineur considéré.

Un facteur (-1) apparaît pour chaque opération du second type, ce qui donne

$$D_i = (-1)^{M-(i+1)} \det \begin{pmatrix} c^{i-1} & -c_{i-1} \\ c^i & -c_i \end{pmatrix}, \quad (5.44)$$

donc, grâce à la relation (5.34), on peut exprimer ce déterminant par

$$\begin{aligned} D_i &= (-1)^{M-(i+1)} (-\beta_i) \\ &= (-1)^{M-i} \beta_i, \end{aligned} \quad (5.45)$$

pour $i = 2, \dots, M-1$. D'autre part, les cas $i = 1$ et $i = M$ donnent $D_1 = c_1$ et $D_M = c^{M-1}$.

En revenant à (5.41), on a

$$D = \bar{a}_1 c_1 + \bar{a}_M c^{M-1} + \sum_{i=2}^{M-1} (-1)^{M+i} \bar{a}_i (-1)^{M-i} \beta_i, \quad (5.46)$$

ce qui se simplifie en

$$D = \bar{a}_1 c_1 + \bar{a}_M c^{M-1} + \sum_{i=2}^{M-1} \bar{a}_i \beta_i > 0. \quad (5.47)$$

Puisque $\sum_{i=1}^M \beta_i = 1$ et $a_i > 0$ pour tout $i = 1, \dots, M$, alors $\det \mathbf{A} > 0$ et les termes interfaciaux $(K_{k,l})$ sont entièrement déterminés, et ce, de façon unique. \square

Donnons un exemple pour $\{N = 2, M = 3\}$, étudié dans [45]. Comme vu précédemment dans (5.24), on doit seulement déterminer trois termes $(K_{k,l})_{k=l,v,g}$ puisque $N = 2$. On obtient les expressions simples

$$K_{l,l} = -(p_v + p_g), \quad K_{v,l} = p_v, \quad K_{g,l} = p_g. \quad (5.48)$$

On se réfère à [45, Prop. 1] pour la preuve complète. Le cas $\{N = 3, M = 4\}$ est plus difficile et détaillé dans [43, Prop. 1].

Remarque 13. (*Préservation des équilibres en pression*) Une propriété importante est la préservation d'un état initial au repos où le fluide est supposé à l'équilibre thermodynamique : les pressions phasiques satisfont la loi de Dalton, les températures phasiques sont égales et les vitesses sont nulles. Une explication complète est donnée dans [44, Annexe A] dans le cas triphasique immiscible.

5.2 Analyse

Dans cette partie, on étudie l'hyperbolicité et la symétrisation du système. L'hyperbolicité donne un cadre connu pour résoudre les équations. La symétrisation est importante pour montrer l'existence d'une solution locale en temps pour un problème de Cauchy, en appliquant le théorème de Kato [57].

- Dans le cas conservatif, l'existence d'une fonction d'entropie entraîne la symétrisation du système grâce au théorème de Godunov-Mock [36, Theorem 3.1].
- Dans le cas non conservatif, ce théorème ne s'applique pas et ainsi la symétrisation doit être démontrée à la main. On peut toutefois citer des avancées récentes à ce sujet [23].

5.2.1 Hyperbolicité

D'abord, on considère le système convectif associé à (5.10)-(5.11) et on le réécrit dans les variables primitives $\mathbf{w} = (\alpha_1, \dots, \alpha_{N-1}, w_1, \dots, w_M)$, où $\mathbf{w}_k = (\rho_k, v_k, p_k)$. Pour $k = 1, \dots, N$ on a

$$\partial_t \alpha_k + V_I \partial_x \alpha_k = 0, \quad (5.49)$$

et pour $k \in \mathcal{K}$

$$\partial_t \rho_k + \frac{\rho_k}{\alpha_k} (v_k - V_I) \partial_x \alpha_k + v_k \partial_x \rho_k + \rho_k \partial_x v_k = 0, \quad (5.50)$$

$$\partial_t v_k + \frac{1}{\alpha_k \rho_k} \left(\sum_{l \in \mathcal{K}} P_{k,l} \partial_x \alpha_l + p_k \partial_x \alpha_k \right) + v_k \partial_x v_k + \frac{1}{\rho_k} \partial_x p_k = 0, \quad (5.51)$$

$$\partial_t p_k + \frac{\rho_k}{\alpha_k} (v_k - V_I) \sum_{\substack{l \in \mathcal{K} \\ l \neq k}} C_{k,l}^2 \partial_x \alpha_l + \rho_k c_k^2 \partial_x v_k + v_k \partial_x p_k = 0, \quad (5.52)$$

où $C_{k,l}$ et c_k sont respectivement les vitesses du son interfaciales et les vitesses du son phasiques, définies par

$$\begin{aligned} C_{k,l}^2 &= -((\partial p_k / \partial e_k) P_{k,l} / \rho_k^2 + (\partial p_k / \partial \rho_k)), \\ c_k^2 &= \partial p_k / \partial \rho_k + p_k / \rho_k + p_k / \rho_k^2 (\partial p_k / \partial e_k). \end{aligned} \quad (5.53)$$

Ensuite, on exprime les $(\partial_x \alpha_l)_{1 \leq l \leq M}$ en fonction des $(\partial_x \alpha_l)_{l \leq N-1}$ en utilisant le lemme 1, ce qui donne

$$\partial_t \alpha_k + V_I \partial_x \alpha_k = 0, \quad (5.54)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_k + \frac{\rho_k}{\alpha_k} (v_k - V_I) \left(\left(1 - \sum_{j=N}^M \delta_{k,j}\right) \partial_x \alpha_k - \left(\sum_{j=N}^M \delta_{k,j}\right) \sum_{l=1}^{N-1} \partial_x \alpha_l \right) \\ + v_k \partial_x \rho_k + \rho_k \partial_x v_k = 0, \end{aligned} \quad (5.55)$$

$$\partial_t v_k + \frac{1}{\alpha_k \rho_k} \sum_{l=1}^{N-1} (K_{k,l} + \chi_{k,l} p_k) \partial_x \alpha_l + v_k \partial_x v_k + \frac{1}{\rho_k} \partial_x p_k = 0, \quad (5.56)$$

$$\partial_t p_k + \rho_k c_k^2 \partial_x v_k + \frac{\rho_k}{\alpha_k} (v_k - V_I) \sum_{l=1}^{N-1} \gamma_{k,l} \partial_x \alpha_l + v_k \partial_x p_k = 0, \quad (5.57)$$

avec $\gamma_{k,l} = C_{k,l}^2 (1 - \delta_{k,l}) - \sum_{j=N}^M C_{k,j}^2 (1 - \delta_{k,j})$ et $K_{k,l}$ définis par (5.22). Notons que l'on a utilisé le lemme 2 pour les équations sur les vitesses.

