



Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide vapeur.

Florian Caro

► To cite this version:

Florian Caro. Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide vapeur.. Mathématiques [math]. Ecole Polytechnique X, 2004. Français. NNT: . pastel-00000993

HAL Id: pastel-00000993

<https://pastel.hal.science/pastel-00000993>

Submitted on 27 Jul 2010

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.

Thèse présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Spécialité : **Mathématiques appliquées**

par

Florian Caro

Sujet :

Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide-vapeur

Organisme d'accueil :

COMMISSARIAT À L'ÉNERGIE ATOMIQUE
centre de Saclay

Soutenue le 24 novembre 2004 devant le jury composé de :

M. Grégoire ALLAIRE	Directeur
M. Frédéric COQUEL	Examineur
M. Bruno DESPRES	Président
M. Florian DE VUYST	Rapporteur
M. Boniface NKONGA	Examineur
M. Richard SAUREL	Rapporteur

Remerciements

Je tiens tout d’abord à remercier mon *grand* chef, Grégoire Allaire. Grâce à ses qualités humaines, il a su me soutenir lorsque j’en avais besoin et grâce à sa culture scientifique qui dépasse largement le cadre du sujet de ma thèse, il a su me conseiller et m’orienter lorsque je faisais fausse route.

Mon deuxième remerciement n’en est pas moins grand puisqu’il revient à mon *petit* chef Samuel Kokh. Il a réussi à me supporter au quotidien. Malgré des moments difficiles et mes baisses de motivation, il m’a encouragé sans relâche. L’expérience d’avoir travaillé avec lui a été très enrichissante et ceci à tous les niveaux, humain, scientifique, culturel. . .

Je tiens également à remercier Didier Jamet pour son ouverture d’esprit et pour ses connaissances physiques en matière de thermodynamique des changements de phase. Celles ci ont été essentielles dans la construction des différents modèles. Les moments passés à travailler ensemble durant la canicule de l’été 2003 ont été fort agréables et c’est avec grand plaisir que je recommencerais cette expérience.

Je remercie aussi chaleureusement Frederic Coquel. Ses connaissances des systèmes hyperboliques et des méthodes de relaxation entre autre ont permis de mener à bien un projet qui n’était pas évident au premier abord. Grâce à son enthousiasme débordant, il a su me redonner confiance en me donnant de nouvelles pistes d’investigation.

Je suis également très reconnaissant envers Bruno Desprès, Florian De Vuyst et Richard Saurel d’avoir accepté de faire partie de mon jury. En particulier je remercie Florian De Vuyst qui, suite à une erreur d’adresse postale, a réussi à rendre son rapport en un laps de temps très courts.

Je remercie tous les membres du LETR au CEA de Saclay qui m’ont également permis d’avoir d’autres sujets que “changement de phase”, “hyperbolicité”, “termes sources”, “relaxation” . . . Le cadre de travail n’en était donc que plus agréable.

Je tiens aussi à remercier tous les membres du CMAP à l’Ecole Polytechnique qui m’ont accueilli, généralement le mardi, mais en cette fin de thèse tous les jours. Je tiens particulièrement à remercier Asma, Benjamin, Charles et Kaouthar de m’avoir chaleureusement accueilli dans leur bureau déjà bien rempli.

Enfin, je remercie mes parents sans qui ce travail n’aurait pas pu avoir lieu ainsi que Julie qui a supporté durant ces trois années les moments douloureux mais qui a également accompagné les moments agréables.

Table des matières

I	Approche à une loi d'état	9
1	Notion de transition de phases	11
1.1	Critères de stabilité de l'équilibre	11
1.1.1	Critères de stabilité de Gibbs-Duheim	11
1.1.2	Classification des états d'équilibres	13
1.1.3	Application à l'étude des fluides	15
1.1.4	Interprétation en pression et équation de Van Der Waals	17
1.2	Caractéristiques de l'équilibre liquide-vapeur	18
1.2.1	La règle des aires de Maxwell	19
1.2.2	Relation de Clapeyron	19
2	Difficultés liées à une loi d'état de type Van Der Waals	21
2.1	Difficulté avec le critère de Lax pour une loi d'état de Van Der Waals	21
2.2	Difficulté du critère visqueux	23
2.3	Régularisation visco-capillaire	27
2.4	Relation cinétique	28
2.5	Conclusion	30
3	Critère visco-capillaire (cas isotherme)	31
3.1	Existence d'ondes progressives pour la régularisation visco-capillaire	31
3.2	Résolution numérique par une méthode de tir	41
3.3	Comparaison du critère visco-capillaire et du critère de Lax	41
3.4	Conclusion	45
4	Problème de Riemann avec le critère visco-capillaire	47
4.1	Structure du problème de Riemann près des points de Maxwell	47
4.1.1	Hypothèses et notations	47
4.1.2	Résultats théoriques	48
4.1.3	Application	53
4.2	Résolution exacte du problème de Riemann	56
4.2.1	Présentation de la méthode	56
4.2.2	Paramétrisation des courbes de chocs et détentes	56
4.2.3	Application numérique	58
4.3	Conclusion	62
II	Approche à deux lois d'états	63
5	Un modèle isotherme de changement de phase	65
5.1	Introduction d'un paramètre d'ordre	65
5.2	Modélisation	66
5.2.1	Hypothèses générales	66

5.2.2	Minimisation de l'action Hamiltonienne	66
5.2.3	Choix d'une énergie libre	69
5.2.4	Structure dissipative	70
5.3	Propriétés et retour à l'équilibre	71
5.3.1	Hyperbolicité du système homogène	72
5.3.2	Système limite équilibre mécanique (M-équilibre)	73
5.3.3	Système limite équilibre mécanique et thermodynamique (MT-équilibre)	74
5.4	Schéma numérique	81
5.4.1	Principe de résolution	81
5.4.2	Traitement numérique de la partie convective	81
5.4.3	Extension au deuxième ordre en espace et en temps	84
5.4.4	Extension en deux dimensions	84
5.4.5	Schéma numérique basé sur le système M-équilibre ($\kappa = +\infty$ et $\lambda < +\infty$)	85
5.4.6	Schéma numérique basé sur le système MT-équilibre ($\kappa = \lambda = +\infty$)	86
5.4.7	Choix des lois d'état des deux phases	87
5.5	Résultats numériques $\mathcal{H} \equiv 0$, $\mu_0 = 0$	89
5.5.1	Advection pure d'une interface	89
5.5.2	Un problème de changement de phase isotherme et unidimensionnel	92
5.5.3	Changement de phase dû à une compression en deux dimensions	105
5.5.4	Changement de phase dû à une dépression en deux dimensions	111
5.5.5	Création d'un film de vapeur par dépression et en hypothèse isotherme	117
5.6	Conclusion	122
6	Extension du modèle au cas non isotherme	123
6.1	Modélisation	123
6.1.1	Hypothèses générales	123
6.1.2	Minimisation de l'action Hamiltonienne	123
6.1.3	Choix d'une énergie interne	125
6.1.4	Structure dissipative	129
6.2	Propriétés et retour à l'équilibre	132
6.2.1	Hyperbolicité du système homogène	132
6.2.2	Système limite équilibre de pression (MTH-équilibre)	135
6.2.3	Système limite équilibre mécanique et thermodynamique (MTT-équilibre)	139
6.3	Schémas numériques	140
6.3.1	Traitement numérique de la partie convective	140
6.3.2	Ajout d'un flux de chaleur pour le modèle avec fermeture isotherme	144
6.3.3	Schéma numérique basé sur le MTT-équilibre ($\lambda = \kappa = +\infty$)	145
6.3.4	Choix des lois d'états des deux phases	145
6.4	Résultats numériques	146
6.4.1	Surchauffage d'une bulle de vapeur dans du liquide	146
6.4.2	Création d'un film de vapeur à l'aide d'une paroi chauffante	151
6.4.3	Nucléation d'une bulle de vapeur à l'aide d'une paroi chauffante	160
6.5	Conclusion	169
7	Conclusion générale et perspectives	171
III	Annexes	175
A	Quelques rappels sur les systèmes dynamiques	177
A.1	Les premiers résultats	177
A.2	Espaces invariants et sous-variétés stables et instables	178

B Rappels généraux de thermodynamique	181
B.1 Description thermodynamique des états de la matière	181
B.2 Potentiels thermodynamiques	181
B.2.1 Principaux potentiels thermodynamiques	182
B.2.2 Grandeurs dérivées des potentiels thermodynamiques	183
 Bibliographie	 185
 Publication	 189

Principales notations utilisées

Symboles	Quantités
X	variable lagrangienne d'espace
x	variable eulérienne d'espace
t	temps
ρ	densité du fluide et densité de mélange
τ	volumne spécifique
$\mathbf{u}$	vitesse des deux phases (supposées égales)
ε	énergie spécifique interne
e	énergie spécifique totale
T	température
Π	tenseur des contraintes
P	pression
η	entropie
A	coefficient de capillarité mis à l'échelle
ν	paramètre des petites variations
σ	vitesse du front de changement de phase
P_α	pression de la phase $\alpha = 1, 2$
ε_α	énergie spécifique interne de la phase $\alpha = 1, 2$
η_α	entropie de la phase $\alpha = 1, 2$
f_α	énergie libre de la phase $\alpha = 1, 2$
g_α	enthalpie libre de la phase $\alpha = 1, 2$
T_α	température de la phase $\alpha = 1, 2$
z	paramètre d'ordre ou traceur
$m_\alpha = \rho_\alpha z_\alpha$	densité partielle de la phase $\alpha = 1, 2$
$\tilde{z}$	z défini pas l'équilibre de pressions $P_1 = P_2$
ρ_α^*	densités définies par l'équilibre de pressions et d'enthalpies libres
z^*	z défini par l'équilibre de pressions et d'enthalpies libres

Introduction générale

Comprendre et simuler les transitions de phase : un enjeu industriel

Les phénomènes de transitions de phases touchent de nombreux domaines industriels. On peut citer par exemple l'industrie chimique où il faut connaître de manière précise les surfaces d'échange entre les différentes phases pour optimiser ces surfaces et ainsi accroître la production de gaz ou de liquide souhaité. Ce domaine d'application concerne le diphasique et plus généralement les écoulements multiphasiques.

Un autre domaine d'application est le domaine de la sécurité nucléaire et plus généralement de l'énergie. Dans les centrales nucléaires utilisant un réacteur à eau sous pression (EPR), les barreaux d'uranium sont plongés dans de l'eau liquide. Cette eau chauffe au contact de ces barreaux puis est dirigée vers un circuit secondaire dans lequel elle sert à chauffer de l'eau liquide qui est transformée en vapeur. Cette vapeur sert ensuite à produire de l'électricité. Le problème vient de la création de bulles de vapeur autour des barreaux d'uranium. La conductivité thermique de la vapeur d'eau étant nettement inférieure à celle de l'eau liquide (rapport de l'ordre de 10^{-3}), le flux de chaleur au voisinage des barreaux varie fortement selon si ceux-ci sont en contact avec de la vapeur ou du liquide. On remarque alors un flux critique pour lequel un film de vapeur se forme instantanément autour des barreaux. Ce phénomène s'appelle *crise d'ébullition*. Dès lors, ceux-ci ne sont plus convenablement refroidis et risquent de fondre. On comprend donc mieux l'intérêt de savoir simuler les transitions de phase liquide-vapeur pour prévenir ce genre d'incident.

On peut également citer comme domaine d'application les problèmes de combustion dans les moteurs. Par exemple, l'industrie aéronautique est concernée par les transitions de phase liquide-vapeur. Les moteurs de la fusée Ariane V fonctionnent grâce à la combustion entre l'hydrogène liquide et l'oxygène liquide. De part les conditions extrêmes de température et de pression, de l'hydrogène liquide est amené à se vaporiser. Pour améliorer la fiabilité de ces moteurs, il est important de prendre en compte ces transferts de masse entre les deux phases lors des calculs numériques.

Citons enfin les problèmes de cavitation au niveau des hélices des sous-marins ou encore l'industrie pétrolière qui est également concernée. En exploitation des gisements naturels, le pétrole est extrait sous l'effet de la pression exercée par le gaz sur le liquide et en exploitation des gisements assistée, on injecte de l'eau sous pression dans la poche du gisement.

Les différentes classes de modèles

Pour simplifier, on s'intéresse uniquement aux écoulements diphasiques. On peut alors citer deux grandes classes de modèles utilisés pour simuler les transitions de phase liquide-vapeur : les modèles moyennés et les modèles voués à la simulation numérique des petites échelles. La distinction de ces deux classes n'est évidemment pas restrictive.

Les modèles moyennés sont obtenus en considérant d’abord un volume de fluide moyen caractéristique de l’écoulement puis en intégrant les équations d’Euler sur ce volume moyen. La plupart de ces modèles font généralement intervenir une fraction volumique gazeuse qui correspond au rapport du volume de gaz sur le volume de fluide caractéristique comme [3, 53, 63]. L’avantage de ce type de modèle son faible coût en terme de temps de calcul puisqu’il permet d’effectuer des simulations à grande échelle en espace et en temps. Pour prendre en compte les changements de phase des termes sources sont alors ajoutés au niveau des équations sur les densités partielles.

Les modèles destinés à la simulation numérique des petites échelles cherchent à rendre compte de la physique diphasique fine. Le but est donc d’avoir accès aux grandeurs physiques instantanées de l’écoulement. Les échelles de temps et d’espace sont évidemment plus petites que les échelles considérées dans les modèles moyennés mais ils pourraient à terme valider des résultats obtenus par ces derniers modèles. Une grande différence avec les modèles moyennés est la description “fine” des interfaces entre fluides. Ce type de modèles à interface peut être séparé en deux grands groupes : les modèles à interface diffuse et les modèles à interface raide.

En ce qui concerne le premier groupe, on peut citer D. Jamet [38] qui a utiliser un modèle utilisant les théories du type théories du second gradient avec une loi d’état de type Van Der Waals pour simuler numériquement les transitions de phase. La discrétisation de ce modèle a également été étudié ensuite par F. Coquel et C. Fouillet. De nombreux auteurs ont aussi travaillé à un niveau plus théorique sur ce modèle. On peut citer Slemrod [69], Shearer [67], Fan [21] et LeFloch [34, 48] qui ont étudié les problèmes d’existence et d’unicité dans le cas isotherme puis par Grinfeld [31], Mischaikov [55] dans le cas nonisotherme. On peut également citer Abeyaratne et Knowles [1] qui ont travaillé sur les transitions de phases solide-solide et Truskinovsky [73], Casal et Gouin [12], Gurtin [32] qui ont travaillé sur les théories du second gradient. Une difficulté de ce modèle est la perte d’hyperbolicité de ce système dans la zone spinodale ainsi que la présence dans les équations de dérivées spatiales d’ordre trois sur la densité. Il faut alors discrétiser convenablement les équations pour ne pas voir apparaître des courants parasites en dimension supérieure à un comme on le verra dans la partie 1.

Les autres modèles sont ceux à interface dite raide. Ces modèles considèrent les deux phases comme deux fluides ayant leur propre thermodynamique séparé par une interface. Cette interface est alors repérée grâce à un paramètre d’ordre a priori abstrait noté z . Ce paramètre tient lieu de marqueur valant 1 (*resp.* 0) dans la phase 1 (*resp.* 2). L’évolution de l’interface est alors entièrement déterminée par la fonction $(x, t) \mapsto z(x, t)$. De tels modèles ont été étudiés lorsqu’il n’y a pas de changement de phase par Allaire, Clerc et Kokh [5, 44], Lagoutière [46] et aussi à l’aide de fonction level set par Osher [56] et Juric [43].

Plan et principaux résultats

Partie 1.

Chapitre 1.

Ce chapitre consiste à donner quelques rappels de thermodynamique obtenus dans [39, 58]. Après avoir défini ce qu’on appelle une *phase*, le second principe nous permet de caractériser les différents états d’équilibre entre deux phases. En utilisant la hessienne de l’entropie physique, on peut également les classer en trois grandes catégories : les équilibres stables qui correspondent à un maximum absolu de l’entropie, les équilibres métastables qui correspondent à un maximum

local de l'entropie et les équilibres instables qui correspondent à un point selle de l'entropie.

En appliquant cette caractérisation à un fluide ayant une loi d'état $P = P(\tau, T)$ où τ désigne le volume spécifique et T la température, on peut montrer qu'une condition suffisante pour avoir un équilibre stable est d'avoir

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \tau}\right)_T < 0, \quad c_v > 0, \quad (1)$$

où c_v désigne la capacité calorifique isochore.

La deuxième condition n'est a priori pas restrictive puisqu'on ne connaît pas de fluide la violant. Par contre, en supposant que la loi d'état est une loi d'état de Van Der Waals

$$P = \frac{(\gamma - 1)c_v T}{\tau - b} - \frac{a}{\tau^2},$$

où γ , a , b sont des constantes dépendantes du fluide considéré, on peut montrer qu'il existe une température critique T_c en-dessous de laquelle, une telle loi d'état vérifie $(\partial P / \partial \tau)_T > 0$. Cette loi d'état a été introduite par Van Der Waals dans les années 1880 et est susceptible de décrire des transitions de phase d'un gaz à un liquide.

On rappelle ensuite l'existence d'états particuliers de volumes spécifiques $m < M$ appelés états de Maxwell et d'une pression de saturation P^{sat} vérifiant la règle dite de *aires de Maxwell* suivante

$$\int_m^M P d\tau = P^{sat}(M - m).$$

Cette relation nous dit que lorsque la densité du liquide est donnée par $1/m$ et la densité de la vapeur par $1/M$, il est possible d'avoir une transition de phase stationnaire entre m et M où l'interface entre les deux phases est immobile. Ainsi, il y a autant de vapeur transformée en liquide que de liquide en vapeur.

Chapitre 2.

En supposant l'écoulement isotherme et en supposant que le fluide suive une loi d'état de type Van Der Waals (*i.e.* lorsque la pression vérifie $(\partial P / \partial \tau)_T > 0$ dans une certaine zone), on étudie dans ce chapitre le comportement des critères classiques de sélections de solutions pour les systèmes hyperboliques de lois de conservation en suivant les travaux classiques de Slemrod [69] et Truskinovsky [73].

Pour cela on considère le système très simple de la mécanique des fluides suivant

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X u &= 0, \\ \partial_t u + \partial_X P &= 0, \end{cases} \quad (2)$$

où u est la vitesse du fluide et X désigne la variable lagrangienne d'espace.

Dans un premier temps, on étudie le comportement du critère de Lax pour des états à gauche et à droite de l'interface proches des points de Maxwell. On montre alors par des considérations géométriques que ce critère est violé alors que des solutions physiques sont acceptables. Par exemple la solution stationnaire entre les états m et M de Maxwell n'est pas admissible pour ce critère. Ce critère n'est donc pas adapté pour sélectionner des solutions dites de transitions de phase.

Un autre critère classique est le critère appelé *critère visqueux*. Celui-ci consiste à ajouter un terme de viscosité sur la quantité de mouvement, puis regarder s'il existe des solutions ondes progressives planes de ce nouveau système reliant deux états à gauche et à droite de l'interface. De

nouveau ce critère n'est pas adapté puisque deux états pris près des points de Maxwell ne sont pas acceptables vis à vis de ce critère.

Pour remédier à ces difficultés, il faut donner une structure à l'interface comme l'ont étudiée Truskinovsky [73], Jamet [38], Gouin [12], Gurtin [32] et plus récemment LeFloch [34, 48] en ajoutant une dépendance dans l'énergie interne notée ε en $\nabla\tau$. Ce terme supplémentaire représente les effets de capillarité et provient du fort gradient de τ dans l'interface.

En supposant que l'énergie interne est donnée par

$$\varepsilon = \varepsilon^{cl} + \frac{\mu^2 A}{2} |\nabla\tau|^2,$$

où $\mu > 0$ est un paramètre d'échelle et $A > 0$ est une constante, le système (2) devient

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X u &= 0, \\ \partial_t u + \partial_X P &= \mu \partial_{XX}^2 u - \mu^2 A \partial_{XXX}^3 \tau. \end{cases} \quad (3)$$

Une version avec l'énergie est également donnée à titre indicatif. Le système (3) est appelé p-système avec régularisation visco-capillaire. Celui-ci va nous servir dans le chapitre 3. à définir deux états à gauche et à droite de l'interface admissibles par critère visco-capillaire s'il existe une onde progressive plane du système (3) reliant ces deux états

Chapitre 3.

On cherche à savoir si le critère visco-capillaire permet de sélectionner des solutions admissibles qui ne l'étaient pas avec les autres critères (comme par exemple la solution stationnaire avec comme état gauche et droit m et M). Une telle étude a déjà été effectuée par Slemrod [69], Shearer [67], Fan [21] et LeFloch [34, 48] dans le cas isotherme puis par Grinfeld [31], Mischaikov [55] pour le modèle nonisotherme mais nous reprendrons ici en détails les différentes étapes pour savoir s'il est possible en pratique de déterminer la vitesse de changement de phase.

Après avoir donné des propriétés qualitatives de solutions ondes progressives de (3), on montre l'existence et l'unicité de telles solutions lorsque les états à gauche et à droite sont proches des points de Maxwell. On note qu'à un état donné dans une phase (par exemple la phase liquide), il n'existe qu'un seul état dans l'autre phase et une seule vitesse de changement de phase $\sigma \geq 0$ tels qu'il existe une solution onde progressive de (3) se déplaçant à la vitesse σ .

La démonstration d'un tel résultat repose sur une méthode de tir. Cette méthode est ensuite utilisée d'un point de vue numérique pour trouver la vitesse de changement de phase. Cette méthode nous permettra également de pouvoir résoudre le problème de Riemann dans le chapitre 4.

On compare par la suite ce critère au critère de Lax lorsque la pression est monotone (donc lorsqu'il n'y a pas de changement de phase). On montre alors que les deux critères sont équivalents si la capillarité A est suffisamment petite ($A < 1/4$). Dans le cas contraire le domaine des états droits admissible par critère visco-capillaire est strictement inclus dans le domaine des états droits admissibles par le critère de Lax.

Chapitre 4.

On étudie dans ce chapitre la résolution du problème de Riemann pour le p-système lorsque la loi d'état est une loi d'état de type Van Der Waals et lorsque les états à gauche et à droite sont proches des points de Maxwell. D'un point de vue théorique, cette étude a déjà été effectuée

par Fan et Slemrod [24] et plus récemment par LeFloch et Shearer [47]. On utilise le critère visco-capillaire pour montrer qu'une telle solution se compose de trois ondes dont l'une est un choc non classique (une transition de phase) et qu'elle est unique dans cette classe de solution.

Nous utilisons ensuite ce résultat pour construire un solveur exact du problème de Riemann en cherchant le zéro d'une fonction non linéaire. L'algorithme de résolution est similaire au cas classique où il n'y a que deux ondes. La courbe de changement de phase n'est pas définie analytiquement mais grâce à une méthode de tir. Une première idée est d'utiliser ce solveur dans une méthode de Godunov mais la méthode de résolution du problème de Riemann est très coûteuse en terme de temps de calcul.

Une autre possibilité est de l'utiliser pour comparer les résultats obtenus avec un solveur de Riemann approché.

Partie 2.

Chapitre 5.

Les difficultés numériques et théoriques liées au caractère non hyperbolique des systèmes utilisant une loi d'état de type Van Der Waals conduisent à adopter une autre approche. Plutôt que de considérer les deux phases comme deux états d'un même fluide, on considère les deux phases comme deux fluides ayant leur propre thermodynamique. L'interface est alors repérée grâce à un paramètre d'ordre abstrait z . Ce paramètre tient lieu de marqueur valant 1 (*resp.* 0) dans la phase 1 (*resp.* 2). L'indice 1 ou 2 représente alors aussi bien la phase vapeur que la phase liquide.

A la différence des modèles immiscibles à interface classique, les deux fluides (donc les deux phases) peuvent échanger de la matière. Il faut donc définir un flux de masse entre les deux fluides. Pour simplifier la problématique, on se restreint à un écoulement isotherme et on suppose que les deux phases sont en équilibre thermique. Dans l'optique d'écrire un modèle bifluide de changement de phase isotherme, thermodynamiquement cohérent, incluant un flux de masse, on utilise la méthodologie générale suivante : on prescrit une énergie libre f pour le système et on en déduit les équations du mouvement à l'aide d'un principe de Hamilton [27]. On choisit ensuite le flux de masse ainsi que l'équation sur z pour être en accord avec le second principe de la thermodynamique. En s'inspirant des modèles dérivés de la théorie du second gradient où l'énergie libre dépend non seulement des variables thermodynamiques classiques mais aussi du gradient de la densité, on suppose que l'énergie libre est définie de la façon suivante

$$\rho f = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} z_{\alpha} f_{\alpha} + \mathcal{H}(z) + \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2,$$

où f_{α} désigne l'énergie libre de la phase α , $\mathcal{H}$ est un potentiel à deux puits entre zéro et une et μ_0 est une constante positive. On obtient ainsi un nouveau modèle de changement de phase

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \operatorname{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) = \lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \operatorname{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) = -\lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = -\mu_0 \operatorname{div}(\nabla z \otimes \nabla z), \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z = \kappa \left(P_1 - P_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right), \end{cases} \quad (4)$$

où g_{α} , P_{α} désignent respectivement l'enthalpie libre et la pression de la phase α , $\mathbf{u}$ la vitesse des deux phases et la pression P est définie par

$$P = \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha} - \mathcal{H}(z) - \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2.$$

Les termes supplémentaires dans l'énergie libre en $\mathcal{H}(z)$ et ∇z sont nécessaires dans les modèles phase field de type Cahn Hilliard et Allen Cahn mais on verra par la suite qu'ils ne sont pas nécessaires dans notre modèle de changement de phase.

Il est reconnu que l'intégration numérique des termes sources portant sur le système (4) n'est pas aisée si on veut conserver le principe de maximum sur z , la positivité des densités partielles et obtenir une bonne vitesse de propagation de la vitesse de changement de phase, voir par exemple LeVeque [51]. Cette difficulté provient essentiellement des dérivées spatiales par rapport à z . C'est pourquoi, on suppose désormais que $\mathcal{H} \equiv 0$ et $\mu_0 = 0$.

On étudie ensuite les propriétés (formelles) du système obtenu lorsqu'on fait tendre κ vers $+\infty$. Cette étape est appelée relaxation. Une telle méthode a déjà été étudiée par Coquel, Godlewski et Perthame [18, 19], Tzavaras [74] ou encore [15, 42]. Ce premier système ainsi obtenu par retour à l'équilibre de pression (donc mécanique) est par la suite appelé modèle M-équilibre. On montre que ce système est strictement hyperbolique. Ce résultat a également été obtenu par Chantepedrix, Villedieu et Vila [14] pour un modèle similaire où il n'y a pas de changement de phase. Ensuite, on étudie formellement le retour à l'équilibre thermodynamique lorsque λ tend vers $+\infty$. L'existence de densités ρ_α^* vérifiant le système d'équations

$$\begin{cases} P(\rho_1^*) = P_2(\rho_2^*), \\ g_1(\rho_1^*) = g_2(\rho_2^*), \end{cases}$$

n'est pas immédiate mais on peut néanmoins donner une condition nécessaire et suffisante d'existence et d'unicité basée sur des arguments géométriques. Ce nouveau système obtenu est alors appelé système M-équilibre et est faiblement hyperbolique parce que dans une certaine plage de densités, la pression $P = P(\rho)$ devient constante.

La dernière section de ce chapitre est consacrée à la résolution numérique des systèmes M-équilibre et MT-équilibre. Pour cela on utilise une méthode de *splitting* en temps. Cette méthode consiste à d'abord intégrer numériquement pendant un demi pas de temps le système (4) sans terme source à l'aide d'un schéma de Roe quasi-conservatif ([5]). Dans le cas du système M-équilibre, on projette ensuite cette solution obtenue sur la variété M-équilibre et on intègre numériquement le terme source portant sur les densités partielles. Dans le cas du système MT-équilibre, on projette la solution obtenue par intégration du système (4) sur la variété MT-équilibre.

Des résultats numériques de convergence en espace et en temps sont montrés pour un cas test de changement de phase isotherme et unidimensionnel. On montre également que la solution obtenue à l'aide du schéma M-équilibre converge vers la solution obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre lorsque le paramètre λ tend vers $+\infty$. Cette propriété est remarquable puisqu'une des difficultés d'intégration des termes sources est la mauvaise capture de la vitesse de propagation du front de changement de phase [51]. On montrera également des simulations bidimensionnels de changement de phase isotherme.

Une version préliminaire de ce travail a été publié en collaboration avec F. Coquel, D. Jamet et S. Kokh [11].

Chapitre 6.

Ce chapitre a pour but d'étendre le modèle bifluide de changement de phase isotherme précédent au cas des écoulements non isotherme. Pour cela la méthodologie est analogue. On prescrit un lagrangien pour le système (énergie cinétique diminuée de l'énergie interne massique) et on utilise un principe de Hamilton pour en déduire les équations du mouvement.

L'utilisation de ce principe de Hamilton ne rend pas compte des effets dissipatifs et c'est pourquoi on postule l'existence d'une entropie η pour le système et le calcul se fait à production d'entropie nulle. Comme dans le cas du modèle isotherme, on prescrit ensuite une énergie interne

$$\rho\varepsilon = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} z_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} + \mathcal{H}(z) + \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2,$$

où ε_{α} désigne l'énergie interne de la phase α . Comme les énergies internes dépendent de ρ_{α} et de η_{α} , il faut prescrire une relation de fermeture pour clore le système. Deux types de relation de fermeture sont envisagées : la fermeture isotherme $T_1 = T_2$ et la fermeture isobare $P_1 = P_2$. Bien que les deux fermetures donnent un système d'équations bien adapté au calcul numérique, seule la fermeture isotherme permet d'exhiber une entropie de mélange valable pour tout type de loi d'état. Dans le cas de la fermeture isobare, on ne peut expliciter une entropie de mélange que pour le cas des lois d'état de type gaz parfaits. Le système ainsi obtenu s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\rho_1 z_1) + \operatorname{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) = \mathcal{S}_y, \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \operatorname{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) = -\mathcal{S}_y, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = -\mu_0 \operatorname{div}(\nabla z \otimes \nabla z), \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}\left((\rho e + P) \mathbf{u}\right) = -\mu_0 \operatorname{div}(\nabla z \otimes \nabla z \mathbf{u}) + \mu_0 \operatorname{div}\left(\nabla z \frac{dz}{dt}\right), \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z = \mathcal{S}_z, \end{array} \right. \quad (5)$$

où la pression P est définie par

$$P = P^f - \mathcal{H}(z) - \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2,$$

et P^f , $\mathcal{S}_y$ et $\mathcal{S}_z$ sont donnés dans le cas de la fermeture isotherme par

$$P^f = \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha}, \quad \mathcal{S}_y = \lambda(g_2 - g_1), \quad \mathcal{S}_z = \kappa \left(P_1 - P_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right), \quad T_1 = T_2$$

et dans le cas de la fermeture isobare par

$$P^f = P_1 = P_2, \quad \mathcal{S}_y = \lambda(h_2 - h_1), \quad \mathcal{S}_z = \kappa \left(\rho_1 \eta_1 T_1 - \rho_2 \eta_2 T_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right).$$

Comme dans le chapitre 5., pour s'affranchir des difficultés liées à l'intégration des termes sources dans (5), on suppose que $\mathcal{H} \equiv 0$ et $\mu_0 = 0$.

On a ainsi obtenu deux systèmes bifluïdes de changements de phase à l'aide de deux relations de fermetures différentes. On peut noter que la fermeture isobare est plus stable d'un point de vue numérique lorsqu'il n'y a pas de changement de phase [5]. Lorsqu'on ajoute les termes sources de changement de phase, la différence majeure entre ces deux systèmes vient des termes sources sur les densités partielles et sur z . Dans le cas de la fermeture isotherme, on peut donner une interprétation de ces termes puisqu'ils correspondent à un déséquilibre mécanique et à un déséquilibre thermodynamique mais dans le cas de la fermeture isobare, ils ne correspondent pas à des déséquilibres physiques connus. C'est pourquoi on étudie ensuite les propriétés du système bifluïde de changement de phase avec fermeture isotherme ainsi que ceux obtenus par passage à la limite (formelle) $\kappa \rightarrow +\infty$ et $\lambda \rightarrow +\infty$. On note que la modèle $\kappa = +\infty$, $\lambda < +\infty$ appelé système MTH-équilibre est hyperbolique mais pas celui $\kappa = \lambda = +\infty$ appelé système MTT-équilibre.

Des résultats numériques bidimensionnels sont ensuite exposés et on montre que le système MTT-équilibre est capable de créer des bulles de vapeur dans du liquide au niveau d'une paroi chauffante et ceci sans utiliser de barre de seuil d'énergie pour savoir s'il faut ou non créer de la vapeur.

Première partie

Approche à une loi d'état

Chapitre 1

Notion de transition de phases

Considérons une substance de composition chimique fixée. Celle-ci se présente sous une forme homogène dont on peut distinguer différentes propriétés. Cette forme est alors appelée *état*. Par exemple, en ce qui concerne l'eau, on peut la trouver sous forme d'un gaz, d'un liquide ou encore d'un solide. Ces trois états diffèrent par leurs propriétés physiques (densité, capacité calorifique. . .). De façon générale, ces différents états de la matière pour une même substance sont appelés des *phases*.

L'expérience met alors en évidence des phénomènes de changement d'état : par exemple, la détente d'un liquide dans un canal fait apparaître dans la conduite une phase nouvelle, la vapeur, qui se mélange transitoirement au liquide sous forme d'un système diphasique. De manière générale, on appelle *transition de phase* ou *changement de phase* le passage d'une substance d'un état physique donné, caractérisé par un ensemble de propriétés, à un autre état physique.

1.1 Critères de stabilité de l'équilibre

En thermodynamique, le second principe nous donne un moyen de caractériser un état d'équilibre. En effet, celui-ci stipule que l'entropie d'un système isolé ne peut pas décroître.

Par conséquent, tout système évoluera vers un état pour lequel son entropie est maximale et donc il n'existe pas de transformation qui puisse s'amorcer spontanément à partir d'un état d'équilibre non contraint. En notant η l'entropie du système et en désignant $\Delta\eta = \eta - \eta^e$ la variation de l'entropie par rapport à l'équilibre (l'indice e faisant référence à l'état d'équilibre), le second principe et donc la condition de stabilité s'écrit

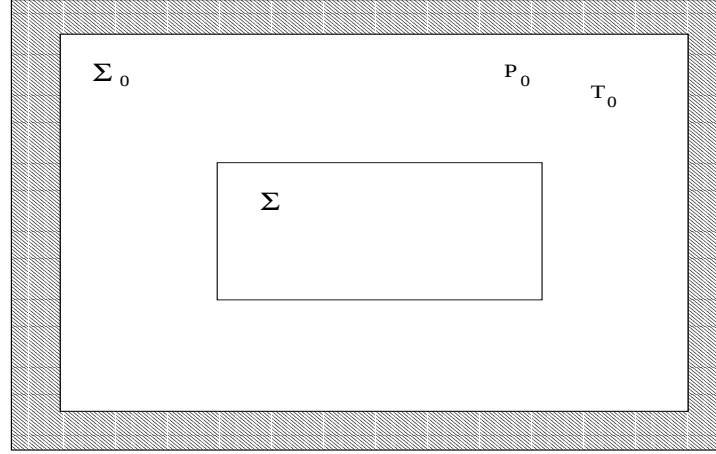
$$\Delta\eta \leq 0. \quad (1.1)$$

1.1.1 Critères de stabilité de Gibbs-Duheim

En reprenant le travail de D. Jamet [39], considérons un système Σ pouvant à la fois échanger de la chaleur et du travail. On suppose que Σ est inclus dans un domaine Σ_0 isolé et beaucoup plus vaste que Σ comme dans la figure 1.1. Soient T_0 et P_0 la température et la pression de Σ_0 .

On suppose que le système Σ est dans un état d'équilibre et on considère une transformation telle que son énergie interne ε varie de $\Delta\varepsilon$. En utilisant le premier principe de la thermodynamique qui stipule qu'au cours d'une transformation élémentaire où le système échange avec le milieu extérieur un travail δW et une quantité de chaleur δQ , la différentielle de l'énergie interne est donnée par

$$d\varepsilon = \delta Q + \delta W,$$

FIG. 1.1 – Définition des domaines thermodynamiques Σ et Σ_0 .

on en déduit la variation de ε

$$\Delta\varepsilon = \Delta Q + \Delta W. \quad (1.2)$$

Le travail ΔW reçu par Σ est fourni par Σ_0 et en notant $\Delta\tau$ l'augmentation du volume de Σ , le travail des forces de pression (en supposant qu'il n'existe pas d'autres forces agissant sur le système Σ) s'écrit

$$\Delta W = -P_0\Delta\tau, \quad (1.3)$$

puisque Σ_0 travaille à pression constante P_0 .

On peut décomposer la transformation effectuée en une transformation réversible et une transformation irréversible. De ce fait on peut écrire la variation de l'entropie $\Delta\eta$ comme

$$\Delta\eta = \Delta\eta_e + \Delta\eta_i, \quad (1.4)$$

où $\Delta\eta_e$ et $\Delta\eta_i$ représentent respectivement les variations d'entropie réversible et irréversible de telle sorte que $\Delta\eta_i \geq 0$. Par conséquent, comme le système Σ n'est en contact thermique qu'avec la source de chaleur Σ_0 à la température T_0 et par application du second principe, la quantité de chaleur ΔQ est donnée par

$$\Delta Q = T_0\Delta\eta_e. \quad (1.5)$$

En tenant compte des relations (1.3), (1.4) et (1.5), on en déduit à l'aide de (1.2) que

$$\Delta\varepsilon - T_0\Delta\eta + P_0\Delta\tau = -T_0\Delta\eta_i,$$

et en supposant que la température T_0 est strictement positive, le second principe montre que

$$\Delta\varepsilon - T_0\Delta\eta + P_0\Delta\tau \leq 0.$$

Cette condition correspond à une condition pour que l'évolution spontanée du système soit possible entre un état initial et l'état final considérés. Or, pour que l'état d'équilibre initial soit stable, il faut qu'il ne puisse pas évoluer spontanément vers un état final voisin. Ainsi, la condition de stabilité d'un équilibre est telle que l'inégalité précédente soit violée, ce qui s'écrit

$$\Delta\varepsilon - T_0\Delta\eta + P_0\Delta\tau \geq 0. \quad (1.6)$$

La condition (1.6) est alors appelée critère de Gibbs-Duheim pour la stabilité d'un équilibre.

On va voir dans le cas d'un système fermé isolé comment le critère de Gibbs-Duheim se simplifie en utilisant les différents potentiels thermodynamiques (voir l'annexe B.1) :

- *Cas d'un système à énergie interne et volume constants :*

Puisque la température T_0 est strictement positive, l'inégalité s'écrit

$$\Delta\eta \leq 0.$$

On retrouve l'application directe du second principe : l'entropie doit être maximum à l'équilibre.

- *Cas d'un système à température et volume constants :*

L'inégalité s'écrit alors

$$\Delta\varepsilon - T_0\Delta\eta \geq 0.$$

Or à T_0 et τ constants, la variation de l'énergie libre f peut s'écrire $\Delta f = \Delta\varepsilon - T_0\Delta\eta$, donc le critère de stabilité (1.6) devient

$$\Delta f \geq 0.$$

- *Cas d'un système à température et pression constantes :*

A température constante, la variation d'enthalpie libre g peut s'écrire

$$\Delta g = \Delta\varepsilon - T_0\Delta\eta + P\Delta\tau,$$

donc le critère de stabilité (1.6) devient

$$\Delta g \geq 0.$$

- *Cas d'un système à entropie et pression constantes :*

Lorsque la pression est constante, la variation d'enthalpie h peut s'écrire

$$\Delta h = \Delta\varepsilon + P_0\Delta\tau,$$

donc le critère de stabilité (1.6) devient

$$\Delta h \geq 0.$$

- *Cas d'un système à entropie et volume constants :*

Le critère (1.6) s'écrit immédiatement

$$\Delta\varepsilon \geq 0.$$

Remarque 1.1. *Les critères de stabilité utilisés précédemment utilisent les potentiels thermodynamiques les plus courants. Dans un cas plus général, il est possible que les potentiels décrits dans l'annexe B.1 ne soient plus adaptés. Dans ce cas, le principe est analogue mais les conditions de stabilité seront différentes et feront intervenir de nouveaux potentiels.*

1.1.2 Classification des états d'équilibres

Le critère de stabilité d'un état d'équilibre (1.6) doit être utilisé avec précaution. Ce critère (ou ses variantes) ne permet pas de préciser les conditions de l'équilibre. Ainsi, on peut constater qu'une petite perturbation d'un état de cet équilibre supposé stable peut modifier cet état. Par exemple, on constate que l'eau liquide maintenue à une température inférieure à 0 °C se solidifie instantanément si l'on ajoute une impureté dans la phase liquide ou si l'on provoque un choc sur le récipient qui la contient.

On doit donc préciser la nature de ces différents équilibres. Notons $\mathcal{E} = (\mathcal{E}_i)_{1,n}$ le jeu de variable choisi (par exemple $\mathcal{E}$ peut désigner l'énergie interne et le volume spécifique $\mathcal{E} = (\varepsilon, \tau)^T$). D'une façon générale, un équilibre correspond à un maximum de l'entropie donc sous réserve de régularité

de l'entropie, on peut faire un développement de Taylor de η au voisinage de l'équilibre de la façon suivante

$$\begin{aligned}\eta &= \eta^e + \sum_i \left(\frac{\partial \eta}{\partial \mathcal{E}_i} \right)^e (\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_i^e) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial \mathcal{E}_i \partial \mathcal{E}_j} \right)^e (\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_i^e)(\mathcal{E}_j - \mathcal{E}_j^e) + \mathcal{O}(\|\mathcal{E} - \mathcal{E}^e\|^3) \\ &= \eta^e + \frac{1}{2} \nabla^2 \eta^e (\mathcal{E} - \mathcal{E}^e) \cdot (\mathcal{E} - \mathcal{E}^e) + \mathcal{O}(\|\mathcal{E} - \mathcal{E}^e\|^3),\end{aligned}$$

puisque à l'équilibre $\nabla \eta^e = 0$.

Notons à présent Ω l'espace des états. Plusieurs cas sont à envisager :

- la hessienne de l'entropie $\nabla^2 \eta^e$ est définie négative et l'état d'équilibre correspond à un maximum de η dans Ω alors l'équilibre est dit *stable* (état *A* de la figure 1.2).
- la hessienne de l'entropie $\nabla^2 \eta^e$ est définie négative mais l'état d'équilibre ne réalise pas un maximum de l'entropie dans Ω alors l'équilibre est dit *métastable* (état *C* de la figure 1.2). Dans ce cas, une petite perturbation peut apporter suffisamment d'énergie pour faire passer cet état d'équilibre à un état stable comme défini auparavant. Il correspond à l'analogie dans le cas de la mécanique des solides lorsque l'énergie est minimale mais le minimum n'est pas un minimum absolu.
- la hessienne de l'entropie $\nabla^2 \eta^e$ a une valeur propre strictement positive alors l'équilibre est dit *instable* (état *B* de la figure 1.2).

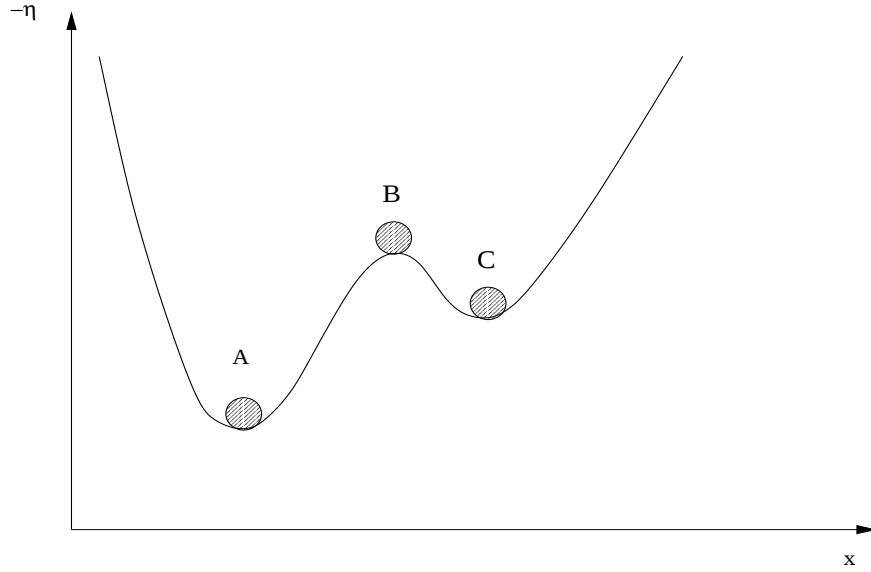


FIG. 1.2 – Représentation des différents états d'équilibres possibles (stable, métastable et instable).

Remarque 1.2. *Savoir si un état est stable, métastable ou instable équivaut donc à savoir si cet état représente un maximum absolu, un maximum local ou un minimum de l'entropie. Ceci est à mettre en relation avec la définition de l'entropie mathématique dans laquelle l'entropie est supposée convexe (qui revient à dire que l'entropie physique est supposée concave). En ajoutant cette contrainte dans la définition de l'entropie, on s'affranchit des problèmes de minimum (ou maximum) local. Un extremum est toujours un extremum global.*

On a donc introduit la notion de *métastabilité* d'un équilibre qui est en quelque sorte un état intermédiaire entre la stabilité et l'instabilité. L'eau liquide à une température inférieure à 0 °C correspond typiquement à un état métastable : on dit qu'elle est *surfondue*. La condition $\nabla^2 \eta^e = 0$

donne la limite de métastabilité de l'équilibre. Ainsi, une substance physique peut passer d'un état stable à un état métastable puis à un état instable par transition de phase. La courbe correspondant à cette limite de métastabilité s'appelle la courbe *spinodale*.

1.1.3 Application à l'étude des fluides

On cherche maintenant à déterminer ce que représente la condition de stabilité $\nabla^2\eta < 0$ dans le cas de fluides. Pour cela, en choisissant comme variables l'énergie interne ε et le volume spécifique τ , la différentielle de l'entropie s'écrit

$$d\eta = \frac{1}{T}d\varepsilon + \frac{P}{T}d\tau,$$

et puisque η est une différentielle totale exacte, les dérivées partielles de l'entropie par rapport à respectivement ε et τ sont données par

$$\left(\frac{\partial\eta}{\partial\varepsilon}\right)_\tau = \frac{1}{T} \quad \text{et} \quad \left(\frac{\partial\eta}{\partial\tau}\right)_\varepsilon = \frac{P}{T}. \quad (1.7)$$

La hessienne de η est définie par

$$\nabla^2\eta = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\varepsilon^2}\right) & \left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\varepsilon\partial\tau}\right) \\ \left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\varepsilon\partial\tau}\right) & \left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\tau^2}\right) \end{pmatrix}.$$

La condition de stabilité $\nabla^2\eta < 0$ sera donc réalisée si le déterminant de $\nabla^2\eta$ est strictement positif et si la trace de $\nabla^2\eta$ est strictement négative. Pour cela on va expliciter les dérivées secondes de η en fonction de données plus physiques pour pouvoir interpréter la condition de stabilité sur la hessienne de η .

Calcul de $(\partial^2\eta/\partial\varepsilon^2)$

La relation (1.7) montre que

$$\left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\varepsilon^2}\right) = -\frac{1}{T^2} \left(\frac{\partial T}{\partial\varepsilon}\right)_\tau,$$

et en utilisant la définition de la chaleur massique isochore c_v , on a

$$\left(\frac{\partial T}{\partial\varepsilon}\right)_\tau = \frac{1}{(\partial\varepsilon/\partial T)_\tau} = \frac{1}{c_v}, \quad (1.8)$$

donc

$$\left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\varepsilon^2}\right) = -\frac{1}{T^2} \cdot \frac{1}{c_v}.$$

Calcul de $(\partial^2\eta/\partial\varepsilon\partial\tau)$

De manière analogue, la relation (1.7) montre que

$$\left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\varepsilon\partial\tau}\right) = -\frac{1}{T^2} \left(\frac{\partial T}{\partial\tau}\right)_\varepsilon,$$

et en utilisant la relation (B.8) de l'annexe (B.1) on a

$$\left(\frac{\partial T}{\partial\tau}\right)_\varepsilon \left(\frac{\partial\tau}{\partial\varepsilon}\right)_T \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial T}\right)_\tau = -1,$$

avec

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_\tau = c_v,$$

donc

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \tau}\right)_\varepsilon = -\frac{1}{c_v} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_T, \quad (1.9)$$

et

$$\left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial \varepsilon \partial \tau}\right) = \frac{1}{T^2} \cdot \frac{1}{c_v} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_T.$$

Calcul de $(\partial^2 \eta / \partial \tau^2)$

Il suffit d'utiliser encore la relation (1.7) et la relation (1.9) pour en déduire

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial \tau^2}\right) &= -\frac{P}{T^2} \left(\frac{\partial T}{\partial \tau}\right)_\varepsilon + \frac{1}{T} \left(\frac{\partial P}{\partial \tau}\right)_\varepsilon \\ &= \frac{P}{T^2} \cdot \frac{1}{c_v} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_T + \frac{1}{T} \left(\frac{\partial P}{\partial \tau}\right)_\varepsilon. \end{aligned}$$

En appliquant la loi de dérivation des fonctions composées, on a

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \tau}\right)_\varepsilon = \left(\frac{\partial P}{\partial \tau}\right)_T + \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\tau \left(\frac{\partial T}{\partial \tau}\right)_\varepsilon,$$

donc en utilisant (1.9), on en déduit

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial \tau^2}\right) &= \frac{P}{T^2} \cdot \frac{1}{c_v} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_T + \frac{1}{T} \left(\frac{\partial P}{\partial \tau}\right)_T - \frac{1}{T} \cdot \frac{1}{c_v} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\tau \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_T \\ &= \frac{1}{T} \left(\frac{\partial P}{\partial \tau}\right)_T + \frac{1}{T^2} \cdot \frac{1}{c_v} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_T \left[P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\tau \right]. \end{aligned}$$

Or, en développant la différentielle de l'entropie dans le jeu de variables T et τ , on a

$$\begin{aligned} d\varepsilon &= T \left[\left(\frac{\partial \eta}{\partial T}\right)_\tau dT + \left(\frac{\partial \eta}{\partial \tau}\right)_T d\tau \right] - P d\tau \\ &= T \left(\frac{\partial \eta}{\partial T}\right)_\tau dT + \left[T \left(\frac{\partial \eta}{\partial \tau}\right)_T - P \right] d\tau, \end{aligned}$$

et comme par ailleurs

$$\begin{aligned} d\varepsilon &= \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_\tau dT + \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_T d\tau \\ &= c_v dT + \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_T d\tau, \end{aligned}$$

on en déduit par identification

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_T = T \left(\frac{\partial \eta}{\partial \tau}\right)_T - P.$$

Enfin, en utilisant le tableau B.2.2, on en déduit que

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_T = T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\tau - P,$$

donc que

$$\left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial \tau^2}\right) = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial P}{\partial \tau}\right)_T - \frac{1}{T^2} \cdot \frac{1}{c_v} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_T^2.$$

Interprétation de la condition de stabilité $\nabla^2\eta < 0$

Le déterminant de $\nabla^2\eta$ est donc donné par

$$\begin{aligned}\det(\nabla^2\eta) &= \left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\varepsilon^2}\right)\left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\tau^2}\right) - \left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\varepsilon\partial\tau}\right)^2 \\ &= -\frac{1}{T^2} \cdot \frac{1}{c_v} \left[\frac{1}{T} \left(\frac{\partial P}{\partial\tau}\right)_T - \frac{1}{T^2} \cdot \frac{1}{c_v} \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial\tau}\right)_T^2 \right] - \frac{1}{T^4} \cdot \frac{1}{c_v^2} \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial\tau}\right)_T^2 \\ &= -\frac{1}{T^3} \cdot \frac{1}{c_v} \left(\frac{\partial P}{\partial\tau}\right)_T,\end{aligned}$$

et la trace de la hessienne de η par

$$\text{Tr}(\nabla^2\eta) = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial P}{\partial\tau}\right)_T - \frac{1}{T^2} \cdot \frac{1}{c_v} \left[\left(\frac{\partial\epsilon}{\partial\tau}\right)_T^2 + 1 \right],$$

donc comme la température est supposée positive, une condition permettant de s'affranchir de $\det(\nabla^2\eta) > 0$ et de $\text{Tr}(\nabla^2\eta) < 0$ à l'équilibre est d'avoir

$$c_v^e > 0, \quad (1.10)$$

et

$$\left(\frac{\partial P}{\partial\tau}\right)_T^e < 0, \quad (1.11)$$

où l'indice e représente l'état d'équilibre.

Remarque 1.3. La condition $(\partial P/\partial\tau)_T < 0$ correspond à une condition de stabilité mécanique et la condition $c_v > 0$ correspond à une condition de stabilité thermique.

1.1.4 Interprétation en pression et équation de Van Der Waals

La condition de stabilité (1.10) dit que la capacité calorifique à volume constant doit être positive. En pratique, on ne connaît pas de corps ayant la particularité d'avoir une capacité calorifique à volume constant négative donc la condition (1.10) ne semble pas restrictive. On s'intéresse plutôt à la condition (1.11) qui en introduisant le coefficient de compressibilité isotherme défini par

$$\chi = -\frac{1}{\tau} \left(\frac{\partial\tau}{\partial P}\right)_T,$$

est équivalent à

$$\chi^e > 0.$$

Une équation d'état susceptible de décrire des transitions de phase d'un gaz à un liquide a été introduite par Van Der Waals dans les années 1880. Il a modifié l'équation d'état d'un gaz parfait

$$P = \frac{(\gamma - 1)c_v T}{\tau}, \quad (1.12)$$

en

$$P = \frac{(\gamma - 1)c_v T}{\tau - b} - \frac{a}{\tau^2}, \quad (1.13)$$

où les coefficients a et b sont des constantes dépendantes du fluide considéré. Le terme en a/τ^2 provient de la prise en compte de l'attraction à longue portée des autres molécules et le terme en $\tau - b$ tient compte du fait que le volume disponible pour chaque molécule doit être diminué du volume qu'occupe les autres molécules. Par conséquent, b est de l'ordre du volume des molécules

individuelles et a représente l'interaction attractive.

En se plaçant à une température suffisamment faible (*i.e.* en dessous d'une température critique $T_c = 8a/(27b(\gamma - 1)c_v)$), l'allure de la représentation de P à une température fixée en fonction de τ est donnée dans la figure 1.3. On remarque que cette courbe possède deux portions : une pour laquelle $(\partial P/\partial \tau)_T \leq 0$ et une autre pour laquelle $(\partial P/\partial \tau)_T \geq 0$, violant ainsi le critère de stabilité (1.11). Cela signifie en notant α et β les points vérifiant $(\partial P/\partial \tau)_T = 0$, que si un volume de fluide se trouve dans la zone (α, β) , il est immédiatement transformé en liquide ou en vapeur. Par conséquent, le système thermodynamique va évoluer vers un autre état thermodynamique qui sera stable.

Il faut remarquer que nous avons supposé que la température était fixée. Ainsi les points α et β dépendent de la température et donc en faisant varier T on obtient une courbe qui est définie par

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \tau}\right)_T = 0.$$

Cette courbe est appelée *courbe spinodale* et correspond à la limite de stabilité ou d'instabilité.

Lorsque la température est supérieure à la température critique T_c , la courbe représentative d'une loi d'état de Van Der Waals est monotone décroissante et il n'y a plus de zone instable. Le fluide est alors sous une forme qu'on appelle *super-critique*.

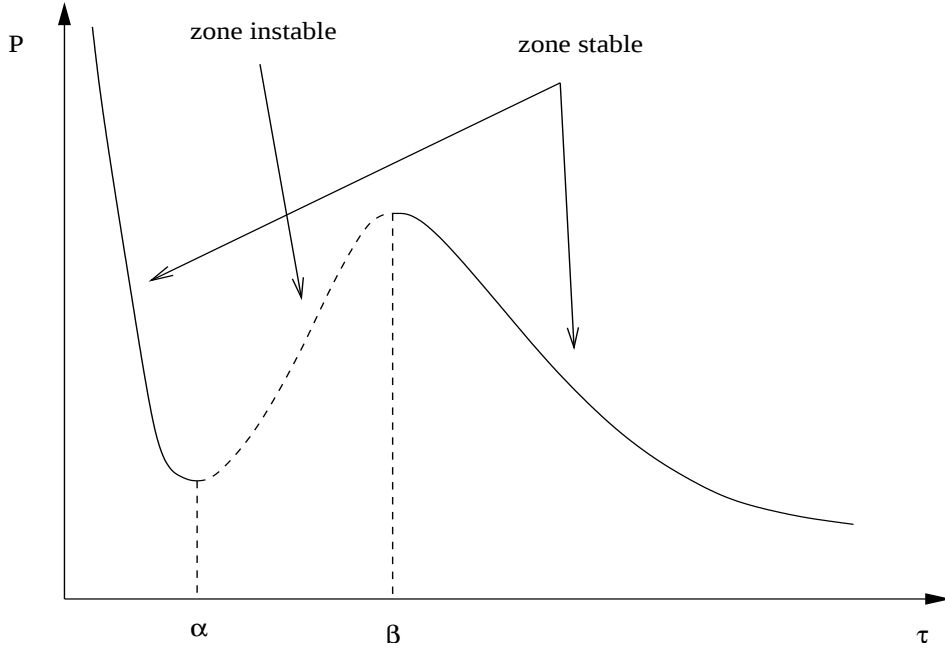


FIG. 1.3 – Zones de stabilité thermodynamiques d'un fluide de Van Der Waals.