On a alors le système quasi-linéaire

$$\partial_t \mathbf{w} + \mathbf{B}(\mathbf{w}) \partial_x \mathbf{w} = 0, \quad (5.58)$$

où $\mathbf{B}(\mathbf{w}) \in \mathcal{M}_{N-1+3M}(\mathbb{R})$ est la matrice par blocs

$$\mathbf{B}(\mathbf{w}) = \left(\begin{array}{c|ccc} V_I \mathbf{I}_{N-1} & 0 & \dots & 0 \\ \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 & & \\ \dots & & \dots & \\ \mathbf{A}_M & & & \mathbf{B}_M \end{array} \right). \quad (5.59)$$

Les matrices $\mathbf{A}_k \in \mathcal{M}_{3,N-1}(\mathbb{R})$ et $\mathbf{B}_k \in \mathcal{M}_3(\mathbb{R})$ sont définies par

$$\mathbf{A}_k = \left(\begin{array}{c} \frac{\rho_k}{\alpha_k} (v_k - V_I) (\mathbf{e}_k^\top (1 - \sum_{j=N}^M \delta_{k,j}) - \mathbf{1}_{N-1}^\top \sum_{j=N}^M \delta_{k,j}) \\ \frac{1}{\alpha_k \rho_k} \boldsymbol{\beta}_k^\top \\ \frac{\rho_k}{\alpha_k} (v_k - V_I) \boldsymbol{\gamma}_k^\top \end{array} \right), \quad (5.60)$$

$$\mathbf{B}_k = \begin{pmatrix} v_k & \rho_k & 0 \\ 0 & v_k & 1/\rho_k \\ 0 & \rho_k c_k^2 & v_k \end{pmatrix}, \quad (5.61)$$

où

- ▶ \mathbf{e}_k est le k ème vecteur unité dans \mathbb{R}^{N-1} quand $k < N$, avec la convention $\mathbf{e}_k = \mathbf{0}$ si $k \geq N$,
- ▶ $\mathbf{1}_{N-1}$ est le vecteur dans \mathbb{R}^{N-1} dont toutes les composantes valent 1,
- ▶ les vecteurs $\boldsymbol{\beta}_k, \boldsymbol{\gamma}_k \in \mathbb{R}^{N-1}$ sont définis, pour $l = 1, \dots, N-1$, par

$$\boldsymbol{\beta}_k = \left(K_{k,1} + \chi_{k,1} p_k, \dots, K_{k,N-1} + \chi_{k,N-1} p_k \right)^\top, \quad (5.62)$$

$$\boldsymbol{\gamma}_k = \left(\gamma_{k,1}, \dots, \gamma_{k,N-1} \right)^\top. \quad (5.63)$$

On constate que les matrices phasiques \mathbf{B}_k ne diffèrent pas du cas immiscible [61], mais les matrices \mathbf{A}_k changent. Les éléments propres de \mathbf{B} sont exactement les mêmes que dans ce dernier cas et ses valeurs propres sont :

- ▶ $\lambda_{I,k} = V_I, k = 1, \dots, N-1$
- ▶ $\lambda_k = v_k$ et $\lambda_{k,\pm} = v_k \pm c_k, k = 1, \dots, M$.

Remarque 14. *La nature et les propriétés de ces champs caractéristiques sont ceux attendus, voir [27] pour leur étude dans le cas diphasique. Précisons que la nature de V_I reste inconnue, et donc ses invariants de Riemann, qui dépendent bien entendu de sa définition. On peut se référer à [16] où différentes lois de fermetures pour V_I sont envisagées pour un mélange diphasique, permettant de définir des relations de saut de façon unique.*

On se tourne à présent vers la détermination des vecteurs propres. La matrice \mathbf{R} composée des vecteurs propres à droite a une structure par blocs et s'écrit

$$\mathbf{R} = \left(\begin{array}{c|ccc} \mathbf{R}_I^0 & 0 & \dots & 0 \\ \mathbf{R}_I^1 & \mathbf{R}_1 & & \\ \dots & & \dots & \\ \mathbf{R}_I^M & & & \mathbf{R}_M \end{array} \right). \quad (5.64)$$

Les problèmes phasiques sont bien connus et donc \mathbf{R}_k l'est, voir (5.68). Pour \mathbf{R}_I^k , on introduit les notations suivantes

$$\kappa_0 = \prod_{l=1}^M \alpha_l \sigma_l, \quad \kappa_k = \prod_{l=1, \neq k}^M \alpha_l \sigma_l, \quad k = 1, \dots, M \quad (5.65)$$

$$\sigma_k = \delta_k^2 - c_k^2 \text{ et } \delta_k = v_k - V_I. \quad (5.66)$$

Ainsi on a

$$\mathbf{R}_I^k = \kappa_k \rho_k \begin{pmatrix} \alpha_k c_k^2 \boldsymbol{\beta}_k^\top - \delta_k^2 \boldsymbol{\gamma}_k^\top \\ -(\alpha_k \boldsymbol{\beta}_k^\top - \boldsymbol{\gamma}_k^\top) \delta_k / \rho_k \\ -\sigma_k (\mathbf{e}_k^\top (1 - \sum_{j=N}^M \delta_{k,j}) - \mathbf{1}_{N-1}^\top \sum_{j=N}^M \delta_{k,j}) + \alpha_k \boldsymbol{\beta}_k^\top - \boldsymbol{\gamma}_k^\top \end{pmatrix}, \quad (5.67)$$

$$\mathbf{R}_I^0 = \kappa_0 \mathbf{I}_{N-1}, \quad \mathbf{R}_k = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -c_k / \rho_k & 0 & c_k / \rho_k \\ c_k^2 & 0 & c_k^2 \end{pmatrix}. \quad (5.68)$$

La matrice \mathbf{R} est inversible sous la condition suivante

$$\sigma_k \neq 0 \iff V_I \neq v_k \pm c_k, \quad \forall k = 1, \dots, M \quad (5.69)$$

dite *condition de non-résonance*.

Proposition 16. *Le système (5.10)-(5.11) est hyperbolique sous la condition de non-résonance (5.69).*

La condition de non-résonance apparaît quand un champ vraiment non linéaire associé à $v_k \pm c_k$ est superposé à l'onde de couplage V_I . Dans de telles situations, l'espace vectoriel n'est plus engendré par les vecteurs propres.

5.2.2 Symétrisation

La preuve de la symétrisation repose sur les mêmes arguments que dans [20, 45] et est exactement la même que dans le cas immiscible à N phases [61]. On construit une matrice symétrique définie positive $\mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{w})$ telle que $\mathbf{P}\mathbf{B}$ est symétrique, en utilisant la structure par blocs de \mathbf{B} et ses matrices de vecteurs propres à gauche et droite. On rappelle ici l'idée générale.