1.2 Caractéristiques de l'équilibre liquide-vapeur

Considérons deux phases liquide et vapeur à une température inférieure à la température critique T_c . En notant par l'indice 1 la phase vapeur et l'indice 2 la phase liquide, les conditions d'équilibre de ces deux phases est d'une part l'équilibre thermique

$$T_1 = T_2, \tag{1.14}$$

d'autre part l'équilibre mécanique

$$P_1 = P_2, \quad (1.15)$$

et enfin l'équilibre thermodynamique

$$g_1 = g_2. \quad (1.16)$$

Les deux conditions d'équilibre (1.14) et (1.15) sont classiques si l'on considère deux systèmes thermodynamiques qui n'échangent que du travail et de la chaleur. Lorsque les deux systèmes thermodynamiques sont deux phases distinctes, il apparaît une condition supplémentaire d'équilibre qui est l'équilibre des enthalpies libres. Cette condition provient du fait que ces deux systèmes peuvent échanger de la masse. On retrouve une condition analogue dans le cas de systèmes quelconques pouvant échanger de la matière.

1.2.1 La règle des aires de Maxwell

La différentielle de l'enthalpie libre g est donnée par

$$dg = -\eta dT + \tau dP,$$

donc si on suppose que la température est constante, cette relation se simplifie en

$$dg = \tau dP = d(\tau P) - P d\tau. \quad (1.17)$$

Considérons comme précédemment deux phases à l'équilibre notées 1 et 2. En intégrant (1.17) entre les deux états 1 et 2 et en utilisant la condition d'équilibre (1.16), on en déduit que

$$0 = g_2 - g_1 = \int_1^2 \tau dP = (P_2 \tau_2 - P_1 \tau_1) - \int_{\tau_1}^{\tau_2} P d\tau,$$

puis en utilisant la condition d'équilibre (1.15) on en déduit la règle dite des *aires de Maxwell*

$$\int_{\tau_1}^{\tau_2} P d\tau = P^{sat}(\tau_2 - \tau_1), \quad (1.18)$$

où $P^{sat} = P^{sat}(T)$ est la pression donnée par $P_1 = P_2$. Cette pression est appelée *pression de saturation* et la courbe $T \mapsto P^{sat}(T)$ est appelée *courbe de saturation*.

La relation (1.18) signifie que l'aire entre la courbe représentative de $\tau \mapsto P(\tau, T)$ à T fixée et la droite horizontale P^{sat} doit être nulle. La figure 1.4 illustre cette règle des aires de Maxwell. Dans la figure 1.4, les points m et M sont appelés les *points de Maxwell* et correspondent aux états τ_1 et τ_2 de la relation (1.18).

Les états se trouvant dans la zone (m, M) et vérifiant la condition de stabilité (1.11) sont en fait *métastables*. Physiquement, une phase métastable peut être atteinte en faisant varier le volume d'un système à température constante. Ainsi, si l'on part par exemple de l'état L de la figure 1.4 et qu'on augmente le volume, ce point va se déplacer le long de la courbe $\tau \mapsto P$ pour atteindre l'état de saturation L' . Le système est alors sous forme monophasique liquide mais est métastable, de sorte qu'une petite perturbation augmentant encore le volume va rendre le système thermodynamiquement instable. Ce système transitionne alors pour devenir diphasique jusqu'à atteindre l'état stable sous forme vapeur noté V dans la figure 1.4.

1.2.2 Relation de Clapeyron

Considérons à nouveau un système liquide-vapeur à l'équilibre. On a vu que les conditions d'équilibre (1.14) et (1.15) imposent une température T et une pression de saturation $P^{sat}(T)$

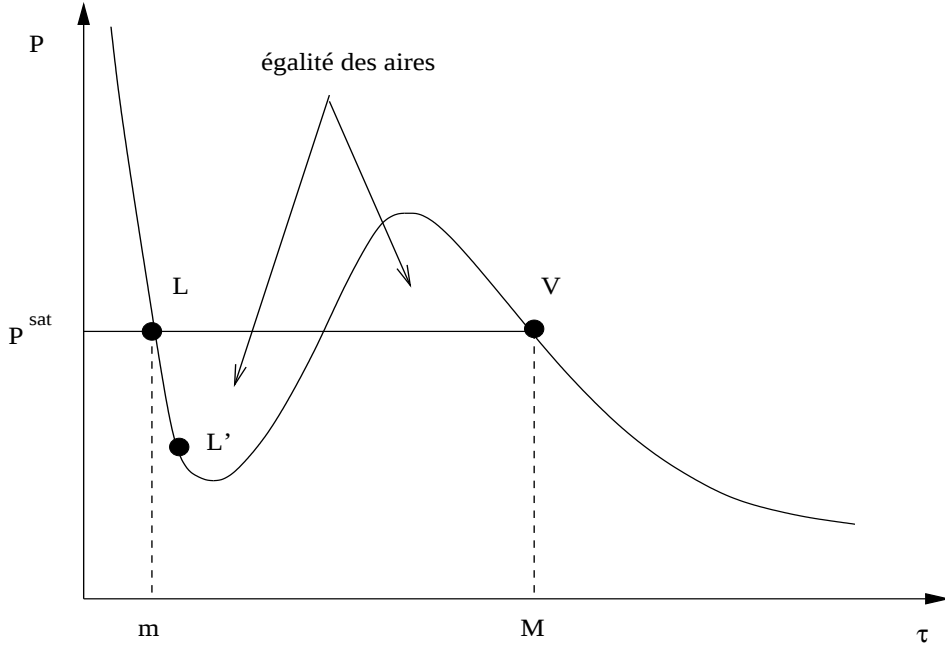


FIG. 1.4 – Règle des aires de Maxwell et définition des points de Maxwell m et M ; P^{sat} désigne la pression de saturation.

pour les deux phases. Ecrivons à présent la condition d'équilibre thermodynamique (1.16) en variables $P - T$

$$g_1(P^{sat}(T), T) = g_2(P^{sat}(T), T). \quad (1.19)$$

On peut alors dériver la relation (1.19) par rapport à T obtenant

$$\frac{\partial g_1}{\partial P_1} \frac{dP^{sat}}{dT} + \frac{\partial g_1}{\partial T_1} = \frac{\partial g_2}{\partial P_2} \frac{dP^{sat}}{dT} + \frac{\partial g_2}{\partial T_2},$$

qui combiné avec les relations du tableau B.2.2 montre que

$$\frac{dP^{sat}}{dT} = \frac{\eta_1 - \eta_2}{\tau_1 - \tau_2}.$$

Finalement, en introduisant la *chaleur latente de changement de phase* définie par

$$\mathcal{L} = T(\eta_1 - \eta_2),$$

on en déduit la *relation de Clapeyron*

$$\frac{dP^{sat}}{dT} = \frac{\mathcal{L}}{T(\tau_1 - \tau_2)}. \quad (1.20)$$

Chapitre 2

Difficultés liées à une loi d'état de type Van Der Waals

Dans ce chapitre on suppose que la température est constante et on considère un fluide suivant une loi d'état de type Van Der Waals (1.13). Comme on a vu dans le chapitre 1, la courbe représentative de $\tau \mapsto P(\tau)$ possède une zone (α, β) pour laquelle

$$\frac{dP}{d\tau} \geq 0.$$

Une telle inégalité revient à dire qu'un état se trouvant dans cette zone est instable (condition (1.11)). Dans la suite, en étudiant un système très simple de la mécanique des fluides (à savoir le p-système), on va voir que cette zone entraîne également des difficultés pour appliquer les critères classiques de sélection de solutions pour les systèmes de lois de conservation.

2.1 Difficulté avec le critère de Lax pour une loi d'état de Van Der Waals

En coordonnées lagrangiennes et en hypothèse isotherme, le système étudié est le p-système. Celui-ci s'écrit sous la forme

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X u &= 0, \\ \partial_t u + \partial_X P &= 0, \end{cases} \quad (2.1)$$

où u est la vitesse du fluide, X est la variable lagrangienne d'espace et $P = P(\tau)$ suit une loi d'état de type van der Waals (1.13) dont un profil est donné dans la figure 1.3.

Considérons à présent une interface Γ séparant les deux phases et soit σ la vitesse de cette interface. Les relations de saut de Rankine Hugoniot doivent être satisfaites à travers Γ donc en notant $[\cdot]$ le saut à travers Γ , on a

$$\begin{cases} -\sigma[\tau] - [u] &= 0, \\ -\sigma[u] + [P] &= 0. \end{cases} \quad (2.2)$$

En particulier σ vérifie

$$\sigma^2 = -\frac{[P]}{[\tau]}.$$

Considérons la vitesse du son c définie là où cela a un sens (*i.e.* pour les τ n'étant pas dans la zone (α, β)) par

$$c^2 = -\frac{dP}{d\tau}.$$

Un choc reliant un état A à un état B est admissible au sens de Lax si σ vérifie l'inégalité

$$c_B < \sigma < c_A,$$

ou

$$-c_B < \sigma < -c_A.$$

Géométriquement, cela signifie que la pente de la droite joignant A à B est comprise entre les tangentes de la courbe représentative de $\tau \mapsto P(\tau)$ en A et B . La figure 2.1 donne un exemple de choc entre A et B où les conditions de Lax sont satisfaites pour un choc allant d'un état A à un état B .

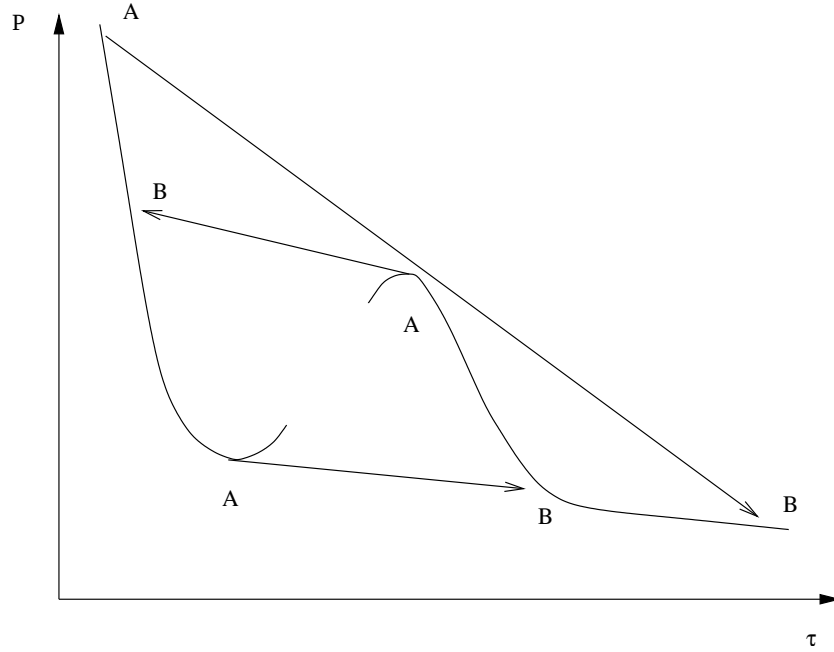


FIG. 2.1 – Exemple de choc entre les états A et B où les conditions de Lax sont satisfaites.

Si on considère les points de Maxwell m et M (1.18), σ vérifie l'inégalité

$$\sigma^2 < \min(c_A^2, c_B^2).$$

Par conséquent m et M ne vérifient pas les conditions de Lax. Or on sait par des considérations physiques qu'une solution discontinue possible de (2.1) avec la condition initiale $(\tau, u)(t = 0) = (m, M)$ est la solution

$$(\tau, u) = \begin{cases} (m, 0), & X < 0, \\ (M, 0), & X > 0. \end{cases}$$

Dans ce cas, la vitesse de changement de phase σ est nul. Le nombre de molécules passant d'un état gazeux à un état liquide égale le nombre de molécules passant d'un état liquide à un état gazeux.

Les points de Maxwell ne sont pas les seuls dans ce cas et on peut construire géométriquement d'autres états violant le critère de Lax comme les états A' et B' dans la figure 2.2.

On peut également noter qu'un choc au sens de Lax est supersonique d'un côté de la discontinuité et subsonique de l'autre alors que dans les transitions de phase, le *choc* est subsonique de

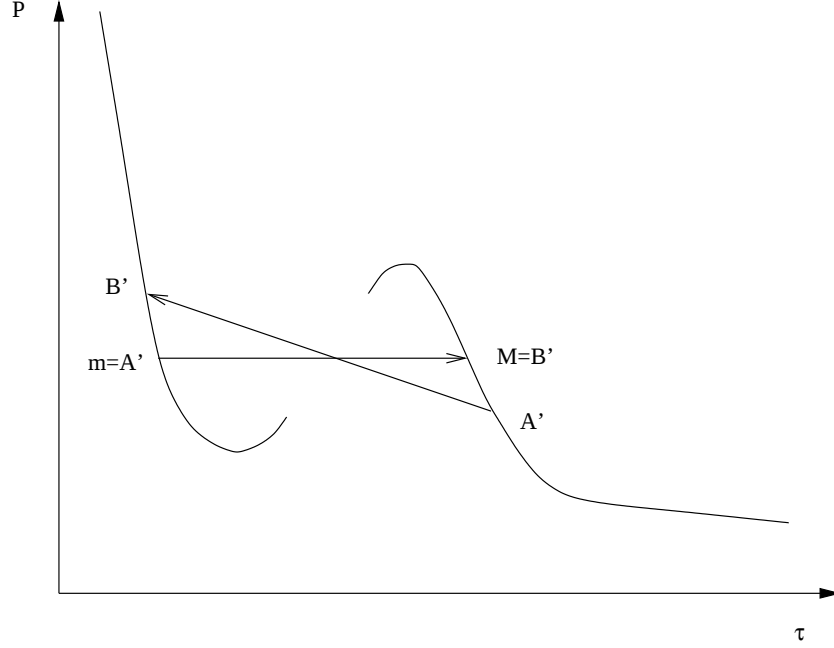


FIG. 2.2 – Exemple de *choc* entre les états A' et B' où les conditions de Lax ne sont pas satisfaites.

chaque côté, ces chocs sont alors appelés dans [73] des *kinks*.

Dans le cas de choc classique, trois caractéristiques rentrent dans la discontinuité plus les deux relations de sauts de Rankine Hugoniot, cela fait autant d'équations que d'inconnues qui sont au nombre de cinq à savoir τ_A , τ_B , u_A , u_B et σ . Dans le cas de transition de phase, seulement deux caractéristiques rentrent dans la discontinuité ce qui fait quatre équations pour cinq inconnues. Il nous manque donc une relation supplémentaire pour sélectionner la solution. Cette relation manquante est communément appelée relation cinétique [1, 13, 48, 34, 73].

2.2 Difficulté du critère visqueux

Un critère classique de sélection des solutions de système de lois de conservation est le *critère visqueux*. Celui-ci consiste à ajouter artificiellement de la viscosité sur le système étudié puis à choisir la solution comme celle limite (lorsqu'elle existe) du système visqueux lorsque la viscosité tend vers zéro.

Pour étudier comment se comporte ce critère, on étudie à nouveau le p-système lorsque le tenseur des contraintes comporte un terme de viscosité (terme d'ordre 2 sur la vitesse). Ce système s'écrit alors

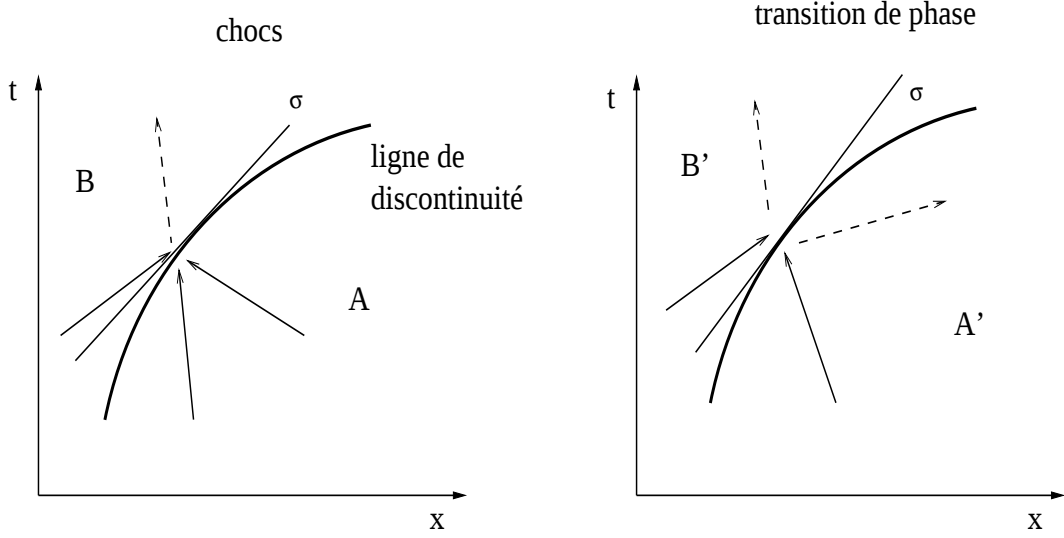
$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X u &= 0, \\ \partial_t u - \partial_X \Pi &= 0, \end{cases} \quad (2.3)$$

où Π est le tenseur des contraintes défini par

$$\Pi = -P + \mu \partial_X u, \quad \mu > 0.$$

On s'intéresse au problème de Riemann

$$(\tau, u)|_{t=0} \begin{cases} (\tau_L, \tau_R) & X < 0, \\ (u_L, u_R) & X > 0. \end{cases} \quad (2.4)$$

FIG. 2.3 – Trace des caractéristiques, σ étant la vitesse du *choc*.

En supposant qu'il existe des solutions *visqueuses* de (2.3), on cherche des solutions particulières sous la forme d'ondes progressives planes

$$\tau^\mu(X, t) := \tau(\xi), \quad u^\mu(X, t) := u(\xi), \quad \xi = \frac{X - \sigma t}{\mu}.$$

Il vient immédiatement en reportant dans (2.3) que τ et u doivent satisfaire le système d'équations différentielles ordinaires (EDO) aux limites suivant

$$\begin{cases} \sigma \tau' + u' = 0, \\ \sigma u' + P' - \mu u'' = 0, \\ (\tau, u)(-\infty) = (\tau_L, u_L), \\ (\tau, u)(+\infty) = (\tau_R, u_R), \end{cases} \quad (2.5)$$

où l'indice $'$ désigne la dérivée par rapport à la variable ξ .

Remarque 2.1. Si on suppose qu'il existe une solution de (2.5) reliant (τ_L, u_L) à (τ_R, u_R) et si on suppose de plus que $(\tau', u')(\pm\infty) = 0$ alors les relations de saut de Rankine Hugoniot sont satisfaites.

Définition 2.1. S'il existe une solution (τ, u) de (2.5), on dira que (τ_L, u_L) et (τ_R, u_R) sont admissibles pour le critère visqueux et alors on dira qu'un choc solution de (2.3)

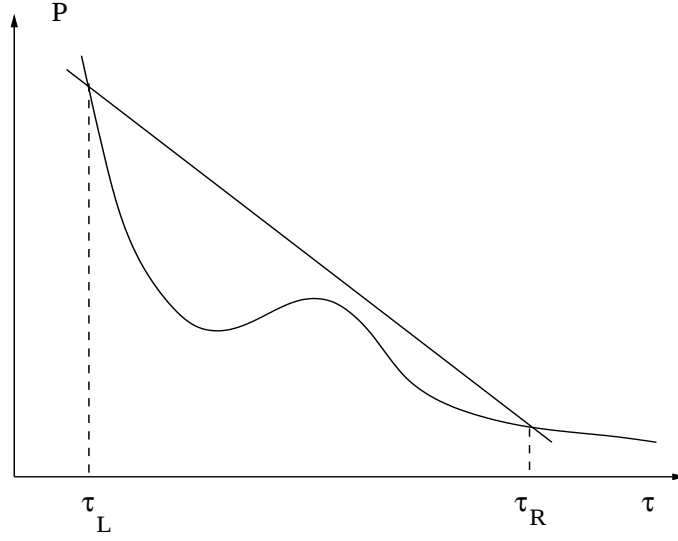
$$(\tau, u)(x, t) = \begin{cases} (\tau_L, u_L) & x < \sigma t \\ (\tau_R, u_R) & x > \sigma t \end{cases}$$

est admissible par critère visqueux.

Théorème 2.1. [69] Le critère visqueux est satisfait si et seulement si

$$-\sigma^2 > \frac{P - P_L}{\tau - \tau_L} \quad (\text{resp. } <) \quad \text{si } \sigma > 0 \quad (\text{resp. } <)$$

pour tout $\tau \in (\tau_L, \tau_R)$ avec $P(\tau_L) + \sigma^2 \tau_L = P(\tau_R) + \sigma^2 \tau_R$. Géométriquement, cela signifie que la corde reliant $(\tau_L, P(\tau_L))$ à $(\tau_R, P(\tau_R))$ est au dessus (resp. en dessous) du graphe de P si $(\tau_R - \tau_L)\sigma > 0$ (resp. $(\tau_R - \tau_L)\sigma < 0$).

FIG. 2.4 – Un exemple où τ_L et τ_R sont admissibles pour le critère visqueux.

Remarque 2.2. La condition du théorème 2.1 est l'analogie des conditions d'Oleinik pour les équations scalaires de lois de conservation. Un exemple de pression admissible est donné dans la figure 2.4.

Preuve.

Soient σ , τ_L et τ_R vérifiant les hypothèses du théorème 2.1 et quitte à changer $\tau(\xi)$ en $\tau(-\xi)$, on peut supposer $\sigma > 0$.

En intégrant de $-\infty$ à τ le système (2.5), celui-ci peut être remis sous la forme équivalente à

$$\begin{cases} \sigma^2 \tau + P(\tau) - \pi = -\sigma \tau', \\ \tau(-\infty) = \tau_L, \\ \tau(+\infty) = \tau_R, \end{cases} \quad (2.6)$$

avec $\pi = P(\tau_L) + \sigma^2 \tau_L$. Ensuite u est simplement donné par $u' = -\sigma \tau'$, $[u] = -\sigma[\tau]$.

Considérons

$$\left| \begin{array}{ccc} f : & \mathbb{R}^+ & \longrightarrow \mathbb{R} \\ \tau & \longmapsto & -\frac{\sigma^2 \tau + P(\tau) - \pi}{\sigma} \end{array} \right.$$

Sous les hypothèses du théorème, on a $f > 0$ dans (τ_L, τ_R) et le système (2.6) s'écrit sous la forme condensée

$$\tau' = f(\tau), \quad \tau(-\infty) = \tau_L, \quad \tau(+\infty) = \tau_R$$

Pour conclure, on a besoin du lemme suivant

Lemme 2.1. Soit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction régulière et considérons l'équation différentielle suivante

$$\frac{dx}{dt} = f(x). \quad (2.7)$$

On suppose qu'il existe deux points d'équilibre x_1 et x_2 de (2.7) (i.e. tels que $f(x_i) = 0$ pour $i = 1, 2$) tels que $f > 0$ dans (x_1, x_2) . Alors il existe une solution $x = x(t)$ de (2.7) vérifiant $x(-\infty) = x_1$ et $x(+\infty) = x_2$.

Preuve du lemme.

Soit $x_0 \in (x_1, x_2)$ et notons $\phi(t, x_0)$ le flot associé à f [36, 60]. Comme x_1 et x_2 sont des points d'équilibres de (2.7), par unicité, $\phi(t, x_0)$ reste dans (x_1, x_2) pour tout t donc $\partial_t \phi = f(\phi) > 0$. Ainsi, ϕ est croissante en t . La croissance de ϕ en t et la bornétude de ϕ implique que $t \mapsto \phi(t, x_0)$ est définie sur $\mathbb{R}$ et les limites

$$\phi_{\infty}^{-}(x_0) = \lim_{t \rightarrow -\infty} \phi(t, x_0), \quad \phi_{\infty}^{+}(x_0) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \phi(t, x_0),$$

existent.

La croissance de ϕ en t et l'existence de limites en $+\infty$ et en $-\infty$ prouvent également que

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \partial_t \phi = 0,$$

donc $\phi_{\infty}^{-}(x_0)$ et $\phi_{\infty}^{+}(x_0)$ sont des points d'équilibres de f . Comme $x_1 \leq \phi_{\infty}^{-}(x_0) < \phi_{\infty}^{+}(x_0) \leq x_2$, nécessairement $\phi_{\infty}^{-}(x_0) = x_1$ et $\phi_{\infty}^{+}(x_0) = x_2$. □

Le lemme nous donne donc l'existence d'une solution (τ, u) de (2.5).

Réciproquement, s'il existe une solution de (2.5) donc de (2.6), alors on a $\sigma^2 \tau + P(\tau) - \pi = -\sigma \tau'$. Supposons $\tau_L < \tau_R$ et qu'il existe ξ_0 tel que $\tau'(\xi_0) = 0$ alors, avec des notations évidentes, $\sigma^2 \tau_0 + P_0 - \pi = 0$, donc $\tau_0 = \tau(\xi_0)$ est un point d'équilibre et par unicité, $\tau \equiv \tau(\xi_0)$ ce qui est impossible. Donc $\tau' > 0$ et $\sigma^2(\tau - \tau_L) + P(\tau) - P(\tau_L) < 0$ pour tout $\tau \in (\tau_L, \tau_R)$. □

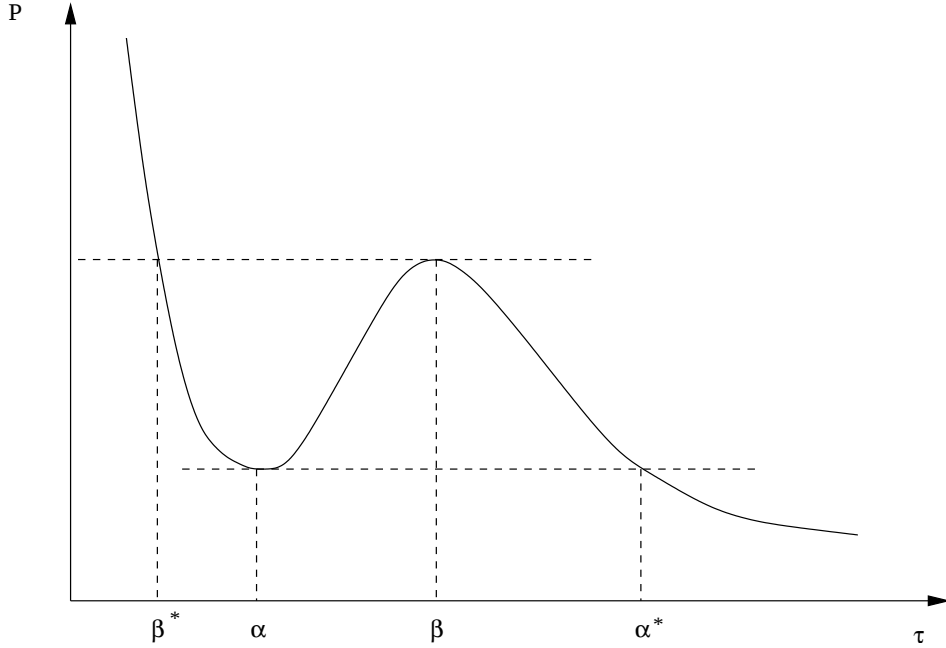


FIG. 2.5 – Loi d'état de Van Der Waals, définitions de α^* et β^* .

Proposition 2.1. *Soit $\alpha^* \in (\beta, +\infty)$ tel que $P(\alpha^*) = P(\alpha)$ et $\beta^* \in (b, \alpha)$ tel que $P(\beta^*) = P(\beta)$ comme dans la figure 2.5. Supposons que $\tau_L \in [\beta^*, \alpha]$ (ou $\tau_L \in [\beta, \alpha^*]$) et τ_R dans l'autre phase, alors il n'existe pas de solutions admissibles pour le critère visqueux lorsque la loi d'état est une loi d'état de type Van Der Waals.*

Preuve.

La droite joignant les points $(\tau_L, P(\tau_L))$ et $(\tau_R, P(\tau_R))$ coupe le graphe de P donc d'après le théorème 2.1 le critère d'admissibilité visqueux ne peut être satisfait. $\square$

Pour remédier aux problèmes de sélection liés aux lois d'états type Van Der Waals, il faut trouver un nouveau critère différent des critères classiques des systèmes hyperboliques de lois de conservation. En fait la régularisation visqueuse ne prend pas en compte les effets interfaciaux que sont les effets capillaires. Le nouveau critère, appelé critère visco-capillaire, consiste à trouver des solutions ondes progressives planes reliant deux états gauche et droit en prenant en compte des dérivées spatiales d'ordre supérieur.

2.3 Régularisation visco-capillaire

L'ajout de viscosité n'est pas suffisant pour donner une structure à l'interface [73]. Les phénomènes physiques se produisant dans une interface de changement de phase sont de nature différente de ceux se produisant dans une interface de choc. Lors de la régularisation visqueuse, une énergie spécifique interfaciale représentant des effets de capillarité a été omise. Cette énergie dépend du gradient de τ , terme non négligeable près de l'interface. En suivant [5, 38, 73], on suppose que l'énergie interne ε dépend de τ , de la température T et du gradient de τ de la façon suivante

$$\varepsilon = \varepsilon^{cl} + \frac{\mu^2 A}{2} |\nabla \tau|^2,$$

où μ est un paramètre d'échelle et $A > 0$ est une constante. La quantité ε^{cl} représente une énergie interne *classique* ne dépendant que de τ et de T .

En prenant en compte cette énergie interfaciale supplémentaire, le p-système s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X u = 0, \\ \partial_t u - \partial_X \Pi = 0, \\ \partial_t e - \partial_X (\Pi u) = -\partial_X q + \partial_X k, \end{cases} \quad (2.8)$$

où q est un flux de chaleur, k est un flux caractéristique [5, 65] représentant le travail interstitiel

$$k = \mu^2 A (\partial_X u) (\partial_X \tau),$$

Π est le tenseur de pression qui, par le choix de ε , est défini par

$$\Pi = -P + \mu \partial_X u - \mu^2 A \partial_{XX}^2 \tau.$$

et e est l'énergie spécifique totale

$$e = \frac{u^2}{2} + \varepsilon.$$

Les équations complètes du mouvement avec régularisation visco-capillaire s'écrivent donc en 1-D et en lagrangien

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X u = 0, \\ \partial_t u - \partial_X \Pi = 0, \\ \partial_t e - \partial_X (\Pi u) = -\partial_X q + \partial_X k, \end{cases} \quad (2.9)$$

avec

$$\begin{cases} \Pi = -P + \mu \partial_X u - \mu^2 A \partial_{XX}^2 \tau, \\ k = \mu^2 A (\partial_X u) (\partial_X \tau), \\ e = \frac{u^2}{2} + \varepsilon^{cl} + \frac{\mu^2 A}{2} |\partial_X \tau|^2. \end{cases}$$

Remarque 2.3. *Ce système d'équation est aussi valable en dimension supplémentaire et une version eulérienne est donnée dans [5, 38, 73].*

L'équation sur l'entropie η est obtenue à l'aide du second principe de la thermodynamique. Celui nous dit qu'il existe une fonction η concave telle que

$$T d\eta = d\varepsilon - \delta W_p - \delta W_c,$$

où δW_p désigne le travail élémentaire des forces de pression et δW_c celui des forces capillaires

$$\delta W_p = -P d\tau, \quad \delta W_c = \frac{\mu^2 A}{2} d(|\partial_X \tau|^2).$$

L'équation sur η s'écrit donc

$$T \partial_t \eta = \partial_t \varepsilon + P \partial_t \tau - \frac{\mu^2 A}{2} \partial_t (|\partial_X \tau|^2),$$

avec

$$\begin{aligned} \partial_t \varepsilon &= \partial_t e - u \partial_t u \\ &= \partial_X (\Pi u) + \partial_X (\mu^2 A \partial_X u \partial_X \tau) - \partial_X q - u \partial_X \Pi \\ &= \Pi \partial_X u + \partial_X (\mu^2 A \partial_X u \partial_X \tau) - \partial_X q \end{aligned}$$

donnant

$$T \partial_t \eta = \mu |\partial_X u|^2 - \partial_X q$$

puis

$$\partial_t \eta = \frac{\mu |\partial_X u|^2}{T} - \frac{\partial_X q}{T}. \quad (2.10)$$

Remarque 2.4. *L'équation sur l'entropie est la même que si les effets capillaires n'avaient pas été pris en compte grâce au flux interfacial k qui a été construit dans ce sens.*

2.4 Relation cinétique

Le but est de trouver la relation supplémentaire permettant de calculer les états intermédiaires de la solution admissible du problème de Riemann dans le cas de transition de phase et ceci à partir du système d'équations (2.9). Pour cela on recherche des solutions particulières de (2.9) sous la forme d'ondes progressives

$$(\tau, u, T)(t, X) := (\tau, u, T)(\xi), \quad \xi = \frac{X - \sigma t}{\mu}$$

avec les conditions aux limites

$$(\tau, u, T)(-\infty) = (\tau_L, u_L, T_L), \quad (\tau, u, T)(+\infty) = (\tau_R, u_R, T_R)$$

Evidemment, il n'existe pas toujours des solutions de ce type de (2.9) et on est limité sur le choix des valeurs des limites et sur le choix de σ .

On suppose également que le flux de chaleur q suit une loi de Fourier

$$q = -\mu \kappa \partial_X T,$$

et en notant $'$ la dérivée par rapport à ξ , on suppose que (τ, u, T) vérifie de plus les conditions aux limites sur les dérivées suivantes

$$(\tau', u', T')(-\infty) = (0, 0, 0), \quad (\tau', u', T')(+\infty) = (0, 0, 0).$$

Proposition 2.2. *Il existe une solution onde progressive de (2.9) si et seulement si (τ, u, T, σ) est solution de*

$$\begin{cases} u = u_L - \sigma(\tau - \tau_L) \\ 0 = A\tau'' + \sigma\tau' + P(\tau, T) - P(\tau_L, T_L) + \sigma^2(\tau - \tau_L) \\ \kappa T' = \frac{\sigma^3}{2}(\tau - \tau_L)^2 - \sigma(\varepsilon^{cl}(\tau, T) - \varepsilon^{cl}(\tau_L, T_L)) - \sigma(\tau - \tau_L)P(\tau_L, T_L) + \frac{\sigma A}{2}|\tau'|^2 \end{cases}$$

avec les conditions aux limites

$$(\tau, u, T)(-\infty) = (\tau_L, u_L, T_L), \quad (\tau, u, T)(+\infty) = (\tau_R, u_R, T_R)$$

$$\text{et } (\tau', u', T')(\pm\infty) = (0, 0, 0)$$

De plus cette solution (τ, u, T) fournit une entropie η vérifiant

$$-\sigma\eta' - \left(\frac{\kappa T'}{T}\right)' = \sigma^2 \frac{|\tau'|^2}{T} + \left(\frac{\kappa T'}{T}\right)^2 \quad (2.11)$$

Preuve.

Grâce à (2.9), (τ, u, T) doit satisfaire

$$\begin{cases} -\sigma\tau' = u', \\ -\sigma u' = (-P + u' - A\tau'')', \\ -\sigma e' = (u(-P + u' - A\tau'') + Au'\tau' + \kappa T')'. \end{cases}$$

En intégrant la première équation de $-\infty$ à ξ , on en déduit

$$u = u_L - \sigma(\tau - \tau_L),$$

puis en intégrant la deuxième et en utilisant $-\sigma\tau' = u'$, on en déduit

$$A\tau'' + \sigma\tau' + P(\tau, T) - P(\tau_L, T_L) + \sigma^2(\tau - \tau_L) = 0.$$

Pour l'équation sur l'énergie, il suffit de procéder de la même manière en utilisant en addition

$$e(\tau, T) - e(\tau_L, T_L) = -\sigma \frac{(\tau - \tau_L)(u + u_L)}{2} + \varepsilon^{cl}(\tau, T) - \varepsilon^{cl}(\tau_L, T_L) + \frac{A}{2}(\tau')^2.$$

Ainsi, on a

$$-\sigma(e - e_L) = u(-P - \sigma\tau' - A\tau'') + u_L P_L + \kappa T' + Au'\tau',$$

et

$$\frac{\sigma^2}{2}(\tau - \tau_L)(u + u_L) - \sigma(\varepsilon^{cl} - \varepsilon_L^{cl}) - \frac{\sigma^2 A}{2}|\tau'|^2 = P_L(u_L - u) + \sigma^2 u(\tau - \tau_L) + \kappa T' - \sigma A|\tau'|^2,$$

donnant

$$\kappa T' = \frac{\sigma^3}{2}(\tau - \tau_L)^2 - \sigma(\varepsilon^{cl}(\tau, T) - \varepsilon^{cl}(\tau_L, T_L)) - \sigma(\tau - \tau_L)P(\tau_L, T_L) + \frac{\sigma A}{2}|\tau'|^2.$$

□

En effectuant $\xi \rightarrow +\infty$ dans les relations de la proposition 2.2, on obtient les relations suivantes entre l'état gauche (τ_L, u_L, T_L) , l'état droit (τ_R, u_R, T_R) et la vitesse de changement de phase σ :

$$\left\{ \begin{array}{l} u_R + \sigma \tau_R = u_L + \sigma \tau_L \\ P(\tau_R, T_R) + \sigma^2 \tau_R = P(\tau_L, T_L) + \sigma^2 \tau_L \\ \varepsilon^{cl}(\tau_R, T_R) - \varepsilon^{cl}(\tau_L, T_L) = -\frac{P_R + P_L}{2}(\tau_R - \tau_L) \\ \int_{\tau_L}^{\tau_R} P(v) dv - \frac{P_R + P_L}{2}(\tau_R - \tau_L) = -\sigma \int_{-\infty}^{+\infty} (\tau')^2 d\xi \\ -\sigma(\eta_R - \eta_L) + \left[\frac{q_R}{T_R} - \frac{q_L}{T_L} \right] = \sigma^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\tau')^2}{T} d\xi + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{q}{T} \right)^2 d\xi \end{array} \right.$$

Remarque 2.5. Si on fait $\sigma = 0$ dans la quatrième relation, on retrouve la règle des aires de Maxwell.

Proposition 2.3. En notant $[a] = a_R - a_L$ le saut d'une quantité a à travers l'interface, et en gardant les mêmes notations, le saut

$$-\sigma[\eta] + \left[\frac{q}{T} \right] := R(\sigma)$$

est une fonction de σ , de plus on a

$$R(\sigma) = \sigma^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\tau')^2}{T} d\xi + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{q}{T} \right)^2 d\xi.$$

Cette relation s'appelle relation cinétique et est la relation supplémentaire souhaitée.

Remarque 2.6. Dans cette relation cinétique, $\tau = \tau(\xi, \sigma)$ et $T = T(\xi, \sigma)$ donc il n'est pas concevable de vouloir résoudre numériquement cette équation en σ pour trouver σ . Néanmoins, il est possible d'utiliser cette relation en utilisant une approximation, par exemple en faisant un développement de Taylor pour des petites valeurs de σ .

Remarque 2.7. On voit que $R(\sigma) \geq 0$, donc la relation cinétique nous assure que la discontinuité de changement de phase est entropique.

2.5 Conclusion

On a présenté dans ce chapitre les difficultés de sélection de solutions liées au caractère croissant de $\tau \mapsto P(\tau)$ dans une certaine zone lorsque le système étudié est le p-système. On a également présenté la régularisation visco-capillaire pour le p-système. Cette régularisation fait intervenir dans les équations des dérivées spatiales sur le volume spécifique d'ordre trois. Ces termes proviennent de la prise en compte d'une énergie interfaciale qui représente les effets capillaires, énergie qui n'existe pas lorsque les interfaces sont des interfaces de chocs. On peut citer par exemple Truskinovsky [73], Casal et Gouin [12], Gurtin [32] qui ont mis en évidence ces termes de capillarité dans l'énergie interne.

Dans le chapitre suivant, on s'intéresse au comportement d'un nouveau critère de sélection des solutions appelé critère *visco-capillaire*. Ce critère a fait l'objet de nombreuses études par Slemrod [69], Shearer [67], Fan [21], LeFloch [34, 48] ... dans le cas isotherme puis par Grinfeld [31], Mischaikov [55] dans le cas nonisotherme. On peut également citer Abeyaratne et Knowles [1] qui ont travaillé sur les transitions de phases solide-solide. Mais nous reprenons l'étude en détail dans le but d'écrire un solveur de Riemann pour le p-système lorsque la loi d'état est une loi d'état de type Van Der Waals.

Chapitre 3

Critère visco-capillaire (cas isotherme)

3.1 Existence d'ondes progressives pour la régularisation visco-capillaire

On suppose désormais que la pression P suit une loi d'état de type Van Der Waals. Toujours en supposant être en hypothèse isotherme et en une dimension d'espace, on cherche des solutions ondes progressives du p-système avec régularisation visco-capillaire. Celui-ci s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X u = 0, \\ \partial_t u - \partial_X \Pi = 0, \end{cases} \quad (3.1)$$

où Π est le tenseur des contraintes défini par

$$\Pi = -P + \mu \partial_X u - \mu^2 A \partial_X^2 \tau, \quad \mu, A > 0.$$

Ainsi, on cherche des solutions de (3.1) de la forme

$$(\tau, u)(\xi) := (\tau^\mu, u^\mu) \left(\frac{X - \sigma t}{\mu} \right),$$

du système d'EDO aux limites suivant

$$\begin{cases} \sigma \tau' + u' = 0, \\ \sigma u' - P' = -u'' + A \tau''', \\ (\tau, u)(-\infty) = (\tau_L, u_L), \\ (\tau, u)(+\infty) = (\tau_R, u_R), \end{cases} \quad (3.2)$$

où on a toujours noté $' = d/d\xi$.

Définition 3.1. *S'il existe une solution (τ, u) de (3.2), nous dirons que (τ_L, u_L) et (τ_R, u_R) sont admissibles pour le critère visco-capillaire, et alors on dira qu'un choc solution de (3.1)*

$$(\tau, u)(t, X) = \begin{cases} u_L & X < \sigma t \\ u_R & X > \sigma t \end{cases}$$

est admissible par critère visco-capillaire.

En intégrant le système (3.2) de $-\infty$ à ξ et en éliminant u , (3.2) se réduit à

$$\begin{cases} A\tau'' + \sigma\tau' + P + \sigma^2\tau = \pi, \\ \tau(-\infty) = \tau_L, \\ \tau(+\infty) = \tau_R, \end{cases} \quad (3.3)$$

où la constante π est donnée par

$$\pi := P(\tau_L) + \sigma^2\tau_L \quad (3.4)$$

et quitte à changer $\{\xi \mapsto \tau(\xi)\}$ en $\{\xi \mapsto \tau(-\xi)\}$, on peut supposer $\sigma > 0$.

Remarque 3.1. En supposant qu'il existe une solution τ de (3.3), en multipliant par τ' et en intégrant de $-\infty$ à $+\infty$, on en déduit la relation suivante

$$\int_{\tau_L}^{\tau_R} P dw - \frac{P_R + P_L}{2}(\tau_R - \tau_L) = -\sigma \int_{-\infty}^{+\infty} (\tau')^2 d\xi. \quad (3.5)$$

Ainsi le signe de σ est l'opposé du signe de la quantité

$$\int_{\tau_L}^{\tau_R} P dw - \frac{P_R + P_L}{2}(\tau_R - \tau_L).$$

De plus, si on fait $\sigma = 0$ dans (3.5) alors $P_L = P_R$ grâce à (3.4) et on retrouve la règle des aires de Maxwell.

Pour caractériser les états gauche et droit admissibles par le critère visco-capillaire, quelques notations sont utiles (voir [67] pour plus de détails).

On note α^* l'unique $\tau > \beta$ vérifiant $P(\alpha^*) = P(\alpha)$ et β^* l'unique $\tau < \alpha$ vérifiant $P(\beta^*) = P(\beta)$ comme dans la figure 3.1.

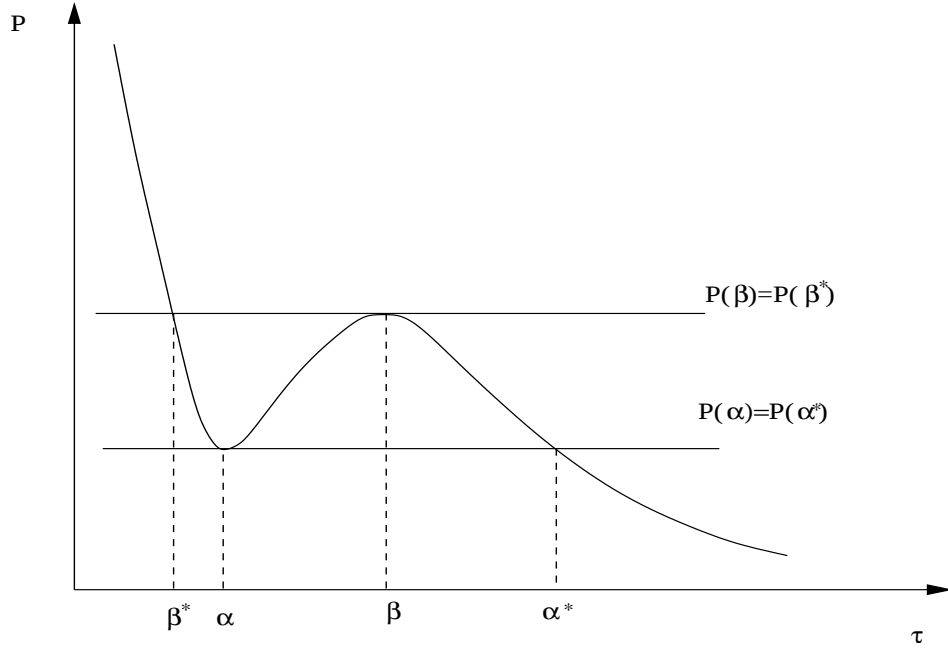


FIG. 3.1 – Définitions de α^* et β^* .

En désignant l'interface comme la zone (α, β) , à τ donné dans une phase, on note τ^* l'unique état dans l'autre phase vérifiant $P(\tau^*) = P(\tau)$. Enfin, comme dans la figure 3.2, pour tout τ_L et σ donnés dans une phase, on note $\tau_R(\sigma)$ la solution (si elle existe) dans l'autre phase de l'équation en τ :

$$P(\tau) - P(\tau_L) + \sigma^2(\tau - \tau_L) = 0.$$

De la même manière on définit $\tau_L(\sigma)$ pour τ_R et σ donnés dans une phase.

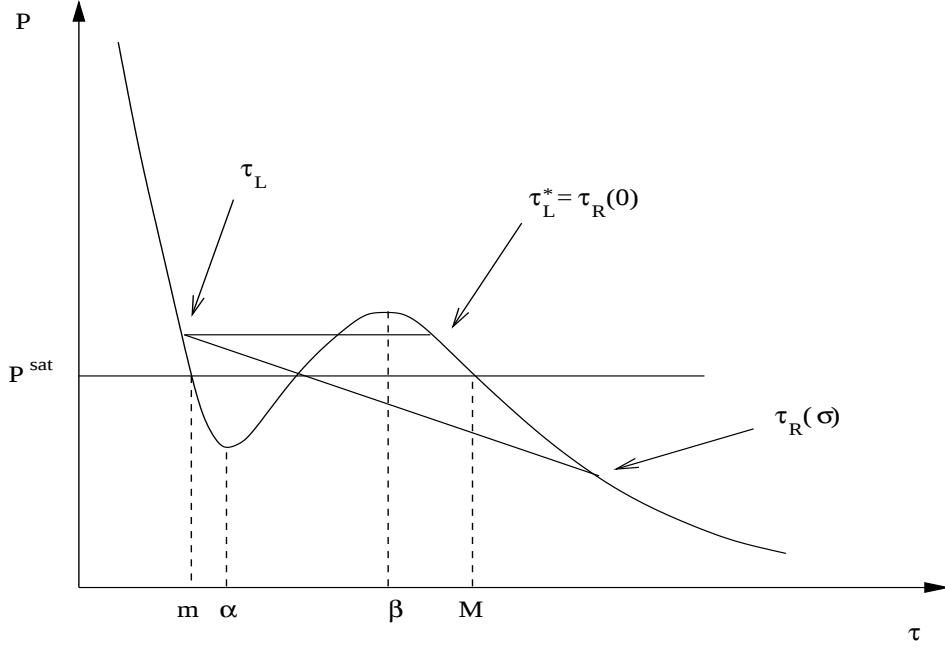


FIG. 3.2 – Définitions de τ^* et $\tau_R(\sigma)$.

Théorème 3.1. Soit $A > 0$ fixé.

1. Soit τ_L donné, $\tau_L > \beta^*$, et supposons que

$$\int_{\tau_L}^{\tau_R(0)} (P(w) - P(\tau_L)) dw < 0, \quad (3.6)$$

alors il existe une vitesse σ^* , $0 < \sigma^* < \bar{\sigma}$ et une fonction τ solution de (3.3) telles que $\tau(-\infty) = \tau_L$, $\tau(+\infty) = \tau_R(\sigma^*)$, la vitesse $\bar{\sigma}$ étant caractérisé par

$$\int_{\tau_L}^{\tau_R(\bar{\sigma})} (P(w) - P(\tau_L) + \bar{\sigma}^2(w - \tau_L)) dw = 0.$$

De plus la régularité de τ_R et de σ par rapport à τ_L est la même que celle de P par rapport à τ .

2. Soit τ_R donné, $\tau_R < \alpha^*$, et supposons que

$$\int_{\tau_L(0)}^{\tau_R} (P(w) - P(\tau_R)) dw > 0, \quad (3.7)$$

alors il existe une vitesse σ^* , $\bar{\sigma} < \sigma^* < 0$ et une fonction τ solution de (3.3) telles que $\tau(-\infty) = \tau_L(\sigma^*)$, $\tau(+\infty) = \tau_R$, la vitesse $\bar{\sigma}$ étant caractérisé par

$$\int_{\tau_L(\bar{\sigma})}^{\tau_R} (P(w) - P(\tau_R) + \bar{\sigma}^2(w - \tau_R)) dw = 0.$$

De plus la régularité de τ_L et de σ par rapport à τ_R est la même que celle de P par rapport à τ .

De plus pour tout $\tau_L < \alpha$, il ne peut exister qu'une unique solution (τ, σ) de (3.3) à une vitesse $\sigma \geq 0$ reliant τ_L à $\tau_R(\sigma)$ et il s'agit d'une orbite selle-selle/

Avant de montrer ce théorème, on peut donner un exemple [24, 73]. Supposons que P soit un polynôme de degré 3

$$P(\tau) = P_0 - P_1(\tau - m)(\tau - M) \left(\tau - \frac{m + M}{2} \right)$$

où P_0, P_1 sont des constantes et m, M sont les points de Maxwell.

Une solution de (3.3) est donnée par

$$\tau(\xi) = \frac{\tau_1 + \tau_2}{2} + \frac{\tau_2 - \tau_1}{2} \tanh \left(\sqrt{\frac{P_1}{2A}} \frac{\tau_2 - \tau_1}{2} (\xi - \xi_0) \right)$$

où τ_1 et τ_2 sont déterminés par le système d'équations

$$\begin{cases} 3(1 - 6A)(2y - z + 1)^2 + z^2 = 1 \\ y = (M - v_2)/(M - m) \\ z = (v_2 - v_1)/(M - m) \end{cases} \quad (3.8)$$

Le nombre de solutions de ce système d'équations est 0, 1 ou 2. Lorsqu'il y a 2 solutions, on obtient 2 solutions de (3.3) mais l'une d'entre elles a une vitesse positive alors que l'autre a une vitesse négative.

Un corollaire immédiat du théorème 3.1 est le suivant

Corollaire 3.1. *Soit $A > 0$ fixé, soit (τ_L, u_L) (resp. (τ_R, u_R)) un état à gauche (resp. à droite) d'une interface Γ de transition de phase, et supposons que la condition (3.6) (resp. (3.7)) a lieu. Alors Γ est une interface de transition de phase admissible pour le critère visco-capillaire si et seulement si*

$$\begin{aligned} \tau_R &= \tau_R(\sigma^*), \quad u_R = u_L - \sigma^*(\tau_R(\sigma^*) - \tau_L) \\ (\text{resp. } \tau_L &= \tau_L(\sigma^*), \quad u_L = u_R + \sigma^*(\tau_R - \tau_L(\sigma^*)), \end{aligned}$$

où σ^* est la vitesse de changement de phase donnée par le théorème 3.1.

Preuve.

Cela vient de la proposition 3.1 et des relations de saut de Rankine Hugoniot.

□

Pour démontrer le théorème 3.1, des lemmes qualitatifs sont nécessaires.

Lemme 3.1. *(Principe du maximum)*

Pour toute solution τ de (3.3), alors τ reste dans (τ_L, τ_R) .

Preuve du lemme 3.1.

Rappelons un principe du maximum (fort) pour les opérateurs elliptiques (voir par exemple [70]). Soit Ω un ouvert connexe, borné, régulier de $\mathbb{R}^N$, $(a_{i,j})_{i,j} \in (\mathcal{C}^0(\Omega))^{N^2}$, $(b_j)_j \in (L^\infty(\Omega))^N$ et $c \in L^\infty(\Omega)$ et notons L l'opérateur différentiel

$$Lu = \sum_{i,j} a_{i,j}(x) \partial_i \partial_j u + \sum_i b_i(x) \partial_i u + c(x)u,$$

avec $A = (a_{i,j})_{i,j}$ supposé elliptique pour tout x : il existe des constantes $c_1 \geq c_0 > 0$ telles que

$$c_0|\xi|^2 \leq (A(x)\xi, \xi) \leq c_1|\xi|^2,$$

pour tout $x \in \Omega$ et $\xi \in \mathbb{R}^N$. On suppose que $u \in \mathcal{C}^2(\Omega)$ vérifie $Lu \geq 0$ dans Ω et que $u \leq 0$ dans Ω . Alors ou bien $u < 0$ dans Ω , ou bien $u \equiv 0$ dans Ω .

Notons $f(\tau, \sigma) = P(\tau) + \sigma^2\tau - P(\tau_L) - \sigma^2\tau_L$. Supposons que $\tau_L < \tau_R$ et qu'il existe une solution τ de (3.3). Supposons qu'il existe un ξ_0 tel que $\tau(\xi) \geq \tau(\xi_0)$, $\forall \xi$ et $\tau(\xi_0) \leq \tau_L$. Soit

$$\gamma(\xi) = \begin{cases} \frac{f(\tau(\xi), \sigma) - f(\tau(\xi_0), \sigma)}{\tau(\xi) - \tau(\xi_0)} & \text{si } \tau(\xi) \neq \tau(\xi_0) \\ \left. \frac{\partial f}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau(\xi_0)} & \text{si } \tau(\xi) = \tau(\xi_0) \end{cases}$$

La fonction γ est bornée sur tout intervalle I contenant ξ_0 et notant $w = \tau(\xi) - \tau(\xi_0)$, w vérifie

$$\begin{cases} Aw'' + \sigma w' + \gamma(\xi)w = 0, \\ w \geq 0, \quad w(\xi_0) = 0, \end{cases} \quad (3.9)$$

donc d'après le principe du maximum fort, $w \equiv 0$ sur I pour tout intervalle I de $\mathbb{R}$ donc $w \equiv 0$ sur $\mathbb{R}$, ce qui est impossible. Ainsi, $\forall \xi$, $\tau(\xi) \geq \tau_L$. Le cas où il existe ξ_0 tel que $\tau(\xi) \leq \tau(\xi_0)$, $\forall \xi$ et $\tau(\xi_0) \geq \tau_R$ se traite de la même manière prouvant le lemme. □

Lemme 3.2. *Il existent des constantes $c_1 > 0$, $c_2 > 0$, $\mu_1 > 0$ et $\mu_2 > 0$ telles que si τ est une solution de (3.3) alors*

$$\begin{cases} \tau(\xi) & \sim \tau_L + c_1 e^{\mu_1 \xi} & \xi \rightarrow -\infty, \\ \tau'(\xi) & \sim \mu_1 c_1 e^{\mu_1 \xi} & \xi \rightarrow -\infty, \end{cases}$$

et

$$\begin{cases} \tau(\xi) & \sim \tau_R - c_2 e^{-\mu_2 \xi} & \xi \rightarrow +\infty, \\ \tau'(\xi) & \sim \mu_2 c_2 e^{-\mu_2 \xi} & \xi \rightarrow +\infty. \end{cases}$$

De plus μ_1 et μ_2 sont les racines positives de respectivement

$$A\lambda^2 + \sigma\lambda + (P'(\tau_L) + \sigma^2) = 0,$$

et

$$A\lambda^2 + \sigma\lambda + (P'(\tau_R) + \sigma^2) = 0.$$

Lemme 3.3. *Pour toute solution τ de (3.3), $\tau' > 0$.*

Preuve du lemme 3.3.