On définit d'abord \mathbf{P}_k le symétriseur du problème phasique par

$$\mathbf{P}_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1/c_k^2 \\ 0 & 0.5(\rho_k/c_k)^2 & 0 \\ -1/c_k^2 & 0 & 1.5/c_k^4 \end{pmatrix}, \quad (5.70)$$

qui est une matrice définie positive. De plus, elle est telle que $\mathbf{P}_k \mathbf{B}_k$ est symétrique. On définit alors $\mathbf{P}_{k,\alpha}$ sous la condition de non-résonance (5.69) par

$$\mathbf{P}_{k,\alpha} = \mathbf{L}_k^\top (\mathbf{\Lambda}_k - V_I \mathbf{I}_3)^{-1} \mathbf{R}_k^\top \mathbf{P}_k \mathbf{A}_k, \quad (5.71)$$

où \mathbf{L}_k est la matrice de vecteurs propres à gauche de \mathbf{B}_k et $\mathbf{\Lambda}_k$ est la matrice diagonale constituée des valeurs propres de \mathbf{B}_k . On rappelle que ces matrices vérifient $\mathbf{L}_k \mathbf{B}_k \mathbf{R}_k = \mathbf{\Lambda}_k$ et $\mathbf{L}_k \mathbf{R}_k = \mathbf{I}_3$. Ainsi on peut définir le symétriseur par \mathbf{B} , qui est

$$\mathbf{P} = \left(\begin{array}{c|ccc} NP_\alpha \mathbf{I}_{N-1} & \mathbf{P}_{1,\alpha}^\top & \dots & \mathbf{P}_{M,\alpha}^\top \\ \hline \mathbf{P}_{1,\alpha} & \mathbf{P}_1 & & \\ \dots & & \dots & \\ \mathbf{P}_{M,\alpha} & & & \mathbf{P}_M \end{array} \right), \quad (5.72)$$

où $P_\alpha \mathbf{I}_{N-1}$ doit être renseignée.

Le point central est la relation $(V_1 \mathbf{P}_{k,\alpha} + \mathbf{P}_k \mathbf{A}_k)^\top = \mathbf{P}_{k,\alpha}^\top \mathbf{B}_k$, ce qui correspond à la symétrie des premières lignes et colonnes de blocs de $\mathbf{P}\mathbf{B}$.

Cela repose sur le fait que $\mathbf{P}_{k,\alpha}^\top \mathbf{A}_k$ est une matrice symétrique, puisque $\mathbf{P}_k^\top \mathbf{R}_k = \mathbf{L}_k^\top$.

On prouve à présent que \mathbf{P} est définie positive. Soit $\mathbf{a} = (\mathbf{a}_\alpha, \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_M) \in \mathbb{R}^{N-1+3M}$ avec $\mathbf{a}_\alpha \in \mathbb{R}^{N-1}$. On a

$$\mathbf{a}^\top \mathbf{P} \mathbf{a} = P_\alpha \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \left(a_{\alpha,i} + (\mathbf{P}_{k,\alpha}^\top \mathbf{a}_k)_i / P_\alpha \right)^2 + \sum_{k=1}^M \frac{1}{P_\alpha} \mathbf{a}_k^\top \mathbf{Q} \mathbf{a}_k, \quad (5.73)$$

où $\mathbf{Q} = P_\alpha \mathbf{P}_k - \mathbf{P}_{k,\alpha} \mathbf{P}_{k,\alpha}^\top$. Déterminons une condition sur P_α telle que les termes $\mathbf{a}_k^\top \mathbf{Q} \mathbf{a}_k$ soient positifs.

On considère la décomposition de Cholesky de $\mathbf{P}_k = \mathbf{C}_k \mathbf{C}_k^\top$ et on définit la matrice symétrique $\mathbf{E}_k = \mathbf{C}_k^{-1} \mathbf{P}_{k,\alpha}^\top \mathbf{P}_{k,\alpha} \mathbf{C}_k^\top$. Ainsi, il existe \mathbf{T}_k telle que $\mathbf{T}_k \mathbf{E}_k \mathbf{T}_k^\top = \mathbf{D}_k = \text{diag}(\mu_1^k, \mu_2^k, \mu_3^k)$, où $(\mu_i^k)_{1 \leq i \leq 3}$ sont les valeurs propres de \mathbf{E}_k . Ainsi on a

$$\mathbf{a}_k^\top \mathbf{Q} \mathbf{a}_k = \mathbf{b}_k^\top (P_\alpha \mathbf{I}_3 - \mathbf{D}_k) \mathbf{b}_k = \sum_{i=1}^3 b_{k,i} (P_\alpha - \mu_i^k), \quad (5.74)$$

avec $\mathbf{b}_k = \mathbf{T}_k^\top \mathbf{C}_k^\top \mathbf{a}_k$. En choisissant $P_\alpha > \max_{i,k} |\mu_i^k| > 0$ le terme $\mathbf{a}_k^\top \mathbf{Q} \mathbf{a}_k$ est positif pour $\mathbf{a}_k \neq 0$, donc $\mathbf{a}^\top \mathbf{Q} \mathbf{a}$ l'est aussi.

Finalement, le système (5.54)-(5.57) est symétrisable et d'après le théorème de Kato [57], il existe une solution régulière locale en temps au problème de Cauchy.

5.3 Termes sources admissibles

Dans cette dernière partie, on s'intéresse à quelques conditions sur les termes sources dans le but de satisfaire le second principe de la thermodynamique. On omet la dépendance en \mathbf{Y} des termes sources pour des raisons de lisibilité. On donne d'abord leur forme, puis on détermine des conditions sur chacune des contributions.

D'abord, remarquons que le terme source de transfert mécanique Φ_k vérifie

$$\forall k \geq N, \Phi_k = \Phi_N, \quad \sum_{k=1}^N \Phi_k = 0, \quad (5.75)$$

ce qui est une conséquence des contraintes de miscibilité. Ceci nous permet d'utiliser une réécriture similaire à (5.25) et (5.26), qui nous servira plus tard.

Le terme de transfert de masse Γ_k est défini comme la somme des contributions

$$\Gamma_k = \sum_{\substack{l \in \mathcal{K} \\ l \neq k}} \Gamma_{kl}, \quad (5.76)$$

où Γ_{kl} représente le transfert de masse de la phase k vers la phase l . Dans un modèle pratique, certains de ces termes peuvent être nuls, par exemple dans le cas d'un gaz non condensable.