D'après le lemme 3.2, il existe $R > 0$ tel que pour $|\xi| > R$, $\tau' > 0$. Soit $t \in \mathbb{R}$, et $\tau^t(\xi) = \tau(\xi + t)$. On a $\tau^t \geq \tau$ pour t grand. Soit $t^* = \inf\{t > 0; \forall \rho \geq t, \tau^\rho \geq \tau \text{ dans } \mathbb{R}\}$. Il faut voir que $t^* = 0$.

Supposons $t^* > 0$, par continuité $\tau^{t^*} \geq \tau$, dans $\mathbb{R}$. Il existe une suite $0 < t_n < t^*$ et ξ_n tels que $t_n \nearrow t^*$ et $\tau(\xi_n + t_n) < \tau(\xi_n)$. La suite (ξ_n) est bornée grâce à la croissance de τ pour $|\xi|$ grand, donc pour une sous-suite, $\xi_{n'} \rightarrow \bar{\xi} \in \mathbb{R}$. A la limite $\tau(\bar{\xi} + t^*) \geq \tau(\bar{\xi})$ donc $\tau(\bar{\xi} + t^*) = \tau(\bar{\xi})$.

Soit $\varphi = \tau^{t^*} - \tau \geq 0$ dans $\mathbb{R}$. On a $\varphi(\bar{\xi}) = 0$ et $A\varphi'' + \sigma\varphi' + \gamma(\xi)\varphi = 0$ avec γ borné comme dans le lemme 3.1. Grâce au principe du maximum fort, $\varphi \equiv 0$, donc $\forall \xi$, $\tau(\xi + t^*) = \tau(\xi)$. Ainsi, τ est périodique. Ceci est impossible donc $t^* = 0$ et $\tau^t \geq \tau$ pour tout t .

Par le même argument sur $\varphi = \tau^t - \tau \geq 0$ et en utilisant le principe du maximum fort, τ est strictement croissante.

□

On recherche donc des solutions τ de (3.3) vérifiant $\tau' > 0$ et $\tau_L < \tau < \tau_R$.

Preuve du théorème 3.1.

La preuve va se décomposer en deux parties, tout d'abord on montre l'existence d'une solution de (3.3) sous les hypothèses du théorème 3.1 puis on montre que cette solution est unique dans la classe des solutions ayant une vitesse de propagation σ positive.

Concernant l'existence, en supposant $\sigma > 0$, $\sigma < \bar{\sigma}$, l'équation (3.3) peut s'écrire sous la forme d'un système 2×2 :

$$\begin{cases} \tau' &= w, \\ w' &= -\frac{1}{A}(\sigma w + P(\tau) + \sigma^2 \tau - \pi), \end{cases} \quad (3.10)$$

avec les conditions aux limites

$$(\tau, w)(-\infty) = (\tau_L, 0), \quad (\tau, w)(+\infty) = (\tau_R(\sigma), 0).$$

Les valeurs et vecteurs propres du linéarisé du système (3.10) en τ_L et τ_R sont

$$\lambda_{L,R}^{\pm}(\sigma) = \frac{1}{2} \left(-\frac{\sigma}{A} \pm \sqrt{\frac{\sigma^2}{A^2} - 4 \frac{P'_{L,R} + \sigma^2}{A}} \right),$$

donc τ_L et τ_R sont des points selles. Les espaces propres correspondant aux valeurs propres $\lambda_{L,R}^{\pm}(\sigma)$ sont de la forme

$$E_{L,R}^{\pm}(\sigma) = \text{vect} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_{L,R}^{\pm}(\sigma) \end{pmatrix},$$

avec $\lambda_L^+(\sigma) > 0$ et $\lambda_R^-(\sigma) < 0$.

Considérons la sous-variété instable $W^u(\tau_L, 0; \sigma)$ en $(\tau_L, 0)$ associé au système (3.10) pour un σ donné

$$W^u(\tau_L, 0; \sigma) := \left\{ (\tau(\xi), w(\xi)) \text{ solution de (3.10); } (\tau(\xi), w(\xi))(-\infty) = (\tau_L, 0) \right\},$$

et la sous-variété stable $W^s(\tau_R, 0; \sigma)$ en $(\tau_R, 0)$

$$W^s(\tau_R, 0; \sigma) := \left\{ (\tau(\xi), w(\xi)) \text{ solution de (3.10); } (\tau(\xi), w(\xi))(+\infty) = (\tau_R, 0) \right\}.$$

Comme $\lambda_L^+(\sigma) > 0$ et $\lambda_R^-(\sigma) < 0$ pour tout $\sigma \in [0, \bar{\sigma}]$ et en utilisant le fait que l'espace propre du linéarisé associé à une valeur propre positive (*resp.* négative) est tangent à la sous-variété instable (*resp.* stable), les espaces

$$\begin{cases} \Gamma_1(\sigma) = W^u(\tau_L, 0; \sigma) \cap \{\tau \geq \tau_L, w \geq 0\}, \\ \Gamma_2(\sigma) = W^s(\tau_R, 0; \sigma) \cap \{\tau \leq \tau_R, w \geq 0\}, \end{cases}$$

sont non vides (voir [60]).

Si (τ, w) désigne une solution de (3.10), la stricte croissance (et donc l'inversibilité) de $\tau = \tau(\xi)$ justifie le changement de variable $w(\tau) := \tau'(\xi)$. Ainsi l'équation (3.10) s'écrit de façon équivalente

$$\begin{cases} \frac{A}{2} \frac{d}{d\tau}(w^2) + \sigma w + P(\tau) + \sigma^2 \tau - \pi = 0, \\ w(\tau_L) = 0, \quad w(\tau_R(\sigma)) = 0, \quad w > 0 \text{ dans } (\tau_L, \tau_R(\sigma)), \\ \tau'(\xi) = w(\tau(\xi)), \quad \tau(0) = \beta \in (\tau_L, \tau_R(\sigma)), \end{cases} \quad (3.11)$$

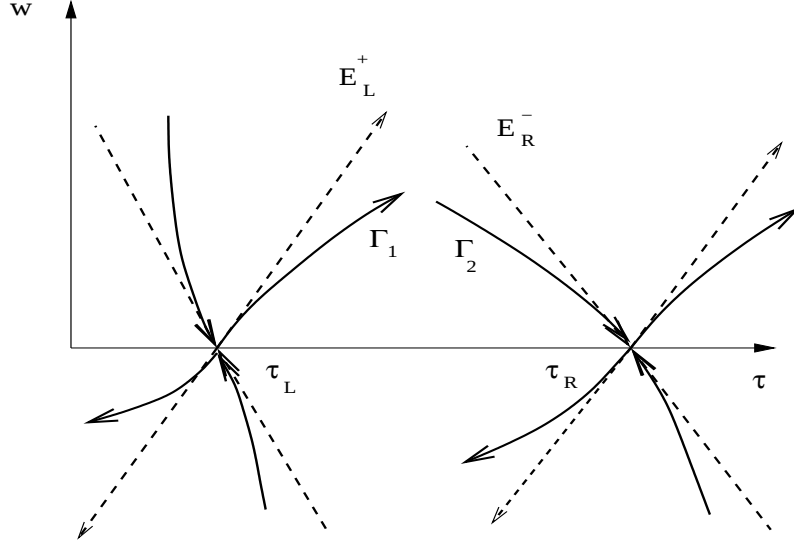


FIG. 3.3 – Sous-variétés stable et instable près des points d'équilibres.

ou encore sous la forme intégrale

$$\begin{cases} \frac{A}{2}w^2(\tau) = -\sigma \int_{\tau_L}^{\tau} w(z)dz - \int_{\tau_L}^{\tau} (P(z) + \sigma^2 z - \pi)dz, \\ w(\tau_R(\sigma)) = 0, \quad w > 0 \text{ dans } (\tau_L, \tau_R(\sigma)), \\ \tau'(\xi) = w(\tau(\xi)), \quad \tau(0) = \beta \in (\tau_L, \tau_R(\sigma)). \end{cases} \quad (3.12)$$

Par équivalence des solutions de (3.10) et de (3.11), on peut écrire les ensembles Γ_1 et Γ_2 sous la forme de courbes (régulières si la pression l'est)

$$\begin{cases} \Gamma_1(\sigma) = \{w_1(\tau; \sigma); \tau \geq \tau_L\}, \\ \Gamma_2(\sigma) = \{w_2(\tau; \sigma); \tau \leq \tau_R\}, \end{cases}$$

où les fonctions w_1 et w_2 vérifient

$$\frac{A}{2} \frac{d}{d\tau}(w_i^2) + \sigma w_i + P(\tau) + \sigma^2 - \pi = 0 \quad (3.13)$$

pour $i = 1, 2$ avec les conditions aux limites

$$w_1(\tau_L; \sigma) = w_2(\tau_R(\sigma); \sigma) = 0.$$

Etudions les solutions de (3.10) pour $\sigma = 0$.

Soit $w_0 := w_0(\tau)$ une solution de

$$\frac{A}{2} \frac{d}{d\tau}(w_0^2) + P(\tau) - P(\tau_L) = 0,$$

partant de $(\tau_L, 0)$ (*i.e.* telle que $w_0(\tau_0) \in \Gamma_1(0)$ pour un certain $\tau = \tau_0$). La relation (3.12) montre alors que

$$\frac{A}{2}w_0^2 = - \int_{\tau_L}^{\tau} (P(z) - P(\tau_L))dz \geq 0. \quad (3.14)$$

Notons $\mathcal{C}_0 = \{w_0(\tau)\}$ la courbe représentative de w_0 dans le plan (τ, w) . Si $\mathcal{C}_0$ coupe l'axe $\{w = 0\}$ alors d'après (3.14), il existe $\tau \in (\tau_L, \tau_R(0))$ vérifiant

$$0 = \int_{\tau_L}^{\tau} (P(z) - P(\tau_L)) dz.$$

La condition (3.6) montre que cette relation est impossible, ainsi la trajectoire reste au-dessus de l'axe $\{w = 0\}$.

Considérons à présent une solution $\bar{w}$ de

$$\frac{A}{2} \frac{d}{d\tau}(w^2) + \bar{\sigma}w + P(\tau) + \bar{\sigma}^2\tau - \pi = 0,$$

partant de $(\tau_L, 0)$.

Pour les τ vérifiant $\bar{w}(\tau) > 0$, on a d'après (3.12)

$$\frac{A}{2} w^2(\tau; \bar{\sigma}) = -\bar{\sigma} \int_{\tau_L}^{\tau} w(z; \bar{\sigma}) dz - \int_{\tau_L}^{\tau} (P(z) + \bar{\sigma}^2 z - \pi) dz, \quad (3.15)$$

donc si $\mathcal{C}_{\bar{\sigma}} = \{\bar{w}(\tau)\}$ désigne la courbe représentative de w dans le plan (τ, w) et si $\mathcal{C}_{\bar{\sigma}}$ ne coupe pas l'axe $\{w = 0\}$ alors on peut prendre $\tau = \tau_R(\bar{\sigma})$ dans la relation (3.15) obtenant

$$0 < \frac{A}{2} w^2(\tau_R(\bar{\sigma}); \bar{\sigma}) = -\bar{\sigma} \int_{\tau_L}^{\tau_R(\bar{\sigma})} w(z; \bar{\sigma}) dz.$$

Ceci est alors impossible si $w > 0$. Par dépendance continue par rapport à σ de la solution $w = w(\tau, \sigma)$ de (3.13) qui part de $(\tau_L, 0)$, il existe un σ^* vérifiant $w(\tau_R(\sigma^*)) = 0$ donc une solution de (3.11) et par conséquent une solution de (3.10).

Pour la régularité de σ^* , on va utiliser le théorème des fonctions implicites.

Rappelons que $\Gamma_1(\sigma)$ et $\Gamma_2(\sigma)$ sont des courbes définies par $\Gamma_1(\sigma) = \{w_1(\tau; \sigma), \tau \geq \tau_L\}$ et $\Gamma_2(\sigma) = \{w_2(\tau; \sigma), \tau \leq \tau_R\}$ avec w_1 et w_2 solutions de (3.13) régulières.

Pour tout σ , on a $w_1(\tau_L; \sigma) = 0$ donc

$$\left. \frac{\partial w_1}{\partial \sigma} \right|_{\tau=\tau_L} = 0.$$

Par ailleurs, la tangente à $\Gamma_1(\sigma)$ en τ_L est dirigé par $r_L^+(\sigma)$, vecteur propre associé $\lambda_L^+(\sigma) > 0$, valeur propre positive du linéarisé en $(\tau_L, 0)$. Ainsi, on peut calculer

$$\left. \frac{\partial w_1}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau_L} = \frac{1}{2} \left\{ -\frac{\sigma}{A} + \sqrt{\frac{\sigma^2}{A^2} - 4 \frac{P'(\tau_L) + \sigma^2}{A}} \right\}$$

et

$$\left. \frac{\partial^2 w_1}{\partial \sigma \partial \tau} \right|_{\tau=\tau_L} = \frac{1}{2A} \left\{ -1 + \frac{1 - 4A}{\sqrt{(1 - 4A) - \frac{4AP'(\tau_L)}{\sigma^2}}} \right\} < 0$$

et ceci quel que soit la valeur de $A > 0$.

On en déduit pour $\tau > \tau_L$ proche de τ_L ,

$$\frac{\partial w_1}{\partial \sigma} < 0.$$

De plus, on a

$$\frac{A}{2} w_1(\tau; \sigma)^2 = -\sigma \int_{\tau_L}^{\tau} w_1(z; \sigma) dz - \int_{\tau_L}^{\tau} (P(z) + \sigma^2 z - \pi) dz$$

donc

$$A w_1 \frac{\partial w_1}{\partial \sigma} = - \int_{\tau_L}^{\tau} \left(w_1 - \sigma \frac{\partial w_1}{\partial \sigma} + 2\sigma(z - \tau_L) \right) dz.$$

Soit F défini par

$$\left\{ \begin{array}{ll} F : & \rightarrow \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}_*^+ \\ (\tau, \sigma) & \mapsto \int_{\tau_L}^{\tau} \left(w_1 - \sigma \frac{\partial w_1}{\partial \sigma} + 2\sigma(z - \tau_L) \right) dz \end{array} \right.$$

Supposons qu'il existe $\tau^0 > \tau_L$ vérifiant

$$\left. \frac{\partial w_1}{\partial \sigma} \right|_{\tau=\tau^0} = 0, \quad w_1(\tau^0; \sigma) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial w_1}{\partial \sigma} < 0, \quad \text{dans } (\tau_L, \tau^0).$$

Alors $F(\tau^0, \sigma) = F(\tau_L, \sigma) = 0$ et $F(\tau, \sigma) > 0$, $\forall \tau \in (\tau_L, \tau^0)$. Il existe donc $\bar{\tau} \in (\tau_L, \tau^0)$ tel que

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \tau} \right|_{\tau=\bar{\tau}} = 0.$$

Or

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \tau} \right|_{\tau=\bar{\tau}} = w_1(\bar{\tau}) - \sigma \left. \frac{\partial w_1}{\partial \sigma} \right|_{\tau=\bar{\tau}} + 2\sigma(\bar{\tau} - \tau_L) > 0$$

ce qui est contradictoire donc $\partial w_1(\tau)/\partial \sigma \leq 0$ sur Γ_1 avec égalité si et seulement si $\tau = \tau_L$. Par des arguments similaires, on en déduit également que $\partial w_2/\partial \sigma \geq 0$ sur Γ_2 avec égalité si et seulement si $\tau = \tau_R$.

Maintenant, soit $\tau_0 = \tau_0(\tau_L, \sigma) \in (\alpha, \beta)$, la solution ¹ de

$$P(\tau) - P(\tau_L) + \sigma^2(\tau - \tau_L) = 0$$

et soit $g(\tau_L, \sigma) = w_1(\tau_0; \sigma) - w_2(\tau_0; \sigma)$, alors $\Gamma_1 = \Gamma_2$ si et seulement si $g(\sigma, \tau_L) = 0$. Par ailleurs

$$\frac{\partial g}{\partial \sigma} = \frac{\partial \tau_0}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial w_1}{\partial \tau} - \frac{\partial w_2}{\partial \tau} \right) + \frac{\partial w_1}{\partial \sigma} - \frac{\partial w_2}{\partial \sigma}$$

et grâce (3.11), on a

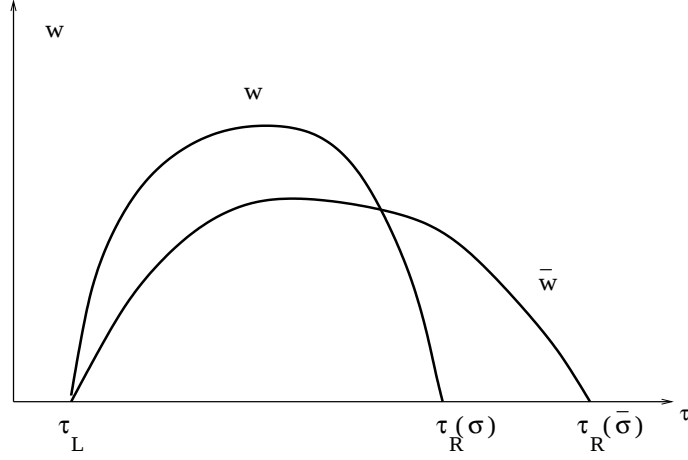
$$\left. \frac{\partial w_1}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau_0} = -\frac{\sigma}{A} = \left. \frac{\partial w_2}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau_0}$$

donc

$$\frac{\partial g}{\partial \sigma} = \frac{\partial w_1}{\partial \sigma} - \frac{\partial w_2}{\partial \sigma} < 0$$

En utilisant le théorème des fonctions implicites, il existe un unique $\sigma = \sigma(\tau)$ défini sur un voisinage N de τ_L tel que $g(\tau, \sigma(\tau)) = 0$, $\sigma(\tau_L) = \sigma^*$, $\forall \tau \in N$ et $\tau \mapsto \sigma(\tau)$ a la même régularité que la pression P .

¹qui existe si $\sigma^2 < -P'(\tau_L)$

FIG. 3.4 – Trajectoires w et $\bar{w}$

Regardons à présent l'unicité d'une solution de (3.3).

Soit $w = w(\tau; \sigma)$ une solution de (3.11) reliant τ_L à $\tau_R(\sigma)$ à la vitesse σ . Ainsi, w vérifie l'équation suivante

$$Aw \frac{\partial w}{\partial \tau} = -\sigma w - P(\tau) - \sigma^2 \tau + \pi. \quad (3.16)$$

Supposons qu'il existe une autre solution $\bar{w} = \bar{w}(\tau; \bar{\sigma})$ de (3.11) reliant τ_L à $\tau_R(\bar{\sigma})$ à la vitesse $\bar{\sigma}$. Quitte changer σ en $\bar{\sigma}$, on peut supposer $\sigma < \bar{\sigma}$. L'équation vérifiée par $\bar{w}$ est donc la suivante

$$A\bar{w} \frac{\partial \bar{w}}{\partial \tau} = -\bar{\sigma} \bar{w} - P(\tau) - \bar{\sigma}^2 \tau + \pi. \quad (3.17)$$

On peut calculer

$$\lim_{\tau \rightarrow \tau_L, \tau > \tau_L} \frac{w(\tau; \sigma) - w(\tau_L; \sigma)}{\tau - \tau_L} = \frac{1}{2A} \left(-\sigma + \sqrt{(1-4A)\sigma^2 - 4AP'(\tau_L)} \right) > 0.$$

La fonction

$$\sigma \mapsto \frac{1}{2A} \left(-\sigma + \sqrt{(1-4A)\sigma^2 - 4AP'(\tau_L)} \right)$$

est une fonction décroissante de σ donc pour $\tau > \tau_L$ proche de τ_L , on a

$$w(\tau) > \bar{w}(\tau). \quad (3.18)$$

De plus, comme $\tau_R(\sigma) < \tau_R(\bar{\sigma})$, grâce (3.18), les trajectoires $w(\tau)$ et $\bar{w}(\tau)$ doivent se couper en un $\tau \in (\tau_L, \tau_R(\sigma))$. En d'autres termes il existe $\tau^* \in (\tau_L, \tau_R(\sigma))$ vérifiant

$$w(\tau^*) = \bar{w}(\tau^*), \quad \left. \frac{\partial w}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau^*} \leq \left. \frac{\partial \bar{w}}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau^*} \quad (3.19)$$

En retranchant (3.16) à (3.17), on en déduit

$$A\bar{w} \frac{\partial \bar{w}}{\partial \tau} - Aw \frac{\partial w}{\partial \tau} = \sigma w - \bar{\sigma} \bar{w} + (\sigma^2 - \bar{\sigma}^2)(\tau - \tau_L)$$

et en utilisant (3.19), on a

$$0 \leq Aw(\tau^*) \left(\left. \frac{\partial \bar{w}}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau^*} - \left. \frac{\partial w}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau^*} \right) = w(\tau^*)(\sigma - \bar{\sigma}) + (\sigma^2 - \bar{\sigma}^2)(\tau - \tau_L) < 0$$

ce qui est impossible donc $\sigma = \bar{\sigma}$.

Il nous reste à montrer que si on a deux solutions $w_1 = w_1(\tau; \sigma)$ et $w_2 = w_2(\tau; \sigma)$ de (3.11) pour la même vitesse σ alors $w_1 \equiv w_2$. Les deux solutions w_1 et w_2 vérifient l'équation

$$\frac{A}{2} \left(\frac{\partial(w_1^2)}{\partial\tau} - \frac{\partial(w_2^2)}{\partial\tau} \right) = -\sigma(w_1 - w_2).$$

Supposons qu'il existe $\tau_0 \in (\tau_L, \tau_R)$ tel que par exemple $w_1(\tau_0) > w_2(\tau_0)$. Soient $\tau_1 = \max\{\tau < \tau_0, w_1(\tau) = w_2(\tau)\}$ et $\tau_2 = \min\{\tau > \tau_0, w_1(\tau) = w_2(\tau)\}$. On a donc $w_1(\tau_i) = w_2(\tau_i)$ pour $i = 1, 2$ et $w_1 > w_2$ dans (τ_1, τ_2) donc

$$\frac{\partial(w_1^2)}{\partial\tau} - \frac{\partial(w_2^2)}{\partial\tau} < 0, \quad \text{dans } (\tau_1, \tau_2)$$

donc

$$0 < w_1^2(\tau) - w_2^2(\tau) < 0, \quad \text{dans } (\tau_1, \tau_2)$$

ce qui est impossible.

□

3.2 Résolution numérique par une méthode de tir

En utilisant le principe de démonstration d'existence d'une solution de (3.10) dans la proposition 3.1, on peut, par une méthode de tir, trouver numériquement la vitesse de changement de phase σ^* . Le principe est alors le suivant.

On se donne $\tau_L < m$ dans la phase liquide (ou τ_R dans la phase vapeur) et on utilise la méthode itérative suivante :

1. On initialise $\sigma = 0$ et on résout (3.10) par une méthode de Runge Kutta. La condition initiale (τ^0, w^0) est choisi dans $E_{\lambda_L}^+$, espace propre instable du linéarisé en $(\tau_L, 0)$, proche de $(\tau_L, 0)$. La trajectoire $(\tau(\xi), w(\xi))$ reste alors au-dessus de l'axe $\{w = 0\}$ pour tout ξ .
2. On résout (3.10) en augmentant σ . La vitesse σ^* est alors donnée lorsque la solution $(\tau(\xi), w(\xi))$ coupe l'axe $\{w = 0\}$.

La figure 3.5 représente les trajectoires de (3.10) pour σ allant de 0 à σ^* . La pression P est donnée par

$$P(\tau) = \frac{8T}{3\tau - 1} - \frac{3}{\tau^2}, \quad T = 0, 9.$$

Cette loi d'état représente une loi d'état type Van Der Waals dite *réduite* (i.e. pour laquelle $T_c = 1$). On peut également calculer $\alpha = 0.7185972$, $\alpha^* = 4.6125547$, $\beta = 1.528505$, $\beta^* = 0.5911801$, $m = 0.6034019$ et $M = 2.348905$. Dans la simulation, on a pris $\tau_L = 0, 6 < m$.

3.3 Comparaison du critère visco-capillaire et du critère de Lax

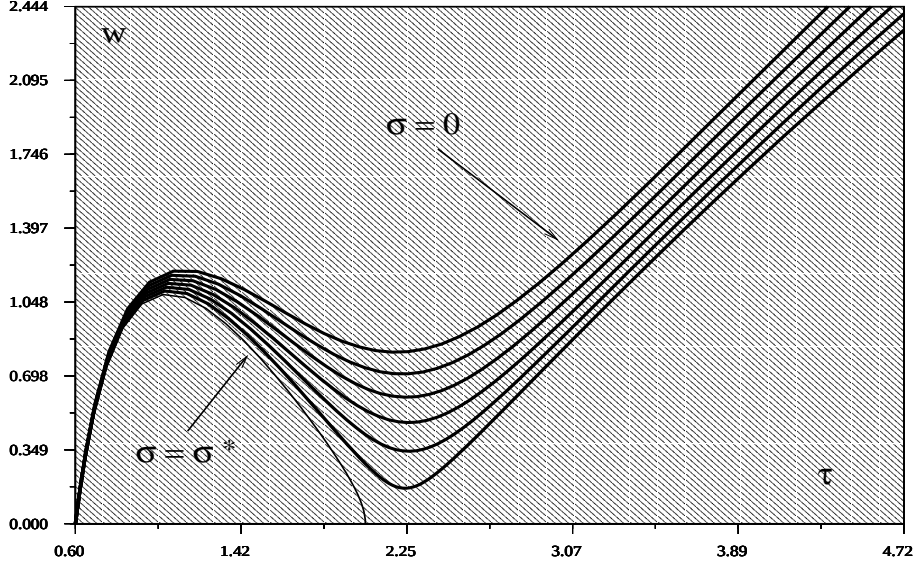
Dans cette partie, on compare le critère d'admissibilité visco-capillaire avec le critère de Lax pour les chocs classiques dans le cas où la pression vérifie $P' < 0$, $P'' > 0$.

Définition 3.2. On dira qu'un choc joignant deux états (τ_L, u_L) à (τ_R, u_R) pour le système (2.1) vérifie le critère de Lax si la vitesse σ du choc vérifie

$$\sqrt{-P'(\tau_R)} < \sigma < \sqrt{-P'(\tau_L)},$$

ou

$$-\sqrt{-P'(\tau_R)} < \sigma < -\sqrt{-P'(\tau_L)}.$$

FIG. 3.5 – Trajectoires de (3.3) pour σ allant de 0 à σ^* .

Théorème 3.2. *Supposons que $P' < 0$, $P'' > 0$, alors un choc admissible pour le critère visco-capillaire pour tout $A > 0$ est admissible pour le critère de Lax.*

Preuve.

On peut supposer $\sigma > 0$. Et soient τ_L, τ_R les 2 états que l'on peut relier par (3.3) à une vitesse σ .

On a vu que les valeurs propres du linéarisé du système (3.10) sont

$$\lambda_{L,R}^{\pm} = \frac{1}{2} \left(-\frac{\sigma}{A} \pm \sqrt{\frac{\sigma^2}{A^2} - 4 \frac{P'_{L,R} + \sigma^2}{A}} \right).$$

Supposons que $\tau_R < \tau_L$, alors $P'(\tau_R) + \sigma^2 < 0$ et $P'(\tau_L) + \sigma^2 > 0$ puisque $P' < 0$ (rappelons que $-\sigma^2$ est la pente de la droite reliant $(\tau_R, P(\tau_R))$ à $(\tau_L, P(\tau_L))$) de sorte que $(\tau_R, 0)$ est un point selle et $(\tau_L, 0)$ est un noeud stable. Ce qui est impossible puisque cela signifie que la trajectoire partant de $(\tau_L, 0)$ ne peut pas sortir d'un voisinage de $(\tau_L, 0)$, donc $\tau_L < \tau_R$. Ainsi on a bien $\sqrt{-P'(\tau_R)} < \sigma < \sqrt{-P'(\tau_L)}$.

Le cas $\sigma < 0$ se traite en changeant τ en $\tau(-\xi)$ donnant le résultat. □

Remarque 3.2. *Le fait que le choc soit admissible pour le critère visco-capillaire pour tout $A > 0$ nous dit que l'on peut, à τ_L donné, relier par un choc au sens de Lax tous les $\tau_R > \tau_L$ à une vitesse σ vérifiant $\sigma^2 = -[P]/[\tau]$.*

Il est intéressant de voir quels sont les τ_R que l'on peut, à τ_L donné, relier par un choc au sens de Lax si l'on suppose seulement que le choc est admissible pour le critère visco-capillaire pour un A fixé.

On suppose qu'il existe une solution onde progressive de (3.3) reliant τ_L à τ_R à la vitesse $\sigma > 0$. La solution $\tau = \tau(\xi)$ de (3.3) vérifie $\tau' > 0$, on doit donc avoir

$$\Delta(\tau) = \frac{\sigma^2}{A^2} - 4 \frac{P'(\tau) + \sigma^2}{A} > 0, \quad (3.20)$$

pour $\tau = \tau_L$ ou $\tau = \tau_R$ (sinon la trajectoire s'enroule autour du point d'équilibre où les valeurs propres ne sont pas réelles dans le diagramme des phases et on perd la monotonie de τ).

On a vu dans la démonstration précédente que $\tau_R < \tau_L$ était impossible donc $\tau_L < \tau_R$.

On va voir que pour $A > 1/4$, on est limité pour la valeur de τ_R . En effet, la condition (3.20) peut se récrire en

$$4AP'(\tau_R) < \sigma^2(1 - 4A), \quad (3.21)$$

qui est toujours vrai si $A \leq 1/4$ ($P' < 0$). Donc si $A \leq 1/4$, le critère visco-capillaire pour un A est le même que celui pour tout $A > 0$.

Supposons maintenant que $A > 1/4$ et considérons le cas d'un gaz parfait

$$P = \frac{(\gamma - 1)c_v T}{\tau}.$$

La condition (3.21) montre que τ_R doit vérifier

$$\tau_L < \tau_R < \frac{4A}{4A - 1}\tau_L.$$

La fonction $\psi : x \mapsto x/(x - 1)$ pour $x > 1$ est décroissante, tend vers $+\infty$ pour $x \rightarrow 1^+$, et tend vers 1 en $+\infty$.

En d'autres termes, plus A (la capillarité) est grand(e) et moins il y a d'états droit que l'on peut relier à un état gauche pour le critère visco-capillaire.

Théorème 3.3. *Supposons $P' < 0$, $P'' > 0$, alors un choc admissible pour le critère de Lax est admissible pour le critère visco-capillaire pour tout A vérifiant*

$$(1 - 4A)\sigma^2 > 4AP'(\tau_R).$$

Preuve.

Soit $A > 0$ vérifiant $(1 - 4A)\sigma^2 > 4AP'(\tau_R)$ et supposons $\sigma > 0$ avec $\sqrt{-P'(\tau_R)} < \sigma < \sqrt{-P'(\tau_L)}$, l'autre cas se traitant de la même manière. On sait que $(\tau_L, 0)$ est un point selle et $(\tau_R, 0)$ est un noeud stable pour le système (3.10). L'espace propre instable du linéarisé en $(\tau_L, 0)$ est dirigé dans l'espace des phases par

$$E_L^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_L^+ \end{pmatrix},$$

avec $\lambda_L^+ > 0$ puisque $(1 - 4A)\sigma^2 > 4AP'(\tau_R)$.

Soit $\beta > 0$ et considérons dans le plan (τ, w) le triangle

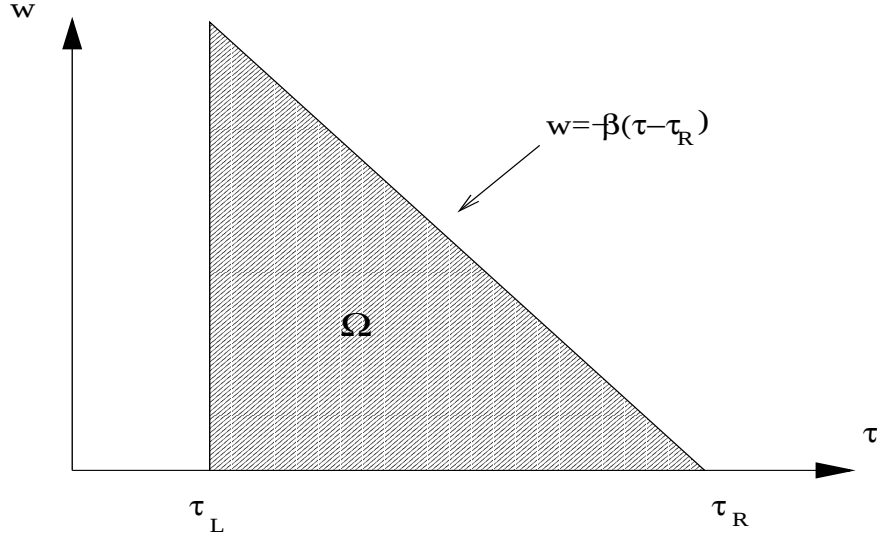
$$\Omega = \{\tau_L < \tau < \tau_R, 0 < w < -\beta(\tau - \tau_R)\}.$$

On va voir que pour β bien choisi, Ω est un ensemble invariant pour (3.10).

Soit $(\tau^0, w^0) \in \Omega \cap W^u(\tau_L, 0)$ et $w = w(\tau)$ la solution de

$$\begin{cases} \tau' &= w, \\ w' &= -\frac{1}{A}(\sigma w + P(\tau) + \sigma^2 \tau - \pi), \end{cases} \quad (3.22)$$

avec la condition initiale $(\tau, w)(0) = (\tau_0, w_0)$.

FIG. 3.6 – Définition de l'ensemble Ω .

Si w rencontre la droite $\{w = -\beta(\tau - \tau_R)\}$ en un $\xi_1 \in \mathbb{R}$ alors on a $w(\xi_1) = -\beta(\tau(\xi_1) - \tau_R)$ et $w'(\xi_1) > -\beta\tau'(\xi_1)$ donc

$$\begin{aligned} 0 &= Aw'(\xi_1) + \sigma w(\xi_1) + P(\tau(\xi_1)) + \sigma^2 \tau(\xi_1) - \pi \\ &> A\beta^2(\tau(\xi_1) - \tau_R) - \beta\sigma(\tau(\xi_1) - \tau_R) + P(\tau(\xi_1)) + \sigma^2 \tau(\xi_1) - \pi \end{aligned}$$

donc

$$0 < A\beta^2 - \beta\sigma + \frac{P(\tau(\xi_1)) + \sigma^2 \tau(\xi_1) - \pi}{\tau(\xi_1) - \tau_R}.$$

Soit

$$\delta = \sup_{\tau \in (\tau_L, \tau_R)} \frac{P(\tau) + \sigma^2 \tau - \pi}{\tau - \tau_R} \geq P'(\tau_R) + \sigma^2 > 0.$$

On a donc

$$0 < A\beta^2 - \sigma\beta + \delta. \quad (3.23)$$

Comme $\sigma^2 > 4A\delta$, le discriminant $\Delta = \sigma^2 - 4A\delta$ est strictement positif donc l'équation en β , $A\beta^2 - \sigma\beta + \delta = 0$ a deux racines réelles $0 < \beta_- < \beta_+$. Ainsi, pour $\beta \in (\beta_-, \beta_+)$, (3.23) ne peut avoir lieu et w ne rencontre pas $\{w = -\beta(\tau - \tau_R)\}$.

Si w rencontre $\{w = 0\}$ en $\xi_1 \in \mathbb{R}$ alors on a

$$P(\tau(\xi_1)) + \sigma^2 \tau(\xi_1) - \pi < 0$$

donc $w'(\xi_1) > 0$ ce qui est impossible.

Enfin si w rencontre $\{\tau = \tau_L\}$ alors w devrait couper l'axe $\{w = 0\}$ ce qui est encore impossible donc Ω est un ensemble invariant pour (3.22).

Puisque $(\tau^0, w^0) \in \Omega \cap W^u(\tau_L, 0)$, on a

$$\lim_{\xi \rightarrow -\infty} (\tau, w) = (\tau_L, 0).$$

On sait aussi que $\tau(\xi) \geq \tau^0 > \tau_L$ pour tout ξ puisque Ω est un ensemble invariant. Supposons que (τ, w) ne tende pas vers $(\tau_R, 0)$ lorsque ξ tend vers $+\infty$ alors il existe $\gamma > 0$ tel que pour tout n , il existe $\xi_n \geq n$ tel que

$$\|(\tau, w)(\xi_n) - (\tau_R, 0)\| \geq \gamma.$$

Par compacité il existe

$$(\tau^\infty, w^\infty) = \lim_{k \rightarrow +\infty} (\tau, w)(\xi_{n_k})$$

pour une sous-suite qui ne peut être qu'un point d'équilibre vérifiant $\tau^\infty > \tau_L$ prouvant le résultat.

□

3.4 Conclusion

On a montré dans ce chapitre que le critère visco-capillaire est capable de sélectionner des solutions qui sont a priori physiques (comme la transition de phase entre les points de Maxwell à vitesse nulle). Une propriété remarquable de ce critère est qu'à un état donné dans la phase liquide, il existe une unique vitesse $\sigma \geq 0$ de changement de phase et un unique état dans l'autre phase admissibles pour le critère visco-capillaire. On a ensuite proposé une méthode numérique pour trouver la vitesse de changement de phase basée sur une méthode de tir. On montre ensuite que lorsque la loi d'état est une loi d'état de type gaz parfait, le critère de Lax et le critère visco-capillaire sont équivalents lorsque la capillarité est suffisamment petite ($A < 1/4$).

Chapitre 4

Problème de Riemann avec le critère visco-capillaire

4.1 Structure du problème de Riemann près des points de Maxwell

Dans cette partie, on s'intéresse à la structure du problème de Riemann au voisinage des points d'équilibres m et M donnés par la règle des aires de Maxwell dans le cas d'un gaz type Van Der Waals. On obtient d'abord des résultats théoriques dans le cas de systèmes hyperboliques de lois de conservation 2×2 puis on l'applique au p-système avec une loi d'état de type Van Der Waals. Ces résultats ont été principalement montrés par Fan, Slemrod [24].

4.1.1 Hypothèses et notations

On s'intéresse au système hyperbolique de loi de conservation en une dimension d'espace

$$\partial_t U + \partial_x(F(U)) = 0, \quad (4.1)$$

avec $U = U(x, t) \in \mathbb{R}^2$, $F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ et comme condition initiale

$$U(t = 0, x) = \begin{cases} U_L & x < 0 \\ U_R & x > 0 \end{cases}$$

On suppose que le système (4.1) est strictement hyperbolique près de U_L et de U_R , c'est à dire que $\nabla F(U)$ a des valeurs propres réelles et distinctes pour tout U près de U_L et de U_R . On dira qu'un choc centré

$$U(t, x) = \begin{cases} U_L & x < \sigma t \\ U_R & x > \sigma t \end{cases}$$

est admissible s'il existe U solution onde progressive $U(t, x) := U(\xi)$, $\xi = (x - \sigma t)/\mu$ du système avec viscosité

$$\partial_t U + \partial_x(F(U)) = \mu B \partial_{xx}^2 U \quad (4.2)$$

où B est une matrice symétrique définie positive appelée matrice de diffusion. Les solutions $U(\xi)$ doivent alors satisfaire l'équation différentielle ordinaire suivante

$$\begin{cases} BU' = F(U) - F(U_L) - \sigma(U - U_L) \\ U(\pm\infty) = U_{L,R}, \quad U'(\pm\infty) = 0 \end{cases} \quad (4.3)$$

pour une certaine vitesse σ à trouver.

Définition 4.1. On dira qu'un choc admissible est supersonique si les sous-variétés stables en U_L et U_R sont de dimensions respectives k et $k - 1$. On dira qu'un choc admissible est subsonique si U_L et U_R sont deux équilibres du même type (voir l'annexe A).

Remarque 4.1. Un choc admissible supersonique équivaut aux conditions de Lax pour les chocs classiques.

Par exemple, si $d = 2$, pour un choc supersonique, si U_L est un point selle alors U_R doit être un point stable (correspond à $k = 2$, c'est un choc rapide) et si U_L est un point instable alors U_R doit être un point selle (correspond à $k = 1$, c'est un choc lent).

Pour un choc subsonique, si U_L est un point selle alors U_R doit être un point selle (cela correspond au cas intéressant, celui des transitions de phase avec une loi d'état de type Van Der Waals).

Le but de ce paragraphe est de montrer que les solutions du problème de Riemann pour $d = 2$ à 3 ondes sont uniques dans cette classe de solutions pour les équations d'Euler près de $(m, 0)$ et $(M, 0)$.

On notera également schématiquement $U_L \xrightarrow{\sigma} U_R$ pour un choc solution de (4.3) qui relie U_L à U_R à une vitesse σ .

4.1.2 Résultats théoriques

On suppose que $d = 2$, que F est de classe $\mathcal{C}^p$, $p \geq 3$ et on écrit (4.3) sous la forme

$$U' = G(U, U_L, \sigma) := B^{-1} \left(F(U) - F(U_L) - \sigma(U - U_L) \right) \quad (4.4)$$

On fait la première hypothèse suivante

Hypothèse 4.1. Il existe une orbite $U_0 \xrightarrow{\sigma_0} U_0^*$ joignant deux points d'équilibres, U_0 et U_0^* qui sont des points selles.

Lemme 4.1. Sous l'hypothèse H4.1, il existe des voisinages A_1 de U_0 , A_2 de U_0^* , un réel $\eta > 0$ et une fonction $\tilde{U} : A_1 \times (\sigma_0 - \eta, \sigma_0 + \eta) \rightarrow A_2$ de classe $\mathcal{C}^p$ vérifiant

$$\tilde{U}(U_0, \sigma_0) = U_0^*, \quad G(\tilde{U}(U, \sigma), U, \sigma) = 0 \quad \forall (U, \sigma) \in A_1 \times (\sigma_0 - \eta, \sigma_0 + \eta).$$

De plus, $U = \tilde{U}(U_L, \sigma)$ pour (U_L, σ) dans $A_1 \times (\sigma_0 - \eta, \sigma_0 + \eta)$ est l'unique équilibre de (4.4) dans A_2 et $U = U_L$, $U = \tilde{U}(U_L, \sigma)$ sont des points selles de (4.4).

Preuve.

Comme $\nabla_U G(U_0^*, U_0, \sigma_0)$ est inversible¹, le théorème des fonctions implicites s'applique et prouve le lemme 4.1.

□

L'hypothèse H4.1 nous fournit une solution $U = \gamma(\xi)$ de (4.4) avec $(U_L, \sigma) = (U_0, \sigma_0)$. Soit Σ une droite coupant le graphe de γ en $\gamma(0)$. On définit alors

$$x^1(U_L, \sigma) = \Sigma \cap W^u(U_L) \text{ et } x^2(U_L, \sigma) = \Sigma \cap W^s(\tilde{U}(U_L, \sigma))$$

pour $(U_L, \sigma) \in A_1 \times (\sigma_0 - \eta, \sigma_0 + \eta)$, puis

$$d(U_L, \sigma) = \dot{\gamma}(0) \wedge (x^1(U_L, \sigma) - x^2(U_L, \sigma))$$

avec $v \wedge w = \det(v, w)$ comme dans [55].

¹les valeurs propres sont non nulles

Par régularité des sous-variétés stable et instable W^u et W^s , d est de classe $\mathcal{C}^p$ et si q désigne l'une des composantes de U_L ou σ alors on a

$$\frac{\partial d}{\partial q}(U_0, \sigma_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\int_0^t \text{tr}\left(\nabla_U G(\gamma(s), U_0, \sigma_0)\right) ds\right) G(\gamma(t), U_0, \sigma_0) \wedge \frac{\partial G}{\partial q}(\gamma(t), U_0, \sigma_0) dt. \quad (4.5)$$

Hypothèse 4.2. On suppose

$$\frac{\partial d}{\partial \sigma}(U_0, \sigma_0) \neq 0.$$

Lemme 4.2. Sous l'hypothèse H4.2, pour tout $U_L \in A_1$, il existe un unique $\sigma^*(U_L)$ dans $(\sigma_0 - \eta, \sigma_0 + \eta)$ tel que $d(U_L, \sigma^*(U_L)) = 0$. De plus σ^* est de classe $\mathcal{C}^p$ et $\sigma^*(U_0) = \sigma_0$.

Preuve.

Comme $U_0 \rightarrow^{\sigma_0} U_0^*$, on a $d(U_0, \sigma_0) = 0$ et grâce à (H2), le théorème des fonctions implicites prouve le résultat. □

Maintenant on va faire d'autres hypothèses sur (4.1) et (4.3).

Hypothèse 4.3. Le système (4.1) est strictement hyperbolique et tous les champs sont vraiment non linéaires (VNL), c'est à dire que $\nabla_U \lambda_k(U) \cdot r_k(U) \neq 0$ $k = 1, 2$ pour tout $U \in A_1 \cup A_2$.

Hypothèse 4.4. Les équilibres de (4.3) près de U_0 et U_0^* sont du même type que si $B = \text{Id}$.

Sous l'hypothèse H4.3, notons λ_k , r_k , l_k respectivement les valeurs propres, vecteurs propres à gauche et à droite de $\nabla_U F(U)$ avec $\lambda_1(U) < \lambda_2(U)$. De plus, comme le système (4.1) est VNL, on peut normaliser ces vecteurs de telle sorte que

$$\nabla \lambda_k(U) \cdot r_k(U) = 1, \quad l_j(U) \cdot r_k(U) = \delta_{jk}.$$

Les fonctions l_k et r_k sont de classe $\mathcal{C}^{p-1}$ et le lemme suivant vient de [52].

Lemme 4.3. Sous les hypothèses H4.3 et H4.4, pour $k = 1, 2$, il existe δ_k , ϱ_k et $U_k(U_L, \epsilon)$ défini sur $\{U_L \in A_k, |\epsilon| < \delta_k\}$ et $\sigma_k(U_L, \epsilon)$ définies sur $\{U_L \in A_k, -\delta_k < \epsilon \leq 0\}$ tels que

1.

$$U_k(U_L, 0) = U_L, \quad \frac{\partial U_k}{\partial \epsilon}(U_L, 0) = r_k(U_L),$$

et

$$\sigma_k(U_L, 0^-) = \lambda_k(U_L), \quad \frac{\partial \sigma_k}{\partial \epsilon}(U_L, 0) = \frac{1}{2}.$$

2. Si $-\delta_k < \epsilon \leq 0$ alors il existe un choc admissible reliant U_L à $U_k(U_L, \epsilon)$ à la vitesse $\sigma_k(U_L, \epsilon)$.

3. Si $0 \leq \epsilon < \delta_k$ alors il existe une onde de détente reliant U_L à $U_k(U_L, \epsilon)$.

4. Si $U_L \in A_k$ et $U \in A_k$ et s'il existe un choc admissible $U_L \rightarrow^\sigma U$ tel que $|\sigma - \lambda_k(U_L)| < \varrho_k$ ou s'il existe une onde de détente alors $\sigma = \sigma_k(U_L, \epsilon)$ et $U = U_k(U_L, \epsilon)$ pour un certain ϵ .

Définition 4.2. On définit les ensembles $W_k(U_L)$ comme

$$W_k(U_L) = \{U_k(U_L, \epsilon)\}.$$

Les courbes $W_k(U_L)$ représentent l'ensemble des points que l'on peut relier à U_L par un choc ou une détente. $W_1(U_L)$ représente la courbe d'onde lente à travers U_L et $W_2(U_L)$ la courbe d'onde rapide à travers U_L .

Maintenant on fixe $U_L \in A_1$ et on regarde l'équation en σ

$$d(U_1(U_L, \epsilon), \sigma) = 0, \quad |\epsilon| < \delta_1. \quad (4.6)$$

L'équation (4.6) détermine les chocs subsoniques qui parte à gauche en $U_1(U, \epsilon)$. Comme $U_1(U_L, 0) = U_L$, par continuité, quitte à diminuer δ_1 , on peut supposer que $U_1(U_L, \epsilon) \in A_1$, $|\epsilon| < \delta_1$ et le lemme 4.2 donne une unique solution $\sigma = \sigma^*(U_1(U_L, \epsilon))$ de (4.6).

A ce σ^* correspond $U_1^* = U_1^*(U_L, \epsilon) = \tilde{U}(U_1(U_L, \epsilon), \sigma^*(U_1(U_L, \epsilon)))$ donné par le lemme 4.1. Ainsi, pour tout $U_L \in A_1$, on peut définir

$$\Sigma(U_L) = \{U_1^*(U_L, \epsilon), \epsilon \text{ petit}\}$$

qui représente les états reliés à un état dans $W_1(U_L)$ par un choc subsonique.

Résumons, pour U_L près de U_0 et ϵ_1, ϵ_2 petits, on peut :

1. $U_L \rightarrow U_1(U_L, \epsilon_1) \in W_1(U_L)$ par un choc supersonique à une vitesse $\sigma_1(U_L, \epsilon_1)$ proche de $\lambda_1(U_0)$ ou par une onde de détente.
2. $U_1(U_L, \epsilon_1) \rightarrow U_1^*(U_L, \epsilon_1) \in \Sigma(U_L)$ par un choc subsonique à une vitesse $\sigma^*(U_1(U_L, \epsilon_1))$ près de σ_0 .
3. $U_1^*(U_L, \epsilon_1) \rightarrow U_2(U_1^*(U_L, \epsilon_1), \epsilon_2) \in W_2(U_1^*(U_L, \epsilon_1))$ par un choc supersonique à une vitesse $\sigma_2(U_1^*(U_L, \epsilon_1), \epsilon_2)$ proche de $\lambda_2(U_0^*)$ ou par une onde de détente.

Soit U_R fixé. Ces 3 ondes sont solutions du problème de Riemann si et seulement si

$$\mathcal{F}(U_L, U_R, \epsilon_1, \epsilon_2) = U_R - U_2(U_1^*(U_L, \epsilon_1), \epsilon_2) = 0. \quad (4.7)$$

Les lemmes 4.1-4.3 nous disent que $\mathcal{F}$ est au moins de classe $\mathcal{C}^2$.

Hypothèse 4.5. *On suppose :*

$$\frac{\partial U_1^*}{\partial \epsilon}(U_0, 0) \text{ et } r_2(U_0^*) \text{ sont linéairement indépendants.}$$

Remarque 4.2. *Géométriquement, cela signifie que les courbes $W_2(U_0^*)$ et $\Sigma(U_0)$ se coupent en U_0^* et ne sont pas tangentes en U_0^* .*

Lemme 4.4. *Sous les hypothèses H4.1, H4.2 et H4.3 alors*

$$\frac{\partial U_1^*}{\partial \epsilon}(U_0, \epsilon = 0) = \left(\nabla_U F(U_0^*) - \sigma_0 \text{Id} \right)^{-1} \left[\left(\lambda_1(U_0) - \sigma_0 \right) r_1(U_0) - \left(U_0^* - U_0 \right) \left(\frac{\partial d}{\partial \sigma}(U_0, \sigma_0) \right)^{-1} \left(\nabla_{U_L} d(U_0, \sigma_0) \cdot r_1(U_0) \right) \right].$$

Preuve.

Rappelons que U_1^* est défini par

$$U_1^*(U_L, \epsilon) = \tilde{U}(U_1(U_L, \epsilon), \sigma^*(U_1(U_L, \epsilon))).$$

Ainsi, par dérivation par rapport à ϵ , on a

$$\frac{\partial U_1^*}{\partial \epsilon} = \nabla_U \tilde{U} \frac{\partial U_1}{\partial \epsilon} + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \sigma} \left(\nabla_U \sigma^* \cdot \frac{\partial U_1}{\partial \epsilon} \right).$$

Cette relation prise en $\epsilon = 0$ combiné avec le lemme (4.3) fournit la relation suivante

$$\frac{\partial U_1^*}{\partial \epsilon}(U_0, 0) = \nabla_U \tilde{U}(U_0, \sigma_0) r_1(U_0) + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \sigma}(U_0, \sigma_0) \left(\nabla_U \sigma^*(U_0) \cdot r_1(U_0) \right). \quad (4.8)$$

Par définition de $\tilde{U}$, on a pour tout U_L et tout σ

$$F(\tilde{U}(U_L, \sigma)) - F(U_L) - \sigma(\tilde{U}(U_L, \sigma) - U_L) = 0,$$

donc par dérivation par rapport à U_L et σ on en déduit

$$\nabla_U F(\tilde{U}) \nabla_{U_L} \tilde{U} - \nabla_U F(U_L) - \sigma(\nabla_{U_L} \tilde{U} - \text{Id}) = 0, \quad (4.9)$$

et

$$\nabla_U F(\tilde{U}) \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \sigma} - (\tilde{U} - U_L) - \sigma \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \sigma} = 0. \quad (4.10)$$

En évaluant (4.9) et (4.10) en $(U_L, \sigma) = (U_0, \sigma_0)$ et en utilisant $\tilde{U}(U_0, \sigma_0) = U_0^*$, on en déduit

$$\nabla_U \tilde{U}(U_0, \sigma_0) = (\nabla_U F(U_0^*) - \sigma_0 \text{Id})^{-1} (\nabla_U F(U_0) - \sigma_0 \text{Id}), \quad (4.11)$$

et

$$\frac{\partial \tilde{U}}{\partial \sigma}(U_0, \sigma_0) = (\nabla_U F(U_0^*) - \sigma_0 \text{Id})^{-1} (U_0^* - U_0). \quad (4.12)$$

De même, puisque $d(U_L, \sigma^*) = 0$, par dérivation par rapport à U_L , on a

$$\nabla_{U_L} \sigma^*(U_0) = - \left(\frac{\partial d}{\partial \sigma}(U_0, \sigma_0) \right)^{-1} \nabla_{U_L} d(U_0, \sigma_0), \quad (4.13)$$

et en reportant (4.11), (4.12) et (4.13) dans (4.8) combiné avec

$$\nabla_U F(U_0) r_1(U_0) = \lambda_1(U_0) r_1(U_0),$$

on en déduit le résultat. □

Proposition 4.1. *Sous les hypothèses H4.1-H4.5, il existe des voisinages M_1 de U_0 , M_2 de U_0^* et M_3 de $(0, 0)$ tels que pour tout $U_L \in M_1$ et tout $U_R \in M_2$, il existe un unique $(\epsilon_1, \epsilon_2) \in M_3$ tel que*

$$\mathcal{F}(U_L, U_R, \epsilon_1, \epsilon_2) = U_R - U_2(U_1^*(U_L, \epsilon_1), \epsilon_2) = 0.$$

Preuve.

On a $\mathcal{F}(U_0, U_0^*, 0, 0) = 0$ et

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon_1} \mathcal{F}(U_0, U_0^*, 0, 0) = -r_2(U_0^*)$$

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon_2} \mathcal{F}(U_0, U_0^*, 0, 0) = \frac{\partial U_1^*}{\partial \epsilon}(U_0, 0)$$

donc le théorème des fonctions implicites s'applique grâce à H4.5 donnant le résultat. □

Théorème 4.1. *Sous les hypothèses H4.1-H4.5, il existe des voisinages N_1 de U_0 et N_2 de U_0^* tels que pour tout $U_L \in N_1$ et tout $U_R \in N_2$, le problème de Riemann a une solution à trois ondes et est unique dans cette classe de solutions.*

Preuve.

Tout d'abord, on peut prolonger σ_k pour $\epsilon \geq 0$ par

$$\sigma_k(U_L, \epsilon) = \lambda_k(U_k(U_L, \epsilon)), \quad 0 \leq \epsilon < \delta_k.$$

Ainsi $\sigma_k \in \mathcal{C}^0(A_k \times (-\delta_k, \delta_k))$ et de classe $\mathcal{C}^2$ loin de $\epsilon = 0$. Et puisque

$$\frac{\partial \sigma_k}{\partial \epsilon}(U_L, 0^+) = \nabla \lambda_k(U_L) \cdot r_k(U_L) = 1,$$

σ_k n'est pas $\mathcal{C}^1$ pour $\epsilon = 0$. On dira que σ_k est la vitesse de l'onde reliant U_L à $U_k(U_L, \epsilon)$, même lorsqu'il s'agit d'une onde de détente.