La contribution en quantité de mouvement se décompose en un terme de trainée et un terme de transfert de masse

$$S_{q,k} = \sum_{l \neq k} D_{kl} + \sum_{l \neq k} \Gamma_{kl} v_{kl}. \quad (5.77)$$

Enfin, les termes sources sur l'énergie totale contiennent des termes de transfert thermique, de trainée et de transfert de masse.

$$S_{E,k} = \sum_{l \neq k} \Psi_{kl} + \sum_{l \neq k} v_{kl} D_{kl} + \sum_{l \neq k} \Gamma_{kl} H_{kl} + \sum_{l \neq k} P_{k,l} \Phi_l. \quad (5.78)$$

Le dernier terme $\sum_{l \neq k} P_{k,l} \Phi_l$ provient du choix de modélisation que nous avons fait au

début du chapitre. En effet, en choisissant les dérivées en espace pour α_l dans l'équation d'énergie (5.11), les termes sources associés $S_{E,k}$ contiennent une contribution mécanique, ce qui n'est par exemple pas le cas dans [43, 45].

Faisons quelques remarques sur ces contributions. D'abord, les coefficients de (5.76), (5.77) et (5.78) doivent vérifier

$$\Gamma_{kl} = -\Gamma_{lk}, \quad D_{kl} = -D_{lk}, \quad \Psi_{kl} = -\Psi_{lk}. \quad (5.79)$$

Celles dans (5.78) donnent

$$v_{kl}D_{kl} = -v_{lk}D_{lk},$$

ce qui impose $v_{kl} = v_{lk}$, grâce à l'indépendance des D_{kl} . De même, on a $H_{kl} = H_{lk}$.

On peut à présent regrouper les contributions selon leurs natures.

$$RHS_\sigma = RHS_\sigma^\Phi + RHS_\sigma^\Gamma + RHS_\sigma^D + RHS_\sigma^\Psi. \quad (5.80)$$

Dans le but d'assurer la croissance de l'entropie, chacun de ces quatre termes doit être positif.

► **Contribution de transfert mécanique admissible Φ**

$$\begin{aligned} RHS_\sigma^\Phi &= \sum_{k \in \mathcal{K}} a_k \left(\sum_{l \neq k} P_{k,l} \Phi_l + \rho_k^2 \frac{\partial e_k}{\partial \rho_k} \Phi_k \right) - \rho_k^2 \frac{\partial s_k}{\partial \rho_k} \Phi_k \\ &= \sum_{k \in \mathcal{K}} a_k \left(\sum_{l \neq k} P_{k,l} \Phi_l + p_k \Phi_k \right) \\ &= \sum_{k \in \mathcal{K}} a_k \left(\sum_{l \leq N-1} (K_{k,l} + \chi_{k,l} p_k) \Phi_l \right) \\ &= \sum_{l=1}^{N-1} \left(\sum_{k=1}^M a_k (K_{k,l} + \chi_{k,l} p_k) \right) \Phi_l. \end{aligned}$$

On obtient les conditions, pour tout $l = 1, \dots, N-1$

$$\left(\sum_{k=1}^M a_k (K_{k,l} + \chi_{k,l} p_k) \right) \Phi_l \geq 0. \quad (5.81)$$

► **Contributions de transfert de masse admissible Γ**

En utilisant la définition du potentiel chimique (5.5), on a

$$RHS_{\sigma}^{\Gamma} = \sum_k a_k \sum_{l \neq k} (H_{kl} + \frac{v_k^2}{2} - v_k v_{kl}) \Gamma_{kl} - \sum_k \sum_{l \neq k} a_k \mu_k \Gamma_{kl}.$$

En prenant $H_{kl} = \frac{v_k v_l}{2}$ et $v_{kl} = \frac{v_k + v_l}{2}$, la première somme est nulle. Ainsi

$$\forall k \neq l, (a_k \mu_k - a_l \mu_l) \Gamma_{kl} \geq 0, \quad (5.82)$$

ce qui est équivalent à

$$\forall k \neq l, (\frac{T_l}{\mu_l} - \frac{T_k}{\mu_k}) \Gamma_{kl} \geq 0. \quad (5.83)$$

► **Contribution des effets de trainée admissibles**

$$RHS_{\sigma}^D = \sum_{k \in \mathcal{K}} a_k \left(\sum_{l \neq k} v_{kl} D_{kl} - v_k \sum_{l \neq k} D_{kl} \right).$$

On considère la forme suivante pour v_{kl} pour vérifier le principe d'invariance Galiléenne

$$v_{kl} = \beta_{kl} v_k + (1 - \beta_{kl}) v_l, \text{ avec } \beta_{kl} + \beta_{lk} = 1 \text{ et } \beta_{kl} \in [0; 1].$$

Alors on impose pour $k \neq l$

$$\begin{aligned} a_k (1 - \beta_{kl} + a_l (1 - \beta_{lk})) (v_l - v_k) D_{kl} &\geq 0 \\ \iff a_k (\beta_{lk} + a_l (1 - \beta_{lk})) (v_l - v_k) D_{kl} &\geq 0. \end{aligned}$$

Sachant que $a_k (\beta_{lk} + a_l (1 - \beta_{lk})) > 0$, la condition finale est

$$(v_l - v_k) D_{kl} \geq 0. \quad (5.84)$$

► **Contribution de transfert thermique admissible**

$$RHS_{\sigma}^{\Psi} = \sum_{k \in \mathcal{K}} \sum_{l > k} \Psi_{kl} (a_k - a_l),$$

et dont la contrainte est que pour $k \neq l$,

$$\Psi_{kl} (T_l - T_k) \geq 0. \quad (5.85)$$

Finalement, ces classes de termes sources vérifient le second principe de la thermodynamique. Dans des cas pratiques, voir [45, 43] par exemple, la condition sur la contribution mécanique Φ_l peut être plus précise, et l'on se réfère à ces papiers pour plus de précisions.

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, on a étudié un modèle du type Baer-Nunziato pour un écoulement N -phasique avec des conditions de miscibilité. Le résultat principal concerne les lois de fermetures sur les termes de pressions interfaciales. On démontre que pour une vitesse interfaciale correspondant à une combinaison convexe des vitesses phasiques, ces termes sont définis de façon unique. Des expressions explicites peuvent en être données dans des situations pratiques, c'est-à-dire pour des valeurs données de M et N , voir par exemple [43, 45].

Ensuite, l'hyperbolicité et la symétrisation de la partie convective du système ont été étudiées. Le système est hyperbolique sous conditions classiques de non-résonance. La symétrisation donne l'existence d'une solution locale en temps.

Finalement, on détermine des contraintes sur les termes sources dans le but de satisfaire le second principe de la thermodynamique. Les résultats sont les mêmes que dans les modèles pratiques où M et N sont donnés. L'expression manquante sur les termes interfaciaux Φ_k peuvent être précisés dans ces situations.

CONCLUSION

Ce mémoire étudie les écoulements multiphasiques compressibles avec miscibilité. Il s'intéresse d'une part à la dynamique de tels phénomènes, et d'autre part aux échanges thermodynamiques qui y adviennent. Dans les deux cas, des résultats théoriques sur les modèles sont donnés et ces derniers sont complétés par des expérimentations numériques.

Une part importante de cette thèse concerne la dynamique des écoulements multiphasiques en étudiant des modèles et plus particulièrement leur simulation. En effet, les chapitres 3 et 4 se concentrent sur l'approximation numérique de deux types de modèles pour un mélange diphasique hybride.

Dans le chapitre 3, le modèle homogène de relaxation (HRM) issu de [60] est présenté et sa partie convective est simulée avec plusieurs schémas volumes finis. On compare en particulier le schéma de VFRoe-ncv avec un schéma de relaxation, et l'on conclut que ce dernier est plus performant, principalement pour des raisons de robustesse et temps de calcul. Ce travail est fait pour deux jeux de lois d'état : un mélange de trois gaz raides, et un mélange de deux gaz raides avec une loi NASG-CK pour le liquide. On s'attarde sur les algorithmes de calcul d'énergie interne dans ces deux cas, qui sont centraux dans les questions de robustesse et temps de calcul.

Dans le chapitre 4, on s'intéresse à un modèle du type Baer-Nunziato issu de [45]. La présence de termes de couplage non conservatifs ne permet pas d'utiliser des méthodes volumes finis classiques. Le centre de ce chapitre est de simuler sa partie convective à l'aide d'un schéma de relaxation [65], qui s'adapte relativement facilement au cas diphasique hybride présent. Il est comparé au schéma de Rusanov adapté au cadre non conservatif, et l'on retrouve les résultats très encourageants déjà connus pour des mélanges immiscibles. En particulier, il est rapide et robuste pour des écoulements à fractions statistiques faibles.

Ces deux chapitres permettent de mettre en perspective ces deux classes de modèles. Premièrement, ils se distinguent par le caractère conservatif/non conservatif. Cette propriété permet au modèle homogène d'être simulé à l'aide de méthodes volumes finis usuelles, tandis que le modèle multivitesse nécessite une adaptation du schéma de Rusanov, ou bien l'utilisation du schéma de relaxation étudié. Ces difficultés sont de plus

liées à la complexité des analyses de ces modèles. En effet, bien qu'ils soient tous deux hyperboliques, l'analyse du modèle HRM est simple puisque sa structure est proche de celle des équations d'Euler. En revanche, le modèle multivitesse admet plus de champs caractéristiques, ce qui entraîne notamment des interactions entre les ondes (et ainsi la perte potentielle de l'hyperbolicité), ou encore la résolution de problèmes de Riemann hors d'atteinte. Son caractère non conservatif nécessite notamment de faire la symétrisation afin d'obtenir l'existence d'une solution locale en temps grâce au théorème de Kato. Finalement, notons que le modèle HRM tient compte de la température et que l'étude a été faite pour des lois de gaz raides (parfois combinées avec une loi NASG-CK), alors que le modèle de type Baer-Nunziato est barotrope et l'on a considéré des lois de gaz parfaits.

Le second pan de ce manuscrit concerne la relaxation thermodynamique. Le chapitre 2 présente un travail sur ces processus d'évolution pour un mélange diphasique, que le chapitre 3 reprend en partie dans le cas d'un mélange diphasique hybride. Enfin, le chapitre 4 considère une relaxation dans le cadre des modèles de Baer-Nunziato et le chapitre 5 aborde ce sujet en donnant des familles de termes sources admissibles pour le modèle de Baer-Nunziato généralisé.

Le chapitre 2 dresse une comparaison entre deux types de termes sources couramment utilisés dans les modèles multiphasiques : les termes du type BGK et ceux du type gradient d'entropie. On s'attache à définir proprement ces termes sources et établir quelques propriétés, notamment leur pertinence physique : leur contribution au modèle doit faire croître l'entropie et mener vers un équilibre thermodynamique. Dans les simulations complètes, on utilise une méthode à pas fractionnaires et ainsi la prise en compte des termes sources se fait par la résolution d'une équation différentielle ordinaire. De plus, des échelles de temps permettent a priori de modifier la vitesse des relaxations selon leur nature (thermique, mécanique, chimique). Des difficultés sont mises en avant, telles que le calcul de l'équilibre qui est nécessaire à l'utilisation du terme source du type BGK, ou l'analyse et la résolution numérique du terme source en gradient d'entropie. Pour ce dernier, une proposition exclue des convergences de solutions vers des états asymptotiques non admissibles physiquement. Des simulations numériques permettent d'illustrer les comportements attendus de chaque terme source pour un état donné.

Le chapitre 3 reprend partiellement ce travail dans le cas d'un mélange diphasique hybride, et l'on observe l'influence des termes sources dans un contexte global où la dynamique agit aussi. Sur des problèmes de Riemann, on constate que pour chaque terme source, les comportements sont cohérents avec les études précédentes. Des difficultés liées

au couplage apparaissent, telles que des états non admissibles au voisinage de certaines ondes. Le terme source du type BGK donne une évolution plus lisible, tandis que le terme source en gradient d'entropie complexifie les états de façon notable.

La comparaison de ces deux types de termes sources est claire : le premier, du type BGK, fait évoluer le système simplement et s'implémente facilement. Néanmoins, il faut calculer l'équilibre thermodynamique et les échelles de temps doivent être les mêmes. À l'opposé, le second terme source est complexe à analyser, et l'évolution du système l'est aussi en conséquence. Il ne requiert pas de calculer l'équilibre et le choix d'échelles de temps distinctes est possible. Le premier reste un choix efficace et relativement simple à mettre en œuvre, et la version récente permettant d'utiliser des échelles de temps distinctes [49] nous encourage à le préférer au second, dont la maîtrise semble difficile.

Enfin, le sujet des termes sources est abordé en fin de chapitre 5 dans un cas général. Des conditions sur les différentes relaxations (mécanique, thermique, chimique) sont établies afin d'assurer la croissance de l'entropie. Dans le chapitre 4, on considère une relaxation thermodynamique sans transfert de masse, où les termes sources sont en accord avec les conditions précédentes. Comme dans le chapitre 3 pour le cas du modèle HRM, on couple dynamique et relaxation.

Finalement, le chapitre 5 est exclusivement théorique et généralise un modèle du type Baer-Nunziato pour un mélange immiscible [61] à un mélange miscible. Ce travail démontre des propriétés importantes du modèle, qui sont nécessaires pour envisager des applications numériques. Dans un premier temps, on démontre qu'il existe un unique jeu de pressions interfaciales qui ferme le système. Dans un second temps, on montre que le modèle est hyperbolique et symétrisable, propriété cruciale pour un modèle non conservatif.