En utilisant la proposition 4.1, soient M_1 , M_2 et M_3 définis comme auparavant et (ϵ_1, ϵ_2) l'unique solution de

$$\mathcal{F}(U_L, U_R, \epsilon_1, \epsilon_2) = 0.$$

Donc une solution du problème de Riemann à 3 ondes est construite de la façon suivante :

$$\begin{array}{ccccc} \sigma_1(U_L, \epsilon_1) \simeq \lambda_1(U_0) & & \sigma^*(U_1(U_L, \epsilon_1)) \simeq \sigma_0 & & \\ U_L & \xrightarrow{\text{lente, supersonique}} & U_1(U_L, \epsilon_1) & \xrightarrow{\text{subsonique}} & U_1^*(U_L, \epsilon_1) \\ & \sigma_2(U_1^*(U_L, \epsilon_1), \epsilon_2) \simeq \lambda_2(U_0^*) & & & \\ U_1^*(U_L, \epsilon_1) & \xrightarrow{\text{rapide, supersonique}} & U_2^*(U_1^*(U_L, \epsilon_1), \epsilon_2) & & \end{array}$$

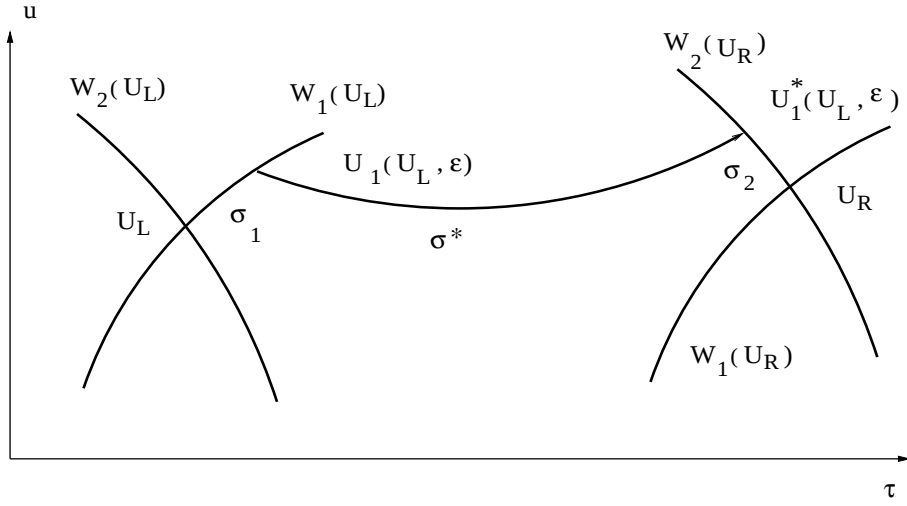


FIG. 4.1 – Schéma de résolution du problème de Riemann entre U_L et U_R .

Soit U une solution du problème de Riemann dans la classe des solutions à 3 ondes, et choisissons des voisinages N_1 de U_0 , N_2 de U_0^* de telle sorte qu'on ait l'unicité des lemmes 4.1-4.3.

Soient $U_L \in N_1$, $U_R \in N_2$. Grâce au lemme 4.3, la vitesse de l'onde lente reliant U_L à $U_m \in N_1$ est $\sigma_1(U_L, \bar{\epsilon}_1)$ pour un $|\bar{\epsilon}_1| < \delta_1$, et $U_m = U_1(U_L, \bar{\epsilon}_1)$.

De même, la vitesse de l'onde rapide reliant U_m^* à U_R est $\sigma_2(U_m^*, \bar{\epsilon}_2)$ pour un $|\bar{\epsilon}_2| < \delta_2$, et $U_R = U_2(U_m^*, \bar{\epsilon}_2)$.

Le choc subsonique de U_m à U_m^* se déplace à une vitesse σ proche de σ_0 , et comme $d(U_m, \sigma) = 0$, le lemme 4.2 impose $\sigma = \sigma^*(U_m)$, $U_m^* = \tilde{U}(U_m, \sigma^*(U_m))$. De par la forme de U_m et grâce au lemme 4.1, on a

$$U_m^* = U_1^*(U_L, \bar{\epsilon}_1)$$

donc

$$\mathcal{F}(U_L, U_R, \bar{\epsilon}_1, \bar{\epsilon}_2) = 0$$

et la proposition 4.1 donne que $\epsilon_1 = \bar{\epsilon}_1$ et $\epsilon_2 = \bar{\epsilon}_2$.

□

4.1.3 Application

Suivant l'étude déjà faite, on considère le p-système avec capillarité et viscosité

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X u = 0, \\ \partial_t u + \partial_X P = \mu \partial_{XX}^2 u - \mu^2 A \partial_{XXX}^3 \tau, \end{cases} \quad (4.14)$$

où P est une pression suivant une loi d'état de type Van Der Waals.

Si $0 < A \leq 1/4$, en notant $b_{\pm}$ les racines (réelles et strictement positives) de l'équation $b^2 - b + A = 0$ et en posant $w = u - \mu b_+ \partial_X \tau$, le système (4.14) devient

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X w = \mu b_+ \partial_{XX}^2 \tau, \\ \partial_t w + \partial_X P = \mu b_- \partial_{XX}^2 w, \end{cases} \quad (4.15)$$

qui est bien de la forme (4.2) avec

$$U = \begin{pmatrix} \tau \\ w \end{pmatrix}, \quad F(\tau, w) = \begin{pmatrix} -w \\ P(\tau) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad B = \begin{pmatrix} b_+ & 0 \\ 0 & b_- \end{pmatrix}.$$

Le système (4.3) devient également

$$\begin{cases} \tau' = b_+^{-1} \left(-(w - w_L) - \sigma(\tau - \tau_L) \right), \\ w' = b_-^{-1} \left((P(\tau) - P(\tau_L)) - \sigma(w - w_L) \right), \end{cases} \quad (4.16)$$

Pour $\sigma = 0$, ce système s'écrit

$$\begin{cases} \tau' = -b_+^{-1}(w - w_L), \\ w' = b_-^{-1}(P(\tau) - P(\tau_L)), \end{cases} \quad (4.17)$$

qui est Hamiltonien (voir [36]) avec

$$H(\tau, w) = -\frac{(w - w_L)^2}{2b_+} - \frac{\tilde{P}(\tau)}{b_-},$$

où $\tilde{P}$ est une primitive de $P - P(\tau_L)$.

Notons G par

$$G = \begin{pmatrix} -b_+^{-1}(w - w_L) \\ b_-^{-1}(P(\tau) - P(\tau_L)) \end{pmatrix}.$$

Les valeurs propres de ∇G sont définies par

$$\lambda_{\pm}(\tau) = \pm \sqrt{\frac{-P'(\tau)}{b_+ b_-}},$$

là où cela a un sens.

On en déduit que $(m, 0)$ et $(M, 0)$ sont des points selles et on en déduit que les espaces propres de ∇G en $(m, 0)$ sont

$$E_m^+ = \text{Ker} \left(\nabla G(m) - \lambda_+(m) \text{Id} \right) = \begin{pmatrix} -h(m) \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$E_m^- = \text{Ker} \left(\nabla G(m) - \lambda_-(m) \text{Id} \right) = \begin{pmatrix} h(m) \\ 1 \end{pmatrix},$$

où $h = h(\tau)$ est strictement positive.

Maintenant, soit $X_0 = (\tau_0, w_0) \in W^u(M, 0)$. D'après ce qui précède, on peut choisir $\tau_0 < M$, $w_0 > 0$ et soit $(\tau, w)(\xi) = \phi(\xi, X_0)$ le flot associé à G .

Par définition, $\phi(\xi, X_0) \rightarrow (M, 0)$ pour $\xi \rightarrow -\infty$ et comme H est constant le long des trajectoires, pour tout ξ , on a $H(\phi(\xi, X_0)) = H(M, 0) = 0$ ². En éliminant w dans (4.17), on en déduit le système

$$\begin{cases} \tau'' + \gamma \tilde{P}' = 0, \\ w' - (b_-)^{-1} \tilde{P}' = 0, \end{cases} \quad (4.18)$$

pour une certaine constante $\gamma > 0$. En l'intégrant de $-\infty$ à ξ , on obtient

$$\begin{cases} \tau' + \gamma \tilde{P} = 0, \\ w - (b_-)^{-1} \tilde{P} = 0. \end{cases} \quad (4.19)$$

Ainsi $\tau' = -\gamma \tilde{P} < 0$ tant que $m < \tau < M$. Comme la courbe $\mathcal{C} = \{H = 0\}$ passe par $(m, 0)$ et $(M, 0)$, et comme $(\tau, w) \neq (m, 0)$ et $(\tau, w) \neq (M, 0)$ pour tout ξ par unicité, τ reste dans l'intervalle (m, M) . Ainsi, τ est décroissante et la limite τ_∞ de $\tau(\xi)$ lorsque τ tend vers $+\infty$ existe. Cette limite est alors un point d'équilibre de (4.17) avec $\tau_\infty < M$. L'unique solution est donc $\tau_\infty = m$. On en déduit également que $w_\infty = \tilde{P}(\tau_\infty)/b_- = 0$ et on a ainsi montré qu'il existe une trajectoire $\Gamma_1 = \{(M, 0) \rightarrow (m, 0)\}$.

De même, on peut montrer par des arguments similaires qu'il existe une trajectoire $\Gamma_2 = \{(m, 0) \rightarrow (M, 0)\}$.

Donc l'hypothèse H4.1 est vérifiée avec $(\tau_0, w_0, \sigma_0) = (m, 0, 0)$ (*resp.* $(M, 0, 0)$) et $(\tau_0^*, w_0^*, \sigma_0) = (M, 0, 0)$ (*resp.* $(m, 0, 0)$).

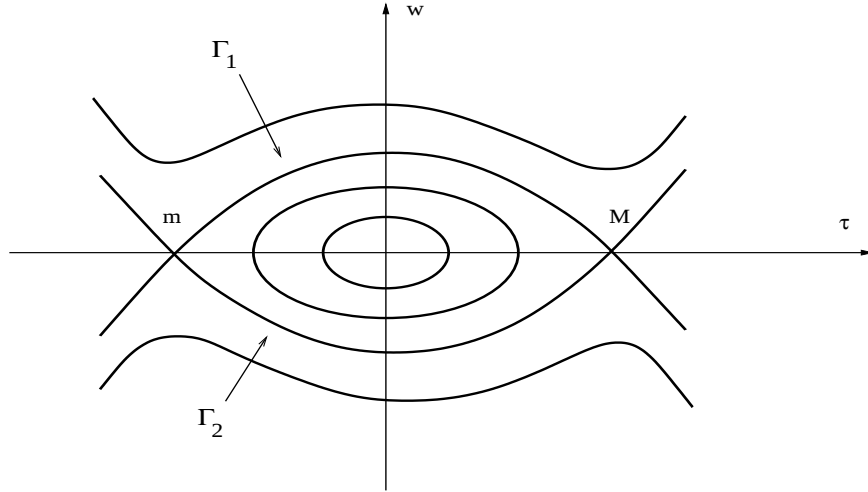


FIG. 4.2 – Courbes de niveau de H .

Maintenant, on définit la fonction d comme auparavant. Notant $(\tau(\xi), w(\xi))$ une orbite reliant $(m, 0)$ à $(M, 0)$ et $\Gamma_1 = \{(m, 0) \rightarrow (M, 0)\}$, en utilisant la formule de Green-Riemann, on peut

²en choisissant H de telle sorte que $H(M, 0) = H(m, 0) = 0$

alors calculer

$$\begin{aligned}\frac{\partial d}{\partial \sigma} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} \tau' \\ w' \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} -(b_+)^{-1}(\tau - m) \\ (b_-)^{-1}w \end{pmatrix} d\xi \\ &= \int_{\Gamma_1} \left((b_+)^{-1}(\tau - m)dw - (b_-)^{-1}wdu \right) \\ &= \left((b_+)^{-1} + (b_-)^{-1} \right) A(R) > 0,\end{aligned}\tag{4.20}$$

où $A(R)$ est l'aire délimitée par Γ_1 et l'axe $\{w = 0\}$ donc l'hypothèse H4.2 est également satisfaite.

Les valeurs propres de la jacobienne du flux du système (4.14) sont définies par

$$\lambda_1(\tau) = -c(\tau), \quad \lambda_2(\tau) = c(\tau)$$

où $c(\tau) = (-P'(\tau))^{1/2}$ là où cela a un sens. Les vecteurs propres correspondant sont définis par

$$r_1(\tau) = k(\tau) \begin{pmatrix} 1 \\ c(\tau) \end{pmatrix}, \quad r_2(\tau) = k(\tau) \begin{pmatrix} 1 \\ -c(\tau) \end{pmatrix},$$

où $k(\tau) = 2c(\tau)/P''(\tau)$ est un coefficient de normalisation.

Le système est donc bien strictement hyperbolique et VNL dans des voisinages $A_1 = \{(\tau, w); \tau < \alpha\}$ de $U_0 = (m, 0)$ et $A_2 = \{(\tau, w); \tau > \beta\}$ de $U_0^* = (M, 0)$ donc l'hypothèse H4.3 est vérifiée.

L'hypothèse H4.4 vient du fait que B est une matrice diagonale à coefficients positifs.

Il ne nous reste plus qu'à vérifier l'hypothèse H4.5 pour pouvoir conclure. Pour cela, on va utiliser le lemme (4.4) pour calculer la dérivée de U_1^* par rapport à ϵ .

La formule 4.5 nous permet de calculer $\nabla_{U_L} d(m, 0, 0)$

$$\frac{\partial d}{\partial \tau_L}(m, 0, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} \tau' \\ w' \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} 0 \\ -(b_-)^{-1}p'(m) \end{pmatrix} d\xi = -\frac{1}{b_-}P'(m)(M - m),$$

et

$$\frac{\partial d}{\partial w_L}(m, 0, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{pmatrix} \tau' \\ w' \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} (b_+)^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} d\xi = 0.$$

Notons β le coefficient

$$\beta = \left(\frac{\partial d}{\partial \sigma} \right)^{-1}$$

qui est strictement positif grâce à (4.20).

Le résultat du lemme 4.4 montre que

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial U_1^*}{\partial \epsilon} \right|_{\epsilon=0} &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ P'(M) & 0 \end{pmatrix}^{-1} \left\{ -c(m)k(m) \begin{pmatrix} 1 \\ c(m) \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. - k(m)\beta \begin{pmatrix} M - m \\ 0 \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} -P'(m)(M - m)/b_- \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ c(m) \end{pmatrix} \right] \right\} \\ &= \frac{k(m)}{P'(M)} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -P'(M) & 0 \end{pmatrix} \left\{ -c(m) \begin{pmatrix} 1 \\ c(m) \end{pmatrix} - \beta b_-^{-1} c^2(m)(M - m) \begin{pmatrix} M - m \\ 0 \end{pmatrix} \right\} \\ &= \frac{k(m)}{P'(M)} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -P'(M) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -c(m) - \beta b_-^{-1} c^2(m)(M - m)^2 \\ -c^2(m) \end{pmatrix} \\ &= k(m) \begin{pmatrix} c^2(m)/c^2(M) \\ c(m) + \beta b_-^{-1} c^2(m)(M - m)^2 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Le coefficient $k(m)$ est stictement positif donc $\partial U_1^*/\partial \epsilon$ a une pente positive alors que la pente de $r_2(U_0^*)$ est $-c(m)$ est négative, donc l'hypothèse H4.5 est vérifiée.

On conclut donc grâce au théorème 4.1 que le problème de Riemann pour (4.14), pour U_L proche de $(m, 0)$ et U_R proche de $(M, 0)$ a une unique solution (dans la classe des solutions à 3 ondes) qui consiste en 3 ondes dont l'une est un choc subsonique (une transition de phase), et pour laquelle τ saute l'intervalle $[\alpha, \beta]$.

4.2 Résolution exacte du problème de Riemann

L'approche théorique de la résolution du problème de Riemann près des points de Maxwell impose de trouver les zéros d'une fonction non linéaire $\mathcal{F}$ de deux paramètres pour trouver les états intermédiaires entre U_L et U_R . Si on se limite au p-système, $\mathcal{F}$ n'est plus fonction de deux paramètres ϵ_1 et ϵ_2 mais d'un seul et il est envisageable de déterminer numériquement les zéros de $\mathcal{F}$.

4.2.1 Présentation de la méthode

On reprend le p-système en une dimension d'espace

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X u &= 0 \\ \partial_t u + \partial_X P &= 0 \end{cases} \quad (4.21)$$

avec la condition initiale

$$U(t=0) := (\tau, u)(t=0) = \begin{cases} U_L = (\tau_L, u_L) & x < 0 \\ U_R = (\tau_R, u_R) & x > 0 \end{cases}$$

et P est la pression.

La méthodologie peut alors s'écrire ainsi :

1. Paramétrer dans le plan (τ, u) l'ensemble $W_1(U_L)$ qui représente les états que l'on peut relier à U_L par un choc ou une détente ce qui nous donne un $U_1(U_L, \epsilon_1)$ dans la même phase que U_L pour un certain paramètre ϵ_1 .
2. A ce $U_1(U_L, \epsilon_1)$ dans une phase correspond un unique couple $(U_1^*(U_L, \epsilon_1), \sigma^*)$ dans l'autre phase. Cet état est donné par le critère visco-capillaire et peut être trouvé par une méthode de tir.
3. Paramétrer dans le plan (τ, u) l'ensemble $W_2(U_1^*)$ qui représente les états que l'on peut relier à U_1^* par un choc ou une détente. Ceci fournit $U_2(U_1^*(U_L, \epsilon_1), \epsilon_2)$ dans la même phase que U_1^* pour un ϵ_2 .
4. Résoudre numériquement en ϵ_1 et ϵ_2 l'équation

$$U_R - U_2(U_1^*(U_L, \epsilon_1), \epsilon_2) = 0.$$

4.2.2 Paramétrisation des courbes de chocs et détentes

La définition des ensembles $W_k(U_L)$ et la construction du problème de Riemann pour le p-système avec données initiales proches dans le cas de loi d'état type gaz parfaits est faite de manière complète dans [17] ou [29] et on le fait ici pour des gaz réels lorsque la pression vérifie $P' < 0$ et $P'' > 0$.

Courbes de choc $\sigma_k(U_L)$, $k = 1, 2$

On se place dans une phase pure et donc la pression vérifie $P' < 0$ et $P'' > 0$ ainsi les valeurs propres de la jacobienne du flux du p-système sont bien réelles et sont définies par

$$\lambda_1 = -\sqrt{-P'} \quad \text{et} \quad \lambda_2 = \sqrt{-P'}.$$

Les relations de saut de Rankine Hugoniot montre que

$$u - u_L = \pm \sqrt{(\tau - \tau_L)(P(\tau_L) - P(\tau))}.$$

Pour les 1-chocs, le critère de Lax impose que

$$-\sqrt{-P'(\tau)} < -\sqrt{-P'(\tau_L)}$$

donc comme $P'' > 0$ on a $\tau_L > \tau$ et la courbe de 1-choc $\sigma_1(\tau; U_L)$ est défini dans le plan (τ, u) par

$$\sigma_1(\tau; U_L) = u_L - \sqrt{(\tau - \tau_L)(P(\tau_L) - P(\tau))}, \quad \tau < \tau_L,$$

et de la même manière, la courbe de 2-choc $\sigma_2(\tau; U_L)$ est défini dans le plan (τ, u) par

$$\sigma_2(\tau; U_L) = u_L - \sqrt{(\tau - \tau_L)(P(\tau_L) - P(\tau))}, \quad \tau_L < \tau.$$

Courbes de détente $d_k(U_L)$, $k = 1, 2$

Une onde de détente est une solution particulière de la forme $U = U(x/t)$. Notons $\xi = x/t$ alors $\tau = \tau(\xi)$ et $u = u(\xi)$ doivent satisfaire le système d'équations différentielles ordinaires

$$(\nabla F - \xi Id)\partial_\xi U = 0,$$

ou $F = (-u, P)^T$.

Si $\partial_\xi U \neq 0^3$ alors $\partial_\xi U$ est un vecteur propre de ∇F et ξ est une valeur propre de ∇F . La courbe de 1-détente est donc paramétrée dans le plan (τ, u) par

$$d_1(\tau; U_L) = u_L + \int_{\tau_L}^{\tau} \sqrt{-P'(v)} dv, \quad \tau > \tau_L$$

et la courbe de 2-détente est définie de la façon suivante

$$d_2(\tau; U_L) = u_L - \int_{\tau_L}^{\tau} \sqrt{-P'(v)} dv, \quad \tau_L > \tau.$$

Ensembles W_k pour $k = 1, 2$

Les ensembles $W_k(U_L)$ dans le plan (τ, u) sont donc définis par

$$W_1(U_L) = \left\{ u = \begin{cases} u_L - \sqrt{(\tau - \tau_L)(P(\tau_L) - P(\tau))} & \text{si } \tau < \tau_L \\ u_L + \int_{\tau_L}^{\tau} \sqrt{-P'(v)} dv & \text{si } \tau > \tau_L \end{cases} \right\},$$

et l'ensemble $W_2(U_L)$ par

$$W_2(U_L) = \left\{ u = \begin{cases} u_L - \sqrt{(\tau - \tau_L)(P(\tau_L) - P(\tau))} & \text{si } \tau_L < \tau \\ u_L - \int_{\tau_L}^{\tau} \sqrt{-P'(v)} dv & \text{si } \tau_L > \tau \end{cases} \right\}.$$

³sinon U est constante

4.2.3 Application numérique

Pour simplifier, on suppose que P est un polynôme de degré trois défini par

$$P = P_0 - P_1(\tau - m)(\tau - M) \left(\tau - \frac{m + M}{2} \right)$$

où P_0 et P_1 sont des constantes et m et M sont les points de Maxwell. On suppose également que τ_L se trouve dans la phase liquide ($\tau < m$) et donc que τ_R se trouve dans la phase vapeur. On choisit pour les applications numérique $P_0 = 2$, $P_1 = 1/10$, $m = 1$ et $M = 5$.

Le cas particulier du p-système fait que $W_k = \{w_k(\tau)\}$. La résolution du problème de Riemann se résume donc à trouver le zéro de l'équation en τ suivante

$$u_R - w_2(\tau_R; U_1^*(U_R, \tau)) = 0. \quad (4.22)$$

Une difficulté vient de l'imprécision sur la vitesse de changement de phase obtenue par la méthode de tir. On peut par exemple tracer la différence

$$\Delta(\tau) = u_R - w_2(\tau_R; U_1^*(U_L, \tau))$$

pour différentes valeurs de $\delta\sigma$, pas d'incrément de σ dans la méthode de tir décrite dans la section 3.2.

La figure 4.3 montre bien l'imprécision du résultat alors que pour un $\delta\sigma$ plus petit le résultat est nettement plus satisfaisant.

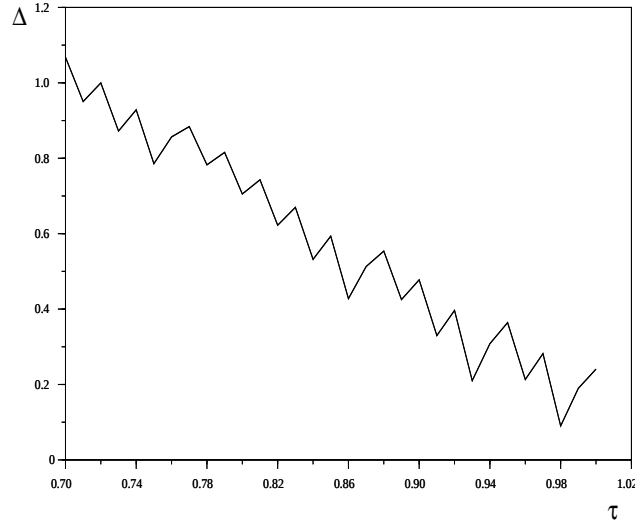


FIG. 4.3 – L'incrément de la vitesse de changement de phase dans la méthode de tir est fixé à $\delta\sigma = 10^{-2}$; les états droits et gauches sont donnés par $U_L = (0.9, 1)$ et $U_R = (5.1, 1)$.

On trace τ et u en fonction de x pour différentes valeurs de t . On peut dans un premier temps, tracer τ et u pour des conditions initiales $u_L = u_R = 0$ et $\tau_L = m$, $\tau_R = M$. La solution exacte est alors celle donnée par la règle des aires de Maxwell. Il s'agit donc de la solution stationnaire $\sigma = 0$ donnée par

$$(\tau, u)(t, x) = \begin{cases} (m, 0) & x < 0 \\ (M, 0) & x > 0 \end{cases}$$

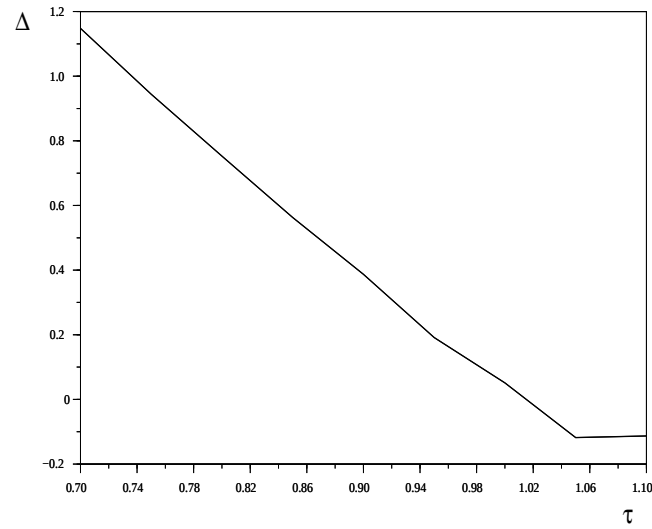
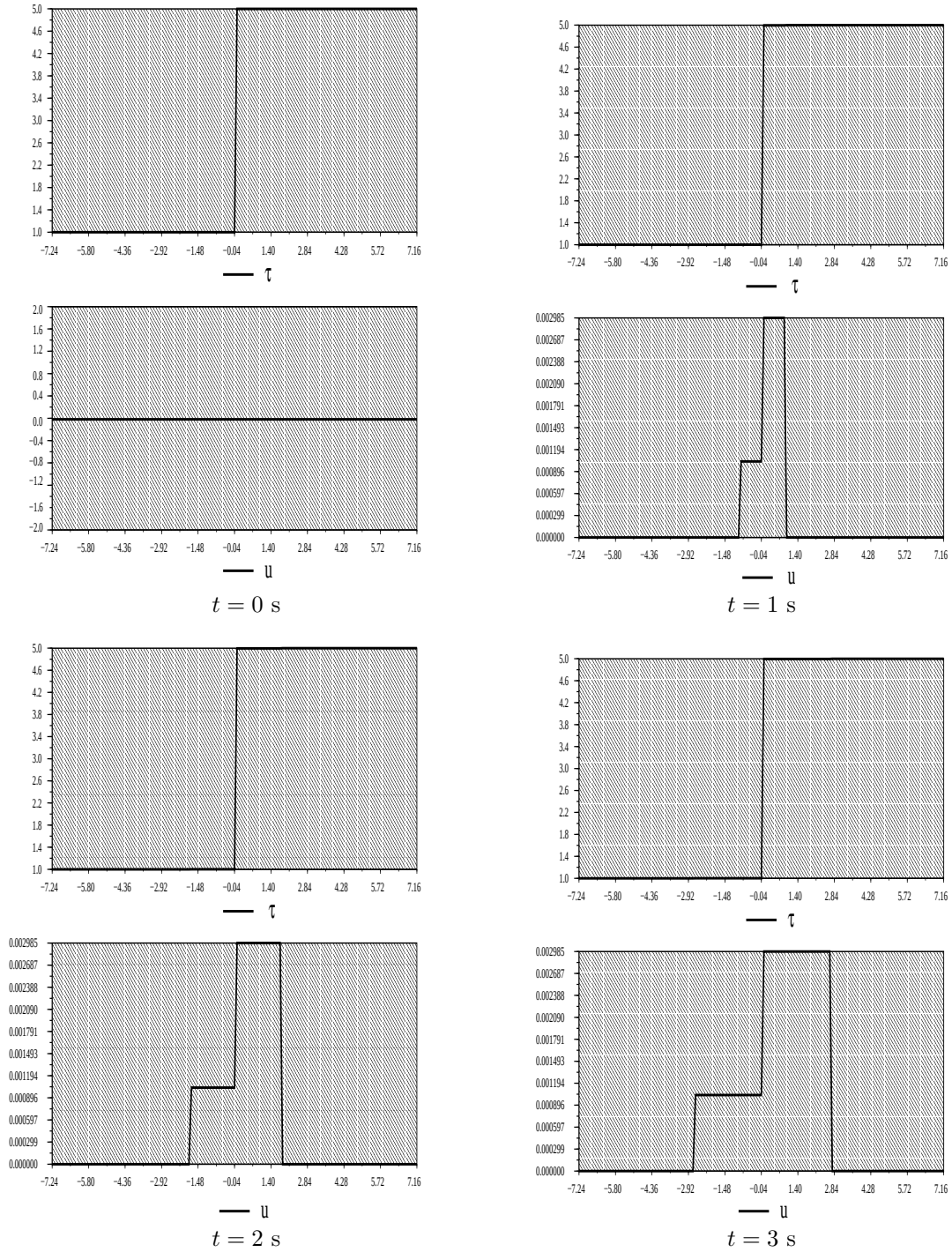
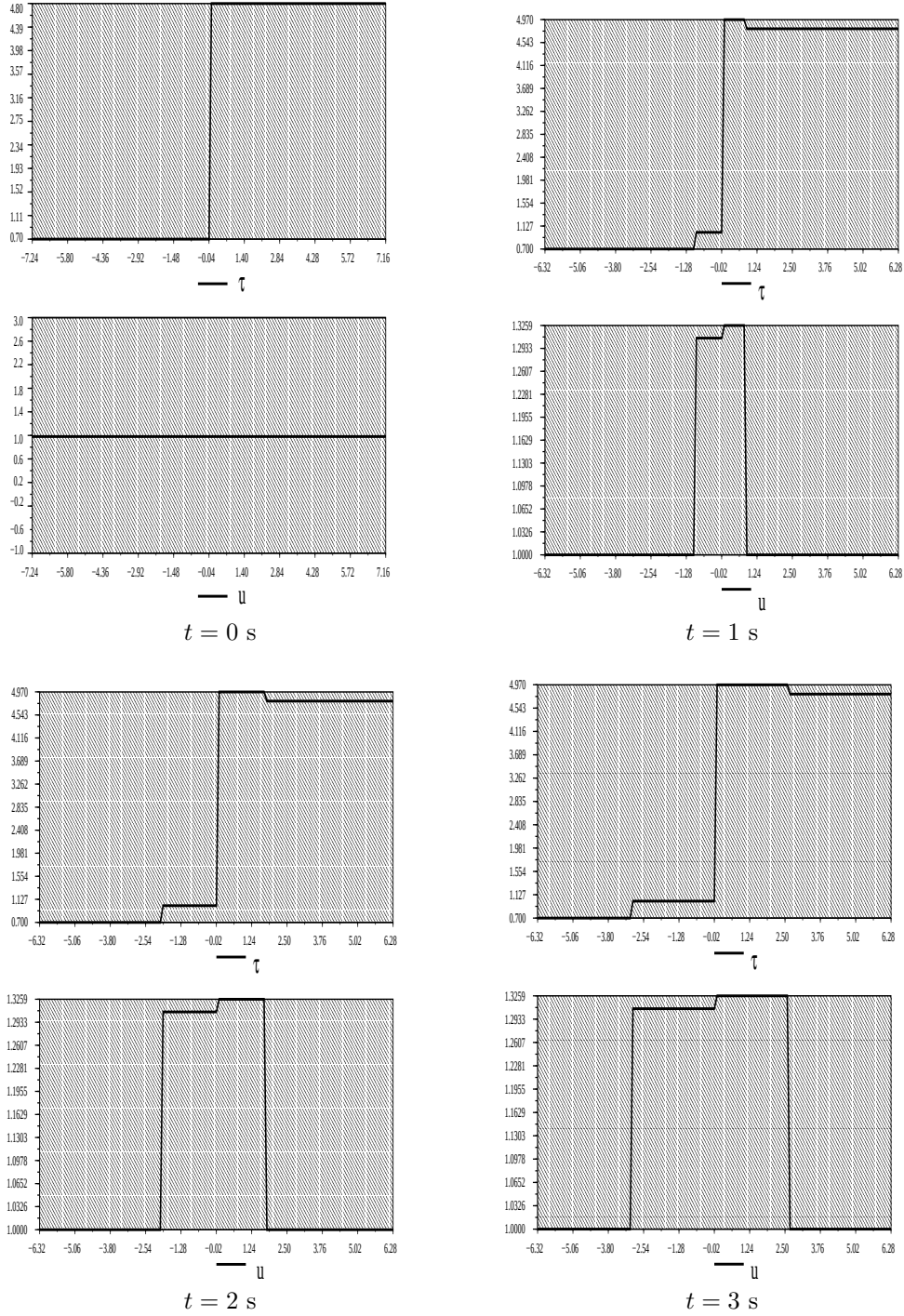


FIG. 4.4 – L’incrément de la vitesse de changement de phase dans la méthode de tir est fixé à $\delta\sigma = 10^{-4}$; les états droits et gauches sont donnés par $U_L = (0.9, 1)$ et $U_R = (5.1, 1)$.

La figure 4.5 montre le profil de τ et de u . Les résultats ainsi obtenus sont bien en accord avec la solution exacte. L’imprécision sur σ vient de la difficulté à trouver la vitesse de changement de phase σ^* . Le seul moyen d’augmenter la précision est de diminuer le pas d’incrément sur la vitesse σ mais cela augmente catastrophiquement le temps de calcul.

FIG. 4.5 - $u_L = u_R = 0$ et $\tau_L = 1$, $\tau_R = 5$

FIG. 4.6 - $u_L = u_R = 1$ et $\tau_L = 0.7$, $\tau_R = 4.8$

4.3 Conclusion

On a montré dans ce chapitre que la solution du problème de Riemann avec des états à gauche et à droite de l'interface proches des points de Maxwell est constituée de trois ondes dont deux sont des chocs ou des détente classiques et une est une transition de phase. De plus cette solution est unique dans cette classe de solutions.

On propose ensuite un algorithme de résolution du problème de Riemann en utilisant cette structure à trois ondes. Le principe est le même que la résolution exacte du problème de Riemann pour le p-système avec une loi d'état de type gaz parfait. On cherche l'intersection avec trois courbes dont une est une courbe définissant les états admissibles par critère visco-capillaire. Cette courbe est définie de manière approchée à l'aide d'une méthode de tir. Elle n'est donc pas définie analytiquement ce qui entraîne par conséquent un cout de calcul non négligeable. Néanmoins les solutions obtenues à l'aide de cette méthode pourraient être utilisées pour valider les solutions du problème de Riemann obtenues à l'aide d'un solveur approché. Des résultats numériques sont alors proposés. Malheureusement, les temps de calculs pour trouver les états intermédiaires sont beaucoup trop élevés (de l'ordre d'une journée) pour pouvoir utiliser cette méthode directement dans un code de calcul utilisant une méthode de type Godunov.

Deuxième partie

Approche à deux lois d'états

Chapitre 5

Un modèle isotherme de changement de phase

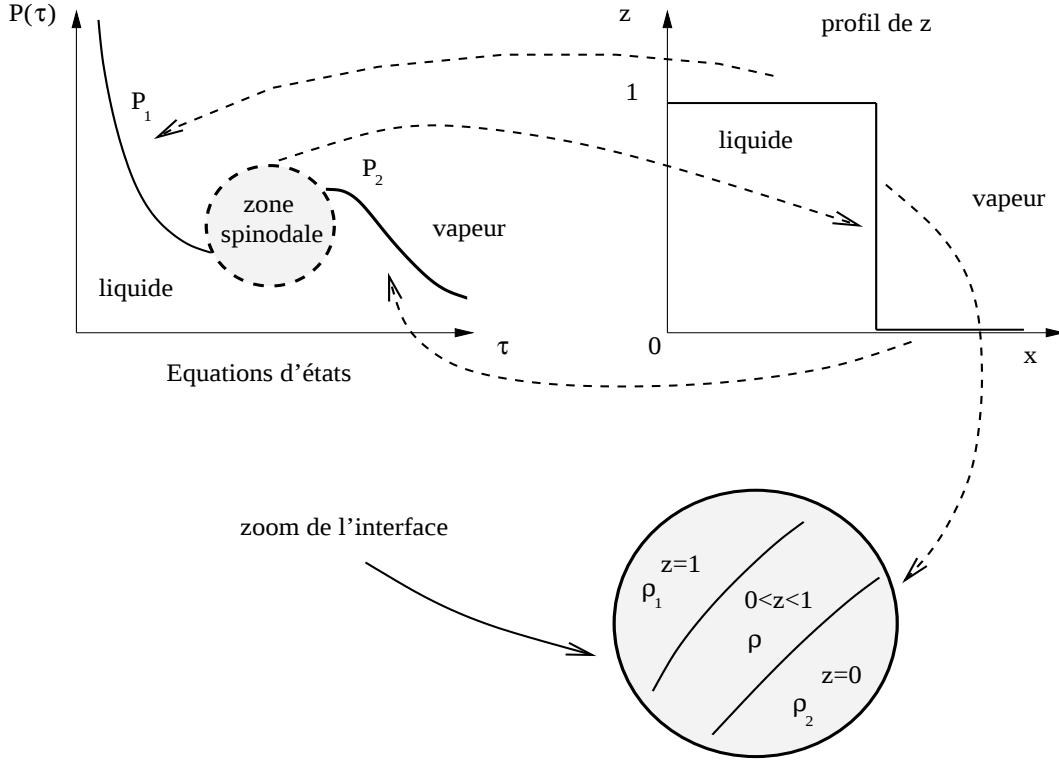
5.1 Introduction d'un paramètre d'ordre

Les difficultés aussi bien mathématiques (problèmes d'existence et d'unicité de solution) que numériques liées à une loi d'état de type Van Der Waals (où il existe une zone pour laquelle la pression $P = P(\tau, T)$ vérifie $\partial P / \partial \tau > 0$ dans la zone spinodale) conduisent à adopter une approche alternative. Celle-ci consiste à supposer que les deux phases sont deux fluides ayant leur propre thermodynamique. L'interface est alors repérée grâce à un paramètre d'ordre abstrait noté z . Ce paramètre tient lieu de marqueur valant 1 (*resp.* 0) dans la phase 1 (*resp.* 2). L'indice 1 ou 2 représente alors aussi bien la phase vapeur que la phase liquide. L'évolution de l'interface est ainsi entièrement déterminée par la fonction $(x, t) \mapsto z(x, t)$. Cette approche bifluide a déjà été étudiée par Allaire, Clerc et Kokh [5] lorsqu'il n'y a pas de transfert de masse à travers l'interface séparant les deux phases. D'autres modèles utilisent une fraction volumique en lieu et en place de ce paramètre z comme par exemple dans [3, 53, 63].

Le principe de passage entre une approche à une loi d'état de type Van Der Waals et une approche à deux lois d'états à l'aide d'un paramètre d'ordre est illustré dans la figure 5.1.

Notre but est maintenant de prendre en compte les effets de changements de phase. Pour cela, il nous faut coupler les deux fluides de manière thermodynamiquement cohérente. Considérons une interface $\Gamma(t)$ d'épaisseur non nulle, le principe de couplage peut être décrit ainsi : dans l'interface, *i.e.* pour les (x, t) tels que $0 < z(x, t) < 1$, les équations du mouvement sont couplées grâce à une thermodynamique non classique qui prend en compte un flux de masse à travers l'interface. Dans les zones de fluide pur, chaque phase est assujettie à suivre sa propre loi d'état.

Pour simplifier la problématique, on se restreint au cas d'un écoulement isotherme et on suppose que les deux phases sont en équilibre thermique. Dans l'optique d'écrire un modèle thermodynamiquement cohérent incluant un flux de masse, on utilise la méthodologie suivante : on prescrit une énergie libre f pour le système et on en déduit les équations du mouvement à l'aide d'un principe de Hamilton [26, 27]. La dissipation d'entropie qui est l'énergie libre augmentée de l'énergie cinétique doit être positive pour être en accord avec le second principe de la thermodynamique. Cette inégalité nous permet alors d'écrire un modèle dissipatif compatible avec le flux de masse et l'équation d'évolution sur z .

FIG. 5.1 – principe de construction du paramètre d'ordre z .

5.2 Modélisation

5.2.1 Hypothèses générales

Le point de départ de la méthodologie est la prescription d'un Lagrangien pour le système. Pour ce faire, on introduit quelques notations : soit ρ_α la densité de la phase $\alpha = 1, 2$, on définit la densité de mélange par

$$\rho = z\rho_1 + (1 - z)\rho_2.$$

Notant $z_1 = z$ et $z_2 = 1 - z$, on définit la concentration de la phase α comme $y_\alpha = \rho_\alpha z_\alpha / \rho$ et dans la suite, pour alléger les notations, on notera $y = y_1$ et donc y_2 est défini par $y_2 = 1 - y$. On suppose que les deux phases ont la même vitesse $\mathbf{u}$ et on note la quantité de mouvement $\mathbf{j} = \rho\mathbf{u}$. On appelle f l'énergie libre du système et par analogie avec les théories du second gradient où l'énergie libre dépend du gradient de ρ (cas où le paramètre d'ordre est ρ [38, 73]), on suppose que f dépend du gradient de z [27],

$$f = f(\rho, y, z, \nabla z).$$

Enfin, on définit le Lagrangien L du système diphasique en utilisant l'expression classique

$$L(\rho, \mathbf{j}, y, z, \nabla z) = \frac{1}{2}\rho|\mathbf{u}|^2 - \rho f = \frac{1}{2}\frac{|\mathbf{j}|^2}{\rho} - \rho f. \quad (5.1)$$

5.2.2 Minimisation de l'action Hamiltonienne

Considérons la trajectoire d'un volume de fluide Ω entre deux instants t_1 et $t_2 > t_1$. Ce volume est assujéti à des transformations entièrement déterminées par les fonctions $(x, t) \mapsto$

$(\rho, \mathbf{j}, y, z, \nabla z)(x, t)$. Notant X la coordonnée lagrangienne de référence et x la coordonnée eulérienne, le flot est alors défini par une solution régulière χ de telle sorte que x est donné par $x = \chi(X, t)$.

Soit ν un petit paramètre réel de perturbation et considérons $(x, t, \nu) \mapsto (\hat{\rho}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{y}, \hat{z}, \widehat{\nabla z})(x, t, \nu)$ une perturbation de $(x, t) \mapsto (\rho, \mathbf{j}, y, z, \nabla z)(x, t)$ vérifiant $(\hat{\rho}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{y}, \hat{z}, \widehat{\nabla z})(x, t, \nu = 0) = (\rho, \mathbf{j}, y, z, \nabla z)(x, t)$ et s'annulant sur le bord de Ω . On fait également l'hypothèse classique de conservation de la masse ρ et on suppose que la masse perturbée $\hat{\rho}$ vérifie

$$\hat{\rho}(\hat{x}, t, \nu) = \text{cste}, \quad \forall t, \forall \nu.$$

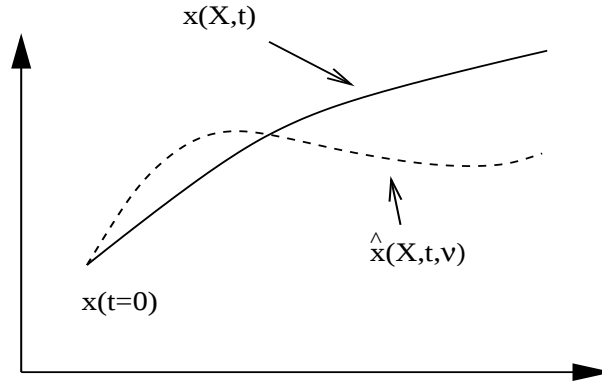


FIG. 5.2 – Perturbation de x .

On définit ensuite le déplacement virtuel ξ associé à la perturbation $\hat{x}$ comme

$$\xi(X, t) = \left(\frac{\partial \hat{x}}{\partial \nu} \right)_{X, t} (X, t, \nu = 0), \quad (5.2)$$

où $\hat{x} = \hat{\chi}(X, t)$ est le flot perturbé.

Pour toute quantité physique a , on définit l'opérateur δ à partir de sa perturbation $\hat{a} = \hat{a}(\hat{x}, t, \nu)$ de la façon suivante,

$$\delta a(x, t) = \left(\frac{\partial \hat{a}}{\partial \nu} \right)_{\hat{x}, t} (x, t, \nu = 0).$$

Il nous faut maintenant relier $\delta\rho$, $\delta\mathbf{j}$ au déplacement virtuel ξ . L'hypothèse de conservation de $\hat{\rho}$ s'écrit

$$\left(\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \nu} \right)_{\hat{x}, t} + \sum_i \frac{\partial}{\partial \hat{x}_i} \left[\hat{\rho} \left(\frac{\partial \hat{x}_i}{\partial \nu} \right)_{X, t} \right] = 0,$$

qui prit en $\nu = 0$ donne immédiatement

$$\boxed{\delta\rho = -\text{div}(\rho\xi)}. \quad (5.3)$$

Pour le calcul de $\delta\mathbf{j}$, on a

$$\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial \nu} \right)_{X, t} = \frac{\partial}{\partial \nu} \left(\hat{\mathbf{u}} \left[\hat{\chi}(X, t, \nu), t, \nu \right] \right) = \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial \nu} \right)_{\hat{x}, t} + \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial \hat{x}} \right)_{\nu, t} \left(\frac{\partial \hat{\chi}}{\partial \nu} \right)_{X, t}, \quad (5.4)$$

puis en considérant la définition de la vitesse $\hat{\mathbf{u}}$

$$\hat{\mathbf{u}}(X, t, \nu) = \left(\frac{\partial \hat{\chi}}{\partial t} \right)_{X, \nu}, \quad (5.5)$$

on en déduit par dérivation par rapport à ν et à l'aide de (5.2)

$$\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \nu}\right)_{X,t} (X, t, \nu = 0) = \left(\frac{\partial \xi}{\partial t}\right)_X (X, t) = \frac{d\xi}{dt}(x, t),$$

où $d/dt = \partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla$ est la dérivée particulaire. La relation précédente combinée avec (5.4) et prise en $\nu = 0$ montre que

$$\delta \mathbf{u} = \frac{d\xi}{dt} - \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \xi.$$

Enfin en utilisant le calcul (5.3) de $\delta \rho$, on en déduit

$$\begin{aligned} \delta(\rho \mathbf{u}) &= -\mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \xi) + \rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \xi - \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \xi \\ &= \frac{\partial}{\partial t}(\rho \xi) + \xi \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) + (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \xi - \mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \xi) - \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \xi, \end{aligned}$$

d'où

$$\boxed{\delta \mathbf{j} = \frac{\partial}{\partial t}(\rho \xi) + \operatorname{div}(\xi \otimes \mathbf{j} - \mathbf{j} \otimes \xi)}. \quad (5.6)$$

On rappelle que si $a = (a_i)_i$ et $b = (b_i)_i$ sont deux vecteurs de taille N alors $\operatorname{div}(a \otimes b)$ est un vecteur de taille N défini par

$$\operatorname{div}(a \otimes b)_i = \sum_j \frac{\partial(a_i b_j)}{\partial x_j}.$$

Dans la suite, on notera

$$R = \frac{\partial L}{\partial \rho}. \quad (5.7)$$

On définit maintenant l'action Lagrangienne dans Ω entre deux instants t_1 et t_2 par

$$\mathcal{A}(\nu) = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega} L(\hat{\rho}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{y}, \hat{z}, \widehat{\nabla z}) \, dx \, dt.$$

On applique ensuite le principe des moindres actions à $\mathcal{A}$. Les variables ρ , $\mathbf{j}$, y , z et ∇z vérifient des relations pour lesquelles l'action Lagrangienne est minimale. Ainsi, en $\nu = 0$, on a

$$\left. \frac{d\mathcal{A}}{d\nu} \right|_{\nu=0} = 0.$$

En supposant que les déplacements virtuels ξ , δz et δy sont des fonctions régulières, alors

$$\frac{d\mathcal{A}}{d\nu} = \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ \frac{\partial L}{\partial \mathbf{j}} \delta \mathbf{j} + \frac{\partial L}{\partial \rho} \delta \rho + \frac{\partial L}{\partial y} \delta y + \frac{\partial L}{\partial z} \delta z + \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \delta (\nabla z) \right\} dx \, dt. \quad (5.8)$$

Comme les dérivations par rapport à ν dans la définition de l'opérateur δ se font à $\hat{x}$ constant, les dérivées $\partial/\partial \nu$ et $\partial/\partial \hat{x}$ commutent et on en déduit

$$\boxed{\delta(\nabla z) = \nabla(\delta z)}. \quad (5.9)$$

En intégrant par parties dans (5.8) combiné avec les relations (5.3), (5.6) et (5.9), on en déduit

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{A}}{d\nu} &= \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ -\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} + \rho \nabla R \right\} \cdot \xi \, dx \, dt \\ &\quad + \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ \frac{\partial L}{\partial z} - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right) \right\} \delta z \, dx \, dt + \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ \frac{\partial L}{\partial y} \right\} \delta y \, dx \, dt. \end{aligned}$$

Comme la relation précédente est vrai pour tout ν , elle est vrai pour tout ξ , δz et δy et en prenant cette relation en $\nu = 0$, on en déduit les trois équations suivantes

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} - \rho \nabla R = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial z} - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right) = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (5.10)$$

Un peu d'algèbre montre alors que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} &= -(\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} + \rho \nabla R - \mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) \\ &= \frac{1}{2} \rho \operatorname{div}(|\mathbf{u}|^2 \operatorname{Id}) - \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) + \rho \nabla R - \mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) \\ &= -\operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho R \operatorname{Id}) + \frac{1}{2} \rho \operatorname{div}(|\mathbf{u}|^2 \operatorname{Id}) - R \nabla(\rho) \\ &\quad - \frac{\partial L}{\partial z} \nabla z - \nabla(\nabla z) \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} + \frac{\partial L}{\partial z} \nabla z + \nabla(\nabla z) \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)}, \end{aligned}$$

et en utilisant (5.10), on a

$$\frac{\partial L}{\partial z} \nabla z + \nabla(\nabla z) \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} = \operatorname{div} \left(\nabla z \otimes \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right).$$

On en déduit l'équation sur la quantité de mouvement

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} &+ \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \operatorname{div}[(\rho |\mathbf{u}|^2 + \rho R) \operatorname{Id}] \\ &- \operatorname{div} \left(\nabla z \otimes \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right) + \operatorname{div}(L \operatorname{Id}) = 0 \end{aligned}} \quad (5.11)$$

L'équation (5.11) a été établie avec une énergie libre générale. Dans la partie suivante, on exhibe une énergie libre particulière utilisée par la suite dans notre modèle de changement de phase isotherme.

5.2.3 Choix d'une énergie libre

Dans la suite, on note respectivement f_α , g_α et P_α l'énergie libre, l'enthalpie libre (également appelée enthalpie de Gibbs) et la pression de la phase α . Dans le cas d'un écoulement isotherme, ces quantités dépendent uniquement de ρ_α et on a les relations suivantes (voir l'annexe B.1)

$$\begin{cases} P_\alpha = \rho_\alpha^2 \frac{df_\alpha}{d\rho_\alpha}, \\ \frac{dP_\alpha}{d\rho_\alpha} = \rho_\alpha \frac{dg_\alpha}{d\rho_\alpha}, \end{cases} \quad (5.12)$$

qui peut également s'écrire à l'aide de l'énergie libre volumique $F_\alpha = \rho_\alpha f_\alpha$

$$\begin{cases} g_\alpha = \frac{dF_\alpha}{d\rho_\alpha}, \\ P_\alpha = \rho_\alpha \frac{dF_\alpha}{d\rho_\alpha} - F_\alpha. \end{cases} \quad (5.13)$$

On suppose désormais que f est donné par l'expression

$$\rho f = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} z_{\alpha} f_{\alpha} + \mathcal{H}(z) + \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2, \quad (5.14)$$

où μ_0 est une constante positive et $\mathcal{H}$ est un potentiel à deux puits. Typiquement $\mathcal{H}$ est défini par $\mathcal{H} = \mu_1 z^2(1 - z)^2$ avec $\mu_1 \geq 0$.

La définition (5.7) de R donne

$$R = -\frac{1}{2} \frac{|\mathbf{j}|^2}{\rho^2} - f - \sum_{\alpha} \frac{y_{\alpha}^2}{z_{\alpha}} \frac{df_{\alpha}}{d\rho_{\alpha}},$$

qui additionné de la relation (5.12) montre que

$$\rho R = -\frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 - \rho \varepsilon - \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha}. \quad (5.15)$$

Des équations (5.11), (5.14) et (5.15), on en déduit l'équation suivante sur la quantité de mouvement

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \operatorname{div}(P \operatorname{Id}) = -\mu_0 \operatorname{div}(\nabla z \otimes \nabla z) \quad (5.16)$$

où P est une pression généralisée donnée par

$$P = \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha} - \mathcal{H}(z) - \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2. \quad (5.17)$$

5.2.4 Structure dissipative

Les équations d'Euler pour un écoulement isotherme possèdent une entropie mathématique naturelle η définie par

$$\eta = \rho \left(f + \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} \right).$$

Dans le but de prescrire un flux de masse entre les deux phases, nous allons utiliser le second principe de la thermodynamique qui nous dit que l'entropie ne peut que croître et donc que la production d'entropie doit être positive quel que soit le mouvement considéré.

Notons Π le tenseur des contraintes défini par

$$\Pi = -P \operatorname{Id} - \mu_0 \nabla z \otimes \nabla z.$$

En utilisant les équations (5.12), (5.14) et (5.16), on en déduit que l'équation d'évolution sur l'entropie s'écrit

$$\begin{aligned} \partial_t \eta + \operatorname{div}(\eta \mathbf{u}) &= \operatorname{div} \left(\mu_0 \nabla z \frac{dz}{dt} \right) + \operatorname{div}(\Pi \mathbf{u}) \\ &\quad + \rho \frac{dy}{dt} (g_1 - g_2) + \frac{dz}{dt} \left(P_2 - P_1 + \frac{d\mathcal{H}}{dz} - \operatorname{div}(\mu_0 \nabla z) \right), \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} \partial_t \eta + \operatorname{div}((\eta - \Pi) \mathbf{u}) &= \operatorname{div} \left(\mu_0 \nabla z \frac{dz}{dt} \right) \\ &\quad + \rho \frac{dy}{dt} (g_1 - g_2) + \frac{dz}{dt} \left(P_2 - P_1 + \frac{d\mathcal{H}}{dz} - \operatorname{div}(\mu_0 \nabla z) \right). \end{aligned}$$

Remarque 5.1. La paire entropie-flux d'entropie est donc donnée par $(\eta, [\eta - \Pi]\mathbf{u})$.

Pour s'affranchir du second principe, il faut choisir dy/dt et dz/dt de telle sorte qu'on ait

$$\rho \frac{dy}{dt} (g_1 - g_2) + \frac{dz}{dt} \left(P_2 - P_1 + \frac{d\mathcal{H}}{dz} - \text{div}(\mu_0 \nabla z) \right) \leq 0,$$

et donc un choix possible pour les équations sur y et z est le suivant

$$\boxed{\begin{cases} \rho \frac{dy}{dt} = \lambda(g_2 - g_1), \\ \frac{dz}{dt} = \kappa \left(P_1 - P_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right), \end{cases}} \quad (5.18)$$

où λ et κ sont des paramètres de modélisation positifs. Ces paramètres peuvent être interprétés comme des paramètres de relaxation, κ représentant l'inverse d'un temps caractéristique de retour à l'équilibre de pression donc un retour à l'équilibre mécanique et λ représentant l'inverse d'un temps caractéristique de retour à un équilibre d'enthalpie libre donc un retour à un équilibre thermodynamique.

Le terme

$$\mathbf{q} = \mu_0 \nabla z \frac{dz}{dt},$$

peut être considéré comme un flux de chaleur nécessaire pour maintenir un écoulement isotherme.

Proposition 5.1. Sous l'hypothèse d'un écoulement isotherme et en utilisant la définition (5.14) de l'énergie libre de mélange, le modèle bifluide de changement de phase isotherme thermodynamiquement consistant avec le second principe s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \text{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) = \lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \text{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) = -\lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \text{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \text{Id}) = -\mu_0 \text{div}(\nabla z \otimes \nabla z), \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z = \kappa \left(P_1 - P_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right), \end{cases} \quad (5.19)$$

où P est défini par

$$P = \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha} - \mathcal{H}(z) - \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2.$$

Remarque 5.2. On verra par la suite avec les simulations numériques que le changement de phase vient essentiellement des termes sources sur y et z et par conséquent des paramètres λ et κ et non de μ_0 et du potentiel $\mathcal{H}$.

Remarque 5.3. Les paramètres λ et κ sont positifs mais ne sont pas forcément constants. Ils peuvent dépendre continuellement des différentes variables.