Cette thèse présente donc des travaux aussi bien sur le plan théorique que sur le plan numérique, et permet de prendre du recul sur deux grandes classes de modèles d'écoulements multiphasiques, et ce, particulièrement dans le cas d'un mélange diphasique hybride. Une part importante est consacrée aux processus de relaxation qui ont été étudiés dans un cas diphasique plus simple pour ensuite les considérer dans des contextes plus généraux. Enfin, la généralisation du modèle dans le dernier chapitre se distingue des autres travaux et apporte un résultat théorique important.

Plusieurs poursuites de travaux sont envisagées.

Premièrement, nous avons insisté dans ce manuscrit sur l'importance des propriétés de concavité de l'entropie spécifique de mélange. En particulier, approfondir la stricte concavité de cette fonction par rapport aux fractions permettrait d'assurer la bonne définition de l'équilibre thermodynamique. Si l'étude "à la main" n'aboutit pas, deux pistes peuvent être envisagées : des études statistiques sur le signe de la hessienne, ou bien une utilisation du calcul formel.

Ensuite, les chapitres 2 et 3 ont entamé une étude des termes sources en gradient d'entropie. Nous avons vu qu'ils peuvent pallier certaines limites des termes sources du type BGK, telles que la nécessité du calcul de l'équilibre, ou encore la contrainte d'échelles de temps égales. L'analyse du terme source en gradient d'entropie est complexe et nécessite un travail approfondi.

Le chapitre 4 a confirmé les propriétés remarquables du schéma de relaxation dans le cas d'un écoulement barotrope. L'extension de ce schéma au cas avec énergies est une poursuite naturelle des travaux associés, et l'application dans le cas diphasique hybride permettrait d'envisager une comparaison entre les deux classes de modèles.

Cette comparaison est le dernier point que l'on aborde. C'est un travail très ambitieux, donnons-en quelques pistes. Nous pourrions d'abord simuler le modèle HRM dans un cas barotrope pour pouvoir le comparer au travail fait dans le chapitre 4. La notion de "comparaison" est très complexe, et il faudrait par exemple étudier la relaxation en vitesse du modèle de Baer-Nunziato dans ce cas, ou encore faire des cas tests de vérification adaptés aux deux modèles. Si le schéma de relaxation utilisé dans le chapitre 4 est adapté au cas avec énergies, la comparaison pourra être étendue à cette situation. Néanmoins, de nombreux paramètres sont à prendre en compte dans de telles comparaisons, et c'est sans aucun doute un travail à envisager sur le long terme.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] Ait-Ameur, K., S. Kokh, M. Massot, M. Pelanti et T. Pichard: *An acoustic-transport splitting method for the barotropic Baer-Nunziato two-phase flow model*. ESAIM : Proceedings and Surveys, 72 :93–116, 2023.
- [2] Bachmann, M., S. Müller, P. Helluy et H. Mathis: *A simple model for cavitation with non-condensable gases*. Dans *Hyperbolic problems—theory, numerics and applications. Volume 1*, tome 17 de *Ser. Contemp. Appl. Math. CAM*, pages 289–296. World Sci. Publishing, Singapore, 2012. <https://hal.science/hal-01420483/document>.
- [3] Baer, M. R. et J. W. Nunziato: *A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials*. International journal of multiphase flow, 12(6) :861–889, 1986. [https://doi.org/10.1016/0301-9322\(86\)90033-9](https://doi.org/10.1016/0301-9322(86)90033-9).
- [4] Barberon, T. et P. Helluy: *Finite volume simulation of cavitating flows*. Computers and Fluids, 34(7) :832–858, 2005. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00139597>.
- [5] Berthoud, G.: *Vapor Explosions*. Annual Review of Fluid Mechanics, 32(1) :573–611, 2000. <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.32.1.573>.
- [6] Bilicki, Z. et J. Kestin: *Physical aspects of the relaxation model in two-phase flow*. Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences, 428(1875) :379–397, 1990. <https://doi.org/10.1098/rspa.1990.0040>.
- [7] Boivin, P., M. A. Cannac et O. Le Métayer: *A thermodynamic closure for the simulation of multiphase reactive flows*. International Journal of Thermal Sciences, 137 :640–649, 2019. <https://hal.science/hal-01981954/document>.
- [8] Bouchut, F.: *Nonlinear stability of finite Volume Methods for hyperbolic conservation laws : And Well-Balanced schemes for sources*. Springer Science & Business Media, 2004. <https://doi.org/10.1007/b93802>.

-
- [9] Boukili, H. et J. M. Hérard: *Relaxation and simulation of a barotropic three-phase flow model*. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 53(3) :1031–1059, 2019. <https://hal.science/hal-01745161/document>.
- [10] Broyden, C. G.: *A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations*. Mathematics of computation, 19(92) :577–593, 1965.
- [11] Buffard, T., T. Gallouët et J. M. Hérard: *A sequel to a rough Godunov scheme : application to real gases*. Computers & fluids, 29(7) :813–847, 2000. <https://www.hal.inserm.fr/UNIV-BPCLERMONT/hal-01579990>.
- [12] Bussac, J.: *Study of relaxation processes in a two-phase flow model*. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03418754>, Preprint, novembre 2021.
- [13] Bussac, J. et H. Mathis: *Simulation of a homogeneous relaxation model for a three-phase mixture with miscible phases*. Computers and Mathematics with Applications, 143 :327–347, 2023, ISSN 0898-1221. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0898122123002110>.
- [14] Callen, H. B.: *Thermodynamics And An Introduction To Thermostatistics*. Wiley, 1985.
- [15] Chalons, C. et J. F. Coulombel: *Relaxation approximation of the Euler equations*. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 348(2) :872–893, 2008. <https://team.inria.fr/ange/files/2020/03/ChalonsCoulombel.pdf>.
- [16] Coquel, F., T. Gallouët, J. M. Hérard et N. Seguin: *Closure laws for a two-fluid two-pressure model*. Comptes Rendus. Mathématique, 334(10) :927–932, 2002. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01484345>.
- [17] Coquel, F., J. M. Hérard et K. Saleh: *A splitting method for the isentropic Baer-Nunziato two-phase flow model*. 38 :241–256, 2012. <https://hal.science/hal-01265218>.
- [18] Coquel, F., J. M. Hérard et K. Saleh: *A positive and entropy-satisfying finite volume scheme for the Baer-Nunziato model*. Journal of Computational Physics, 330 :401–435, 2017. <https://hal-polytechnique.archives-ouvertes.fr/hal-01261458v4>.