5.3 Propriétés et retour à l'équilibre

On suppose désormais que $\mathcal{H} \equiv 0$ et $\mu_0 = 0$. Pour des solutions régulières, le système (5.19) s'écrit donc

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \text{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) = \lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \text{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) = -\lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \text{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \text{Id}) = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z = \kappa(P_1 - P_2), \end{cases} \quad (5.20)$$

avec P défini comme

$$P = \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha}.$$

On étudie également dans la suite la partie convective de (5.20), soit

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \operatorname{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \operatorname{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z = 0. \end{cases} \quad (5.21)$$

5.3.1 Hyperbolicité du système homogène

Considérons des solutions régulières $\mathbf{V} = (\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, \rho u, z)^T$ de (5.21) alors le système (5.21) est équivalente en 1-D au système suivant

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{V} + A(\mathbf{V}) \partial_x \mathbf{V} = 0, \\ A(\mathbf{V}) = \begin{pmatrix} uy_2 & -uy_1 & y_1 & 0 \\ -uy_2 & uy_1 & y_2 & 0 \\ c_1^2 - u^2 & c_2^2 - u^2 & 2u & M \\ 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}, \end{cases}$$

où

$$c_{\alpha}^2 = \frac{dP_{\alpha}}{d\rho_{\alpha}}, \quad M = \frac{\partial P}{\partial z}.$$

Notant c la vitesse du son de mélange par

$$c^2 = \sum_{\alpha} y_{\alpha} c_{\alpha}^2,$$

alors A possède les quatres valeurs propres suivantes

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_2 = \lambda_3 = u, \quad \lambda_4 = u + c,$$

et les vecteurs propres orthonormés à gauche l_k et à droite r_k associés à λ_k

$$l_1 = \frac{1}{2c^2} \begin{bmatrix} c_1^2 + uc \\ c_2^2 + uc \\ -c \\ M \end{bmatrix}, \quad l_2 = \frac{1}{c^2} \begin{bmatrix} y_2 c_2^2 \\ -y_1 c_2^2 \\ 0 \\ -y_1 M \end{bmatrix}, \quad l_3 = \frac{1}{c^2} \begin{bmatrix} -y_2 c_1^2 \\ y_1 c_1^2 \\ 0 \\ -y_2 M \end{bmatrix}, \quad l_4 = \frac{1}{2c^2} \begin{bmatrix} c_1^2 - uc \\ c_2^2 - uc \\ c \\ M \end{bmatrix},$$

$$r_1 = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ u - c \\ 0 \end{bmatrix}, \quad r_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ u \\ -c_1^2/M \end{bmatrix}, \quad r_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ u \\ -c_2^2/M \end{bmatrix}, \quad r_4 = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ u + c \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Ceci prouve que (5.21) est hyperbolique. Néanmoins, l'entropie du système n'est pas strictement convexe. En effet, la perte de convexité dans la direction z ne permet pas de dire si le système (5.21) est symétrisable.

5.3.2 Système limite équilibre mécanique (M-équilibre)

On peut remarquer que les paramètres λ^{-1} et κ^{-1} représentent un temps caractéristique de retour à l'équilibre des solutions du système (5.20). Le terme $(P_2 - P_1)$ correspond à un retour à l'équilibre mécanique tandis que le terme $(g_2 - g_1)$ correspond à un retour à l'équilibre thermodynamique. On suppose ici que le retour à l'équilibre mécanique est plus rapide que le retour à l'équilibre thermodynamique. Ainsi, on s'intéresse maintenant à l'évolution (formelle) des solutions du système (5.20) lorsque $\kappa \rightarrow +\infty$ tandis que λ reste fini. Le système équilibre ainsi obtenu sera référencé par la suite comme système M-équilibre pour désigner l'équilibre mécanique.

L'hypothèse $\kappa = +\infty$ dans le système (5.20) est formellement équivalent à trouver $z \in [0, 1]$ vérifiant

$$P_1\left(\frac{m_1}{z}\right) = P_2\left(\frac{m_2}{1-z}\right), \quad (5.22)$$

pour des valeurs fixées de $m_1 = \rho_1 z_1$ et $m_2 = \rho_2 z_2$ (voir [14]).

Proposition 5.2. *On suppose que les fonctions $P_\alpha : \rho_\alpha \mapsto P_\alpha(\rho_\alpha)$ pour $\alpha = 1, 2$ sont de classe $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^+)$, sont strictement croissantes sur $\mathbb{R}^+$ et tendent vers $+\infty$ lorsque $\rho_\alpha \rightarrow +\infty$. Alors il existe un unique $\tilde{z}(m_1, m_2) \in [0, 1]$ solution de*

$$P_1\left(\frac{m_1}{z}\right) = P_2\left(\frac{m_2}{1-z}\right). \quad (5.23)$$

De plus

- $m_1 \mapsto \tilde{z}(m_1, m_2)$ est croissante sur $\mathbb{R}^+$,
- $m_2 \mapsto \tilde{z}(m_1, m_2)$ est décroissante sur $\mathbb{R}^+$,
- $(m_1, m_2) \mapsto \tilde{z}(m_1, m_2)$ est aussi régulière que les P_α , $\alpha = 1, 2$ (i.e. si $P_\alpha \in \mathcal{C}^{p_\alpha}(\mathbb{R}^+)$ alors $\tilde{z} \in \mathcal{C}^{\min(p_1, p_2)}(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+)$).

Preuve.

Définissons φ par

$$\left| \begin{array}{ll} \varphi : [0, 1] & \rightarrow \mathbb{R} \\ z & \mapsto P_1\left(\frac{m_1}{z}\right) - P_2\left(\frac{m_2}{1-z}\right). \end{array} \right.$$

Alors φ vérifie

$$\lim_{z \rightarrow 0} \varphi(z) = +\infty, \quad \lim_{z \rightarrow 1} \varphi(z) = -\infty.$$

De plus

$$\frac{d\varphi}{dz} = -\frac{m_1}{z^2} \frac{dP_1}{d\rho_1}\left(\frac{m_1}{z}\right) - \frac{m_2}{(1-z)^2} \frac{dP_2}{d\rho_2}\left(\frac{m_2}{1-z}\right) < 0,$$

prouvant l'existence et unicité de $\tilde{z} \in [0, 1]$. La régularité de $\tilde{z}$ par rapport à m_1 et m_2 vient directement du théorème des fonctions implicites.

Regardons à présent la monotonie de $\tilde{z}$. En utilisant l'équation (5.23), on a pour $0 < \tilde{z} < 1$

$$\frac{\partial \tilde{z}}{\partial m_1} = \frac{c_1^2 / \tilde{z}}{\frac{c_1^2 m_1}{(\tilde{z})^2} + \frac{c_2^2 m_2}{(1-\tilde{z})^2}} \geq 0$$

et

$$\frac{\partial \tilde{z}}{\partial m_2} = -\frac{c_2^2 / (1-\tilde{z})}{\frac{c_1^2 m_1}{(\tilde{z})^2} + \frac{c_2^2 m_2}{(1-\tilde{z})^2}} \leq 0$$

terminant la preuve.

□

Remarquons qu'il est possible d'obtenir une expression analytique pour $\tilde{z}$ pour des lois d'états spécifiques. Par exemple, considérons le cas de lois d'états de type *stiffened gas* comme Chanteperdrix, Villedieu et Vila [14] alors P_α s'écrit

$$P_\alpha = P^0 + c_\alpha^2(\rho_\alpha - \rho_\alpha^0),$$

où c_α , ρ_α^0 et P^0 sont des constantes. Définissons q , $\tilde{q}$ par

$$q = \rho_2^0 c_2^2 - \rho_1^0 c_1^2, \quad \tilde{q} = m_2 c_2^2 - m_1 c_1^2,$$

alors, $\tilde{z}$ vérifie

$$\tilde{z} = \frac{\beta}{1 + \beta} \quad \text{où} \quad \beta = \frac{q - \tilde{q} + \sqrt{(q - \tilde{q})^2 + 4m_1 m_2 c_1^2 c_2^2}}{2m_2 c_2^2}. \quad (5.24)$$

On revient maintenant à l'étude du système limite $\kappa = +\infty$ à λ fini. Formellement, celui-ci s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \operatorname{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) = \lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \operatorname{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) = -\lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \end{cases} \quad (5.25)$$

où

$$P = \sum_\alpha \tilde{z}_\alpha P_\alpha = P_1 = P_2.$$

Montrons que le système (5.25) est strictement hyperbolique. Notons $\mathbf{W} = (\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, u)^T$. Pour des solutions régulières, le système (5.25) est équivalent au système

$$\partial_t \mathbf{W} + B(\mathbf{W}) \partial_x \mathbf{W} = \mathcal{S}$$

avec

$$B(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} u & 0 & \rho_1 z_1 \\ 0 & u & \rho_2 z_2 \\ 1/\rho(\partial P/\partial m_1) & 1/\rho(\partial P/\partial m_2) & u \end{pmatrix}, \quad \mathcal{S} = \begin{pmatrix} \lambda(g_2 - g_1) \\ -\lambda(g_2 - g_1) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

La matrice B possède les trois valeurs propres distinctes suivantes

$$\lambda_1 = u - \check{c}, \quad \lambda_2 = u, \quad \lambda_3 = u + \check{c}$$

où $\check{c}$ est défini par

$$\frac{1}{\rho \check{c}^2} = \sum_\alpha \frac{\tilde{z}_\alpha^2}{m_\alpha c_\alpha^2}$$

prouvant la stricte hyperbolicité du système équilibre de pression (5.25).

On peut aussi montrer qu'il n'existe pas de matrice symétrique définie positive $B_0(\mathbf{W}) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ telle que $B_0(\mathbf{W})B(\mathbf{W})$ soit symétrique et donc le système (5.25) n'est pas symétrisable. Cela provient, comme pour le système (5.21), de la perte de convexité de l'entropie dans la direction z .

5.3.3 Système limite équilibre mécanique et thermodynamique (MT-équilibre)

Existence et unicité d'un état d'équilibre

La condition $\kappa = +\infty$ et $\lambda = +\infty$ (MT-équilibre pour équilibre mécanique et thermodynamique) est formellement équivalente à déterminer $m_1 \geq 0$, $m_2 \geq 0$ et $z \in [0, 1]$, à $\rho > 0$ fixé, tels

que

$$\begin{cases} P_1\left(\frac{m_1}{z}\right) = P_2\left(\frac{m_2}{1-z}\right), \\ g_1\left(\frac{m_1}{z}\right) = g_2\left(\frac{m_2}{1-z}\right), \\ \rho = m_1 + m_2. \end{cases} \quad (5.26)$$

Remarquons auparavant que la résolution de (5.26) n'est pas immédiate. En effet, définissons $\bar{z}(m_1) = z^*(m_1, \rho - m_1)$ où z^* est la solution dans $[0, 1]$ de (5.22) et soit ψ défini par

$$\begin{cases} \psi : [0, \rho] \rightarrow \mathbb{R} \\ m_1 \mapsto g_1\left(\frac{m_1}{\bar{z}}\right) - g_2\left(\frac{\rho - m_1}{1 - \bar{z}}\right) \end{cases}$$

La fonction $m_1 \mapsto \bar{z}$ est croissante grâce à la proposition 5.2 et de plus

$$\frac{d\psi}{dm_1} = \frac{dg_1}{d\rho_1} \left(\frac{1}{\bar{z}} - \frac{m_1}{\bar{z}^2} \frac{d\bar{z}}{dm_1} \right) + \frac{dg_2}{d\rho_2} \left(\frac{1}{1 - \bar{z}} - \frac{\rho - m_1}{(1 - \bar{z})^2} \frac{d\bar{z}}{dm_1} \right).$$

En utilisant (5.12), on en déduit

$$\frac{d\psi}{dm_1} = \left(\frac{c_1^2 c_2^2}{m_1 m_2} \right) \left(\frac{(zm_2 - (1 - z)m_1)^2}{c_1^2 m_1 z_2 + c_2^2 m_2 z_1} \right) \geq 0,$$

donc ψ est croissante mais ne connaissant pas les limites de ψ pour $m_1 \rightarrow 0$ et $m_1 \rightarrow \rho$, on ne peut pas conclure.

Pour remédier à cette difficulté, résoudre le système (5.26) est équivalent à trouver ρ_1, ρ_2 et z solution du système suivant

$$\begin{cases} P_1(\rho_1) = P_2(\rho_2), \\ g_1(\rho_1) = g_2(\rho_2), \\ \rho = z\rho_1 + (1 - z)\rho_2, \end{cases} \quad (5.27)$$

avec les contraintes

$$z \in [0, 1] \text{ et } \rho_\alpha \geq 0. \quad (5.28)$$

Nous allons proposer une condition suffisante de résolubilité du système (5.27) avec les contraintes (5.28) basée sur des arguments géométriques.

Proposition 5.3. Soit $F_\alpha = \rho_\alpha f_\alpha$ l'énergie libre volumique. S'il existe un unique $\rho^* \in (0, +\infty)$ tel que

$$F_1(\rho^*) = F_2(\rho^*),$$

alors le système

$$\begin{cases} P_1(\rho_1) = P_2(\rho_2), \\ g_1(\rho_1) = g_2(\rho_2), \end{cases} \quad (5.29)$$

admet une unique solution $(\rho_1^*, \rho_2^*) \in (0, +\infty)^2$.

Notons $\mathcal{C}_\alpha$ la courbe $\rho_\alpha \mapsto F_\alpha(\rho_\alpha)$ dans le plan (ρ, F) . Supposons que $(\rho_1^*, \rho_2^*, z^*)$ soit une solution de (5.27) et considérons la tangente D_α à $\mathcal{C}_\alpha$ en ρ_α^* . Alors les relations provenant de (5.12) imposent à D_1 et D_2 d'avoir la même pente (égalité des enthalpies libres) et la même ordonnée à l'origine (égalité des pressions) comme dans la figure 5.3. Dans ce cas et en supposant $\rho_1^* < \rho_2^*$, z^* est donné par

$$\begin{cases} z^* = 1 & \text{si } \rho < \rho_1^* \\ z^* = \frac{\rho - \rho_2^*}{\rho_1^* - \rho_2^*} & \text{si } \rho_1^* < \rho < \rho_2^* \\ z^* = 0 & \text{si } \rho_2^* < \rho \end{cases} \quad (5.30)$$

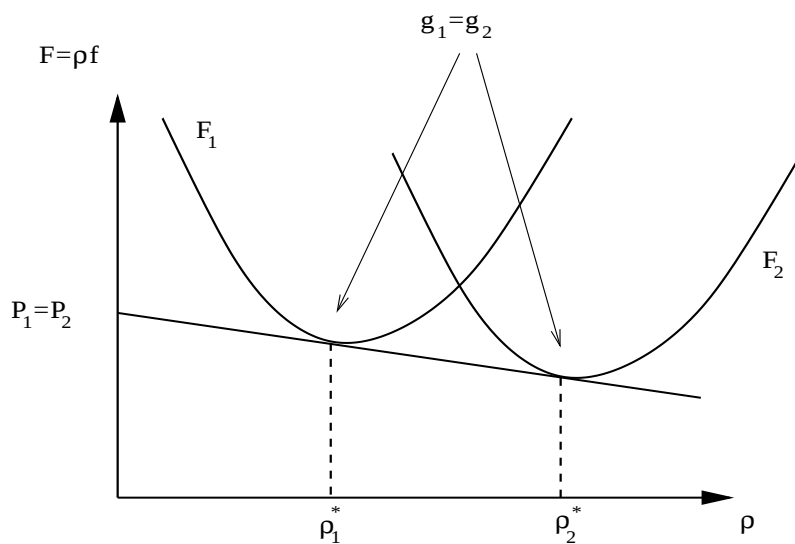


FIG. 5.3 – Une condition géométrique d'existence de densités solutions du MT-équilibre.

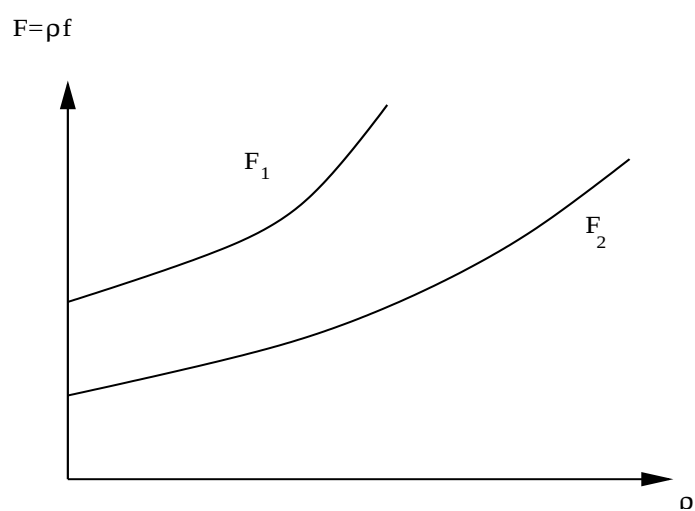


FIG. 5.4 – Un exemple d'énergie libre volumique F_α pour lesquelles il n'existe pas de densités solutions du système MT-équilibre.

En utilisant cette approche géométrique, on voit facilement, comme dans la figure 5.4, qu'il est possible de trouver deux courbes $\mathcal{C}_1$ et $\mathcal{C}_2$ pour lesquelles il n'existe pas de solution de (5.27). Ainsi, il n'est pas possible d'assurer l'existence et encore moins l'unicité d'une solution de (5.27) pour des lois d'états générales. Remarquons que cette faiblesse n'est pas surprenante puisqu'il semble difficile de pouvoir faire du changement de phase entre n'importe quel fluide et n'importe quelle condition de température. Néanmoins, étant données deux lois d'états, cette approche géométrique nous permet de savoir s'il existe un état d'équilibre et nous permet (lorsqu'il existe) de déterminer une fois et une seule fois les états d'équilibre ρ_1^* et ρ_2^* . Par ce biais, nous avons un outil géométrique pour déterminer les lois d'états compatibles pour notre procédé de retour à l'équilibre mécanique et thermodynamique.

Dans la suite, on suppose être dans le cas où il existe un unique couple (ρ_1^*, ρ_2^*) solution de (5.29) et quitte à changer ρ_1^* en ρ_2^* , on suppose que $\rho_1^* < \rho_2^*$. Le système MT-équilibre s'écrit alors

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \end{cases} \quad (5.31)$$

avec

$$P = P(\rho).$$

Avant d'aller plus loin, on peut regarder le profil de pression $\rho \mapsto P(\rho)$ donné par le MT-équilibre. En considérant l'énergie libre volumique $\rho_\alpha \mapsto F_\alpha(\rho_\alpha)$ dans plan (ρ, F) , l'énergie libre définie par le MT-équilibre peut être interprétée comme l'enveloppe convexe de la fonction $\rho \mapsto \min\{F_1(\rho), F_2(\rho)\}$ (ligne dans la figure 5.5). La pression P découle de la relation $P = \rho dF/d\rho - F$. Comme dans la figure 5.5, on voit que la pression (et par conséquent le flux du système (5.31)) est de classe $\mathcal{C}^1$ pour $\rho \in \mathbb{R}^+$ sauf pour $\rho = \rho_1^*$ et $\rho = \rho_2^*$ où elle est seulement de classe $\mathcal{C}^0$.

Pour $\rho \notin \{\rho_1^*, \rho_2^*\}$ et $\rho \in \mathbb{R}^+$, on peut calculer la matrice jacobienne A du flux du système (5.31). Pour une solution régulière $\mathbf{U} = (\rho, u)$, on a

$$A(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} u & \rho \\ 1/\rho(\partial P/\partial \rho) & u \end{pmatrix},$$

qui a pour valeurs propres

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_2 = u + c,$$

où

$$c^2 = \frac{dP}{d\rho}.$$

Pour $\rho \notin (\rho_1^*, \rho_2^*)$, c est strictement positif et donc le système (5.31) est strictement hyperbolique mais dans la zone $\rho_1^* < \rho < \rho_2^*$, on a $c = 0$. Ainsi, le polynôme caractéristique de $A(\mathbf{U})$ a une unique racine u . Par conséquent, le système n'est plus hyperbolique et est seulement faiblement hyperbolique (les valeurs propres de la jacobienne du flux sont réelles mais la jacobienne n'est plus diagonalisable). Ce système s'apparente alors aux modèles des gaz sans pressions [37, 9, 10]. Il est alors bien connu que les solutions de ces systèmes sont des solutions mesures. Néanmoins, dans notre cas, la pression devient constante dans l'interface, *i.e.* pour les $\rho \in (\rho_1^*, \rho_2^*)$, et uniquement dans cette zone donc si ρ tend vers un dirac, ρ sortira du domaine (ρ_1^*, ρ_2^*) et donc la solution redeviendra a-priori stable.

On peut également remarquer que le profil de pression de la figure 5.5 est similaire au profil de pression pour un gaz de Van Der Waals lors d'un changement de phase isotherme lorsque les deux états de part et d'autre de l'interface sont les points de Maxwell. A partir d'une approche à deux lois d'états avec retour à l'équilibre en pressions et en enthalpies libres, on a retrouvé un profil de pression analogue à celui observé avec une approche à une loi d'état de type Van Der Waals.

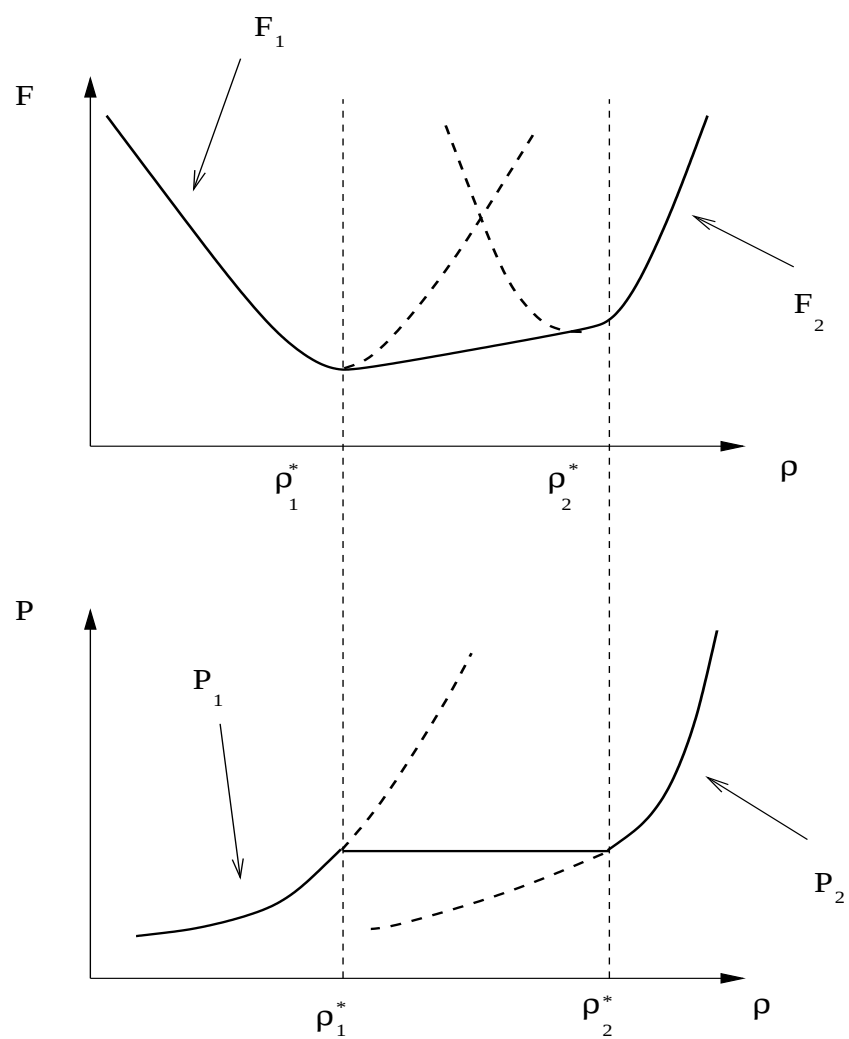


FIG. 5.5 – Energie libre volumique F et pression P à l'équilibre.

Enfin, on peut remarquer que le profil de pression obtenu par ce procédé de retour à l'équilibre ressemble à celui obtenu par S. Jaouen [41] où l'approche a été de convexifier une loi d'état de type Van Der Waals pour s'affranchir des difficultés de la zone spinodale dans laquelle $P'(\rho) < 0$ (zone elliptique).

Correction au premier ordre du système M-équilibre

Ecrivons le système équilibre de pression (5.25) en variables lagrangiennes :

$$\begin{cases} \partial_t y = \lambda \tau (g_2 - g_1), \\ \partial_t \tau - \partial_X u = 0, \\ \partial_t u + \partial_X P = 0, \end{cases} \quad (5.32)$$

où P est définie par

$$P = \sum_{\alpha} \tilde{z}_{\alpha} P_{\alpha} \left(\frac{y_{\alpha}}{\tau \tilde{z}_{\alpha}} \right) = P_1 \left(\frac{y_1}{\tau \tilde{z}_1} \right) = P_2 \left(\frac{y_2}{\tau \tilde{z}_2} \right).$$

Comme le système (5.31) n'est pas hyperbolique, on n'entre pas dans le cadre classique des systèmes de lois de conservation. La théorie de Chen, Levermore et Liu [52] développée sur les systèmes hyperboliques avec des termes sources raides ne s'appliquent pas non plus ici puisque, si le système (5.25) est strictement hyperbolique, l'entropie associée à ce système n'est pas strictement convexe. Néanmoins, on peut regarder si les solutions du système relaxé (5.32) possèdent formellement des propriétés de stabilité par rapport aux solutions MT-équilibre de (5.31).

En posant $\mathcal{G} = 0$, $\mathbf{V} = (\tau, u)^T$, $\mathcal{F} = (-u, P)^T$, $a = y$, $\mathcal{S} = g_2 - g_1$ et $\epsilon = \lambda^{-1}$, on remarque que le système (5.32) est du style de celui étudié dans [52]

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{V} + \partial_x \mathcal{F}(a, \mathbf{V}) = 0, \\ \partial_t a + \partial_x \mathcal{G}(a, \mathbf{V}) = \frac{1}{\epsilon} \mathcal{S}(a, \mathbf{V}), \end{cases} \quad (5.33)$$

avec $\mathbf{V}(x, t) \in \mathbb{R}^N$ et $a(t, x) \in \mathbb{R}$. On suppose dans [52] qu'il existe une unique solution $a^*(\mathbf{V})$ pour tout $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^N$ de

$$\mathcal{S}(a, \mathbf{V}) = 0.$$

De plus, la fonction $a \mapsto \mathcal{S}(a, \mathbf{V})$ est supposée strictement monotone. Le système (5.33) est alors formellement équivalent pour $\epsilon \rightarrow 0$ au système

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{F}^*}{\partial x} = \epsilon \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial a} \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial a} \right)^{-1} \left[\frac{\partial a^*}{\partial \mathbf{V}} \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial a} \frac{\partial a^*}{\partial \mathbf{V}} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{V}} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \right) - \left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial a} \frac{\partial a^*}{\partial \mathbf{V}} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{V}} \right) \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \right] \right\} \quad (5.34)$$

où on a noté $\mathcal{F}^*(\mathbf{V}) = \mathcal{F}(a^*(\mathbf{V}), \mathbf{V})$ et le terme de droite est pris sur la variété d'équilibre.

En notant

$$M = \frac{1}{\tau} \left(\frac{1 - y^*}{1 - z^*} c_2^2 - \frac{y^*}{z^*} c_1^2 \right), \quad K = \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2 y_{\alpha}^*}{(z_{\alpha}^*)^2},$$

alors

$$\frac{\partial z^*}{\partial \tau} = \frac{1}{\tau} \frac{M}{K}, \quad \frac{\partial z^*}{\partial y} = \frac{1}{K} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*},$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial y} &= - \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{y_{\alpha}^*} + \frac{1}{K} \left(\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} \right)^2 \\ &= - \frac{c_1^2 c_2^2}{K z^* (1 - z^*) y^* (1 - y^*)} \left(z^* (1 - y^*) - y^* (1 - z^*) \right)^2 < 0. \end{aligned}$$

La correction au premier ordre de (5.25) est donc définie par

$$\begin{cases} \frac{\partial \tau}{\partial t} - \frac{\partial u}{\partial X} = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial X} = \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial P}{\partial y} \frac{\partial y^*}{\partial \tau} \left(-\frac{\partial S}{\partial y} \right) \frac{\partial u}{\partial X} \right), \end{cases} \quad (5.35)$$

avec

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{c_1^2 - c_2^2}{\tau} + \frac{M}{\tau K} \left(\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} \right) \quad \text{et} \quad \frac{\partial y^*}{\partial \tau} = \frac{\frac{c_1^2 - c_2^2}{\tau} + \frac{M}{\tau K} \left(\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} \right)}{\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{y_{\alpha}^*} - \frac{1}{K} \left(\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} \right)^2} = -\frac{\frac{\partial P}{\partial y}}{\frac{\partial h}{\partial y}}.$$

Ainsi, (5.35) est formellement équivalent au système

$$\begin{cases} \frac{\partial \tau}{\partial t} - \frac{\partial u}{\partial X} = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial X} = \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial X} \left(\left(\frac{\partial P}{\partial y} \right)^2 \frac{\partial u}{\partial X} \right). \end{cases}$$

Ceci prouve que la correction au premier ordre en λ^{-1} du système (5.31) obtenu à partir de (5.25) est bien dissipative.

Minimisation de l'énergie libre

Proposition 5.4. *L'état d'équilibre $(\rho_1^*, \rho_2^*, z^*)$ vérifiant (5.27) minimise l'énergie libre volumique $F = \rho f$:*

$$F^*(\rho) := F(\rho, m_1^*(\rho), z^*(\rho)) = \min_{\substack{0 \leq m_1 \leq \rho \\ 0 \leq z \leq 1}} F(\rho, m_1, z),$$

et par conséquent l'entropie η .

Remarque 5.4. *Cette propriété montre que le modèle MT-équilibre obtenu par relaxation en pression et en enthalpie libre revient à minimiser l'entropie (mathématique) sous certaines contraintes. Un tel modèle de changement de phase par minimisation de l'entropie a déjà été étudié par Helluy et Barberon [35].*

Preuve.

Rappelons que l'énergie libre volumique F est définie par

$$F = \sum_{\alpha} m_{\alpha} f_{\alpha} = m_1 f_1 \left(\frac{m_1}{z} \right) + (\rho - m_1) f_2 \left(\frac{\rho - m_1}{1 - z} \right).$$

Pour prouver le résultat, il suffit de montrer que le gradient de F est nul à l'équilibre et que la hessienne de F est définie positive. On a

$$\frac{\partial F}{\partial m_1} = g_1 - g_2 \quad \text{et} \quad \frac{\partial F}{\partial z} = P_2 - P_1,$$

et donc

$$\nabla F(\rho_1^*, \rho_2^*, z^*) = 0.$$

En utilisant le calcul de ∇F , on en déduit le calcul de la hessienne de F

$$\nabla^2 F = \begin{pmatrix} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}^*} & -\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} \\ -\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} & \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}^* c_{\alpha}^2}{(z_{\alpha}^*)^2} \end{pmatrix}.$$

La trace et le déterminant de $\nabla^2 F$ sont respectivement donnés par

$$\text{tr}(\nabla^2 F) = \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{m_{\alpha}^*} + \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}^* c_{\alpha}^2}{(z_{\alpha}^*)^2} > 0,$$

et

$$\begin{aligned} \det(\nabla^2 F) &= \left(\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{y_{\alpha}^*} \right) \left(\sum_{\alpha} \frac{y_{\alpha}^* c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} \right) - \left(\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} \right)^2 \\ &= \frac{c_1^2 c_2^2}{z^*(1-z^*)y^*(1-y^*)} \left(z^*(1-y^*) - y^*(1-z^*) \right)^2 > 0. \end{aligned}$$

Ces deux quantités sont strictement positives donc la matrice $\nabla^2 F$ est définie positive prouvant ainsi le résultat. □

5.4 Schéma numérique

5.4.1 Principe de résolution

Comme le système MT-équilibre (5.31) n'est pas hyperbolique, on utilise un schéma numérique basé sur le système relaxé (5.36). Par conséquent, on ne discrétise ni (5.25) ni (5.31) mais on utilise une méthode de splitting en temps qui consiste à d'abord intégrer numériquement le système (5.20) sans terme source

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \partial_x(\rho_1 z_1 u) = 0 \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \partial_x(\rho_2 z_2 u) = 0 \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + P) = 0 \\ \partial_t z + u \partial_x z = 0 \end{cases} \quad (5.36)$$

puis, dans le cas du M-équilibre, à projeter la solution numérique sur la variété d'équilibre de pression et intégrer le terme source sur m_1 , et dans le cas du MT-équilibre, projeter la solution numérique sur la variété d'équilibre de pression et d'enthalpie libre.

5.4.2 Traitement numérique de la partie convective

Dans la partie 5.3.1, on a montré que le système (5.36) est hyperbolique. En utilisant les travaux de S. Kokh [5], on peut écrire une méthode quasi-conservative basée sur un solveur de Roe pour résoudre (5.36). En utilisant le calcul des vecteurs propres à gauche et à droite de la section 5.3.1, la projection d'un état $\mathbf{U} = (\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, \rho u, z)$ dans la base des vecteurs propres à droite r_k s'écrit en notant $\Delta \mathbf{U} = (\Delta(\rho_1 z_1), \Delta(\rho_2 z_2), \Delta(\rho u), \Delta z)$

$$\Delta \mathbf{U} = \sum_k \beta_k(\mathbf{U}) r_k(\mathbf{U}),$$

où les coefficients $\beta_\alpha(\mathbf{U}) = \langle l_k(\mathbf{U}), \Delta \mathbf{U} \rangle$ associés aux valeurs propres $\lambda_1 = u - c$, $\lambda_{2,3} = u$ et $\lambda_4 = u + c$ sont donnés par

$$\begin{aligned}\beta_1 &= \frac{1}{2c^2} \left(\sum_{\alpha} c_{\alpha}^2 \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) + uc\Delta\rho - c\Delta(\rho u) + M\Delta z \right), \\ \beta_2 &= \frac{1}{c^2} \left(y_2 c_2^2 \Delta(\rho_1 z_1) - y_1 c_2^2 \Delta(\rho_2 z_2) - y_1 M\Delta z \right), \\ \beta_3 &= \frac{1}{c^2} \left(-y_2 c_1^2 \Delta(\rho_1 z_1) + y_1 c_1^2 \Delta(\rho_2 z_2) - y_2 M\Delta z \right), \\ \beta_4 &= \frac{1}{2c^2} \left(\sum_{\alpha} c_{\alpha}^2 \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) - uc\Delta\rho + c\Delta(\rho u) + M\Delta z \right).\end{aligned}$$

Pour décrire la méthode numérique, il faut trouver un état moyen $\mathbf{U}^*$ vérifiant

$$\begin{bmatrix} \rho_1 z_1 u \\ \rho_2 z_2 u \\ \rho u^2 + P \end{bmatrix}_R - \begin{bmatrix} \rho_1 z_1 u \\ \rho_2 z_2 u \\ \rho u^2 + P \end{bmatrix}_L = \Pi \left[A(\mathbf{U}^*)(\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L) \right], \quad (5.37)$$

où Π est l'opérateur de projection sur les trois premières coordonnées.

On rappelle les notations pour toute quantité a , $\Delta a = a_R - a_L$,

$$\begin{aligned}\underline{a} &= \frac{\sqrt{\rho_L} a_R + \sqrt{\rho_R} a_L}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}, \\ \bar{a} &= \frac{\sqrt{\rho_L} a_L + \sqrt{\rho_R} a_R}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}.\end{aligned}$$

Les opérateurs ci-dessus vérifient les relations suivantes pour toute quantité a et b

$$\Delta(ab) = \underline{a}\Delta b + \bar{b}\Delta a,$$

$$\underline{\rho a} = \underline{\rho} \bar{a}.$$

Proposition 5.5. *En supposant qu'il existe des états moyens $(c_1^2)^*$, $(c_2^2)^*$ et M^* vérifiant la relation de saut discrète*

$$\Delta P = \sum_{\alpha} (c_{\alpha}^2)^* \Delta m_{\alpha} + M^* \Delta z, \quad (5.38)$$

alors un état $\mathbf{U}^*$ vérifiant (5.37) peut être défini par

$$u^* = \bar{u}, \quad \rho^* = \underline{\rho} \quad \text{et} \quad y_{\alpha}^* = \bar{y}_{\alpha}.$$

Preuve

L'équation (5.37) montre que $\mathbf{U}^*$ doit vérifier les relations suivantes

$$\begin{cases} \Delta(\rho_1 z_1 u) = y_2^* u^* \Delta(\rho_1 z_1) - u^* y_1^* \Delta(\rho_2 z_2) + y_1^* \Delta(\rho u), \\ \Delta(\rho_2 z_2 u) = -y_2^* u^* \Delta(\rho_1 z_1) + u^* y_1^* \Delta(\rho_2 z_2) + y_2^* \Delta(\rho u), \\ \Delta(\rho u^2 + P) = \left[(c_1^2)^* - (u^*)^2 \right] \Delta(\rho_1 z_1) + \left[(c_2^2)^* - (u^*)^2 \right] \Delta(\rho_2 z_2) + 2u^* \Delta(\rho u) + M^* \Delta z. \end{cases} \quad (5.39)$$

La première relation montre que

$$\begin{aligned}\Delta(\rho_1 z_1 u) &= \underline{\rho_1 z_1} \Delta u + \bar{u} \Delta(\rho_1 z_1) \\ &= y_2^* u^* \Delta(\rho_1 z_1) - u^* y_1^* \Delta\rho + u^* y_1^* \Delta(\rho_1 z_1) + y_1^* \bar{u} \Delta\rho + y_1^* \underline{\rho} \Delta u \\ &= u^* \Delta(\rho_1 z_1) + y_1^* (\bar{u} - u^*) \Delta\rho + y_1^* \underline{\rho} \Delta u,\end{aligned}$$

ainsi il suffit de prendre

$$u^* = \bar{u},$$

et

$$y_1^* = \frac{\rho_1 z_1}{\underline{\rho}} = \bar{y}_1,$$

pour que la première relation soit toujours vérifiée. La deuxième relation est également vérifiée puisqu'il suffit d'intervertir 1 en 2. Enfin, en utilisant l'hypothèse (5.38) et la relation

$$\Delta(\rho u^2) = -\bar{u}^2 \Delta \rho + 2\bar{u} \Delta(\rho u),$$

on en déduit la troisième relation ce qui termine la preuve. $\square$

En utilisant cet état moyen et l'hypothèse (5.38), on peut simplifier les coefficients β_k ainsi

$$\begin{aligned} \beta_1^* &= \frac{1}{2(c^*)^2} (\Delta P - \underline{\rho} c^* \Delta u), \\ \beta_2^* &= \frac{1}{(c^*)^2} (-\bar{y}_1 \Delta P + (c^*)^2 \Delta(\rho_1 z_1)), \\ \beta_3^* &= \frac{1}{(c^*)^2} (-\bar{y}_2 \Delta P + (c^*)^2 \Delta(\rho_2 z_2)), \\ \beta_4^* &= \frac{1}{2(c^*)^2} (\Delta P + \underline{\rho} c^* \Delta u). \end{aligned}$$

On est alors en mesure d'écrire l'algorithme de résolution numérique de (5.36). Notons $\mathbf{V} = (\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, \rho u)$ et considérons un état $\mathbf{U}_i^n$ dans la maille i au temps $t^n = n\Delta t$. L'état $\mathbf{V}_i^{n+1/2} = ((\rho_1 z_1)_i^{n+1/2}, (\rho_2 z_2)_i^{n+1/2}, (\rho u)_i^{n+1/2})$ obtenu avant projection sur la variété d'équilibre est défini par

$$\mathbf{V}_i^{n+1/2} = \mathbf{V}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{F}_{i+1/2}^n - \mathbf{F}_{i-1/2}^n)$$

où le flux numérique $\mathbf{F}_{i+1/2}^n = \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1}^n, \mathbf{U}_i^n)$ à l'interface $i + 1/2$ prend la forme

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \rho_1 z_1 \\ \rho_2 z_2 \\ \rho u^2 + P \end{bmatrix}_R + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \rho_1 z_1 \\ \rho_2 z_2 \\ \rho u^2 + P \end{bmatrix}_L - \frac{1}{2} |R(\mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L)|. \quad (5.40)$$

Le vecteur $|R|$ est défini par

$$\begin{aligned} |R(\mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L)| &= |\bar{u} - c^*| \beta_1(\mathbf{U}^*) \begin{bmatrix} \bar{y}_1 \\ \bar{y}_2 \\ \bar{u} - c^* \end{bmatrix} + |\bar{u} + c^*| \beta_2(\mathbf{U}^*) \begin{bmatrix} \bar{y}_1 \\ \bar{y}_2 \\ \bar{u} + c \end{bmatrix} \\ &\quad + |\bar{u}| \beta_3(\mathbf{U}^*) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \bar{u} \end{bmatrix} + |\bar{u}| \beta_4(\mathbf{U}^*) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \bar{u} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Ensuite $z_i^{n+1/2}$ est défini en utilisant un schéma upwind classique

$$z_i^{n+1/2} = z_i^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left((u_i^n - |u_i^n|) \Delta z_{i+1/2}^n + (u_i^n + |u_i^n|) \Delta z_{i-1/2}^n \right).$$

5.4.3 Extension au deuxième ordre en espace et en temps

De la même manière que dans le cas monophasique, le second ordre en espace est obtenue à l'aide d'une méthode de type MUSCL [30] adaptée pour le système quasi conservatif (5.21) comme dans [5]. Les pentes sont reconstruites pour le jeu de variables $\mathbf{V} = (\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, \rho \mathbf{u}, z)^T$ à l'aide d'un limiteur de pente de type minmod. Rappelons que la fonction minmod est définie par

$$\text{minmod}(x, y) = \text{sgn}(x) \max \left\{ 0, \min(|x|, y \text{sgn}(x)) \right\}.$$

Soit a une des coordonnées de $\mathbf{V}$, alors, en notant

$$\overline{\Delta a}_{i+1/2} = \text{minmod}(\Delta a_{i+1/2}, \Delta a_{i-1/2}),$$

et

$$\underline{\Delta a}_{i+1/2} = \text{minmod}(\Delta a_{i+1/2}, \Delta a_{i+3/2}),$$

l'extension au second ordre en espace à l'aide de limiteurs de pentes s'écrit

$$\begin{cases} a_{i+1/2}^R = a_{i+1} - \frac{1}{2} \overline{\Delta a}_{i+3/2}, \\ a_{i+1/2}^L = a_i + \frac{1}{2} \underline{\Delta a}_{i+1/2}, \\ \overline{\Delta a}_{i+1/2} = \underline{\Delta a}_{i-1/2}. \end{cases}$$

En utilisant cette reconstruction sur les variables primitives $(\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, \mathbf{u}, z)^T$, on peut en déduire les quantités reconstruites $\mathbf{V}_i^{R,L}$ de chaque côté de l'interface et le schéma s'écrit

$$\begin{cases} \mathbf{V}_i^{n+1/2} = \mathbf{V}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{F}_{i+1/2}^n - \mathbf{F}_{i-1/2}^n), \\ \mathbf{F}_{i+1/2}^n = \mathbf{F}(\mathbf{V}_i^n, \mathbf{V}_{i+1}^n), \end{cases}$$

où $\mathbf{F}(\cdot, \cdot)$ est définie comme dans la relation (5.40).

En ce qui concerne l'équation d'advection sur z , le schéma est une extension au second ordre du schéma upwind et s'écrit

$$\begin{cases} z_i^{n+1} = z_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{i+1/2} - q_{i-1/2}) + \frac{\Delta t}{\Delta x} z_i^n (r_{i+1/2} - r_{i-1/2}), \\ q_{i+1/2} = q(\mathbf{V}_{i+1/2}^L, \mathbf{V}_{i-1/2}^R), \\ q(\mathbf{V}_L, \mathbf{V}_R) = \frac{1}{2} (u_R z_R + u_L z_L) - \frac{1}{2} \left| \frac{u_L + u_R}{2} \right| (z_R - z_L), \\ r_{i+1/2} = \frac{1}{2} (u_{i+1/2}^R + u_{i+1/2}^L). \end{cases}$$

5.4.4 Extension en deux dimensions

Les modifications nécessaires à l'extension en deux dimensions d'espace ne touchent que la discrétisation du système homogène (5.21). On suppose que les maillages utilisés pour les tests numériques sont cartésiens. Ainsi on peut utiliser une méthode de directions alternées. Le système (5.21) s'écrit en deux dimensions d'espace de la façon suivante

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}^x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}^y}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial z}{\partial t} + u_x \frac{\partial z}{\partial x} + u_y \frac{\partial z}{\partial y} = 0, \end{cases}$$

où u_x et u_y désignent respectivement les vitesses du fluide dans les directions x et y et les flux $\mathbf{F}^x$ et $\mathbf{F}^y$ sont définis par

$$\mathbf{F}^x(\mathbf{V}) = \begin{pmatrix} \rho_1 z_1 u_x \\ \rho_2 z_2 u_x \\ \rho u_x^2 + P \\ \rho u_x u_y \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{F}^y(\mathbf{V}) = \begin{pmatrix} \rho_1 z_1 u_y \\ \rho_2 z_2 u_y \\ \rho u_x u_y \\ \rho u_y^2 + P \end{pmatrix}.$$

En notant les A_{roe}^x et A_{roe}^y les matrices de Roe associées respectivement aux flux $\mathbf{F}^x$ et $\mathbf{F}^y$ et en notant Δx et Δy les pas d'espace respectivement dans les directions x et y , le flux numérique $\mathbf{F}_{i+1/2,j}^{x,n}$ entre les mailles (i,j) et $(i+1,j)$ et le flux numérique $\mathbf{F}_{i,j+1/2}^{y,n}$ entre les mailles (i,j) et $(i,j+1)$ au temps t^n s'écrivent

$$\mathbf{F}_{i+1/2,j}^{x,n} = \mathbf{R}^x(\mathbf{V}_{i,j}^n, \mathbf{V}_{i+1,j}^n), \quad \mathbf{F}_{i,j+1/2}^{y,n} = \mathbf{R}^y(\mathbf{V}_{i,j}^n, \mathbf{V}_{i,j+1}^n),$$

où

$$\begin{cases} \mathbf{R}^x(\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}^x(\mathbf{V}_1) + \mathbf{F}^x(\mathbf{V}_2) - |A_{roe}^x(\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2)| (\mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1) \right), \\ \mathbf{R}^y(\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}^y(\mathbf{V}_1) + \mathbf{F}^y(\mathbf{V}_2) - |A_{roe}^y(\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2)| (\mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1) \right). \end{cases}$$

Le passage du temps t^n au temps $t^{n+1/2}$ s'écrit donc

$$\mathbf{V}_{i,j}^{n+1/2} = \mathbf{V}_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{F}_{i+1/2,j}^{x,n} - \mathbf{F}_{i-1/2,j}^{x,n} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\mathbf{F}_{i,j+1/2}^{y,n} - \mathbf{F}_{i,j-1/2}^{y,n} \right),$$

pour les variables conservatives et

$$\begin{aligned} z_{i,j}^{n+1/2} = z_{i,j}^n &- \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left\{ [(u_x)_{i,j}^n - |(u_x)_{i,j}^n|] \Delta z_{i+1/2,j} + [(u_x)_{i,j}^n + |(u_x)_{i,j}^n|] \Delta z_{i-1/2,j} \right\} \\ &- \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left\{ [(u_y)_{i,j}^n - |(u_y)_{i,j}^n|] \Delta z_{i,j+1/2} + [(u_y)_{i,j}^n + |(u_y)_{i,j}^n|] \Delta z_{i,j-1/2} \right\}, \end{aligned}$$

pour la variable z .

5.4.5 Schéma numérique basé sur le système M-équilibre ($\kappa = +\infty$ et $\lambda < +\infty$)

Le solveur ainsi détaillé dans la suite sera référencé comme le schéma M-équilibre et on décrit la méthode en utilisant $\lambda = \lambda_0 m_1 (\rho - m_1)$ où $\lambda_0 > 0$ est une constante.

La méthode numérique envisagée est donc une méthode de splitting en temps. Au cours d'une première étape, on résout le système (5.36) suivant

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \text{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \text{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \text{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \text{Id}) = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z = 0, \end{cases}$$

par le solveur détaillé dans la partie 5.4.2 Cette étape donne donc à partir d'un état

$$\mathbf{V}_i^n := \left((\rho_1 z_1)_i^n, (\rho_2 z_2)_i^n, (\rho \mathbf{u})_i^n, z_i^n \right)^T,$$

un état intermédiaire $\mathbf{V}_i^{n+1/2}$.

Ensuite on impose formellement $\kappa = +\infty$ donnant $\tilde{z} = \tilde{z}(m_1, m_2)$ et on cherche à résoudre le système d'équations différentielles ordinaires suivant

$$\begin{cases} \partial_t m_1 &= \lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t \rho &= 0, \\ \partial_t(\rho u) &= 0, \end{cases} \quad (5.41)$$

sur $[0, \Delta t]$ avec $\mathbf{V}_i^{n+1/2}$ comme condition initiale pour de grandes valeurs de λ (et donc de λ_0).

Pour des raisons de stabilité et pour respecter la positivité de m_1 , au lieu d'intégrer numériquement (5.41), on préfère garder constant $(g_2 - g_1)$ au temps $t^{n+1/2}$ de telle sorte qu'on puisse intégrer exactement sur $[0, \Delta t]$ l'équation différentielle suivante

$$\begin{cases} \partial_t m_1 = \lambda_0 m_1 (\rho_i^{n+1/2} - m_1) (g_2 - g_1)_i^{n+1/2}, \\ m_1(t=0) = (m_1)_i^{n+1/2}. \end{cases}$$

La solution de cette équation est donnée par

$$m_1(t) = \rho \frac{(m_1)_i^{n+1/2}}{(\rho_i^{n+1/2} - (m_1)_i^{n+1/2}) \exp(\lambda_0 \rho t (g_2 - g_1)_i^{n+1/2}) + (m_1)_i^{n+1/2}},$$

et nous assure un principe du maximum sur $m_1(\Delta t)$.

On définit alors

$$(m_1)_i^{n+1} := m_1(\Delta t),$$

et en utilisant $\partial_t \rho = 0$, $\partial_t u = 0$, on définit

$$\begin{cases} \rho_i^{n+1} = \rho_i^{n+1/2}, \\ u_i^{n+1} = u_i^{n+1/2}, \\ (m_2)_i^{n+1} = \rho_i^{n+1} - (m_1)_i^{n+1}, \end{cases}$$

puis pour finir, on met à jour $z_i^{n+1/2}$ en utilisant $\tilde{z}$ défini par l'équilibre de pression de la façon suivante

$$z_i^{n+1} := \tilde{z}((m_1)_i^{n+1}, (m_2)_i^{n+1}).$$

5.4.6 Schéma numérique basé sur le système MT-équilibre ($\kappa = \lambda = +\infty$)

Dans la suite, ce solveur sera référencé comme le schéma MT-équilibre.

Comme précédemment, la méthode numérique est une méthode de splitting en temps : on résout le système (5.36) avec le schéma détaillé dans la partie 5.4.2. Cet étape donne à partir d'un état

$$\mathbf{V}_i^n = \left((\rho_1 z_1)_i^n, (\rho_2 z_2)_i^n, (\rho u)_i^n, z_i^n \right)^T$$

un état intermédiaire $\mathbf{V}_i^{n+1/2}$.

On impose ensuite formellement $\kappa = +\infty$ et $\lambda = +\infty$ (*i.e.* on impose $P_1 = P_2$ et $g_1 = g_2$) en projetant $\mathbf{V}_i^{n+1/2}$ sur la variété MT-équilibre. Premièrement, on utilise $\partial_t \rho = 0$ et $\partial_t u = 0$ pour définir $\rho_i^{n+1} = \rho_i^{n+1/2}$ et $u_i^{n+1} = u_i^{n+1/2}$. Ensuite, en supposant $\rho_1^* < \rho_2^*$, on définit z_i^{n+1} par

$$\begin{cases} z_i^{n+1} = 1 & \text{si } \rho_i^{n+1/2} < \rho_1^*, \\ z_i^{n+1} = \frac{\rho_i^{n+1/2} - \rho_2^*}{\rho_1^* - \rho_2^*} & \text{si } \rho_1^* < \rho_i^{n+1/2} < \rho_2^*, \\ z_i^{n+1} = 0 & \text{si } \rho_2^* < \rho_i^{n+1/2}, \end{cases} \quad (5.42)$$

puis les densités partielles $(m_\alpha)_i^{n+1/2}$, $\alpha = 1, 2$ sont mises à jour ainsi

$$\begin{cases} (m_1)_i^{n+1} = \rho_i^{n+1} & (m_2)_i^{n+1} = 0 & \text{si } \rho_i^{n+1} < \rho_1^*, \\ (m_1)_i^{n+1} = \rho_1^* z_i^{n+1} & (m_2)_i^{n+1} = \rho_2^* (1 - z_i^{n+1}) & \text{si } \rho_1^* < \rho_i^{n+1} < \rho_2^*, \\ (m_1)_i^{n+1} = 0 & (m_2)_i^{n+1} = \rho_i^{n+1} & \text{si } \rho_2^* < \rho_i^{n+1}. \end{cases} \quad (5.43)$$

5.4.7 Choix des lois d'état des deux phases

Lors des tests numériques, on utilisera deux types de lois d'état, à savoir les lois d'état de type gaz parfaits et les lois d'état de type *stiffened gas*.

Les gaz parfaits ne décrivent pas de façon satisfaisante les propriétés thermodynamiques des fluides que l'on considérera par la suite (en particulier pour les phases liquides) mais elles ont l'avantage d'être très simples. Il est en particulier possible d'avoir des solutions analytiques pour $\tilde{z}$ donné par l'équilibre de pression et pour les ρ_α^* donnés par l'équilibre de pression et d'enthalpies libres.

Le choix des *stiffened gas* provient également de leurs simplicité mais aussi de la bonne corrélation entre les courbes de saturation expérimentales et théoriques dans le cas de l'eau liquide et de la vapeur d'eau ainsi que dans le cas du dodécane liquide et du dodécane gazeux. En effet, les coefficients intervenants dans les lois d'états ont été tabulés par O. Le Metayer [54] pour obtenir ces résultats entre les courbes de saturation expérimentales et théoriques.

Cas des gaz parfaits

On rappelle les expressions de P_α et g_α

$$\begin{cases} P_\alpha = a_\alpha \rho_\alpha, \\ g_\alpha = b_\alpha + a_\alpha \log(\rho_\alpha), \end{cases}$$

où $a_\alpha = a_\alpha(T)$ et $b_\alpha = b_\alpha(T)$ sont des constantes données par

$$\begin{cases} a_\alpha = (\gamma_\alpha - 1)c_{v_\alpha} T, \\ b_\alpha = \left\{ \gamma_\alpha c_{v_\alpha} + (\gamma_\alpha - 1)c_{v_\alpha} \log [(\gamma_\alpha - 1)c_{v_\alpha}] \right\} T - c_{v_\alpha} T \log(T). \end{cases}$$

Dans ce cas, il est facile de vérifier que $\tilde{z}(m_1, m_2)$ solution de l'équation (5.23) est donnée par

$$\tilde{z} = \frac{a_1 m_1}{a_1 m_1 + a_2 m_2}.$$

La fonction $(m_1, m_2) \mapsto \tilde{z}(m_1, m_2)$ ainsi définie a les propriétés qualitatives suivantes

- $\tilde{z} \in [0, 1]$ pour tout $m_i \in \mathbb{R}^+$ sous la contrainte $m_1 + m_2 = \rho > 0$
- $\tilde{z}(m_1, 0) = 1$ pour tout $m_1 > 0$
- $\tilde{z}(0, m_2) = 0$ pour tout $m_2 > 0$.

En ce qui concerne le schéma MT-équilibre, il faut déterminer ρ_1^* et ρ_2^* solution de $P_1 = P_2$ et $g_1 = g_2$. En utilisant l'expression des lois d'états, on peut montrer que

$$\begin{cases} \rho_1^* = \exp\left(-\frac{b_1 - b_2}{a_1 - a_2}\right) \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^{\frac{a_2}{a_1 - a_2}}, \\ \rho_2^* = \exp\left(-\frac{b_1 - b_2}{a_1 - a_2}\right) \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^{\frac{a_1}{a_1 - a_2}}. \end{cases}$$

Ces expressions sont alors utilisées dans le schéma MT-équilibre et déterminent entièrement la variété MT-équilibre.

Cas des *stiffened gas*

En supposant donc que les lois d'états sont de type *stiffened gas*, l'énergie interne, la pression, l'enthalpie et l'enthalpie libre de chaque phase sont respectivement données par

$$\begin{cases} \varepsilon_\alpha = \frac{P_\alpha + \gamma_\alpha P_\alpha^\infty}{\rho_\alpha(\gamma_\alpha - 1)} + q_\alpha, \\ P_\alpha = (\gamma_\alpha - 1)c_{v_\alpha}\rho_\alpha T - P_\alpha^\infty, \\ h_\alpha = \varepsilon_\alpha + P_\alpha/\rho_\alpha = \gamma_\alpha c_{v_\alpha}T + q_\alpha, \\ g_\alpha = h_\alpha - T\eta_\alpha = (\gamma_\alpha c_{v_\alpha} - q'_\alpha)T - c_{v_\alpha}T \log\left(\frac{T^{\gamma_\alpha}}{(P_\alpha + P_\alpha^\infty)^{\gamma_\alpha - 1}}\right) + q_\alpha, \end{cases} \quad (5.44)$$

où les coefficients P_α^∞ , c_{v_α} , γ_α , q_α et q'_α sont des constantes dépendants du fluide considéré.