-
- [19] Coquel, F., J. M. Hérard, K. Saleh et N. Seguin: *A robust entropy- satisfying finite volume scheme for the isentropic Baer- Nunziato model*. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 48(1) :165–206, 2014. <https://hal.science/hal-01265218>.
- [20] Coquel, F., J. M. Hérard, K. Saleh et N. Seguin: *Two properties of two-velocity two-pressure models for two-phase flows*. Communications in Mathematical Sciences, 12(3), 2014. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00788902v2>.
- [21] Coquel, F. et B. Perthame: *Relaxation of energy and approximate Riemann solvers for general pressure laws in fluid dynamics*. SIAM J. Numer. Anal., 35(6) :2223–2249, 1998, ISSN 0036-1429. <http://dx.doi.org/10.1137/S0036142997318528>.
- [22] Coquel, F., K. Saleh et N. Seguin: *A robust and entropy-satisfying numerical scheme for fluid flows in discontinuous nozzles*. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 24(10) :2043–2083, 2014. <https://hal.science/hal-00795446/>.
- [23] Cordesse, P. et M. Massot: *Entropy supplementary conservation law for non-linear systems of PDEs with non-conservative terms : application to the modelling and analysis of complex fluid flows using computer algebra*. CoRR, abs/1911.02313, 2019. <http://arxiv.org/abs/1911.02313>.
- [24] Cordesse, Pierre: *Contribution to the study of combustion instabilities in cryotechnic rocket engines : coupling diffuse interface models with kinetic-based moment methods for primary atomization simulations*. Thèse de doctorat, Université Paris-Saclay, 2020.
- [25] Douchet, J. et B. Zwahlen: *Calcul différentiel et intégral. Fonctions réelles d'une ou de plusieurs variables réelles*. PPUR, Enseignement des mathématiques, 2018.
- [26] Drew, D. A.: *Mathematical modeling of two-phase flow*. Annual review of fluid mechanics, 15(1) :261–291, 1983. <https://doi.org/10.1146/annurev.fl.15.010183.001401>.
- [27] Embid, P. et M. Baer: *Mathematical analysis of a two-phase continuum mixture theory*. Continuum Mechanics and Thermodynamics, 4(4) :279–312, 1992.
- [28] Faccanoni, G.: *Étude d'un modèle fin de changement de phase liquide-vapeur. Contribution à l'étude de la crise d'ébullition*. novembre 2008. <https://pastel>.

archives-ouvertes.fr/tel-00363460, Thèse en cotutelle entre l'École Polytechnique et l'Università di Trento (Italie).

- [29] Faccanoni, G., S. Kokh et G. Allaire: *Modelling and simulation of liquid-vapor phase transition in compressible flows based on thermodynamical equilibrium*. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 46(5) :1029–1054, 2012.
- [30] Faccanoni, G. et H. Mathis: *Admissible Equations of State for Immiscible and Miscible Mixtures*. ESAIM : Proceedings and Surveys, 66 :1–21, octobre 2019. <https://hal-univ-tln.archives-ouvertes.fr/hal-01913810>.
- [31] Faucher, E.: *Simulation numérique des écoulements unidimensionnels instationnaires avec autovaporisation*. Theses, Université Paris XII Val de Marne, janvier 2000. <https://theses.hal.science/tel-01026372>.
- [32] Gallouët, T., J. M. Hérard et N. Seguin: *Numerical modeling of two-phase flows using the two-fluid two-pressure approach*. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 14(05) :663–700, 2004. <https://hal.science/hal-00003327v1/document>.
- [33] Gavriljuk, S.: *The structure of pressure relaxation terms : the one-velocity case*. rapport technique, EDF, H-I83-2014-0276-EN, 2014.
- [34] Giovangigli, Vincent: *Multicomponent flow modeling*. Science China Mathematics, 55 :285–308, 2012.
- [35] Glossary, U. S. NRC :: *Loss of Coolant Accident (LOCA)*. https://www.irsn.fr/FR/connaissances/Installations_nucleaires/Les-centrales-nucleaires/criteres_surete_ria_aprp/Pages/2-accident-perte-refrigerant-primaire.aspx?dId=6f765313-55e7-4581-8f5c-09b08a1ac859&dwId=3163662f-e01c-4895-af0f-0b82c2f2a3af#.Yd7ryC1h1qs.
- [36] Godlewski, E. et P. A. Raviart: *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*, tome 118. Springer Science & Business Media, 2013.
- [37] Helluy, P.: *Simulation numérique des écoulements multiphasiques : de la théorie aux applications*. Habilitation à diriger des recherches, Université du Sud Toulon Var, 2005. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00657839>.

-
- [38] Helluy, P., J. M. Hérard, H. Mathis et S. Müller: *A simple parameter-free entropy correction for approximate Riemann solvers*. Comptes rendus Mécanique, 338(9) :493–498, 2010. <https://hal.science/hal-00466999v1/preview/entrefix.pdf>.
- [39] Helluy, P. et N. Seguin: *Relaxation models of phase transition flows*. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 40(2) :331–352, 2006. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00139607>.
- [40] Hérard, J. M.: *A three-phase flow model*. Mathematical and computer modelling, 45(5-6) :732–755, 2007. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01265367>.
- [41] Hérard, J. M.: *An hyperbolic two-fluid model in a porous medium*. Comptes Rendus Mécanique, 336 :650–655, 2008. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01265406>.
- [42] Hérard, J. M. et O. Hurisse: *A fractional step method to compute a class of compressible gas-liquid flows*. Computers & Fluids, 55 :57–69, 2012. <https://hal.science/hal-01265315/file/caf.pdf>.
- [43] Hérard, J. M., O. Hurisse et L. Quibel: *A four-field three-phase flow model with both miscible and immiscible components*. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 55 :S251–S278, 2021. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02432793>.
- [44] Hérard, J. M. et G. Jomée: *Pressure relaxation in some multiphase flow models*. ESAIM : Proceedings and Surveys, 2022. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03241934/>.
- [45] Hérard, J. M. et H. Mathis: *A three-phase flow model with two miscible phases*. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 53(4) :1373–1389, 2019. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01976938>.
- [46] Hou, T. Y. et P. G. LeFloch: *Why nonconservative schemes converge to wrong solutions : error analysis*. Mathematics of computation, 62(206) :497–530, 1994. <https://doi.org/10.2307/2153520>.
- [47] Hurisse, O.: *Application of an homogeneous model to simulate the heating of two-phase flows*. International Journal on Finite Volumes, 11, mai 2014. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01114808>.

-
- [48] Hurisse, O.: *Numerical simulations of steady and unsteady two-phase flows using a homogeneous model*. Computers and Fluids, 152, juillet 2017. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01489039>.
- [49] Hurisse, O.: *BGK source terms for out-of-equilibrium two-phase flow models*. Continuum Mechanics and Thermodynamics, 34(3) :721–737, 2022. <https://hal.science/hal-03330954/document>.
- [50] Hurisse, O. et L. Quibel: *A homogeneous model for compressible three-phase flows involving heat and mass transfer*. ESAIM : Proceedings and Surveys, 66 :84–108, 2019. <https://doi.org/10.1051/proc/201966005>.
- [51] Hurisse, O. et L. Quibel: *Simulations of liquid-vapor water flows with non-condensable gases on the basis of a two-fluid model*. Appl. Math. Model., 99 :514–537, 2021, ISSN 0307-904X. <https://hal.science/hal-03094067/document>.
- [52] Hurisse, O. et L. Quibel: *Simulations of water-vapor two-phase flows with non-condensable gas using a Noble-Able-Chemkin stiffened gas equation of state*. Computers & Fluids, 239 :105399, 2022. DOI:10.1016/j.compfluid.2022.105399.
- [53] IRSN: *Principe de fonctionnement d'une centrale nucléaire à réacteur à eau pressurisée*. https://www.irsn.fr/FR/connaissances/Installations_nucleaires/Les-centrales-nucleaires/reacteurs-nucleaires-France/Pages/1-reacteurs-nucleaires-France-Fonctionnement.aspx#.Y_2yWi_pN-U.
- [54] Jaouen, S.: *Etude mathématique et numérique de stabilité pour des modeles hydrodynamiques avec transition de phase*. 2001.
- [55] Jung, J.: *Schémas numériques adaptés aux accélérateurs multicoeurs pour les écoulements bifluïdes*. Thèse de doctorat, Strasbourg, 2013. https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00876159v3/file/JUNG_Jonathan_ED269_2013_1.pdf.
- [56] Kapila, A. K., R. Menikoff, J. B. Bdzil, S. F. Son et D. Stewart: *Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : Reduced equations*. Physics of fluids, 13(10) :3002–3024, 2001. <https://doi.org/10.1063/1.1398042>.

-
- [57] Kato, T.: *The Cauchy problem for quasi-linear symmetric hyperbolic systems*. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 58(3) :181–205, 1975. <https://doi.org/10.1007/BF00280740>.
- [58] Le Métayer, O., J. Massoni et R. Saurel: *Elaboration des lois d'état d'un liquide et de sa vapeur pour les modèles d'écoulements diphasiques*. International Journal of Thermal Sciences, 43, 2004. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2003.09.002>.
- [59] LeVeque, R.J.: *Finite volume methods for hyperbolic problems*, tome 31. Cambridge university press, 2002.
- [60] Mathis, H.: *A thermodynamically consistent model of a liquid-vapor fluid with a gas*. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 53(1) :63–84, 2019. <https://arxiv.org/pdf/1710.04525.pdf>.
- [61] Müller, S., M. Hantke et P. Richter: *Closure conditions for non-equilibrium multi-component models*. Continuum Mechanics and Thermodynamics, 28(4) :1157–1189, 2016.
- [62] Perrier, V. et E. Gutiérrez: *Derivation and closure of Baer and Nunziato type multi-phase models by averaging a simple stochastic model*. Multiscale Modeling & Simulation, 19(1) :401–439, 2021.
- [63] Quibel, L.: *Simulation of water-vapor two-phase flows with non-condensable gas*. Theses, Université de Strasbourg, septembre 2020. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-03505530>.
- [64] Rusanov, V. V.: *The calculation of the interaction of non-stationary shock waves with barriers*. Ž. Vyčisl. Mat i Mat. Fiz., 1 :267–279, 1961, ISSN 0044-4669. [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(62\)90062-9](https://doi.org/10.1016/0041-5553(62)90062-9).
- [65] Saleh, K.: *A relaxation scheme for a hyperbolic multiphase flow model. Part I : barotropic eos*. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, avril 2019. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01737681>.
- [66] Saleh, Khaled et Nicolas Seguin: *Some mathematical properties of a barotropic multi-phase flow model*. 69 :70–78, 2020. <https://www.esaim-proc.org/articles/proc/pdf/2020/03/proc200695.pdf>.

-
- [67] Saurel, R., S. Gavrilyuk et F. Renaud: *A multiphase model with internal degrees of freedom : application to shock–bubble interaction*. *Journal of Fluid Mechanics*, 495 :283–321, 2003.
- [68] Serre, D.: *Systems of Conservation Laws 1 : Hyperbolicity, entropies, shock waves*. Cambridge University Press, 1999.
- [69] Yanenko, N. N.: *The method of fractional steps. The solution of problems of mathematical physics in several variables*. Springer-Verlag, New York-Heidelberg, 1971.

Titre : Modélisation et simulation d'écoulements multiphasiques avec miscibilité

Mot clés : équations aux dérivées partielles, mécanique des fluides, thermodynamique, méthodes volumes finis

Résumé : Cette thèse étudie les écoulements multiphasiques avec miscibilité, dont l'étude est fondamentale pour la sûreté des réacteurs nucléaires. Elle se scinde en deux types de travaux : la première, plus théorique, consiste en la modélisation de tels phénomènes par des systèmes d'équations aux dérivées partielles. La seconde, plus pratique, simule ces modèles à l'aide de schémas volumes finis et de méthodes à pas fractionnaires. Modéliser un fluide multiphasique nécessite de prendre en compte les échanges thermodynamiques entre les composants. Une partie importante de ce manuscrit est accordée à la définition

et à l'étude des objets mathématiques permettant de modéliser ces phénomènes. Deux types de modèles pour un mélange diphasique à trois composants sont étudiés et simulés. Ce mélange correspond à un écoulement constitué d'eau liquide, de vapeur et d'air. De nombreuses simulations numériques sont fournies et comparées, notamment en prenant compte des échanges thermodynamiques. Enfin, on propose une généralisation d'un modèle existant dans le cas où le fluide contient un nombre arbitraire de composants miscibles.

Title: Modelling and simulation of multiphase flow with miscible components

Keywords: partial derivative equations, fluid mechanics, thermodynamics, finite volume methods

Abstract: This thesis concerns the multiphase flows with miscible components, that are mandatory in the nuclear powerplant safety. Two types of works are presented : the first one is the modelling of such phenomena that involve systems of partial derivative equations. The second one concerns the simulation of these models thanks to numerical schemes. The modelling of a multiphase fluid requires to take into account for the thermodynamical exchanges between the components. An important part of this thesis is dedicated to the

definition and the study of the mathematical tools that allow to describe these phenomena. Two types of models for a two-phase flow with three components are studied. This mixture corresponds to a fluid composed of liquid water, vapour water and a gas. Numerous numerical simulations are given and compared, especially by taking into account of the thermodynamical exchanges. Finally, we propose a generalization of an existing model by considering a miscible hypothesis.