En utilisant les relations (5.44) et en utilisant l'hypothèse d'écoulement isotherme, on peut exprimer les pressions et les enthalpies libres de chaque phase de la façon suivante

$$\begin{cases} P_\alpha = a_\alpha \rho_\alpha - P_\alpha^\infty, \\ g_\alpha = b_\alpha + a_\alpha \log(\rho_\alpha), \end{cases}$$

où $a_\alpha = a_\alpha(T)$ et $b_\alpha = b_\alpha(T)$ sont des constantes données par

$$\begin{cases} a_\alpha = (\gamma_\alpha - 1)c_{v_\alpha}T, \\ b_\alpha = q_\alpha + \left\{ \gamma_\alpha c_{v_\alpha} - q'_\alpha + (\gamma_\alpha - 1)c_{v_\alpha} \log[(\gamma_\alpha - 1)c_{v_\alpha}] \right\} T - c_{v_\alpha}T \log(T). \end{cases}$$

On a vu qu'il est possible d'avoir une expression analytique de $\tilde{z}$ solution de (5.23) et celle-ci est donnée par

$$\tilde{z} = \frac{\beta}{1 + \beta},$$

où

$$\beta = \frac{-\left(a_2 m_2 - a_1 m_1 - P_2^\infty + P_1^\infty\right) + \sqrt{\left(a_2 m_2 - a_1 m_1 - P_2^\infty + P_1^\infty\right)^2 + 4a_1 a_2 m_1 m_2}}{2a_2 m_2}.$$

En ce qui concerne la variété MT-équilibre, il n'est plus possible d'avoir une description analytique. Il est même possible de ne plus avoir de solution de (5.27) dans certaines conditions. Néanmoins, on peut dégager des informations sur cette variété. L'équation $g_1 = g_2$ montre qu'on peut exprimer ρ_2 en fonction de ρ_1 de la façon suivante

$$\overline{\rho_2} = \exp\left(\frac{b_1 - b_2}{a_2}\right) \rho_1^{a_1/a_2}.$$

Pour obtenir une solution de (5.27), il faut alors étudier la fonction $\varphi : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ définie par

$$\begin{aligned} \varphi(\rho_1) &= P_1(\rho_1) - P_2(\overline{\rho_2}(\rho_1)) \\ &= a_1 \rho_1 + P_1^\infty - P_2^\infty - a_2 \exp\left(\frac{b_1 - b_2}{a_2}\right) \rho_1^{a_1/a_2}. \end{aligned}$$

On a

$$\begin{cases} \varphi(0) = P_1^\infty - P_2^\infty, \\ \varphi(\rho_1) \sim a_1 \rho_1 - a_2 \exp\left(\frac{b_1 - b_2}{a_2}\right) \rho_1^{a_1/a_2} \text{ pour } \rho_1 \rightarrow +\infty, \end{cases}$$

et donc l'existence et unicité d'une solution de (5.27) dépend du signe de $P_2^\infty - P_1^\infty$ et $a_1 - a_2$. Quitte à changer 1 en 2, on peut supposer $a_1 - a_2 > 0$.

La fonction φ vérifie $\varphi(+\infty) < 0$ et sa dérivée est définie par

$$\varphi'(\rho_1) = a_1 \left\{ 1 - \exp\left(\frac{b_1 - b_2}{a_2}\right) \rho_1^{\frac{a_1 - a_2}{a_2}} \right\}.$$

Il existe donc un unique ρ_1^0 vérifiant $\varphi'(\rho_1^0) = 0$ et ρ_1^0 est donné par

$$\rho_1^0 = \exp\left(-\frac{b_1 - b_2}{a_1 - a_2}\right).$$

On a en ρ_1^0

$$\varphi(\rho_1^0) = (a_1 - a_2) \exp\left(-\frac{b_1 - b_2}{a_1 - a_2}\right) + \varphi(0).$$

On en déduit les différentes possibilités suivantes

1. si $\varphi(0) = P_1^\infty - P_2^\infty > 0$, il existe un unique ρ_1^* solution de $\varphi(\rho_1) = 0$ et donc une unique solution de (5.27).
2. si $\varphi(0) = P_1^\infty - P_2^\infty < 0$ alors ou bien $\varphi(\rho_1^0) < 0$ et il n'existe pas de solution de (5.27), ou bien $\varphi(\rho_1^0) > 0$ et il existe deux solutions de (5.27). Lorsqu'on est dans une telle situation, le modèle sort de son domaine de validité et il n'y a plus de raison de continuer le calcul.

On peut néanmoins proposer une alternative. Lorsqu'on se trouve dans un tel cas de figure, cela signifie que l'hypothèse de retour instantané à l'équilibre thermodynamique n'est plus valide. Ainsi, λ n'est plus infini et on utilise le système M-équilibre.

5.5 Résultats numériques $\mathcal{H} \equiv 0, \mu_0 = 0$

5.5.1 Advection pure d'une interface

On considère un problème unidimensionnel d'advection d'interface : un domaine de 1 m de long contient du liquide et de la vapeur initialement séparés par une interface située à $x = 0.5$ m.

On suppose que les deux phases suivent des lois d'états de type *stiffened gas*. Les caractéristiques des deux fluides sont alors données dans le tableau 5.1 et sont tirées de [54]. Le fluide à gauche correspond à de la vapeur d'eau et le fluide à droite de l'interface correspond à de l'eau liquide. La température des deux phases est supposée égale à $T = 400$ K. La vitesse des deux phases est initialement de $u = 100$ m.s⁻¹ et les densités sont choisies de part et d'autre de l'interface de telle sorte qu'on ait équilibre mécanique (égalité des pressions) et thermodynamique (égalité des enthalpies libres) dans tout le domaine, ainsi $\rho = \rho_1^* \simeq 1.63$ kg.m⁻³ à gauche de l'interface et $\rho = \rho_2^* \simeq 1020$ kg.m⁻³ à droite de l'interface. Le problème ainsi proposé ne fait pas intervenir de changement de phase mais permet de voir comment se comporte les termes sources dans ce cas.

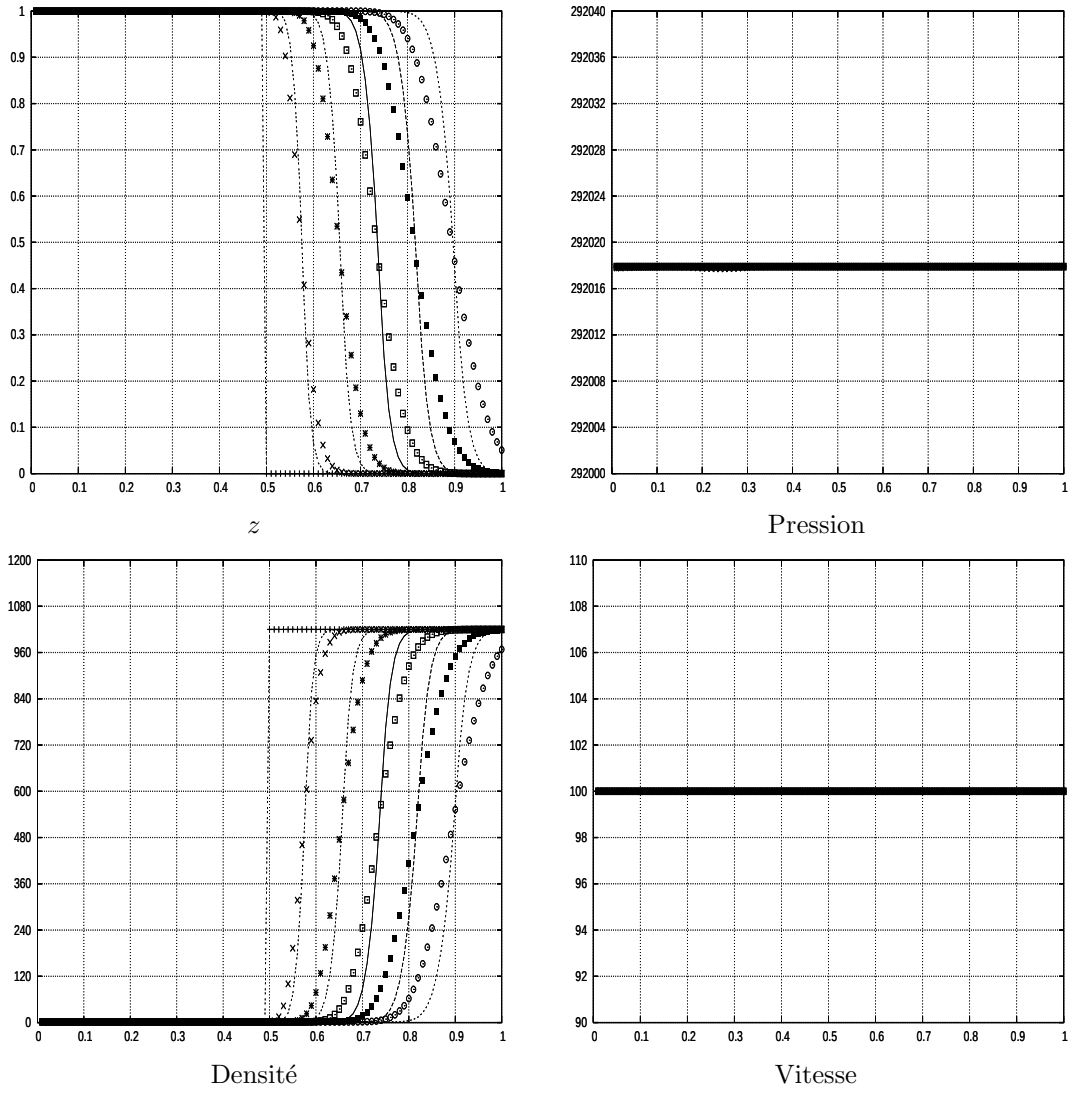
Les conditions aux limites sont des états constants aux deux extrémités du domaine qui est discrétisé avec 100 mailles.

La figure (5.6) représente la solution obtenue avec le schéma MT-équilibre (points) et la solution obtenue avec le système homogène (5.36) (lignes). Les deux solutions ont été obtenues avec un schéma numérique d'ordre un en espace et en temps.

Si ce problème de Riemann est très simple et ne fait pas intervenir de changement de phase mais seulement des effets dynamiques, il permet de constater que le schéma MT-équilibre semble

	vapeur	liquide
c_v (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	1040.14	1816.2
$\gamma = C_p/C_v$	1.43	2.35
P^∞ (Pa)	0	10 ⁹
q (kJ.kg ⁻¹)	2030.255	-1 167.056
q' (kJ.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	-23.31	0

TAB. 5.1 – Coefficients de la vapeur d'eau et de l'eau liquide.

FIG. 5.6 – Evolution en temps de la solution MT-équilibre calculée avec le schéma MT-équilibre (points) et la solution du système convectif pur (5.36) calculée avec un schéma de Roe (lignes) ; t varie de $t = 0$ s à $t = 4$ ms.

capturer la même solution que le schéma de Roe appliqué au système homogène (sans terme source). Par ailleurs la solution exacte de ce cas test est donnée par

$$(m_1, m_2, \rho u, z)^T = \begin{cases} (m_1, m_2, \rho u, z)_L^T & \text{si } x/T < 100, \\ (m_1, m_2, \rho u, z)_R^T & \text{si } x/t > 100, \end{cases}$$

où $(m_1, m_2, \rho u, z)_L^T$ désigne l'état à gauche de l'interface et $(m_1, m_2, \rho u, z)_R^T$ l'état à droite. Cette solution coïncide avec les solutions numériques obtenues. Ainsi, malgré les termes sources de changement de phase, nous obtenons la même vitesse de propagation qui est celle de la solution exacte. De plus, le schéma MT-équilibre n'engendre pas d'oscillations de pression et de vitesse.

5.5.2 Un problème de changement de phase isotherme et unidimensionnel

On s'intéresse maintenant au cas d'un problème unidimensionnel de changement de phase isotherme. Comme précédemment, on considère un domaine de 1 m de long contenant du liquide et de la vapeur initialement séparés par une interface localisée en $x = 0.5$ m.

On suppose que les deux fluides suivent des lois d'états de type gaz parfaits et que les caractéristiques des deux fluides sont donnés dans le tableau 5.2. On suppose que les deux fluides sont initialement au repos à la température constante $T = 100$ K et les densités à gauche et à droite de l'interface sont choisies de telle sorte que la pression soit constante ainsi $\rho = \rho_1^* \simeq 6 \times 10^{-4}$ kg.m⁻³ à droite de l'interface et $\rho = \rho_2^* \simeq 330 \times 10^{-4}$ kg.m⁻³ à gauche de l'interface.

On suppose maintenant que l'extrémité gauche du domaine est un piston se déplaçant vers la gauche à une vitesse constante tandis que l'extrémité droite est un mur. S'il n'y a pas de piston, les deux phases sont en équilibre et aucun changement de phase apparaît. En effet, le mouvement du piston va générer une onde acoustique se déplaçant de la gauche vers la droite. En touchant l'interface, elle va modifier l'équilibre thermodynamique et activer les termes sources. Ceux-ci vont alors forcer le système à retourner à l'équilibre et des échanges apparaissent entre les deux phases.

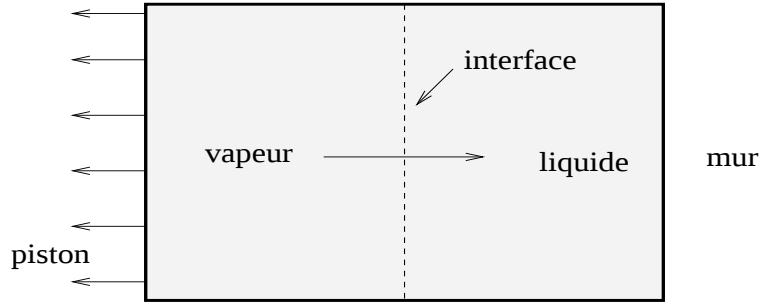


FIG. 5.7 – Un problème de changement de phase liquide-vapeur en 1D.

	gauche (vapeur)	droit (liquide)
c_v (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	1 816	1 040
$\gamma = c_p/c_v$	2.35	1.43
T (K)	100	100

TAB. 5.2 – Paramètres des deux fluides pour le cas test du piston.

Convergence en maillage

L'effet du piston est réalisé en imposant une vitesse constante $u_p = -100$ m.s⁻¹ dans les mailles fictives à gauche du domaine avec un flux de masse nul.

Les figures 5.8, 5.9, 5.10, 5.11, 5.12 et 5.13 représentent les profils de z , de la densité ρ , de la pression P , de la vitesse u et des densités partielles de chaque phase $\rho_\alpha z_\alpha$ pour $\alpha = 1, 2$ obtenus à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 1 et à l'ordre 2. La discrétisation du système homogène (5.21) est effectuée à l'aide d'un schéma de Roe. Les lignes représentent la solution approchée à l'aide du schéma équilibre avec 5000 mailles, les croix correspondent à la solution obtenue avec

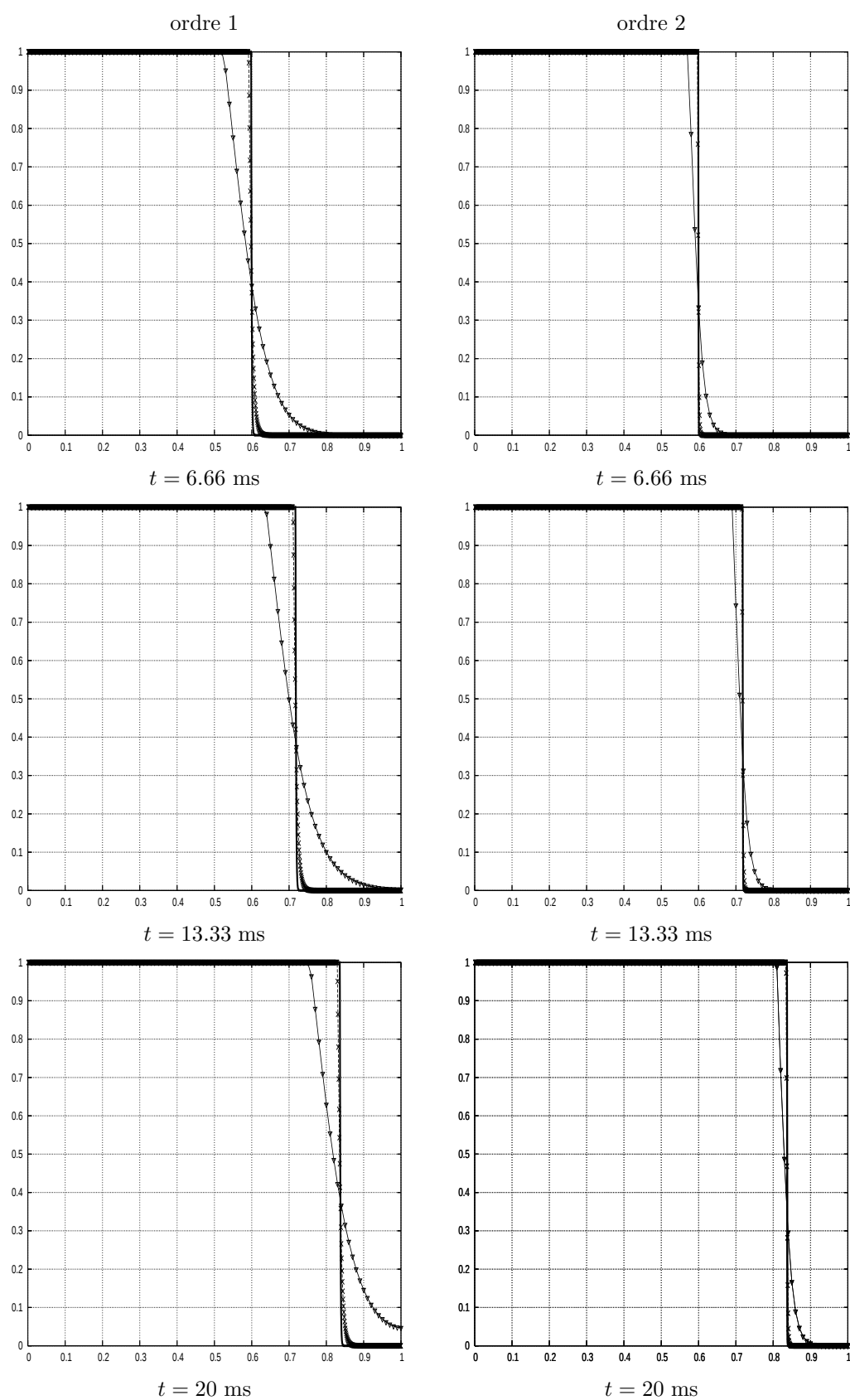


FIG. 5.8 – Comparaison des profils de z obtenus à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 1 (gauche) et à l'ordre 2 (droite); les différentes lignes représentent différents maillages.

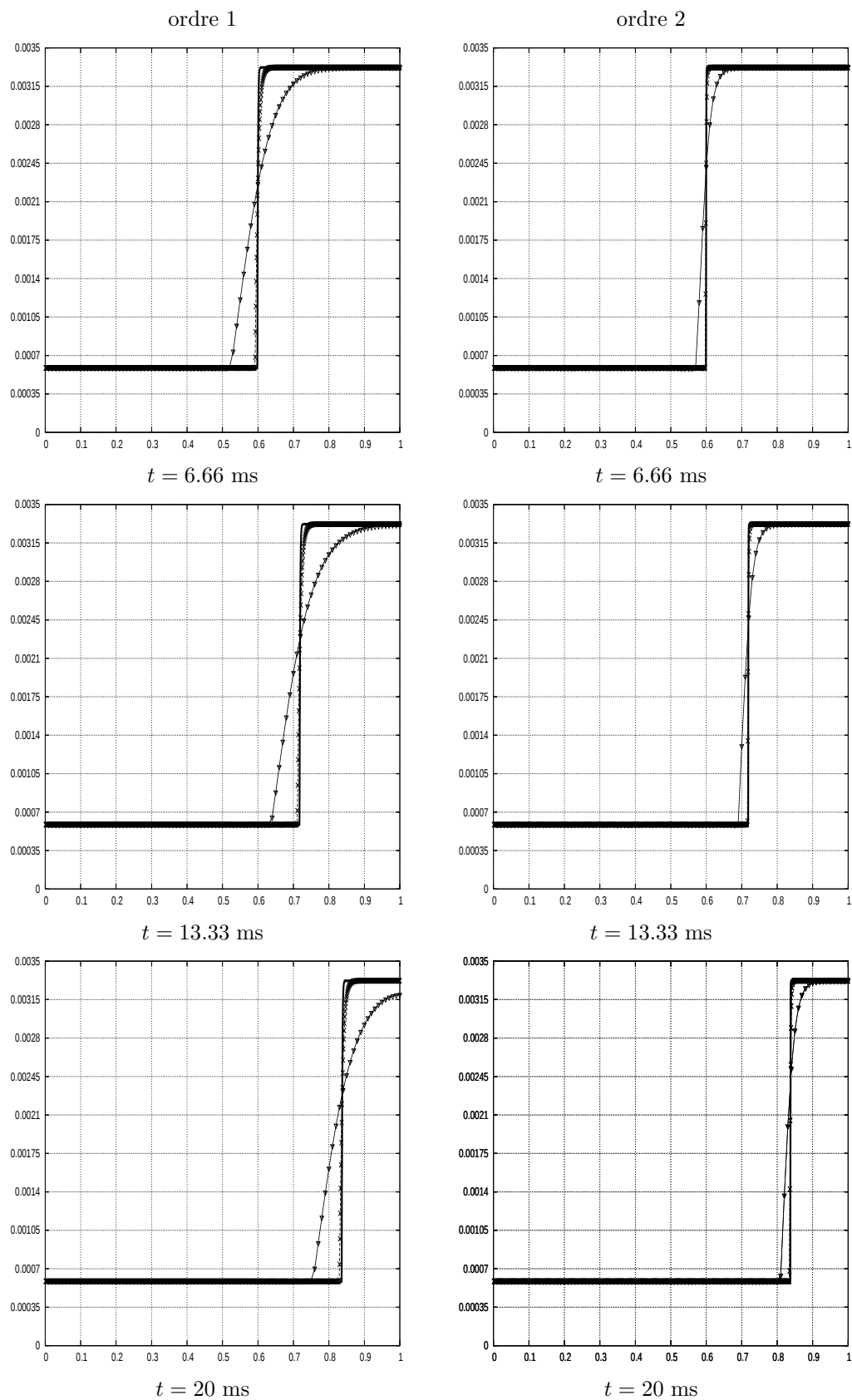


FIG. 5.9 – Comparaison des profils de la densité obtenus à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 1 (gauche) et à l'ordre 2 (droite); les différentes lignes représentent différents maillages.

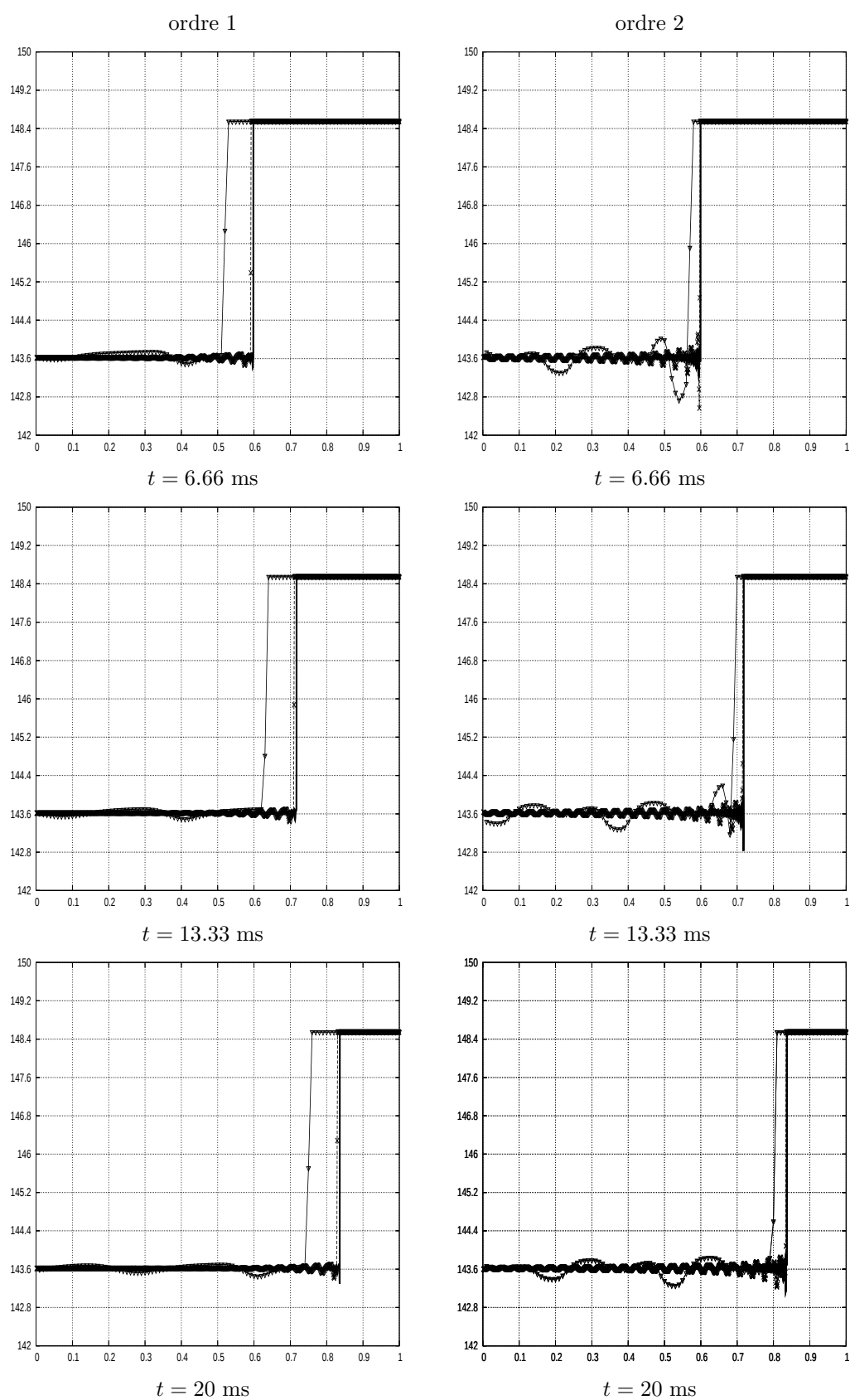


FIG. 5.10 – Comparaison des profils de la pression obtenus à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 1 (gauche) et à l'ordre 2 (droite); les différentes lignes représentent différents maillages.

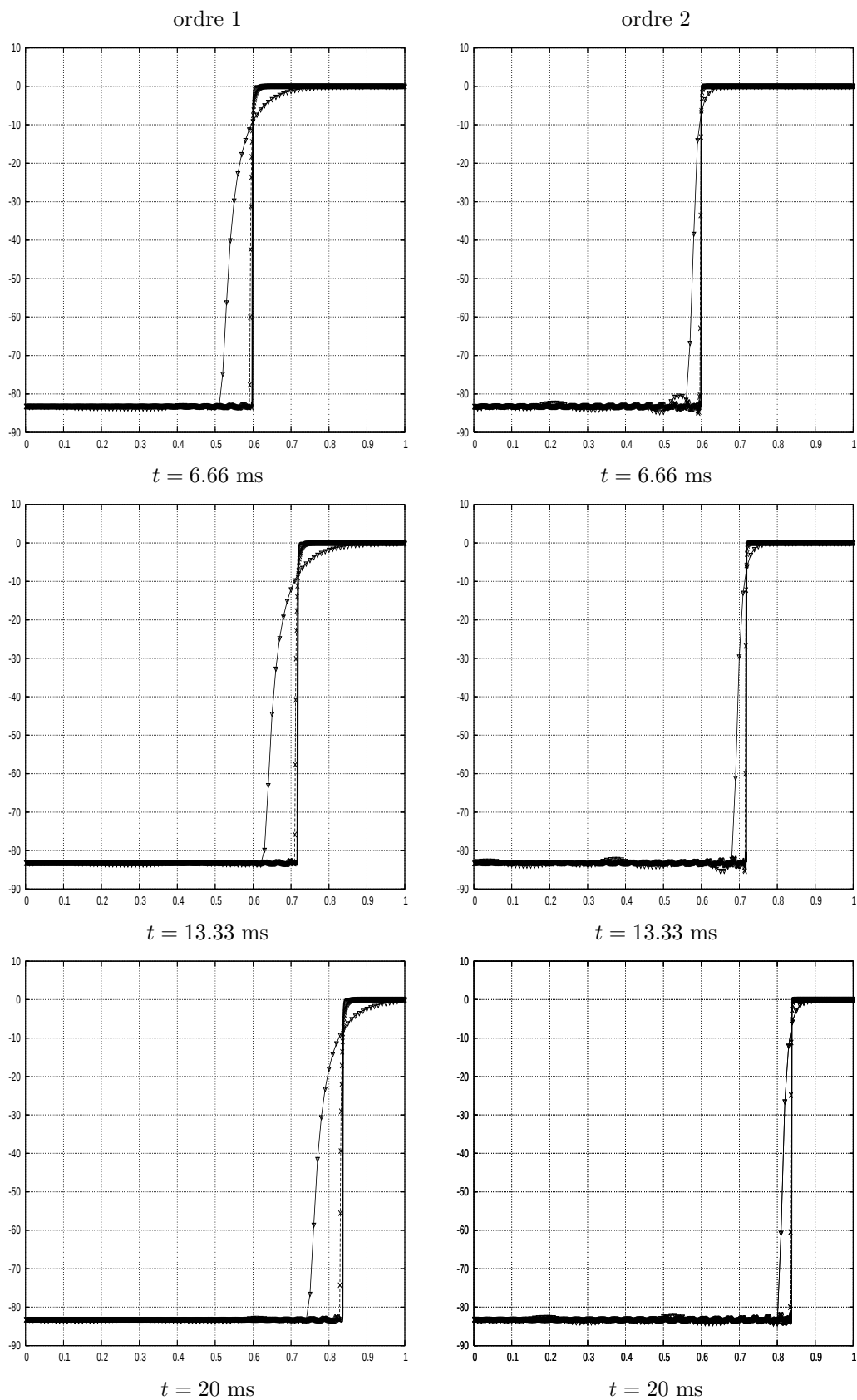


FIG. 5.11 – Comparaison des profils de la vitesse obtenus à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 1 (gauche) et à l'ordre 2 (droite) ; les différentes lignes représentent différents maillages .

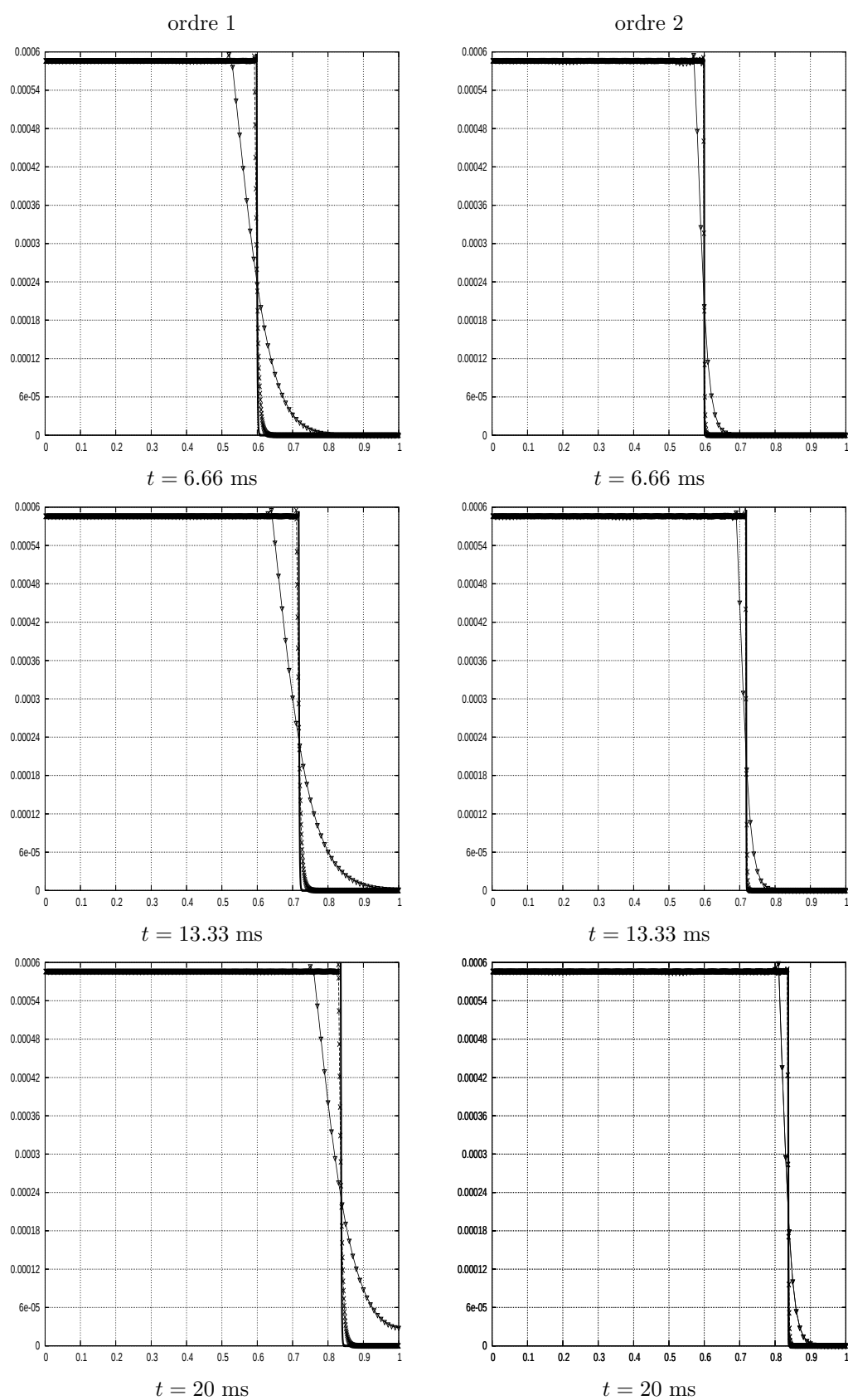


FIG. 5.12 – Comparaison des profils de la densité partielle de la phase 1 obtenus à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 1 (gauche) et à l'ordre 2 (droite) ; les différentes lignes représentent différents maillages.

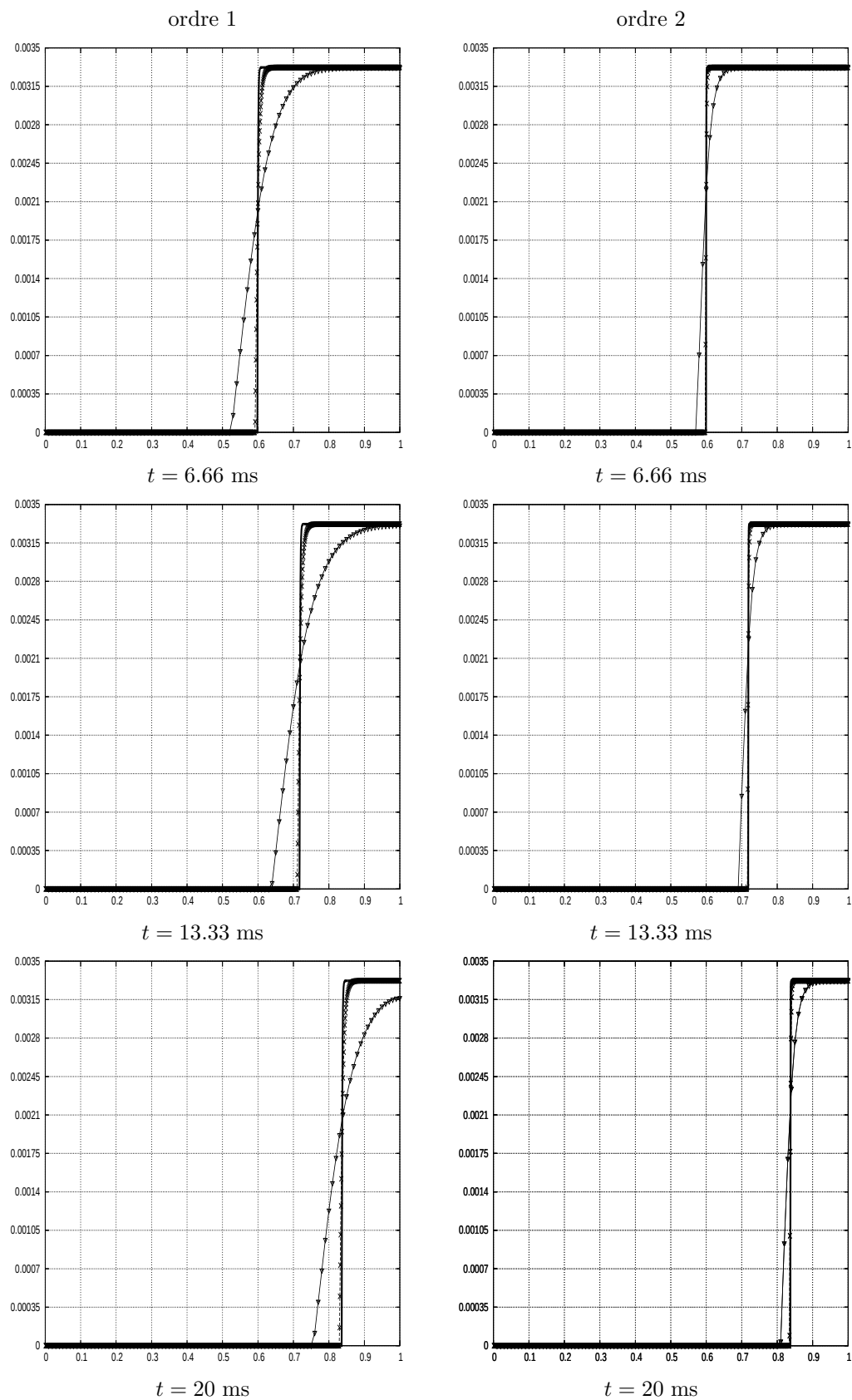


FIG. 5.13 – Comparaison des profils de la densité partielle de la phase 2 obtenus à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 1 (gauche) et à l'ordre 2 (droite) ; les différentes lignes représentent différents maillages .

1000 mailles et les triangles correspondent à la solution obtenue avec 100 mailles. Ceci montre que la solution approchée converge lorsque le pas du maillage tend vers zéro. On remarque également qu'aucune instabilité ne se développe malgré de légères oscillations en pression devant l'interface.

Convergence de la solution M-équilibre vers la solution MT-équilibre

On s'intéresse maintenant à la convergence de la solution obtenue avec le schéma M-équilibre vers la solution obtenue avec le schéma MT-équilibre lorsque $\lambda \rightarrow +\infty$. Les figures 5.15 et 5.16 représentent les profils de z, ρ, P et u obtenus avec les deux schémas au temps $t = 20$ ms pour le cas test du piston ; λ varie de 10 à 10^6 . Le nombre de mailles est fixé à 100. Les lignes représentent la solution obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre tandis que les points représentent la solution obtenue à l'aide du schéma M-équilibre. On constate ainsi que la solution obtenue à l'aide du schéma M-équilibre converge bien vers la solution obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre lorsque $\lambda \rightarrow +\infty$.

On prend pour solution de référence la solution obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre notée $\mathbf{V}_h^{ref}$ et on note $\mathbf{V}_h^\lambda$ la solution obtenue à l'aide du schéma M-équilibre. La figure 5.14 représente $\log(\lambda) \mapsto \log(\|\mathbf{a}_h^\lambda - \mathbf{a}_h^{ref}\|_{L^2})$, $\mathbf{a}$ désignant respectivement z , la densité, la pression et la vitesse.

Convergence en temps

On étudie maintenant le comportement du schéma 2 lorsque le pas de temps Δt tend vers zéro. Il est connu que l'intégration numérique de ce type de termes sources lorsque λ est *grand* peut donner des vitesses de propagation fausses (voir [51]). En effet, dans certains cas de figures, ce front avance à chaque pas de temps d'un certain nombre de mailles fixe. Ainsi, le front de changement de phase avancera d'autant plus vite que le pas de temps sera petit. Cet artefact numérique peut se rencontrer lorsqu'on ne projette pas la solution sur la variété $P_1 = P_2$ (intégration numérique du terme source sur l'équation sur z). Dans notre cas, en projetant sur cette variété d'équilibre et en intégrant uniquement le terme source portant sur les densités partielles, ce problème n'apparaît pas.

Au vu des résultats de convergence de la solution M-équilibre vers la solution MT-équilibre lorsque $\lambda \rightarrow +\infty$, on fixe $\lambda = 10^6$. Dans la figure 5.17, les lignes représentent la solution obtenue à l'aide du schéma M-équilibre avec la condition CFL

$$\Delta t = \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\max_{i=1,4} |\lambda_k|}, \quad (5.45)$$

et les triangles représentent celle obtenue à l'aide du schéma M-équilibre avec la condition CFL

$$\Delta t = \frac{1}{200} \frac{\Delta x}{\max_{i=1,4} |\lambda_k|}. \quad (5.46)$$

Le domaine est discrétisé avec 100 mailles en espace. Un schéma de Roe est utilisé pour la discrétisation de la partie convective et l'ordre en espace et en temps est fixé à deux. On constate donc que la vitesse du front de changement de phase est bien indépendante du pas de temps même si des différences apparaissent sur la pression et la vitesse en amont du front.

Comparaison des solutions obtenus avec deux schémas convectifs différents

Comme le système d'équilibre (5.31) n'est pas hyperbolique, on peut vérifier que la solution obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre ne dépend pas du schéma utilisé pour la discrétisation de la partie convective. Pour cela, on discrétise la partie convective avec le schéma de Roe précédemment détaillé et avec un schéma de Rusanov avec 5000 mailles pour avoir convergence en maillage. La figure 5.18 représente l'évolution en temps de ces deux solutions. Les triangles représentent celle

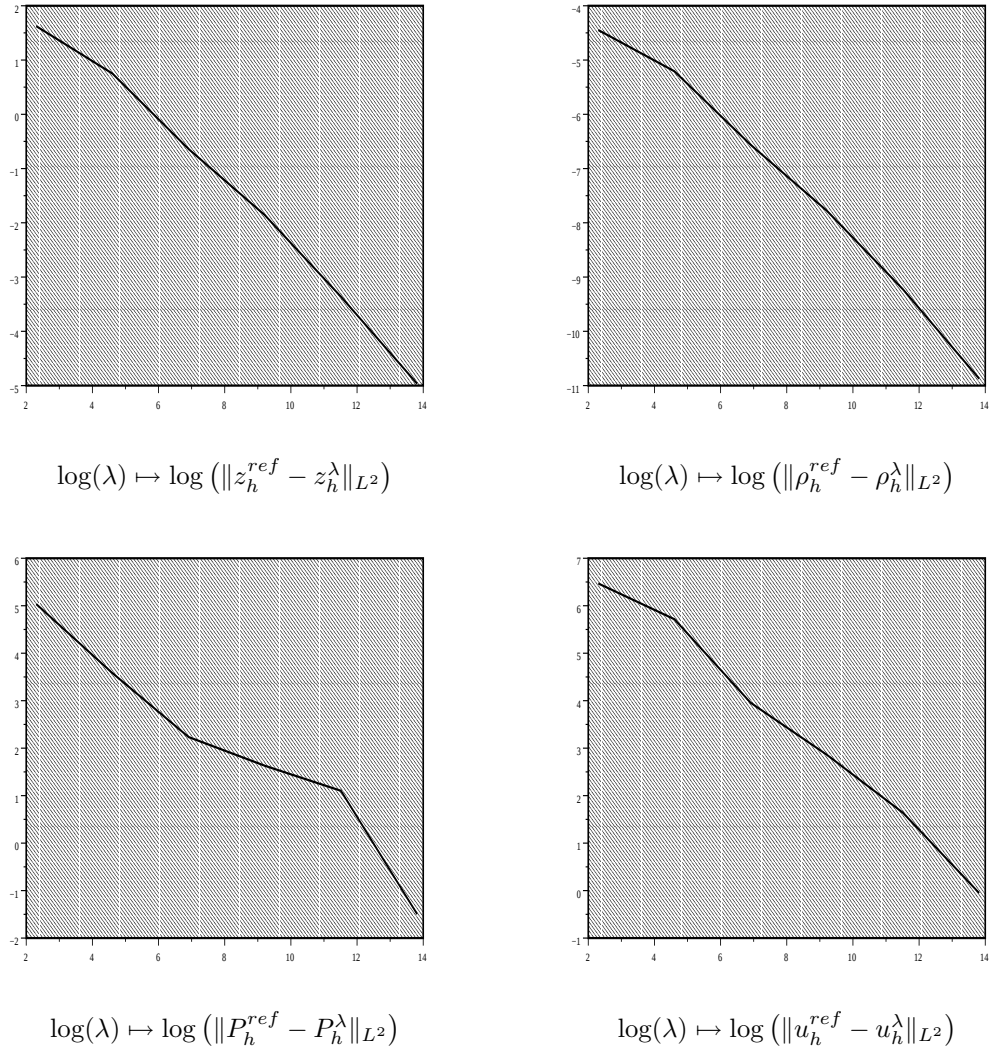


FIG. 5.14 – Convergence quand $\lambda \rightarrow +\infty$ de la solution du schéma M-équilibre vers la solution du schéma MT-équilibre; le nombre de mailles est fixé à 100, $t = 20$ ms.

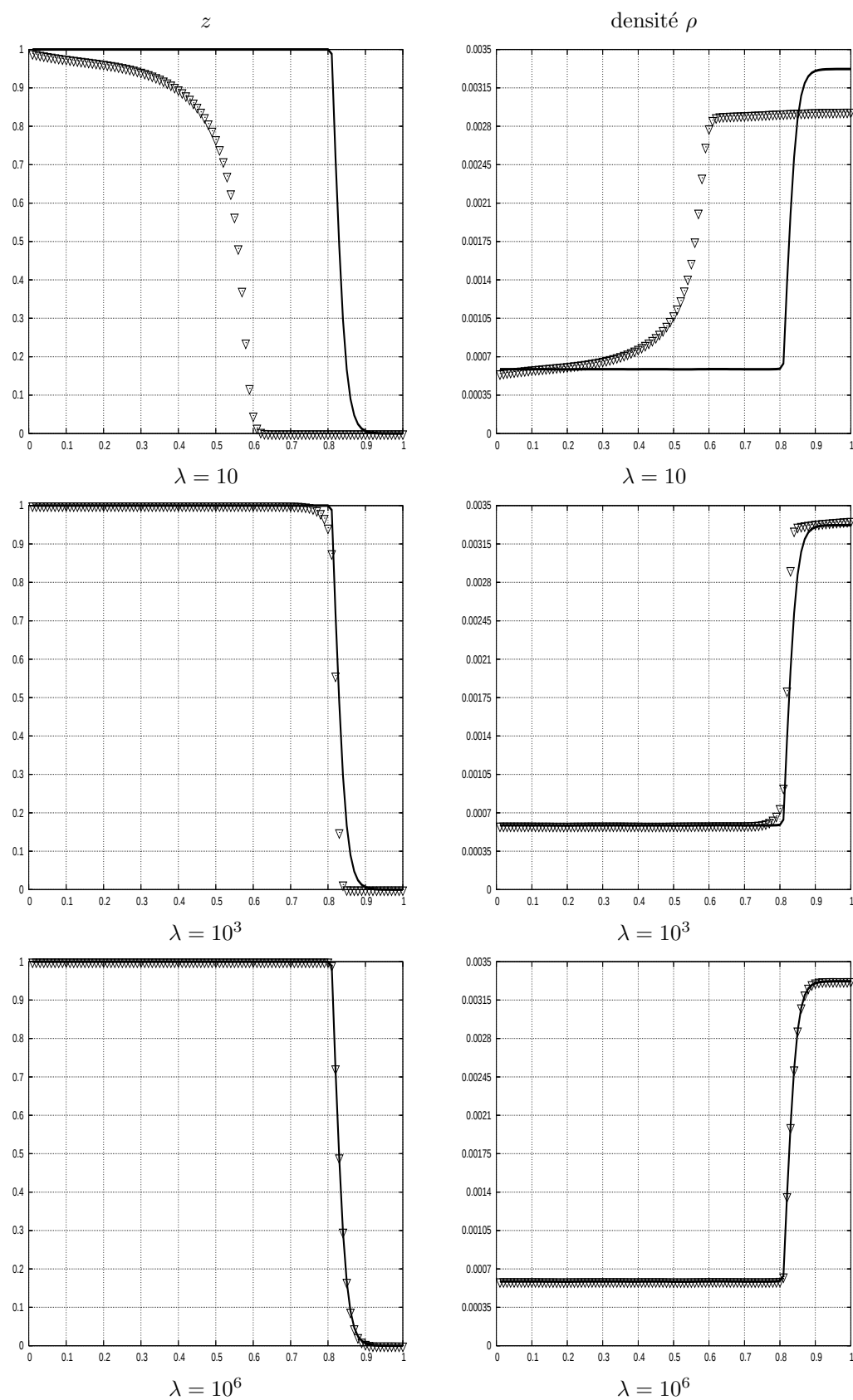


FIG. 5.15 – Comparaison des profils de z et de la densité obtenus à l'aide du schéma M-équilibre et du schéma MT-équilibre au temps $t = 20$ ms ; λ varie de 10 à 10^6 .

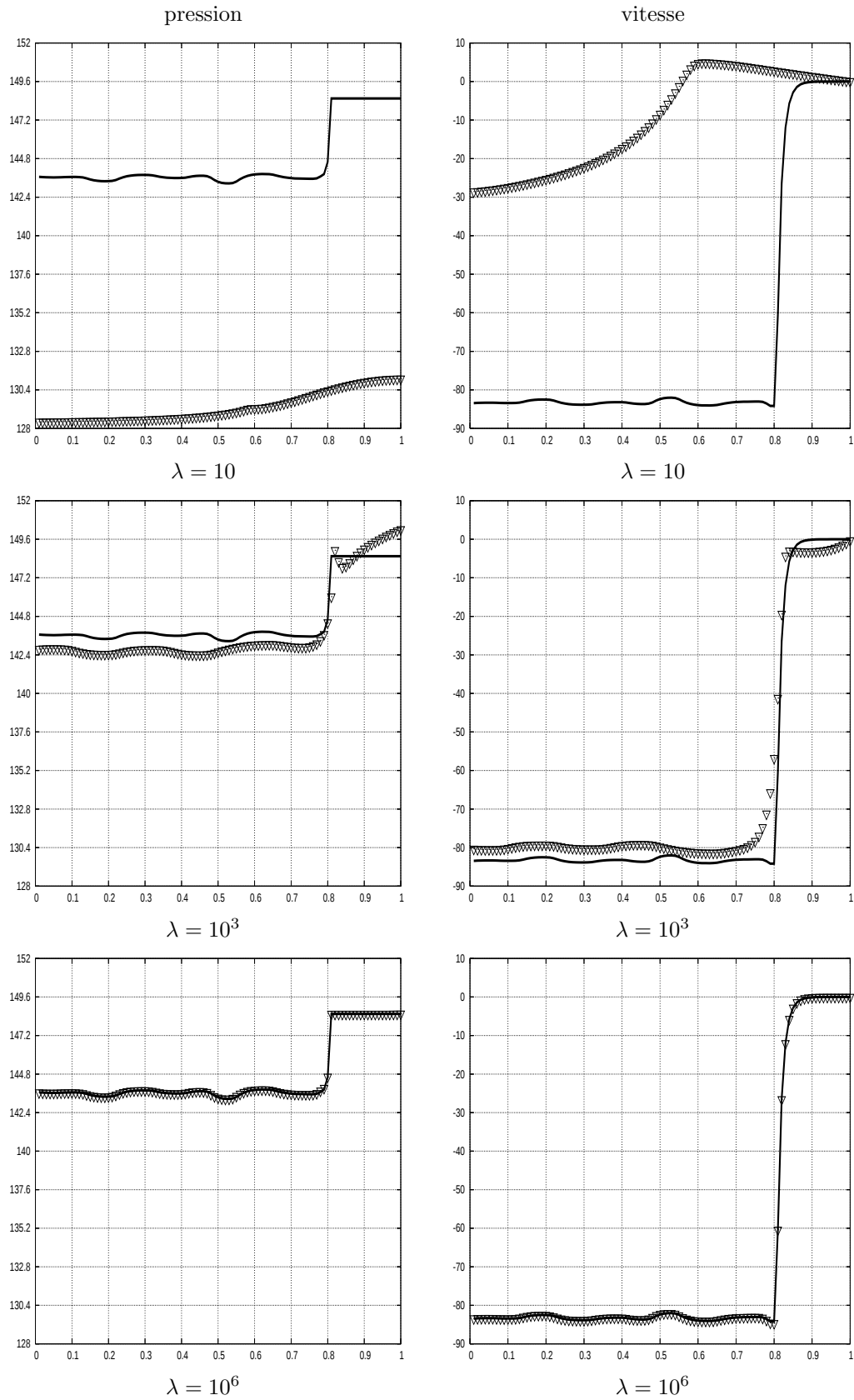


FIG. 5.16 – Comparaison des profils de la pression et de la vitesse obtenus à l'aide du schéma M-équilibre et du schéma MT-équilibre au temps $t = 20$ ms ; λ varie de 10 à 10^6 .

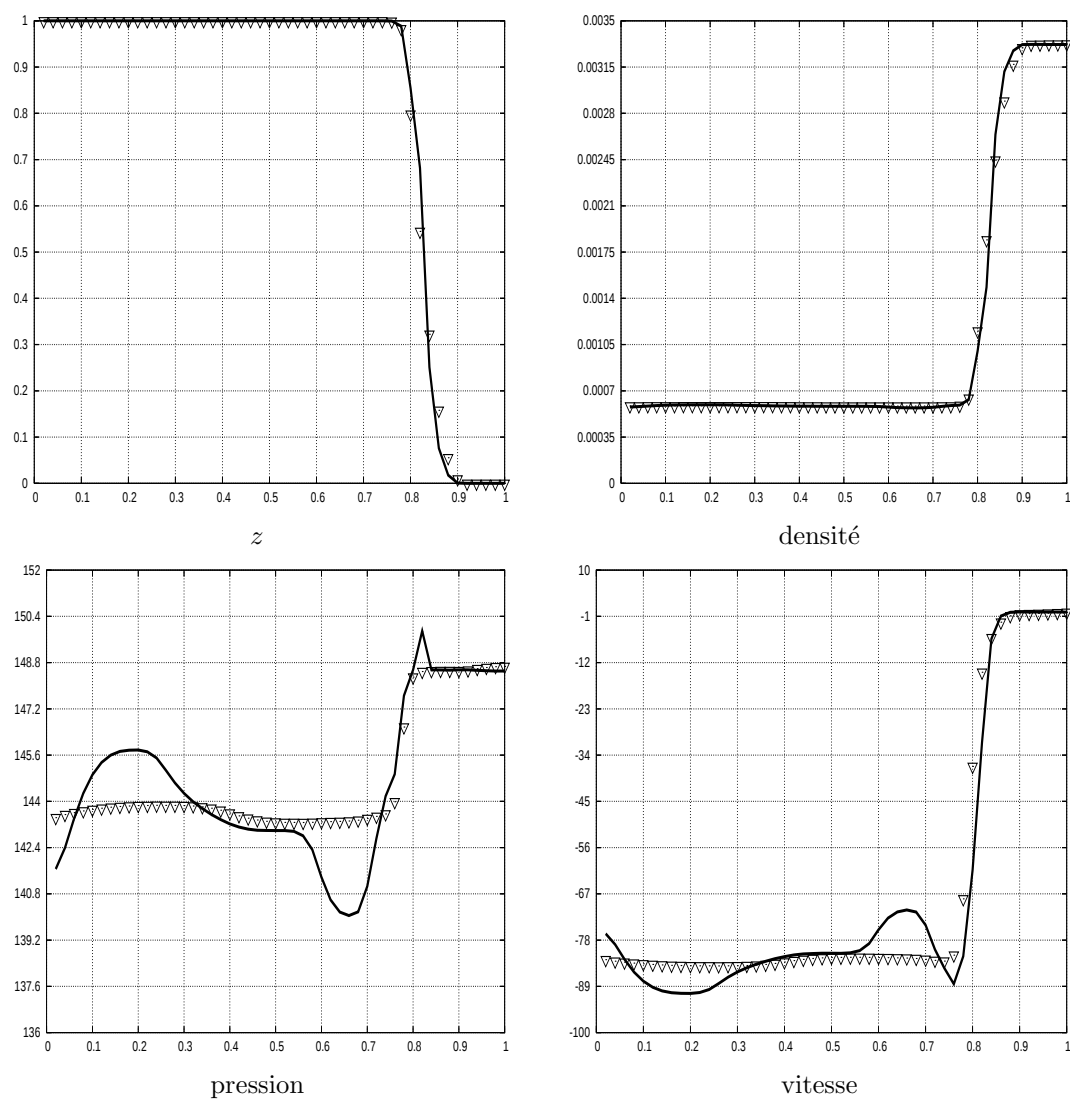


FIG. 5.17 – Comparaison des profils de z , de la densité, de la pression et de la vitesse pour le schéma MT-équilibre pour Δt donné par la condition CFL (5.45) (lignes) et pour Δt donné par la condition CFL (5.46).

obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre basé sur Rusanov et les lignes celle obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre basée sur Roe. Le temps final est toujours de 20 ms et les caractéristiques des deux fluides sont toujours données dans le tableau 5.2.

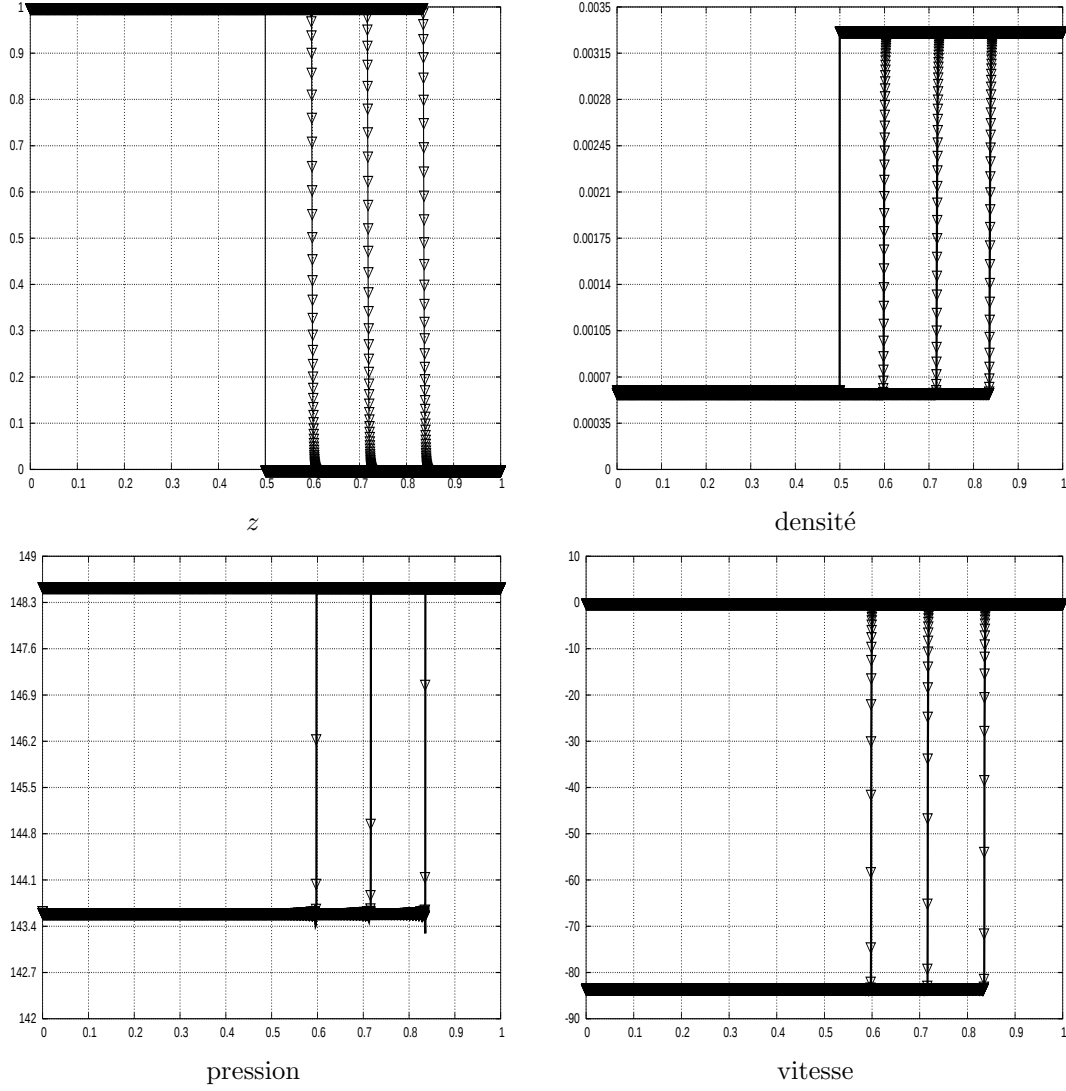


FIG. 5.18 – Comparaison des profils de z , de la densité, de la pression et de la vitesse pour le schéma MT-équilibre lorsque le schéma utilisé pour la discrétisation de la partie convective est le schéma de Roe (lignes) et le schéma de Rusanov (triangles) ; on a utilisé 5000 mailles.

5.5.3 Changement de phase dû à une compression en deux dimensions

On considère un domaine de 1 m de long sur 1 m de large. On plonge une bulle de vapeur d'eau de rayon $r = 25$ cm dans de l'eau liquide au centre du domaine. La géométrie de cette compression est donnée dans la figure 5.19.

Les lois d'état utilisées sont des lois d'états de type *stiffened gas* et sont donc différentes du cas test 1D du piston. Les coefficients des deux phases sont donnés dans le tableau 5.1. La température des deux phases est fixée à $T = 600$ K et les densités des deux phases sont choisies de telle sorte qu'on ait équilibre mécanique et thermodynamique dans tout le domaine au temps initial, ainsi $\rho_1^* \simeq 35.5 \text{ kg.m}^{-3}$ pour la phase vapeur et $\rho_2^* \simeq 686.2 \text{ kg.m}^{-3}$ pour la phase liquide.

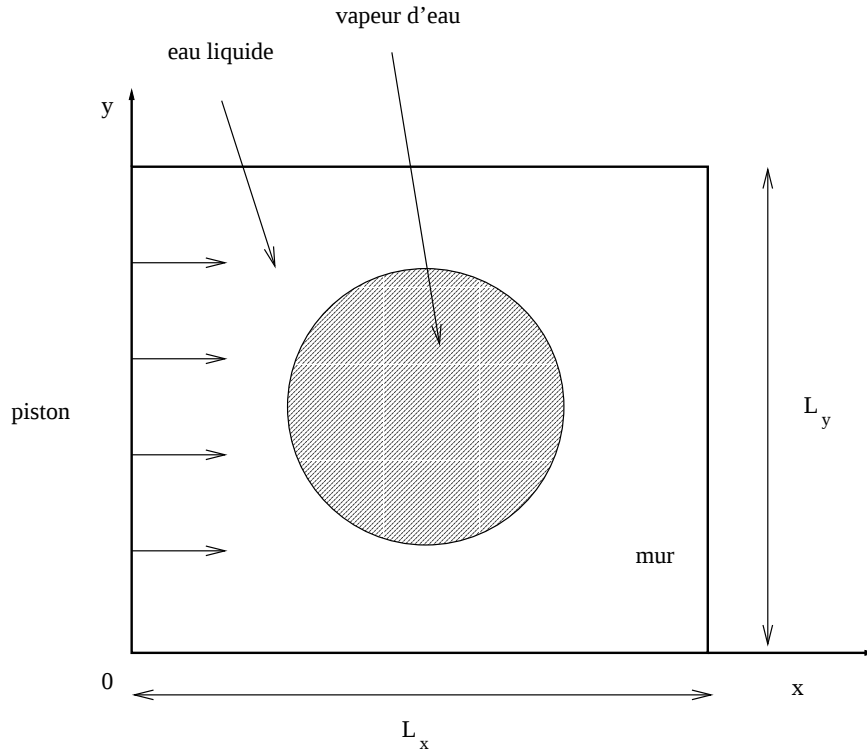


FIG. 5.19 – Géométrie du cas test de compression d'une bulle de vapeur d'eau dans de l'eau

La compression est modélisée en imposant une vitesse constante $u_p = 100 \text{ m.s}^{-1}$ dans les mailles fictives du bord gauche du domaine alors que les autres conditions aux limites sont des conditions de type mur. Le flux de masse est également nul sur tous les bords du domaine.

Les figures 5.20 et 5.21 comparent le contour de z obtenu par le schéma MT-équilibre et celui obtenu par discrétisation du système homogène (5.21) donc sans changement de phase. Les figures (5.22) et (5.23) comparent le contour de la densité obtenu également à l'aide de ces deux systèmes. Le temps final est de $t = 1.08 \text{ ms}$ et on a utilisé un maillage 100×100 . L'ordre en espace et en temps est fixé à un. On constate donc la transformation de la bulle de vapeur en liquide due à la compression et cette transformation ne provient pas d'un artefact numérique.

La figure 5.24 représente les profils de la pression et de la vitesse dans la direction x obtenus à l'aide du schéma MT-équilibre aux temps $t = 0.18 \text{ ms}$, $t = 0.54 \text{ ms}$ et $t = 0.9 \text{ ms}$.

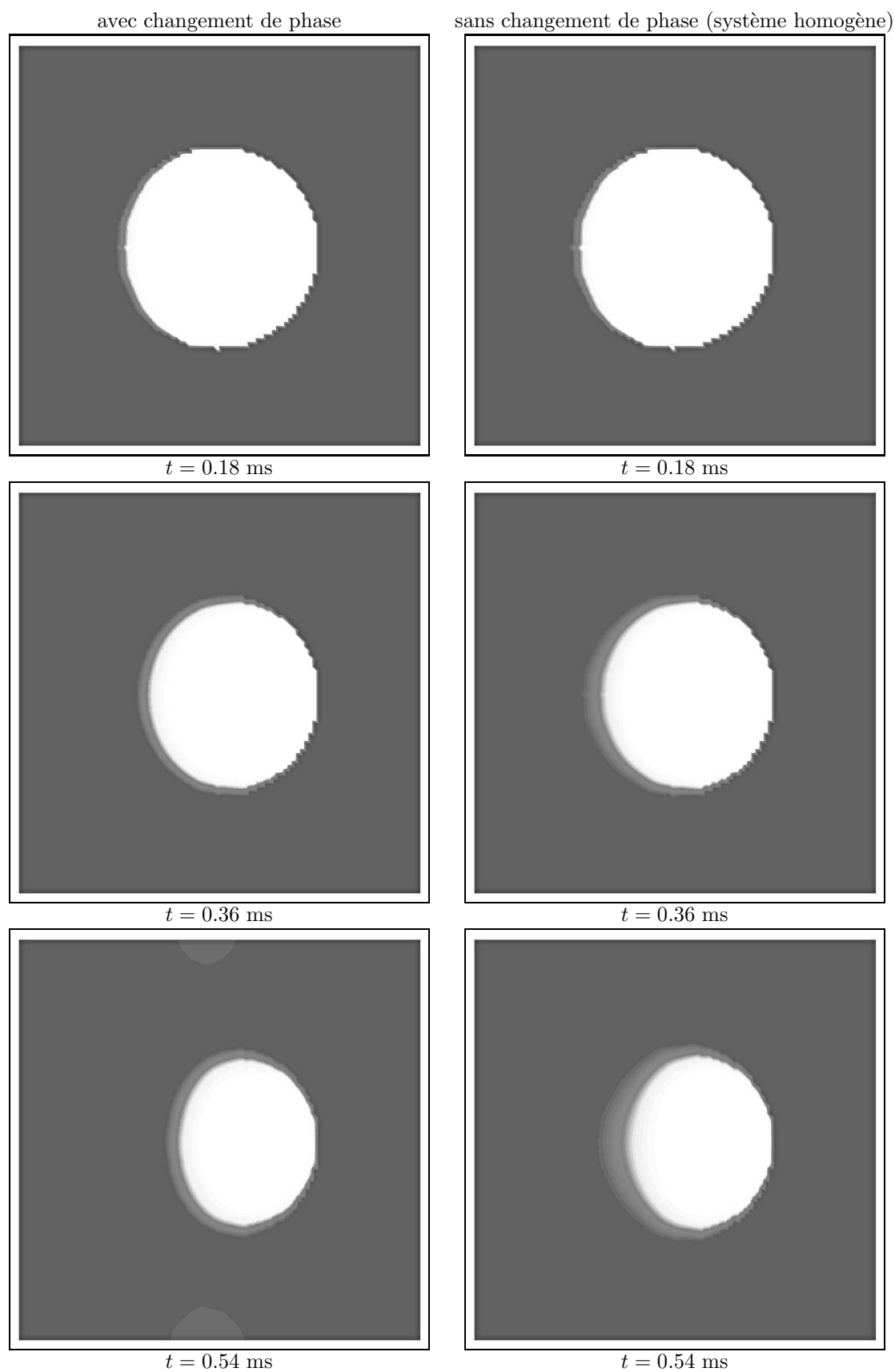


FIG. 5.20 – Comparaison des profils de z obtenus avec le schéma MT-équilibre (gauche) et avec le système homogène (droite) ; t varie de 0.18 ms à 0.54 ms.

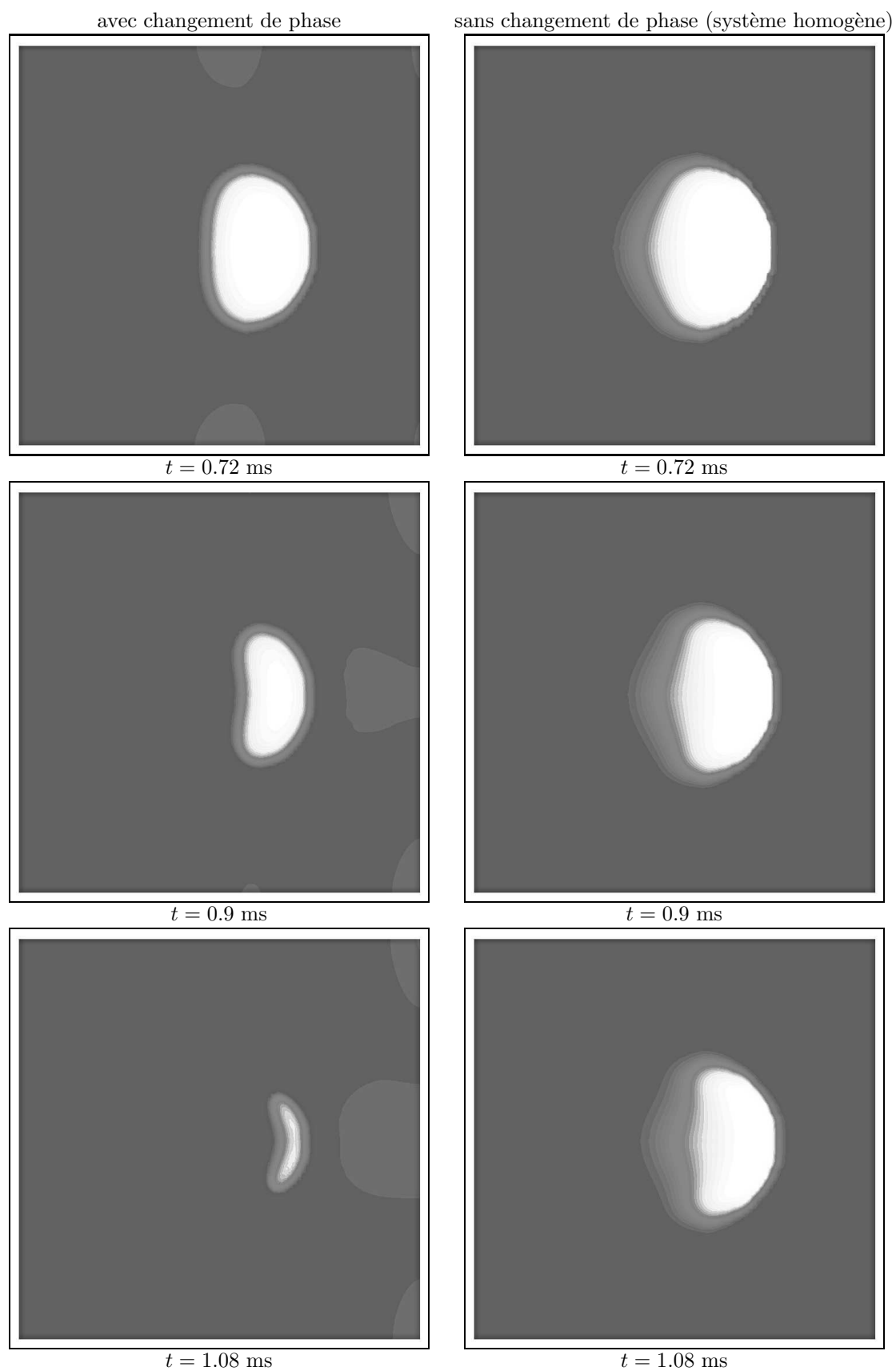


FIG. 5.21 – Comparaison des profils de z obtenus avec le schéma MT-équilibre (gauche) et avec le système homogène (droite) ; t varie de 0.72 ms à 1.08 ms.

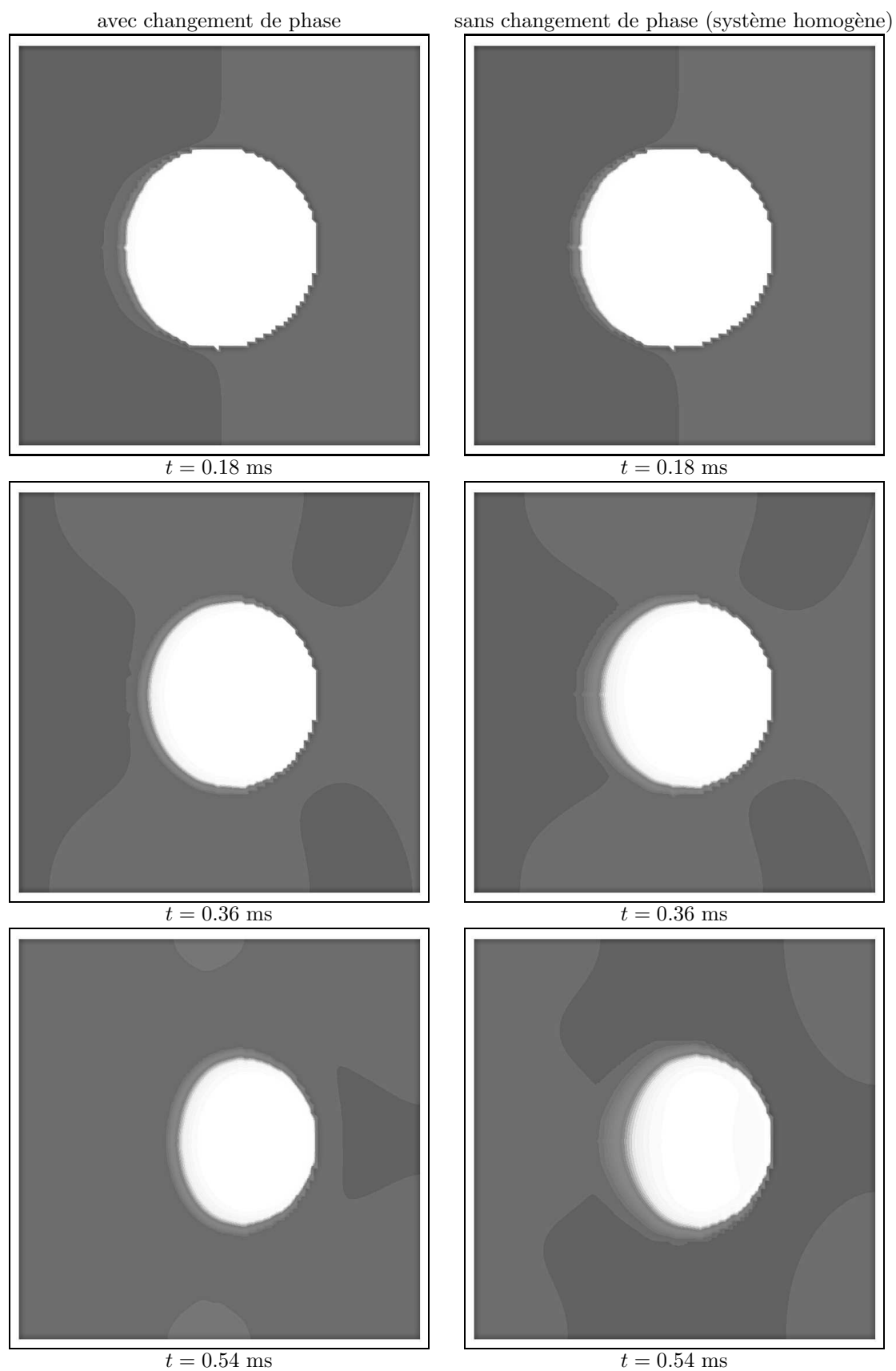


FIG. 5.22 – Comparaison des profils de la densité obtenus avec le schéma MT-équilibre (gauche) et avec le système homogène (droite) ; t varie de 0.18 ms à 0.54 ms.

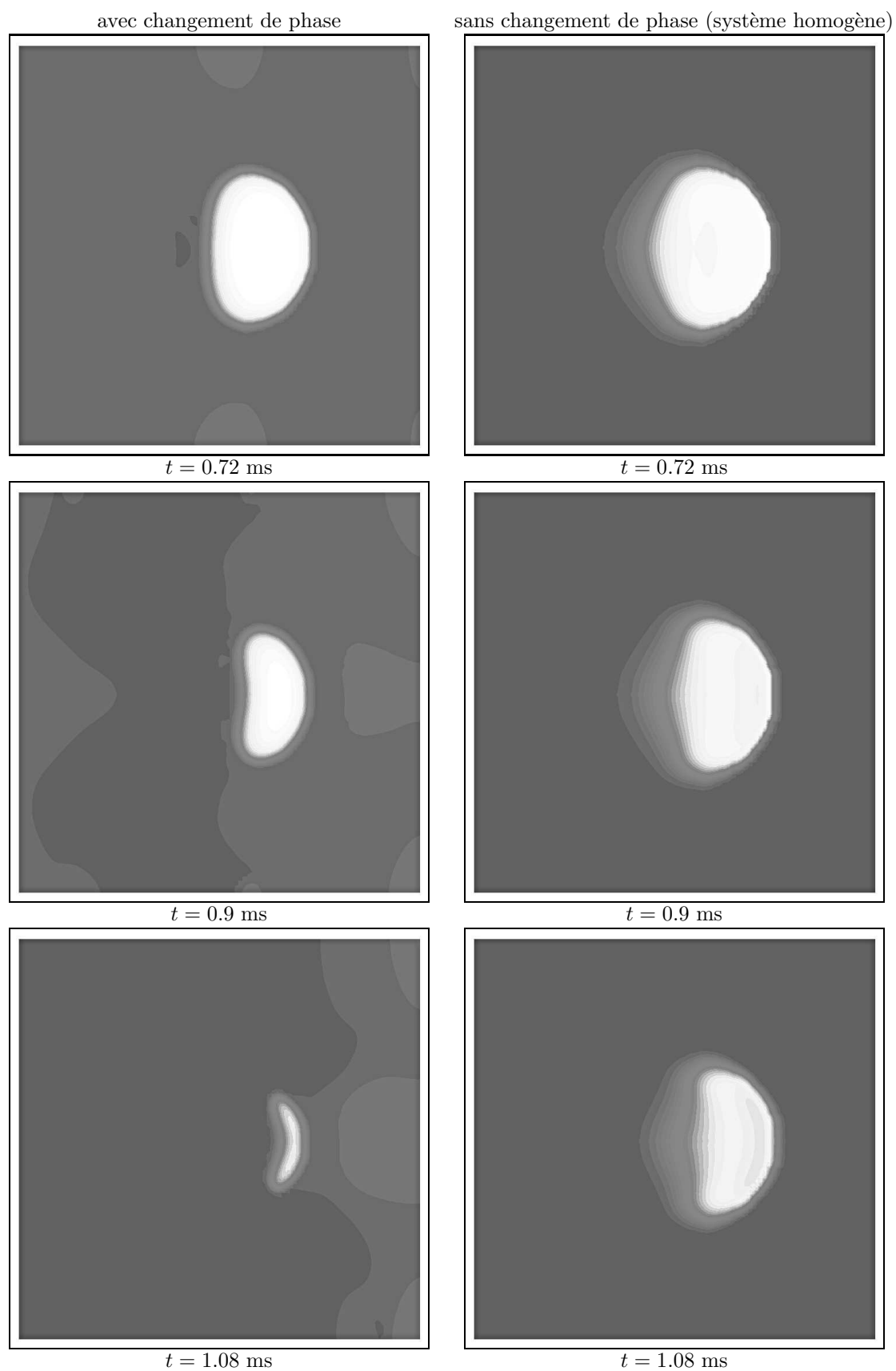


FIG. 5.23 – Comparaison des profils de la densité obtenus avec le schéma MT-équilibre (gauche) et avec le système homogène (droite) ; t varie de 0.72 ms à 1.08 ms.

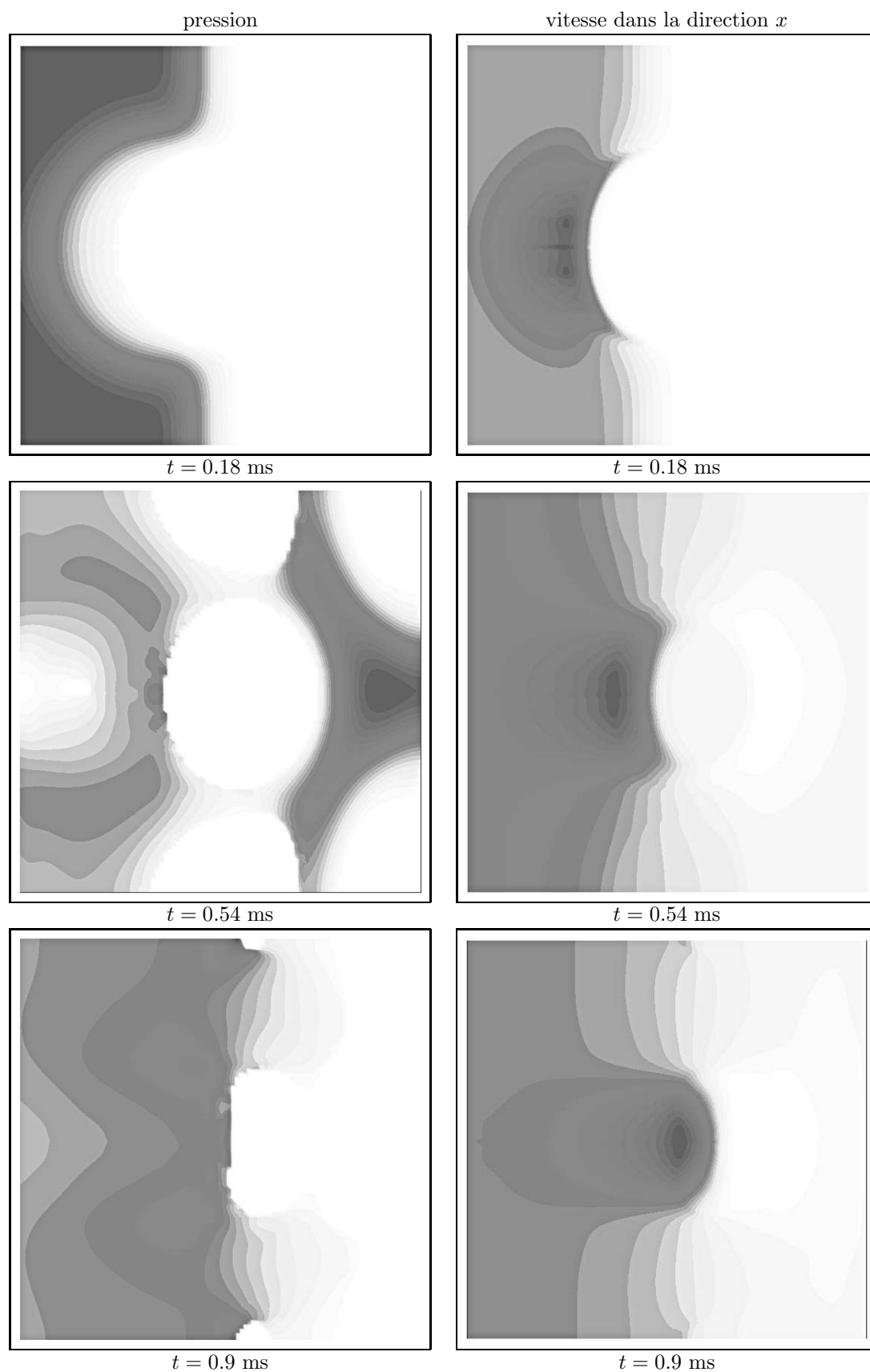


FIG. 5.24 – Profils de la pression et la vitesse dans la direction x obtenus à l'aide du schéma MT-équilibre; t varie de 0.181 ms à 0.9 ms.

5.5.4 Changement de phase dû à une dépression en deux dimensions

On considère à nouveau un domaine bidimensionnel de 1 m de long sur 1 m de large contenant deux gouttes de dodécane liquide de rayons $r = 12.5$ cm dans du dodécane vapeur. Les lois d'états des deux fluides sont supposées être des lois d'états de type *stiffened gas*. Les centres des deux gouttes de liquide sont situés respectivement au quart et au trois quart du domaine dans la longueur et sont situés au milieu du domaine dans la largeur comme cela est indiqué dans la figure 5.25.

La température dans le domaine est fixée à 600 K et les caractéristiques des deux fluides sont données dans le tableau 5.3 et viennent d'O. Le Metayer [54]. Comme précédemment les densités des deux phases sont choisies de telle sorte qu'on ait équilibre mécanique et thermodynamique entre les deux phase. Par conséquent, on a prit comme condition initiale sur les densités $\rho_1^* \simeq 12 \text{ kg.m}^{-3}$ pour la phase vapeur et $\rho_2^* \simeq 159 \text{ kg.m}^{-3}$ pour la phase liquide.

	liquide	vapeur
$c_v \text{ (J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1})$	1077.7	1956.45
$\gamma = C_p/C_v$	2.35	1.025
$P^\infty \text{ (Pa)}$	4.10^8	0
$q \text{ (kJ.kg}^{-1})$	-755.269	-237.547
$q' \text{ (kJ.kg}^{-1}.\text{K}^{-1})$	0	-24.485

TAB. 5.3 – Coefficients de la dodécane liquide et de sa vapeur.

La dépression est simulée comme dans le cas unidimensionnel en imposant une vitesse $u_p = -100 \text{ m.s}^{-1}$ dans les mailles fictives à gauche du domaine. Les autres conditions aux limites sont de type mur et le flux de masse est nul sur le bord du domaine. On a utilisé 100 mailles dans la direction x et dans la direction y .

Les figures 5.26, 5.27, 5.28 et 5.29 représentent respectivement l'évolution en temps du profil de z , de la densité, de la pression et de la vitesse dans la direction x pour t variant de 2 ms à 32 ms.

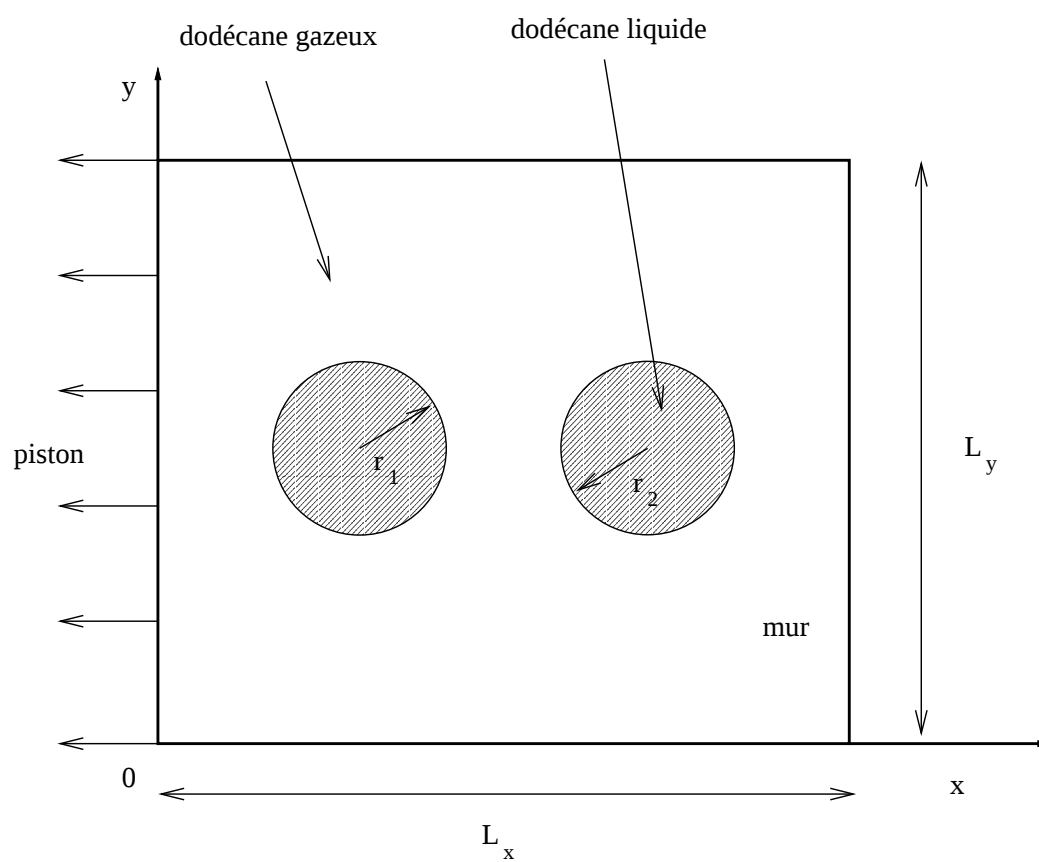


FIG. 5.25 – Géométrie du cas test du piston avec deux bulles de liquide dans de la vapeur

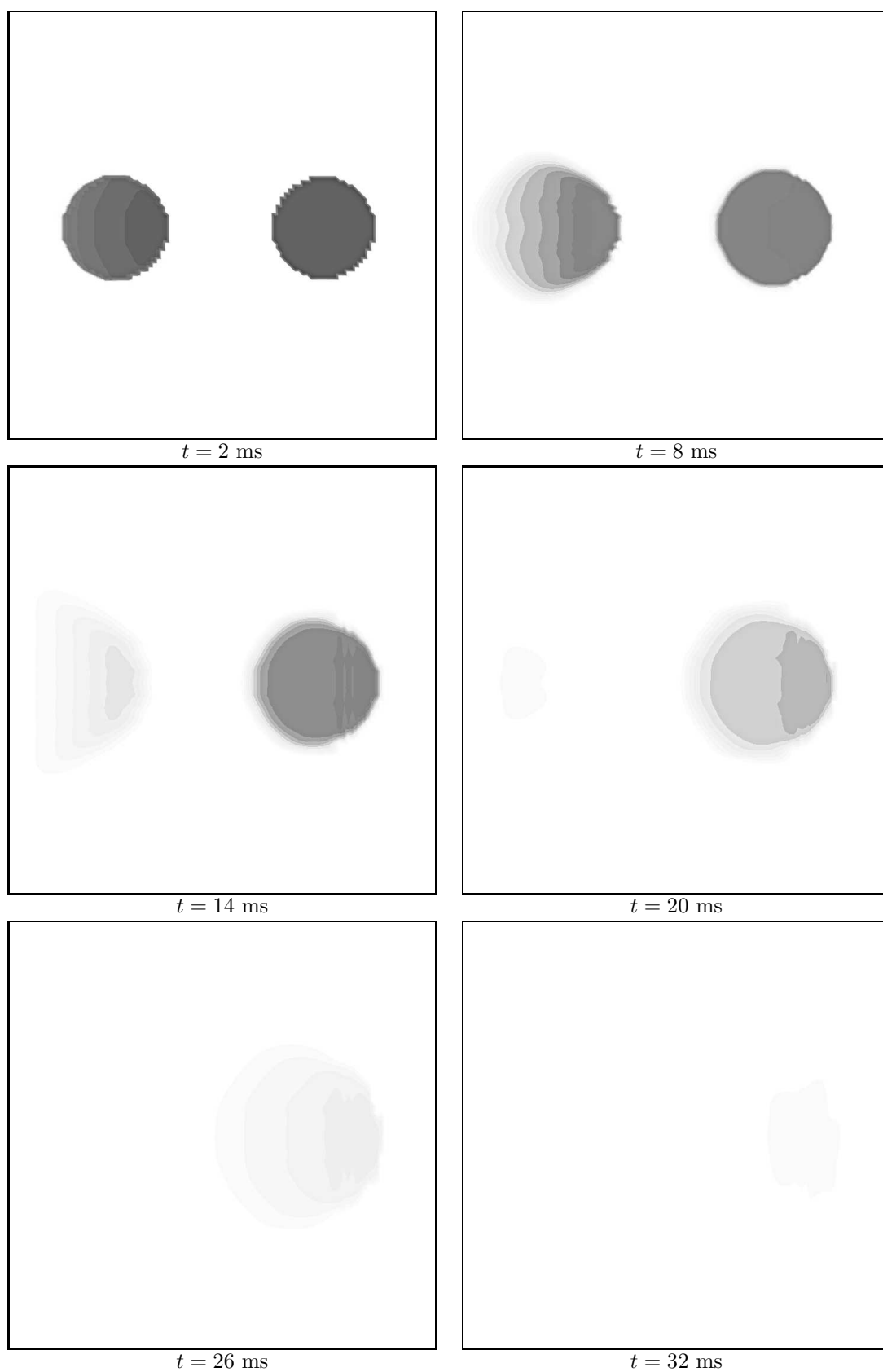


FIG. 5.26 – Profil de z obtenu à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 1 en espace et en temps ; t varie de 2 ms à 32 ms.

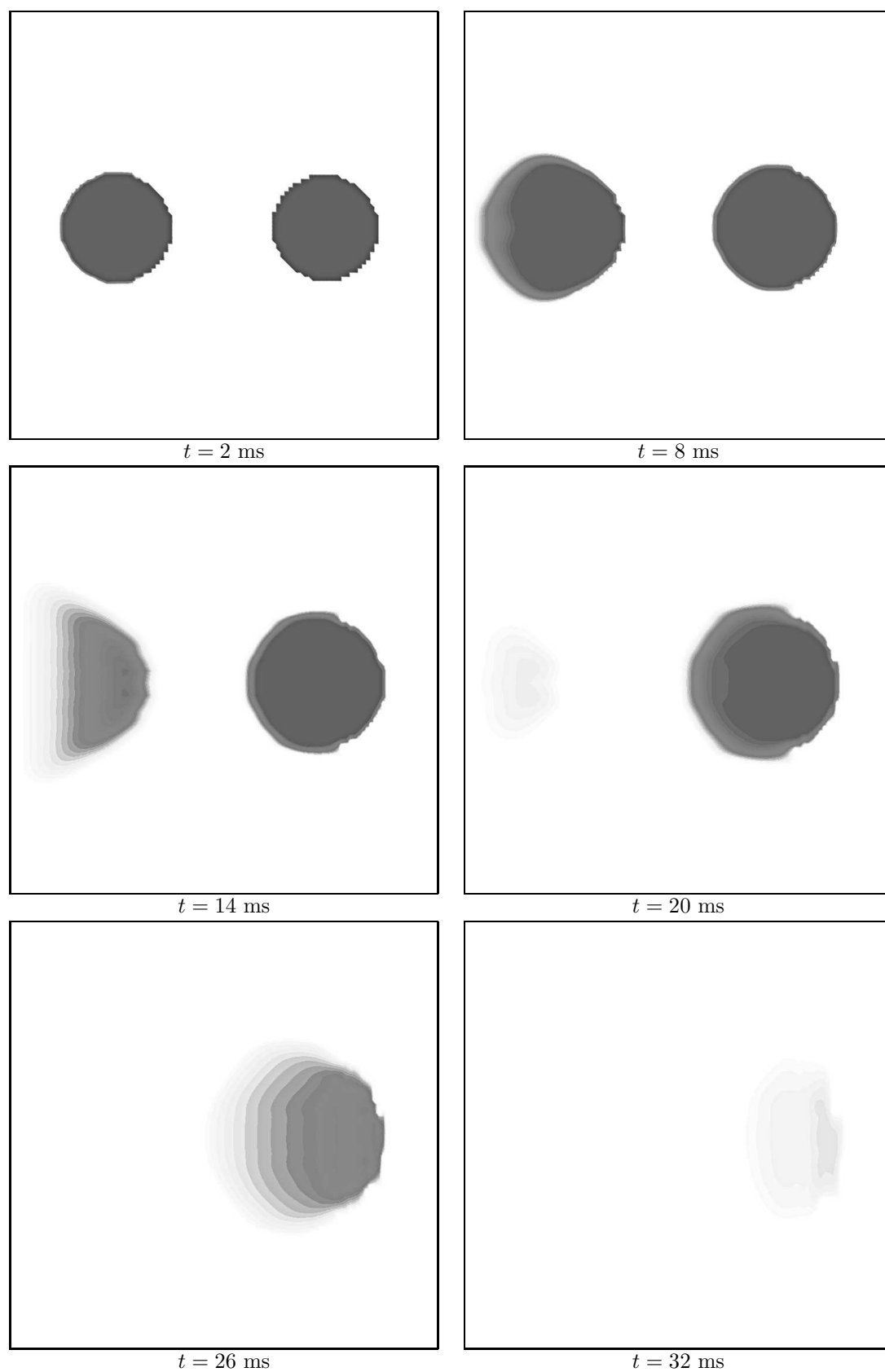


FIG. 5.27 – Profil de la densité obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 1 en espace et en temps; t varie de 2 ms à 32 ms.

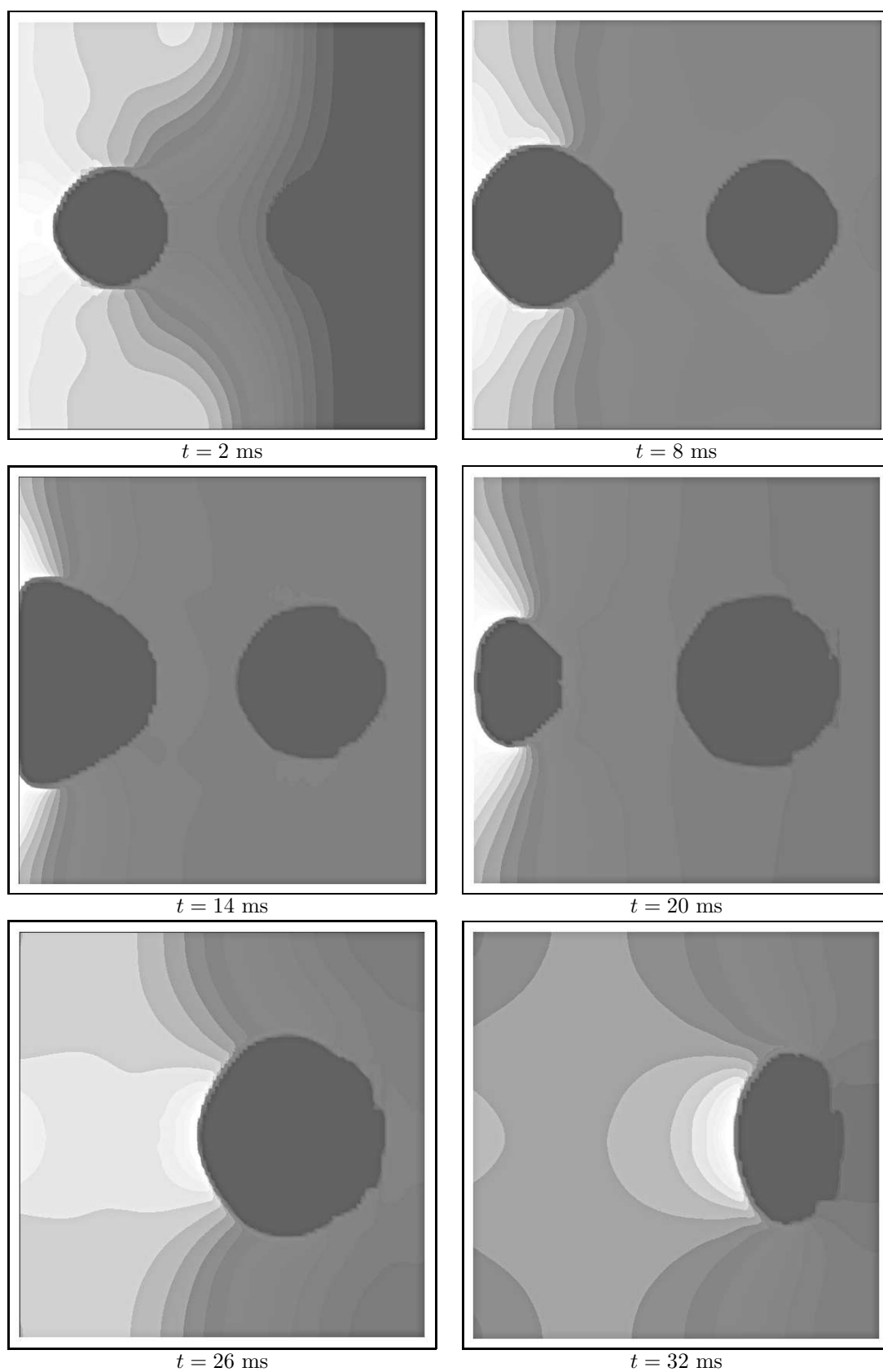


FIG. 5.28 – Profil de la pression obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 1 en espace et en temps; t varie de 2 ms à 32 ms.

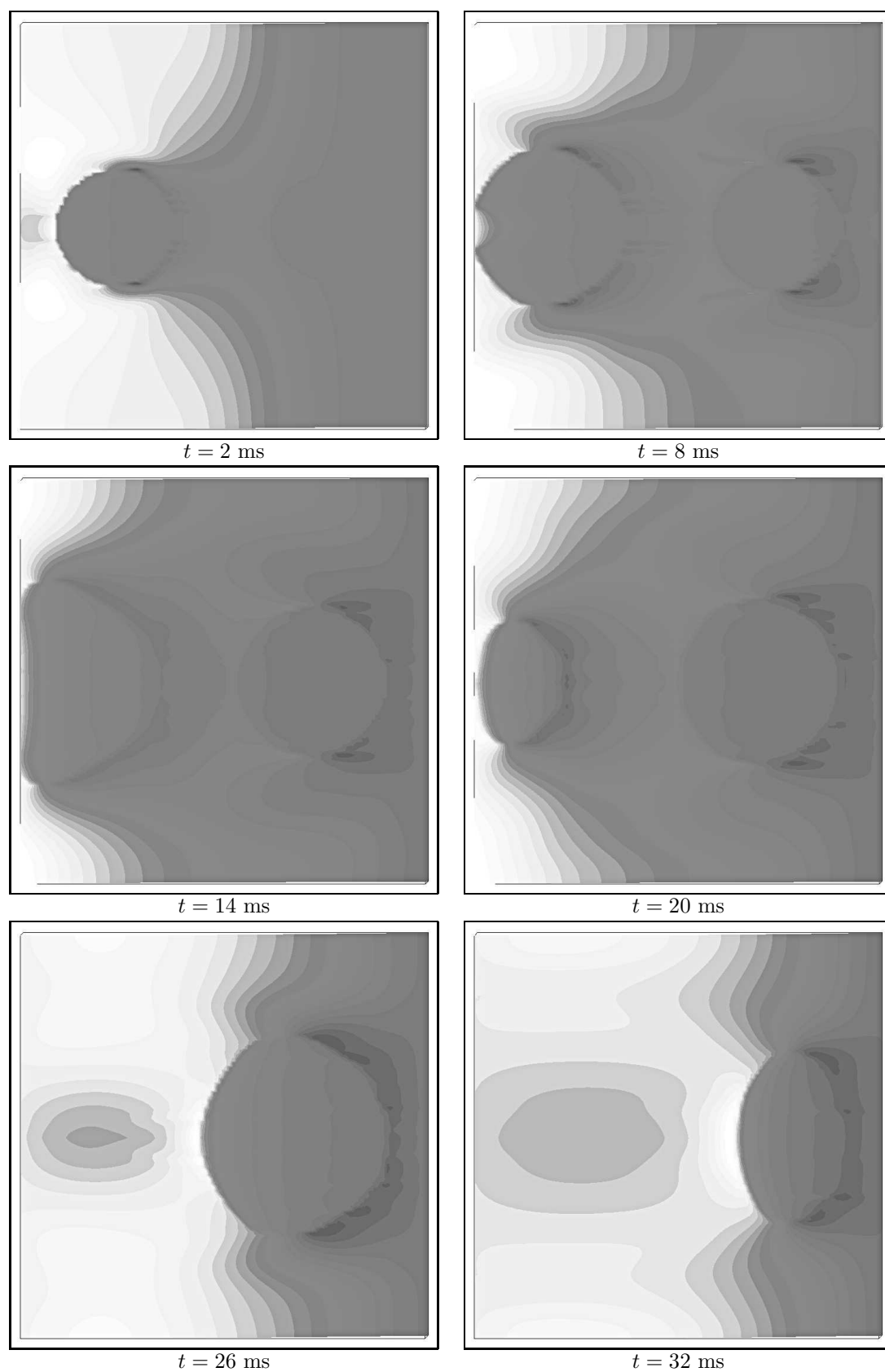


FIG. 5.29 – Profil de la vitesse dans la direction des x obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 1 en espace et en temps; t varie de 2 ms à 32 ms.

5.5.5 Création d'un film de vapeur par dépression et en hypothèse isotherme

On considère un domaine de 1 m de long sur 1 m de large rempli d'eau liquide. A l'extrémité droite du domaine sont disposés des bulles de vapeur d'eau comme dans la figure 5.30.

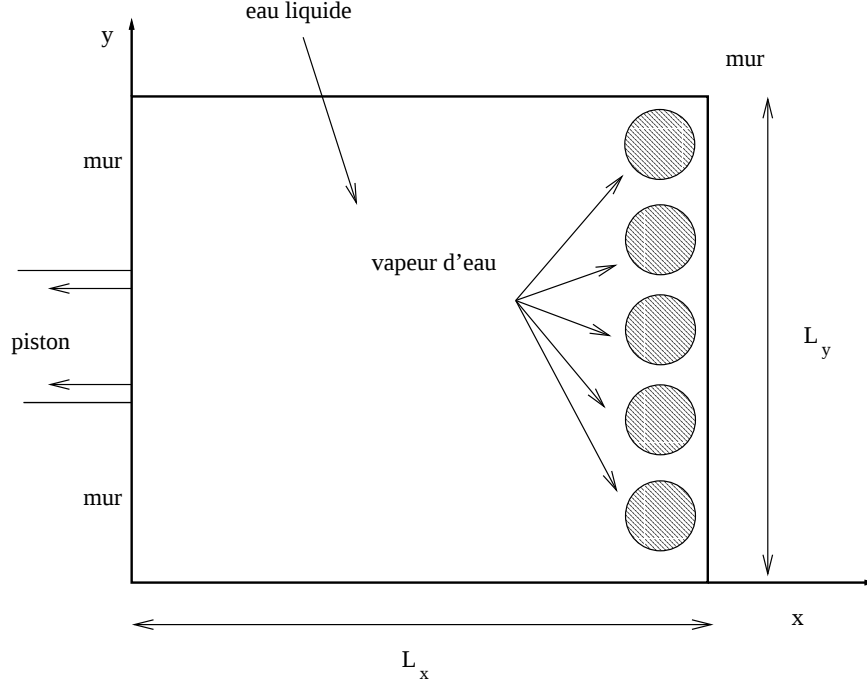


FIG. 5.30 – Géométrie du cas test du piston avec deux bulles de liquide dans de la vapeur

Les deux phases suivent des lois d'états de type *stiffened gas* dont les caractéristiques sont données dans le tableau 5.1. La température des deux phases est fixée à 500 K et les densités des deux phases sont choisies de telle sorte qu'on ait équilibre thermodynamique et mécanique dans tout le domaine. Par conséquent, on a pris $\rho_1^* \simeq 11.8 \text{ kg.m}^{-3}$ pour la phase vapeur et $\rho_2^* \simeq 817.8 \text{ kg.m}^{-3}$ pour la phase liquide.

On crée artificiellement une dépression en imposant une vitesse fictive $u_p = -100 \text{ m.s}^{-1}$ dans les mailles fictives à gauche du domaine. Comme l'écoulement est supposé isotherme, si la dépression se fait sur toute la largeur du domaine dans le sens des y , celle-ci transformera le liquide en vapeur sur toute la longueur du domaine et le cas test sera l'analogue du cas test 1D du piston. C'est pourquoi, la dépression ne se fait que sur une petite partie du domaine à gauche comme dans la figure 5.30. Toutes les autres conditions aux limites sont des conditions aux limites de type *mur*.

Les figures 5.31, 5.32, 5.33 et 5.34 représentent le profil de z et de la densité obtenus à l'aide du schéma MT-équilibre à l'ordre 2 en espace et en temps. Le nombre de mailles utilisées lors des simulations est de 100 dans les directions x et y .

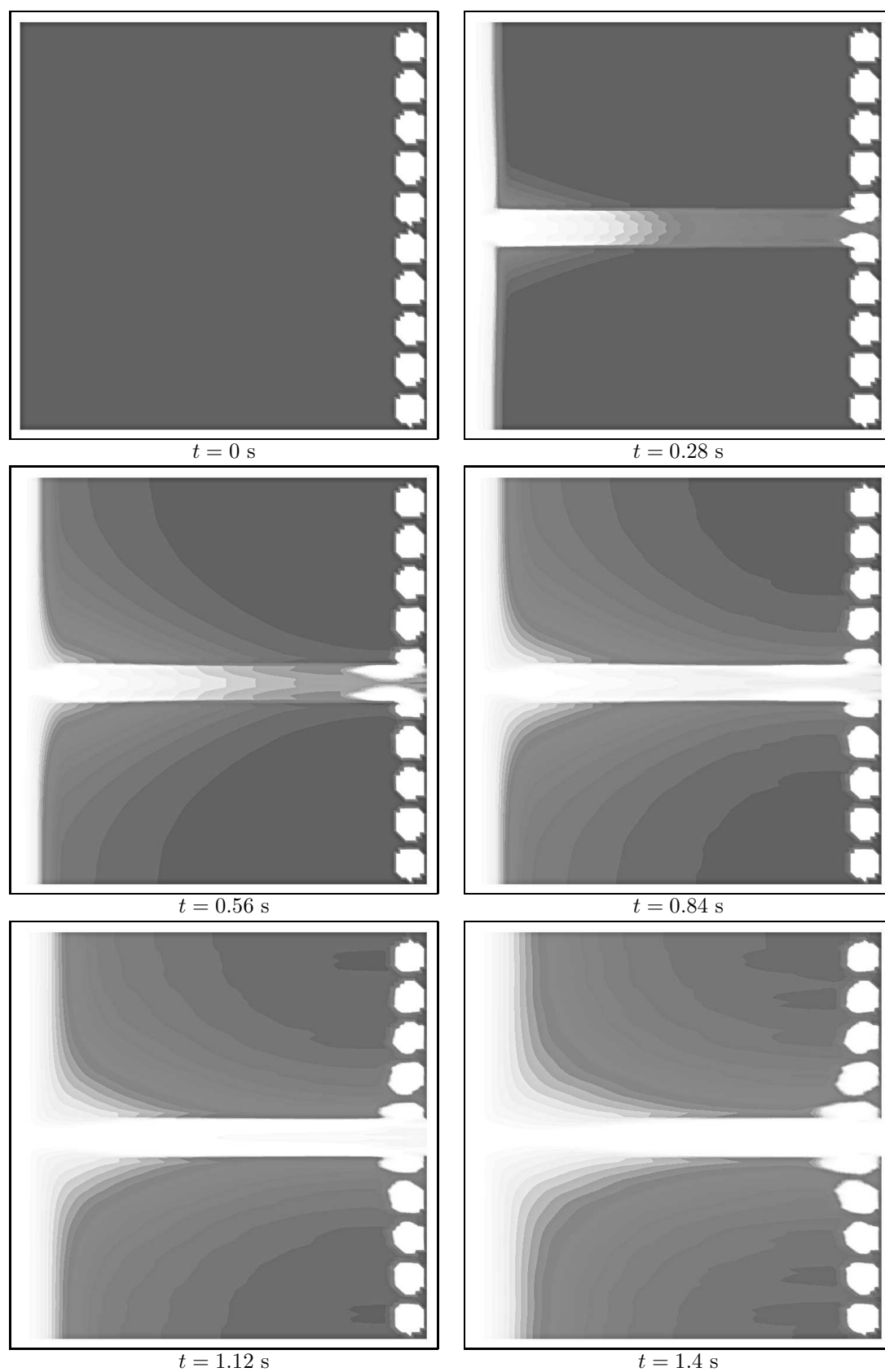


FIG. 5.31 – Profil de z obtenu avec le schéma MT-équilibre à l'ordre 2 en espace et en temps ; t varie 0 s à 1.4 s.

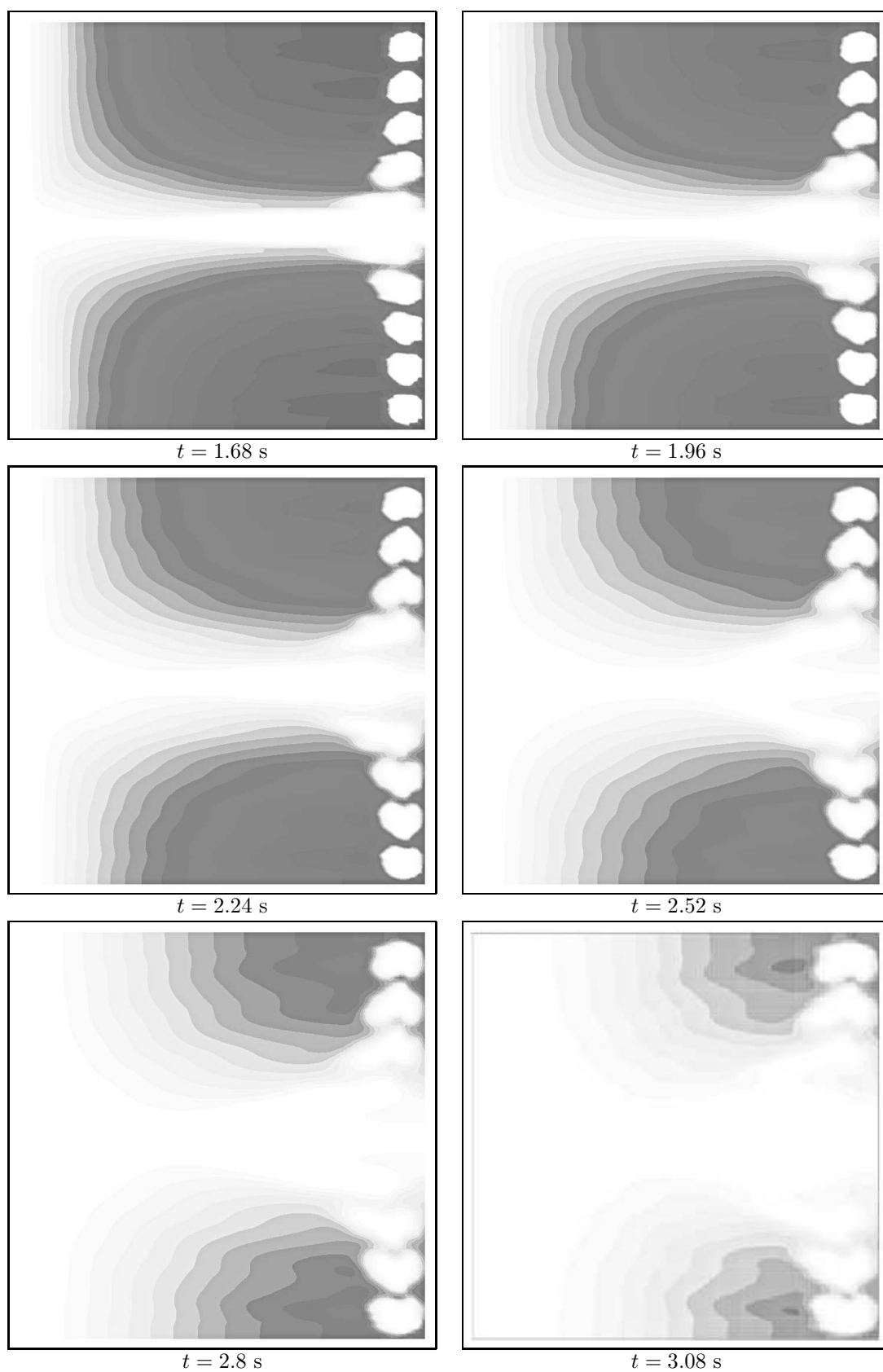


FIG. 5.32 – Profil de z obtenu avec le schéma MT-équilibre à l'ordre 2 en espace et en temps ; t varie 1.68 s à 3.08 s.

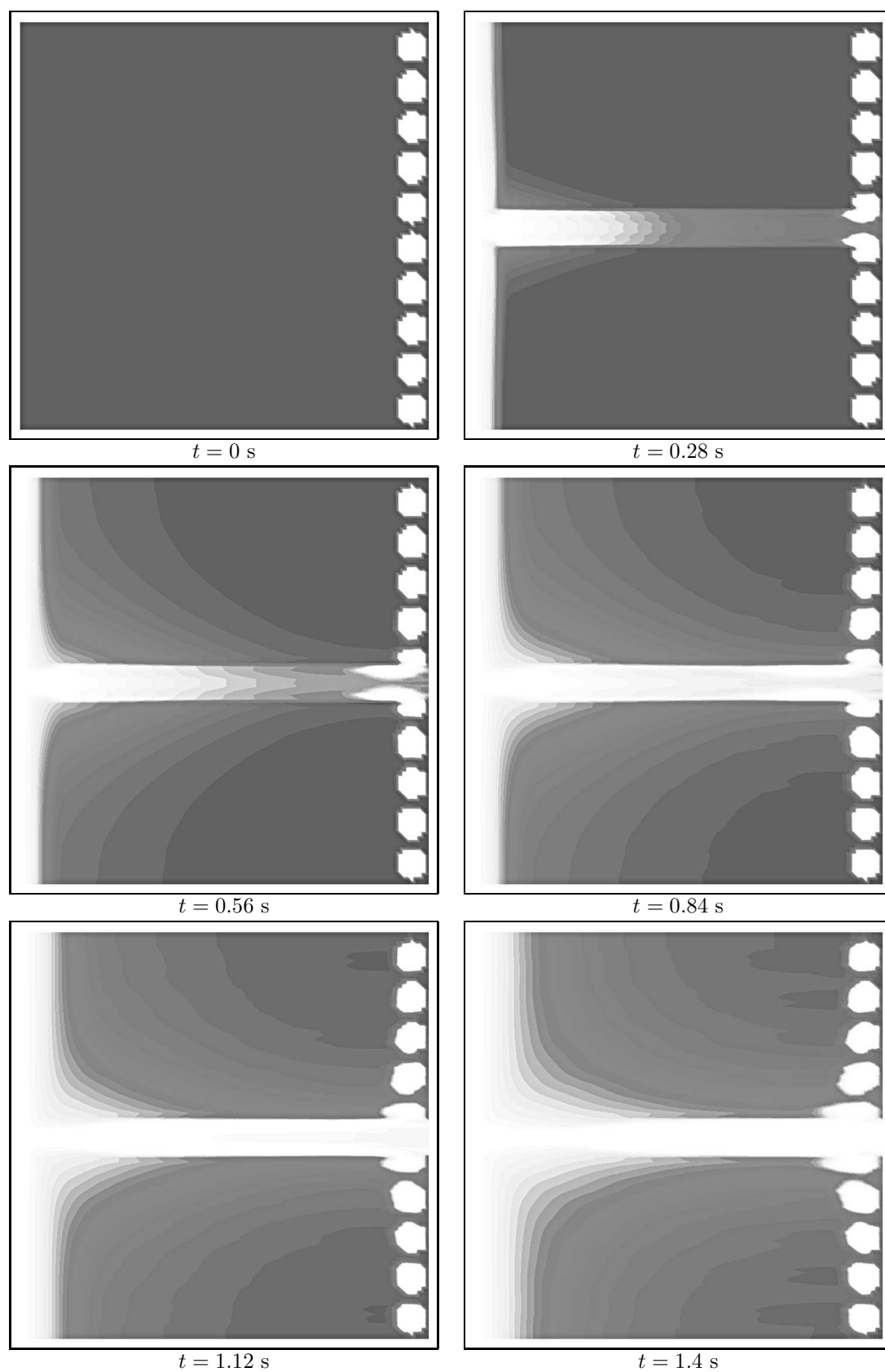


FIG. 5.33 – Profil de la densité obtenue avec le schéma MT-équilibre à l'ordre 2 en espace et en temps; t varie 0 s à 1.4 s.

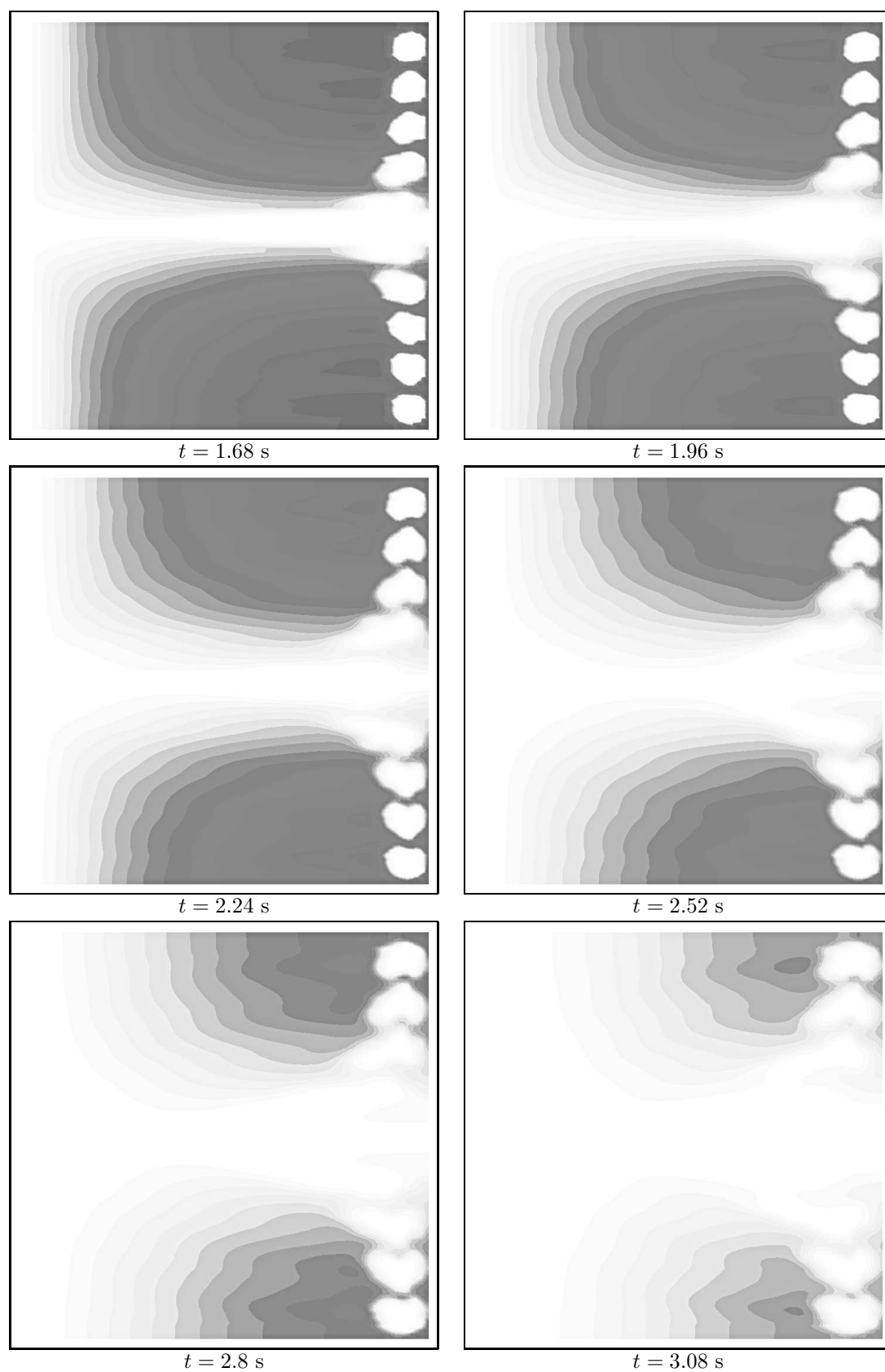


FIG. 5.34 – Profil de la densité obtenue avec le schéma MT-équilibre à l'ordre 2 en espace et en temps; t varie 1.68 s à 3.08 s.

5.6 Conclusion

En utilisant un principe de Hamilton, on a construit un modèle biffuide de changement de phase isotherme thermodynamiquement cohérent avec le second principe de la thermodynamique. Ce procédé fournit un terme source en différence d'enthalpies libres des deux phases portant sur les équations des densités partielles et un terme source de différence de pression des deux phases portant sur l'équation de z . On en a déduit deux sous-systèmes : le M-équilibre avec équilibre de pressions et le MT-équilibre avec équilibre de pressions et d'enthalpies libres. On a alors montré que si le premier système est strictement hyperbolique, le deuxième est seulement faiblement hyperbolique.

Les termes sources obtenus sont ensuite vus comme des termes de relaxation. On a utilisé un procédé de splitting en temps avec projection sur les variétés d'équilibre pour proposer un schéma numérique basé sur le système père (avec les deux termes sources) pour discrétiser les systèmes M-équilibre et MT-équilibre. On a ensuite montré numériquement que la solution obtenue ne dépend pas du schéma numérique utilisé pour discrétiser la partie convective et on a également montré la convergence en maillage de la solution obtenue par cette méthode de splitting en temps.

Chapitre 6

Extension du modèle au cas non isotherme

6.1 Modélisation

6.1.1 Hypothèses générales

L'obtention du modèle de changement de phase pour les écoulements non isothermes utilise le même principe de minimisation du Lagrangien que lorsque les écoulements sont supposés isothermes. Pour commencer, on suppose qu'il existe une entropie η pour le système puis, par analogie avec les écoulements isothermes, on suppose que l'énergie interne ε dépend des variables thermodynamiques classiques mais aussi de z et du gradient de z

$$\varepsilon = \varepsilon(\rho, y, \eta, z, \nabla z),$$

où on rappelle que $\rho = z\rho_1 + (1-z)\rho_2$ est la densité de mélange et $y = \rho_1 z_1 / \rho$ désigne la concentration de la phase 1.

Enfin, on définit le Lagrangien L du système de manière classique analogue aux écoulements isothermes

$$L(\rho, \mathbf{j}, y, \eta, z, \nabla z) = \frac{1}{2}\rho|\mathbf{u}|^2 - \rho\varepsilon = \frac{|\mathbf{j}|^2}{2\rho} - \rho\varepsilon. \quad (6.1)$$

6.1.2 Minimisation de l'action Hamiltonienne

Soit ν un petit paramètre et considérons, comme dans la partie 5.2.2, des perturbations $(x, t, \nu) \mapsto (\hat{\rho}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{y}, \hat{\eta}, \hat{z}, \widehat{\nabla z})(x, t, \nu)$ de $(x, t) \mapsto (\rho, \mathbf{j}, y, \eta, z, \nabla z)$ vérifiant $(\hat{\rho}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{y}, \hat{\eta}, \hat{z}, \widehat{\nabla z})(x, t, \nu = 0) = (\rho, \mathbf{j}, y, \eta, z, \nabla z)(x, t)$. En supposant toujours la conservation de ρ ainsi que la conservation de $\hat{\rho}$ pour tout t et tout ν et en reprenant les calculs effectués dans la partie 5.2.2, on en déduit les petites variations de ρ ,

$$\boxed{\delta\rho = -\operatorname{div}(\rho\xi)}, \quad (6.2)$$

et de $\mathbf{j} = \rho\mathbf{u}$,

$$\boxed{\delta\mathbf{j} = \frac{\partial}{\partial t}(\rho\xi) + \operatorname{div}(\xi \otimes \mathbf{j} - \mathbf{j} \otimes \xi)}. \quad (6.3)$$

On note toujours

$$R = \frac{\partial L}{\partial \rho},$$

et on définit l'action Lagrangienne sur un domaine Ω borné en espace entre deux instants t_1 et t_2 par

$$\mathcal{A}(\nu) = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega} L(\hat{\rho}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{y}, \hat{\eta}, \hat{z}, \widehat{\nabla z}) dx dt.$$

On applique alors le principe des moindres actions à $\mathcal{A}$. En $\nu = 0$, on aura donc

$$\left. \frac{d\mathcal{A}}{d\nu} \right|_{\nu=0} = 0.$$

En supposant que les déplacements virtuels ξ , δy et δz sont des fonctions régulières s'annulant sur le bord de $\Omega \times [t_1, t_2]$, on en déduit

$$\frac{d\mathcal{A}}{d\nu} = \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ \frac{\partial L}{\partial \rho} \delta \rho + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{j}} \delta \mathbf{j} + \frac{\partial L}{\partial y} \delta y + \frac{\partial L}{\partial \eta} \delta \eta + \frac{\partial L}{\partial z} \delta z + \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \delta (\nabla z) \right\} dx dt. \quad (6.4)$$

Comme le principe des moindres actions ne rend pas compte des effets dissipatifs, on suppose que la production d'entropie est nulle,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \eta) + \operatorname{div}(\rho \eta \mathbf{u}) = 0,$$

et on suppose la conservation de $\hat{\eta}$ pour tout t et tout ν

$$\left(\frac{\partial(\hat{\rho}\hat{\eta})}{\partial \nu} \right)_{\hat{x}, t} + \sum_i \frac{\partial}{\partial \hat{x}_i} \left[\hat{\rho}\hat{\eta} \left(\frac{\hat{x}_i}{\partial \nu} \right)_{X, t} \right] = 0,$$

on en déduit

$$\boxed{\delta \eta = -\xi \cdot \nabla \eta}. \quad (6.5)$$

La relation (6.5) combinée avec (6.2), (6.3) et (5.9) et après intégrations par parties dans (6.4) fournit

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{A}}{d\nu} = & \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ -\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \rho(\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{u} + \rho \nabla R - \frac{\partial L}{\partial \eta} \nabla \eta \right\} \cdot \xi dx dt \\ & + \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ \frac{\partial L}{\partial z} - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right) \right\} \delta z dx dt + \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ \frac{\partial L}{\partial y} \right\} \delta y dx dt. \end{aligned}$$

Cette relation étant vraie pour tous ξ , δy et δz et comme en $\nu = 0$, on a $d\mathcal{A}/d\nu = 0$, on en déduit les trois relations suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{u} - \rho \nabla R + \frac{\partial L}{\partial \eta} \nabla \eta = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial z} - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right) = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial y} = 0. \end{array} \right. \quad (6.6)$$

L'équation sur la quantité de mouvement s'écrit donc

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \operatorname{div}[(\rho |\mathbf{u}|^2 + \rho R) \operatorname{Id}] \\ - \operatorname{div} \left(\nabla z \otimes \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right) + \operatorname{div}(L \operatorname{Id}) = 0. \end{aligned}} \quad (6.7)$$

L'équation sur l'énergie totale $e = \mathbf{j} \cdot \mathbf{u} - L$ s'obtient ensuite en calculant $\partial(\mathbf{j} \cdot \mathbf{u} - L)/\partial t$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial t} &= \frac{\partial L}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{j}} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \frac{\partial(\nabla z)}{\partial t} \\ &= -R \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) + \mathbf{u} \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial \eta} \mathbf{u} \cdot \nabla \eta + \frac{\partial L}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \frac{\partial(\nabla z)}{\partial t}, \end{aligned}$$

en utilisant (6.6) et la conservation de ρ et de $\rho \eta$. Puis, toujours en utilisant (6.6), on a la relation suivante

$$\frac{\partial L}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} = \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \right) \frac{\partial z}{\partial t} = \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \frac{\partial z}{\partial t} \right) - \frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \frac{\partial(\nabla z)}{\partial t}.$$

Ainsi, on en déduit

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{j} \cdot \mathbf{u} - L) = \mathbf{u} \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \mathbf{u} \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + R \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) + \frac{\partial L}{\partial \eta} \mathbf{u} \cdot \nabla \eta - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \frac{\partial z}{\partial t} \right),$$

qui combinée avec (6.6) montre que

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{j} \cdot \mathbf{u} - L) = \rho \mathbf{u} \cdot \nabla R - \frac{\partial L}{\partial \eta} \mathbf{u} \cdot \nabla \eta + R \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) + \frac{\partial L}{\partial \eta} \mathbf{u} \cdot \nabla \eta - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \frac{\partial z}{\partial t} \right),$$

donc l'équation d'énergie est donnée par

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{j} \cdot \mathbf{u} - L) - \operatorname{div}(\rho R \mathbf{u}) + \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \frac{\partial z}{\partial t} \right) = 0}. \quad (6.8)$$

6.1.3 Choix d'une énergie interne

Dans la suite on note respectivement ε_α , T_α et η_α , l'énergie interne, la température et l'entropie de la phase α . Puisque η_α est une différentielle totale exacte, on a les relations suivantes

$$T_\alpha = \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \eta_\alpha} \right)_{\rho_\alpha}, \quad P_\alpha = \rho_\alpha^2 \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \rho_\alpha} \right)_{\eta_\alpha}. \quad (6.9)$$

En utilisant la définition de la capacité calorifique à volume constant c_{v_α} de la phase α ,

$$c_{v_\alpha} = \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial T_\alpha} \right)_{\rho_\alpha},$$

et en utilisant la relation de Gibbs, on a

$$\begin{aligned} T_\alpha d\eta_\alpha &= d\varepsilon_\alpha - \frac{P_\alpha}{\rho_\alpha^2} d\rho_\alpha \\ &= c_{v_\alpha} dT_\alpha + \left[\left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \rho_\alpha} \right)_{T_\alpha} - \frac{P_\alpha}{\rho_\alpha^2} \right] d\rho_\alpha, \end{aligned}$$

donc

$$\left(\frac{\partial T_\alpha}{\partial \eta_\alpha} \right)_{\rho_\alpha} = \frac{T_\alpha}{c_{v_\alpha}} \quad (6.10)$$

Pour mettre les quations (6.7) et (6.8) sous une forme plus explicite, on suppose désormais que l'expression de ε est donnée par

$$\rho \varepsilon = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} z_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} + \mathcal{H}(z) + \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2 \quad (6.11)$$

où μ_0 est une constante positive et $\mathcal{H}$ est un potentiel à deux puits comme dans le cas d'un écoulement isotherme.

Les équations (6.7) et (6.8) ont été obtenues en faisant l'hypothèse principale d'existence d'une entropie η pour le mélange. Au vu de la forme de ε dans (6.11), l'énergie interne ε_α dépend de ρ_α et de η_α . Ainsi, il y a six inconnues pour cinq équations et il nous faut prescrire une relation de fermeture et exprimer la dépendance de η en fonction des données pour clore le système. Deux types de fermeture vont être envisagées, à savoir la fermeture isotherme ($T_1 = T_2$) et la fermeture isobare ($P_1 = P_2$). Dans le cas de la fermeture isotherme, on peut exhiber une entropie pour toute loi d'état $P_\alpha = P_\alpha(\rho_\alpha, \eta_\alpha)$ alors que dans le cas de la fermeture isobare, nous n'avons pas trouvé d'entropie pour des lois d'états autres que gaz parfaits. Ces entropies ont déjà été exhibées dans [5].

Fermeture isotherme

La fermeture isotherme consiste donc à supposer l'égalité des températures entre les deux phases

$$T_1 = T_2. \quad (6.12)$$

On définit maintenant η en fonction des données par

$$\boxed{\eta = \sum_{\alpha} y_{\alpha} \eta_{\alpha}}. \quad (6.13)$$

Proposition 6.1. (Consistance)

Supposons que ρ , $y = \rho_1 z_1 / \rho$, z et η soient donnés, alors sous les hypothèses $T_\alpha > 0$ et $c_{v_\alpha} > 0$ pour $\alpha = 1, 2$, le système d'équations

$$\begin{cases} T_1 \left(\rho \frac{y}{z}, \eta_1 \right) = T_2 \left(\rho \frac{1-y}{1-z}, \eta_2 \right), \\ y\eta_1 + (1-y)\eta_2 = \eta, \end{cases} \quad (6.14)$$

a une unique solution $(\eta_1, \eta_2) = (\eta_1, \eta_2)(\rho, y, z, \eta)$ et donc l'hypothèse (6.1) est justifiée.

Preuve

Pour $x \in [0, 1]$, définissons φ par

$$\varphi(x) = T_1 \left(\rho \frac{y}{z}, \frac{\eta}{y} x \right) - T_2 \left(\rho \frac{1-y}{1-z}, \frac{\eta}{1-y} (1-x) \right).$$

Sous réserve de régularité des lois d'états, la dérivée de φ est donnée par

$$\begin{aligned} \varphi'(x) &= \eta \left(\frac{1}{y} \frac{\partial T_1}{\partial \eta_1} + \frac{1}{1-y} \frac{\partial T_2}{\partial \eta_2} \right) \\ &= \eta \left(\frac{T_1}{y c_{v_1}} + \frac{T_1}{(1-y) c_{v_2}} \right) > 0, \end{aligned}$$

donc φ est strictement croissante sur $[0, 1]$ et en appliquant le troisième principe de la thermodynamique,

$$\lim_{\eta_\alpha \rightarrow 0} T_\alpha = 0,$$

on a $\varphi(0) = -T_2 < 0$ et $\varphi(1) = T_1 > 0$. Il existe donc un unique $x_0 \in [0, 1]$ annulant φ . En posant $\eta_1 = x_0 \eta / y$ et $\eta_2 = (1 - x_0) \eta / (1 - y)$, on a le résultat souhaité.

□

Une propriété remarquable de la fermeture isotherme est la possibilité de définir une température de mélange de manière analogue au cas classique de la thermodynamique. En effet, grâce à la relation (6.12) et à la définition (6.13) de l'entropie, en posant

$$c_v = \sum_{\alpha} y_{\alpha} c_{v_{\alpha}},$$

on a

$$\left(\frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial \eta} \right)_{\rho, y, z, \nabla z} = \frac{c_{v_{\alpha}}}{c_v}.$$

Définissons T de la manière suivante

$$T := \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \eta} \right)_{\rho, y, z, \nabla z}.$$

On peut donc calculer T par

$$T = \sum_{\alpha} y_{\alpha} \left(\frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial \eta} \right)_{\rho, y, z} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\alpha}}{\partial \eta_{\alpha}} \right)_{\rho_{\alpha}} = \sum_{\alpha} y_{\alpha} \frac{c_{v_{\alpha}}}{c_v} T_{\alpha} = T_1 = T_2.$$

Pour expliciter les équations (6.7) et (6.8) sous une forme particulière, il reste à calculer R . Par définition, on a

$$R = \left(\frac{\partial L}{\partial \rho} \right)_{\mathbf{j}, y, \eta, z, \nabla z} = -\frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 - \sum_{\alpha} y_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} - y \frac{P_1}{\rho_1} - (1-y) \frac{P_2}{\rho_2} - \rho \sum_{\alpha} y_{\alpha} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial \rho} T_{\alpha},$$

et grâce à l'hypothèse de fermeture isotherme et à la définition (6.13) de l'entropie η , on a

$$\sum_{\alpha} y_{\alpha} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial \rho} T_{\alpha} = T \sum_{\alpha} y_{\alpha} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial \rho} = 0,$$

donc

$$\rho R = -\frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 - \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} z_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} - \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha}.$$

En définissant la pression de mélange P comme

$$P = \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha} - \mathcal{H}(z) - \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2,$$

on en déduit les deux équations sur la quantité de mouvement et sur l'énergie

$$\begin{cases} \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) &= \operatorname{div} \left(\nabla z \otimes \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right), \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) &= \operatorname{div} \left(\nabla z \otimes \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \mathbf{u} \right) - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \frac{dz}{dt} \right). \end{cases} \quad (6.15)$$

Fermeture isobare

On suppose que les pressions des deux phases sont égales,

$$P_1 = P_2. \quad (6.16)$$

Comme dans le cas de la fermeture isotherme, il nous faut prescrire une entropie pour le système. Si dans le cas précédent il existait une forme d'entropie *naturelle*, il n'en est pas de même pour le cas de la fermeture isobare. Néanmoins, si on n'a pas réussi à exhiber une entropie des lois

d'états quelconques, cela a été possible dans le cas des gaz parfaits. En notant $r_\alpha = c_{v_\alpha}(\gamma_\alpha - 1)$ la constante des gaz parfaits, η est supposée être de la forme suivante

$$\eta = \sum_{\alpha} \frac{z_\alpha}{r_\alpha} \eta_\alpha. \quad (6.17)$$

Proposition 6.2. (*Consistance*) Supposons que ρ , $y = \rho_1 z_1 / \rho$, z et η soient donnés, alors sous les hypothèses $P_\alpha > 0$ et $\partial P_\alpha / \partial \eta_\alpha > 0$ pour $\alpha = 1, 2$, le système d'équations

$$\begin{cases} P_1 \left(\rho \frac{y}{z}, \eta_1 \right) = P_2 \left(\rho \frac{1-y}{1-z}, \eta_2 \right), \\ \frac{z}{r_1} \eta_1 + \frac{1-z}{r_2} \eta_2 = \eta, \end{cases} \quad (6.18)$$

a une unique solution $(\eta_1, \eta_2) = (\eta_1, \eta_2)(\rho, y, z, \eta)$ et donc l'hypothèse (6.1) est justifiée.

Preuve

Pour $x \in [0, 1]$ définissons φ par

$$\varphi(x) = P_1 \left(\rho \frac{y}{z}, \frac{\eta r_1}{z} x \right) - P_2 \left(\rho \frac{1-y}{1-z}, \frac{\eta r_2}{1-z} (1-x) \right).$$

Sous réserve de régularité des lois d'états, la dérivée de φ est donnée par

$$\varphi'(x) = \eta \left(\frac{r_1}{z} \frac{\partial P_1}{\partial \eta_1} + \frac{r_2}{1-z} \frac{\partial P_2}{\partial \eta_2} \right) > 0,$$

avec les hypothèses de la proposition. Ainsi, φ est strictement croissante sur $[0, 1]$ et de plus

$$\varphi(0) = -P_2, \quad \varphi(1) = P_1,$$

donc il existe un unique $x_0 \in [0, 1]$ annulant φ . En posant $\eta_1 = x_0 r_1 \eta / z$ et $\eta_2 = (1-x_0) r_2 \eta / (1-z)$, on a le résultat souhaité. $\square$

Comme dans le cas de fermeture isotherme, pour expliciter (6.7) et (6.8), il suffit de calculer R . Le calcul est analogue et montre que R est donnée par

$$R = -\frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 - \sum_{\alpha} y_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} - y \frac{P_1}{\rho_1} - (1-y) \frac{P_2}{\rho_2} - \rho \sum_{\alpha} y_{\alpha} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial \rho} T_{\alpha}.$$

En notant $P^f = P_1 = P_2$ la pression donnée par la relation de fermeture, on a

$$\rho_{\alpha} T_{\alpha} = \frac{P_{\alpha}}{r_{\alpha}},$$

et en utilisant la définition (6.17) de η , on en déduit que

$$0 = \sum_{\alpha} y_{\alpha} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial \rho} T_{\alpha}.$$

En définissant la pression de mélange comme

$$P = P^f - \mathcal{H}(z) - \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2,$$

les deux équations sur la quantité de mouvement et sur l'énergie sont similaires à celles obtenues dans le cas de la fermeture isotherme et sont données par

$$\begin{cases} \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) &= \operatorname{div} \left(\nabla z \otimes \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right), \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) &= \operatorname{div} \left(\nabla z \otimes \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \mathbf{u} \right) - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \frac{dz}{dt} \right). \end{cases} \quad (6.19)$$

6.1.4 Structure dissipative

Dans l'optique d'obtenir un système thermodynamiquement cohérent pour modéliser les changements de phase liquide-vapeur, il nous faut prescrire un flux de masse sur les densités partielles (et donc sur y) et il faut également prescrire une équation sur z . Pour ce faire, on va calculer la dissipation d'entropie et utiliser le second principe de la thermodynamique pour prescrire ces deux équations.

Cas de la fermeture isotherme

Le principe est de calculer $d(\rho\varepsilon)/dt$ à partir de la définition (6.11) de ε et à partir des équations (6.7) de (6.8) pour en déduire $\rho d\eta/dt$.

On a

$$\begin{aligned} \frac{d(\rho\varepsilon)}{dt} &= \frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial\rho} \frac{d\rho}{dt} + \frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial\eta} \frac{d\eta}{dt} + \frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial z} \frac{dz}{dt} + \frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial(\nabla z)} \frac{d(\nabla z)}{dt} \\ &= \rho \left(R + \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 \right) \operatorname{div}(\mathbf{u}) - \frac{\partial L}{\partial y} \frac{dy}{dt} - \frac{\partial L}{\partial\eta} \frac{d\eta}{dt} - \frac{\partial L}{\partial z} \frac{dz}{dt} - \frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \frac{d(\nabla z)}{dt}. \end{aligned}$$

Or les équations (6.7) et (6.8) montrent également que

$$\frac{d(\rho\varepsilon)}{dt} = \rho R \operatorname{div}(\mathbf{u}) - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \right) \frac{dz}{dt} - \frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \frac{d(\nabla z)}{dt} + \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 \operatorname{div}(\mathbf{u}),$$

donc on en déduit l'équation vérifiée par η

$$-\frac{\partial L}{\partial\eta} \frac{d\eta}{dt} = \left(\frac{\partial L}{\partial z} - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} \right) \right) \frac{dz}{dt} + \frac{\partial L}{\partial y} \frac{dy}{dt}. \quad (6.20)$$

En utilisant l'existence d'une température pour la fermeture isotherme, on a

$$-\frac{\partial L}{\partial\eta} = \rho \frac{\partial\varepsilon}{\partial\eta} = \rho T > 0.$$

On peut expliciter les termes $\partial L/\partial z$, $\partial L/\partial(\nabla z)$ et $\partial L/\partial y$ en termes de potentiels thermodynamiques à l'aide de la définition (6.11).

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial z} &= -\rho \frac{\partial}{\partial z} \left\{ y\varepsilon_1 \left(\rho \frac{y}{z}, \eta_1 \right) + (1-y)\varepsilon_2 \left(\rho \frac{1-y}{1-z}, \eta_2 \right) + \frac{1}{\rho} \mathcal{H}(z) + \frac{\mu_0}{2} \frac{|\nabla z|^2}{\rho} \right\} \\ &= P_1 - P_2 + \sum_{\alpha} y_{\alpha} T_{\alpha} \frac{\partial\eta_{\alpha}}{\partial z} - \frac{d\mathcal{H}}{dz}, \end{aligned}$$

et toujours en utilisant la définition (6.13), on en déduit que

$$0 = \frac{\partial\eta}{\partial z} = \sum_{\alpha} y_{\alpha} \frac{\partial\eta_{\alpha}}{\partial z},$$

donc que

$$\sum_{\alpha} y_{\alpha} T_{\alpha} \frac{\partial\eta_{\alpha}}{\partial z} = 0,$$

grâce à l'hypothèse de fermeture isotherme. Cette relation montre alors que

$$\frac{\partial L}{\partial z} = P_1 - P_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz}.$$

Il est également facile de voir que

$$\frac{\partial L}{\partial y} = \rho(g_2 - g_1),$$

où $g_\alpha = \varepsilon_\alpha + P_\alpha/\rho_\alpha - \eta_\alpha T_\alpha$ désigne l'enthalpie libre de la phase α et que

$$\frac{\partial L}{\partial(\nabla z)} = -\mu_0 \nabla z.$$

Une manière très simple de s'affranchir de la positivité de la production d'entropie est de choisir dy/dt et dz/dt de la manière suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{dy}{dt} = \lambda(g_2 - g_1), \\ \frac{dz}{dt} = \kappa \left(P_1 - P_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right), \end{array} \right. \quad (6.21)$$

où comme dans le cas d'écoulement isotherme, les paramètres λ et κ sont strictement positifs et peuvent être considérés comme des paramètres de relaxation. L'équation sur l'entropie s'écrit donc

$$\partial_t(\rho\eta) + \operatorname{div}(\rho\eta\mathbf{u}) = \frac{1}{T} \left\{ \kappa \left(P_1 - P_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right)^2 + \lambda(g_2 - g_1)^2 \right\}.$$

Cas de la fermeture isobare

Dans le cas de la fermeture isobare, le principe reste le même et la relation (6.20) reste inchangée. La différence vient dans le calcul des quantités $\partial L/\partial y$ et $\partial L/\partial z$. Pour le calcul de $\partial L/\partial y$, on a

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial y} &= -\rho \frac{\partial}{\partial y} \left\{ y\varepsilon_1 \left(\rho \frac{y}{z}, \eta_1 \right) + (1-y)\varepsilon_2 \left(\rho \frac{1-y}{1-z}, \eta_2 \right) \right\} \\ &= -\rho \left\{ \varepsilon_1 - \varepsilon_2 + \frac{P_1}{\rho_1} - \frac{P_2}{\rho_2} + \sum_{\alpha} y_{\alpha} T_{\alpha} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial y} \right\}. \end{aligned}$$

Or grâce à la définition (6.17) et l'hypothèse de gaz parfaits, on a $y_{\alpha} T_{\alpha} = P^f z_{\alpha}/r_{\alpha}$ et donc

$$0 = \sum_{\alpha} \frac{z_{\alpha}}{r_{\alpha}} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial y} = \frac{\rho}{P^f} \sum_{\alpha} y_{\alpha} T_{\alpha} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial y},$$

donc

$$\frac{\partial L}{\partial y} = \rho(h_2 - h_1),$$

où h_{α} désigne l'enthalpie de la phase α . Le calcul de $\partial L/\partial z$ est analogue,

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial z} &= -\rho \frac{\partial}{\partial z} \left\{ y\varepsilon_1 \left(\rho \frac{y}{z}, \eta_1 \right) + (1-y)\varepsilon_2 \left(\rho \frac{1-y}{1-z}, \eta_2 \right) + \frac{1}{\rho} \mathcal{H}(z) + \frac{\mu_0}{2} \frac{|\nabla z|^2}{\rho} \right\} \\ &= -\rho \left\{ -\frac{1}{\rho} (P_1 - P_2) + \sum_{\alpha} y_{\alpha} T_{\alpha} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{d\mathcal{H}}{dz} \right\}, \end{aligned}$$

et en utilisant la définition (6.17), on a

$$0 = \frac{\eta_1}{r_1} - \frac{\eta_2}{r_2} + \sum_{\alpha} \frac{z_{\alpha}}{r_{\alpha}} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial z},$$

donc

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha} y_{\alpha} T_{\alpha} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial z} &= \frac{P^f}{\rho} \left(\frac{\eta_2}{r_2} - \frac{\eta_1}{r_1} \right) \\ &= \frac{1}{\rho} (\rho_2 \eta_2 T_2 - \rho_1 \eta_1 T_1),\end{aligned}$$

qui combiné avec l'hypothèse (6.16) montre que $\partial L / \partial z$ est donné par

$$\frac{\partial L}{\partial z} = -\frac{d\mathcal{H}}{dz} + \rho_1 \eta_1 T_1 - \rho_2 \eta_2 T_2.$$

Le calcul de $\partial L / \partial(\nabla z)$ est indépendant de la relation de fermeture et reste par conséquent inchangé. Remarquons également que la quantité $-\partial L / \partial \eta$ est donnée par

$$-\frac{\partial L}{\partial \eta} = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} z_{\alpha} T_{\alpha} \frac{\partial \eta_{\alpha}}{\partial \eta} = \frac{P^f}{z_1 r_1 + z_2 r_2} > 0,$$

donc pour s'assurer de la positivité de la production d'entropie, il suffit de choisir dy/dt et dz/ddt de la manière suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{dy}{dt} = \lambda(h_2 - h_1), \\ \frac{dz}{dt} = \kappa \left(\rho_1 \eta_1 T_1 - \rho_2 \eta_2 T_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right), \end{array} \right. \quad (6.22)$$

où comme précédemment, les paramètres λ et κ sont positifs et peuvent être considérés comme des paramètres de relaxation. L'équation sur l'entropie s'écrit donc

$$\partial_t(\rho\eta) + \operatorname{div}(\rho\eta\mathbf{u}) = \frac{z_1 r_1 + z_2 r_2}{P^f} \left\{ \lambda(h_2 - h_1)^2 + \kappa \left(\rho_1 \eta_1 T_1 - \rho_2 \eta_2 T_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right)^2 \right\}.$$

Proposition 6.3. *Le système bifluide de changement de phase thermodynamiquement cohérent avec le second principe de la thermodynamique s'écrit*

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\rho_1 z_1) + \operatorname{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) = \mathcal{S}_y, \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \operatorname{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) = -\mathcal{S}_y, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = -\mu_0 \operatorname{div}(\nabla z \otimes \nabla z), \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = -\mu_0 \operatorname{div}(\nabla z \otimes \nabla z \mathbf{u}) + \mu_0 \operatorname{div} \left(\nabla z \frac{dz}{dt} \right), \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z = \mathcal{S}_z, \end{array} \right. \quad (6.23)$$

où la pression P est définie par

$$P = P^f - \mathcal{H}(z) - \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2,$$

et P^f , $\mathcal{S}_y$ et $\mathcal{S}_z$ sont donnés dans le cas de la fermeture isotherme par

$$P^f = \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha}, \quad \mathcal{S}_y = \lambda(g_2 - g_1), \quad \mathcal{S}_z = \kappa \left(P_1 - P_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right), \quad T_1 = T_2$$

et dans le cas de la fermeture isobare par

$$P^f = P_1 = P_2, \quad \mathcal{S}_y = \lambda(h_2 - h_1), \quad \mathcal{S}_z = \kappa \left(\rho_1 \eta_1 T_1 - \rho_2 \eta_2 T_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right).$$

Remarque 6.1. *Le terme en $d\mathcal{H}/dz$ intervenant dans l'équation d'advection sur z peut être interprété comme un terme de retour aux phases pures.*

On a ainsi obtenu deux systèmes bifluïdes de changements de phase à l'aide de deux relations de fermetures différentes. La différence majeure entre ces deux systèmes vient des termes sources sur les densités partielles et sur z . Dans le cas de la fermeture isotherme, on peut donner une interprétation de ces termes puisqu'ils correspondent à un déséquilibre mécanique et à un déséquilibre thermodynamique mais dans le cas de la fermeture isobare, ils ne correspondent pas à des déséquilibres physiques connus. C'est pourquoi on s'intéressera dans la suite aux propriétés du système (6.23) et c'est celui-ci qui servira dans les simulations numériques.

6.2 Propriétés et retour à l'équilibre

On suppose désormais que $\mathcal{H} \equiv 0$ et que $\mu_0 = 0$. Pour des solutions régulières, le système (6.23) s'écrit donc

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \partial_t(\rho_1 z_1) + \operatorname{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) & = & \mathcal{S}_y, \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \operatorname{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) & = & -\mathcal{S}_y, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) & = & 0, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) & = & 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z & = & \mathcal{S}_z. \end{array} \right. \quad (6.24)$$

On s'intéressera également à la seule partie convective de (6.24) [5], soit

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \partial_t(\rho_1 z_1) + \operatorname{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) & = & 0, \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \operatorname{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) & = & 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) & = & 0, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) & = & 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z & = & 0. \end{array} \right. \quad (6.25)$$

6.2.1 Hyperbolicité du système homogène

Proposition 6.4. *Dans le cas de la fermeture isotherme ou de la fermeture isobare, la différentielle de la pression peut être mise sous la forme*

$$dP = \sum_{\alpha} \frac{1}{\xi} \left(\frac{1}{2} u^2 - \delta_{\alpha} \right) dm_{\alpha} - \frac{u}{\xi} d(\rho u) + \frac{1}{\xi} d(\rho e) + M dz,$$

où les coefficients ξ , δ_{α} et M sont définis dans le cas de la fermeture isotherme par

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\xi} = \frac{1}{\rho c_v} \sum_{\alpha} z_{\alpha} \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T_{\alpha}} \right)_{\rho_{\alpha}}, \\ \rho c_v = \sum_{\alpha} m_{\alpha} c_{v_{\alpha}}, \\ \delta_{\alpha} = -\xi \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial \rho_{\alpha}} \right)_{T_{\alpha}} + h_{\alpha} - \frac{T_{\alpha}}{\rho_{\alpha}} \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T_{\alpha}} \right)_{\rho_{\alpha}}, \\ M = \frac{\partial P}{\partial z}, \end{array} \right. \quad (6.26)$$

et dans le cas de la fermeture isobare par

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_\alpha = \left(\frac{\partial(\rho_\alpha \varepsilon_\alpha)}{\partial P_\alpha} \right)_{\rho_\alpha}, \\ \xi = \sum_\alpha z_\alpha \xi_\alpha, \\ \delta_\alpha = \left(\frac{\partial(\rho_\alpha \varepsilon_\alpha)}{\partial \rho_\alpha} \right)_{P_\alpha}, \\ M = \frac{\partial P}{\partial z}. \end{array} \right. \quad (6.27)$$

On note désormais $\beta_\alpha = (u^2/2 - \delta_\alpha)/\xi$ et $H = e + P/\rho$ l'enthalpie augmenté de l'énergie cinétique et considérons des solutions régulières $\mathbf{V} = (\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, \rho u, \rho e, z)^T$ de (6.25). Le système (6.25) peut alors être remis sous la forme équivalente

$$\partial_t \mathbf{V} + A(\mathbf{V}) \partial_x \mathbf{V} = 0,$$

où la matrice A est définie par

$$A(\mathbf{V}) = \begin{pmatrix} uy_2 & -uy_1 & y_1 & 0 & 0 \\ -uy_2 & uy_1 & y_2 & 0 & 0 \\ (\beta_1 - u^2) & (\beta_2 - u^2) & \left(2 - \frac{1}{\xi}\right)u & \frac{1}{\xi} & M \\ u(\beta_1 - H) & u(\beta_2 - H) & \left(H - \frac{u^2}{\xi}\right) & u\left(1 + \frac{1}{\xi}\right) & uM \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}.$$

Les valeurs propres de A sont

$$\lambda_1(\mathbf{V}) = u - c, \quad \lambda_2(\mathbf{V}) = \lambda_3(\mathbf{V}) = \lambda_4(\mathbf{V}) = u, \quad \lambda_5(\mathbf{V}) = u + c,$$

où c est la vitesse du son définie par

$$\boxed{\rho c^2 = \sum_\alpha m_\alpha \left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial \rho_\alpha} \right)_{T_\alpha} + \frac{T}{\rho c_v} \left(\sum_\alpha z_\alpha \left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial T_\alpha} \right)_{\rho_\alpha} \right)^2}, \quad (6.28)$$

dans le cas de la fermeture isotherme et

$$\boxed{\rho c^2 = \frac{1}{\xi} \sum_\alpha m_\alpha \xi_\alpha c_\alpha^2}, \quad (6.29)$$

dans le cas de la fermeture isobare, c_α désignant la vitesse du son pour la phase α pure.

Les vecteurs propres orthonormés l_k à gauche et r_k à droite associés à la valeur propre λ_k sont définis par

$$l_1(\mathbf{V}) = \frac{1}{2c^2} \begin{bmatrix} \beta_1 + uc \\ \beta_2 + uc \\ -c - \frac{u}{\xi} \\ \frac{1}{\xi} \\ M \end{bmatrix}, \quad l_2(\mathbf{V}) = \frac{1}{\xi c^2} \begin{bmatrix} y_2 \left(\delta_1 - \frac{u^2}{2} \right) \\ \xi c^2 + y_2 \left(\delta_2 - \frac{u^2}{2} \right) \\ uy_2 \\ -y_2 \\ -y_2 M \end{bmatrix},$$

$$\begin{aligned}
l_3(\mathbf{V}) &= \frac{1}{\xi c^2} \begin{bmatrix} \xi c^2 + y_1 \left(\delta_1 - \frac{u^2}{2} \right) \\ y_1 \left(\delta_2 - \frac{u^2}{2} \right) \\ uy_1 \\ -y_1 \\ -y_1 M \end{bmatrix}, \quad l_4(\mathbf{V}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad l_5(\mathbf{V}) = \frac{1}{2c^2} \begin{bmatrix} \beta_1 - uc \\ \beta_2 - uc \\ c - \frac{u}{\xi} \\ \frac{1}{\xi} \\ M \end{bmatrix}, \quad (6.30) \\
r_1(\mathbf{V}) &= \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ u - c \\ H - uc \\ 0 \end{bmatrix}, \quad r_2(\mathbf{V}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ u \\ \frac{u^2}{2} + \delta_2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad r_3(\mathbf{V}) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ u \\ \frac{u^2}{2} + \delta_1 \\ 0 \end{bmatrix}, \\
r_4(\mathbf{V}) &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -M\xi \\ 1 \end{bmatrix}, \quad r_5(\mathbf{V}) = \begin{bmatrix} y_1 & y_2 \\ u + c \\ H + uc \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (6.31)
\end{aligned}$$

Ceci montre que le système (6.25) est hyperbolique quelle que soit la relation de fermeture (isotherme ou isobare).

Proposition 6.5. *Les définitions de la vitesse du son (6.28) et (6.29) dans le cas de la fermeture isotherme et isobare peuvent être mises sous la forme générale en utilisant les coefficients ξ et δ_α*

$$\xi c^2 = h - \sum_{\alpha} y_{\alpha} \delta_{\alpha}, \quad (6.32)$$

où $h = \varepsilon + P/\rho$ désigne l'enthalpie de mélange.

Preuve

Dans le cas de la fermeture isotherme, la vitesse du son c est définie par

$$\rho c^2 = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial \rho_{\alpha}} \right)_{T_{\alpha}} + \frac{T}{\rho c_v} \left(\sum_{\alpha} z_{\alpha} \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T_{\alpha}} \right)_{\rho_{\alpha}} \right)^2.$$

La définition des coefficients δ_{α} dans (6.26) montre que

$$\sum_{\alpha} m_{\alpha} \delta_{\alpha} = -\xi \left(\sum_{\alpha} m_{\alpha} \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial \rho_{\alpha}} \right)_{T_{\alpha}} \right) + \rho h - T \left(\sum_{\alpha} z_{\alpha} \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T_{\alpha}} \right)_{\rho_{\alpha}} \right),$$

donc toujours en utilisant la définition de ξ dans (6.26), on en déduit

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha} y_{\alpha} \delta_{\alpha} - h &= -\frac{\xi}{\rho} \left(\sum_{\alpha} m_{\alpha} \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial \rho_{\alpha}} \right)_{T_{\alpha}} \right) - \frac{T}{\rho} \left(\sum_{\alpha} z_{\alpha} \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T_{\alpha}} \right)_{\rho_{\alpha}} \right) \\
&= -\frac{\xi}{\rho} \left\{ \sum_{\alpha} m_{\alpha} \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial \rho_{\alpha}} \right)_{T_{\alpha}} + \frac{T}{\rho c_v} \left(\sum_{\alpha} z_{\alpha} \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T_{\alpha}} \right)_{\rho_{\alpha}} \right)^2 \right\} \\
&= -\xi c^2.
\end{aligned}$$

Dans le cas de la fermeture isobare, il suffit juste de remarquer que

$$\xi_{\alpha} c_{\alpha}^2 = h_{\alpha} - \delta_{\alpha},$$

pour en déduire (6.32).

□

6.2.2 Système limite équilibre de pression (MTH-équilibre)

On étudie désormais le système bifluide de changement de phase avec fermeture isotherme. Dans ce modèle, les paramètres λ^{-1} et κ^{-1} représentent un temps caractéristique de retour à l'équilibre thermodynamique et mécanique. Comme dans la section 5.3.2, on suppose que le retour à l'équilibre mécanique est plus rapide que le retour à l'équilibre thermodynamique. On s'intéresse donc à l'évolution formelle du système (6.23) pour $\lambda \rightarrow +\infty$ avec λ fini. Ce système sera référencé dans la suite comme le système MTH-équilibre pour équilibre mécanique et thermique.

L'hypothèse $\kappa = +\infty$ est formellement équivalente à trouver $z \in [0, 1]$ solution de

$$P_1\left(\frac{m_1}{z}, T\right) = P_2\left(\frac{m_2}{1-z}, T\right), \quad (6.33)$$

pour des valeurs de m_1 et m_2 fixées.

Proposition 6.6. *On suppose que les lois d'états $(\rho_\alpha, T_\alpha) \mapsto P_\alpha(\rho_\alpha, T_\alpha)$ sont des fonctions régulières (au moins de classe $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+)$), que*

$$\left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial \rho_\alpha}\right)_{T_\alpha} > 0,$$

et que

$$\lim_{\rho_\alpha \rightarrow +\infty} P_\alpha(\rho_\alpha, T_\alpha) = +\infty,$$

alors l'équation (6.33) admet une unique solution $\tilde{z} = \tilde{z}(m_1, m_2, T) \in [0, 1]$. De plus

- $m_1 \mapsto \tilde{z}(m_1, m_2, T)$ est croissante sur $\mathbb{R}^+$,
- $m_2 \mapsto \tilde{z}(m_1, m_2, T)$ est décroissante sur $\mathbb{R}^+$,
- $(m_1, m_2, T) \mapsto \tilde{z}(m_1, m_2, T)$ est aussi régulière que les P_α .

Preuve

La preuve est identique à celle donnée dans la proposition 5.2 puisqu'on a fait l'hypothèse de fermeture isotherme. □

Le système MTH-équilibre s'écrit donc en utilisant $\tilde{z}$ de la façon suivante

$$\begin{cases} \partial_t m_1 + \operatorname{div}(m_1 \mathbf{u}) = \lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t m_2 + \operatorname{div}(m_2 \mathbf{u}) = -\lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = 0, \end{cases} \quad (6.34)$$

où

$$P = \sum_{\alpha} \tilde{z}_{\alpha} P_{\alpha} = P_1 = P_2.$$

On s'intéresse maintenant à l'hyperbolicité de ce système. En notant

$$\zeta_{\alpha} = \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial \rho_{\alpha}}\right)_{T_{\alpha}}, \quad \text{et} \quad \mu_{\alpha} = \left(\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T_{\alpha}}\right)_{\rho_{\alpha}},$$

on peut calculer les dérivées partielles de $\tilde{z}$ et celles-ci sont données par

$$\frac{\partial \tilde{z}}{\partial m_1} = \frac{\zeta_1 / \tilde{z}_1}{\sum_{\alpha} \zeta_{\alpha} m_{\alpha} / (\tilde{z}_{\alpha})^2}, \quad \frac{\partial \tilde{z}}{\partial m_2} = -\frac{\zeta_2 / \tilde{z}_2}{\sum_{\alpha} \zeta_{\alpha} m_{\alpha} / (\tilde{z}_{\alpha})^2}, \quad \frac{\partial \tilde{z}}{\partial T} = \frac{\mu_1 - \mu_2}{\sum_{\alpha} \zeta_{\alpha} m_{\alpha} / (\tilde{z}_{\alpha})^2}.$$

On note désormais $\mathcal{S}_y^1 = \lambda(g_2 - g_1)$ le terme source portant sur m_1 et $\mathcal{S}_y^2 = -\mathcal{S}_y^1$ le terme source portant sur m_2 et on utilise les variables primitives $\mathbf{W} = (m_1, m_2, u, P)^T$ pour étudier l'hyperbolicité. En utilisant les équations sur les densités partielles dans (6.34), il est facile de voir que l'équation sur m_α peut également s'écrire

$$\frac{dm_\alpha}{dt} = -m_\alpha \partial_x u + \mathcal{S}_y^\alpha.$$

De même, on peut transformer les équations du système (6.34) pour obtenir celles sur la vitesse

$$\frac{du}{dt} + \frac{1}{\rho} \partial_x P = 0$$

et celle sur l'énergie interne

$$\frac{d(\rho\varepsilon)}{dt} = -(\rho\varepsilon + P)\partial_x u. \quad (6.35)$$

L'équation sur la pression est obtenue en dérivant $P = P(m_1, m_2, T)$ et en utilisant $P_1 = P_2$

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\sum_\alpha \tilde{z}_\alpha P_\alpha \left(\frac{m_\alpha}{\tilde{z}_\alpha}, T \right) \right) \\ &= - \sum_\alpha m_\alpha \zeta_\alpha \partial_x u + \sum_\alpha \zeta_\alpha \mathcal{S}_y^\alpha - \sum_\alpha \frac{m_\alpha \zeta_\alpha}{\tilde{z}_\alpha} \frac{d\tilde{z}_\alpha}{dt} + \sum_\alpha \tilde{z}_\alpha \mu_\alpha \frac{dT}{dt}. \end{aligned}$$

Or $\tilde{z}$ vérifie l'équation suivante

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{z}}{dt} &= \sum_\alpha \frac{\partial \tilde{z}}{\partial m_\alpha} \frac{dm_\alpha}{dt} + \frac{\partial \tilde{z}}{\partial T} \frac{dT}{dt} \\ &= - \left(\sum_\alpha m_\alpha \frac{\partial \tilde{z}}{\partial m_\alpha} \right) \partial_x u + \sum_\alpha \mathcal{S}_y^\alpha \frac{\partial \tilde{z}}{\partial m_\alpha} + \frac{\partial \tilde{z}}{\partial T} \frac{dT}{dt} \\ &= - \left(\frac{m_1 \zeta_1 / \tilde{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \tilde{z}_2}{\sum_\alpha m_\alpha \zeta_\alpha / (\tilde{z}_\alpha)^2} \right) \partial_x u + \sum_\alpha \mathcal{S}_y^\alpha \frac{\partial \tilde{z}}{\partial m_\alpha} + \frac{\partial \tilde{z}}{\partial T} \frac{dT}{dt}, \end{aligned}$$

donc l'équation sur P s'écrit

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} &= - \sum_\alpha m_\alpha \zeta_\alpha \partial_x u + \sum_\alpha \zeta_\alpha \mathcal{S}_y^\alpha + \frac{\left(m_1 \zeta_1 / \tilde{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \tilde{z}_2 \right)^2}{\sum_\alpha m_\alpha \zeta_\alpha / (\tilde{z}_\alpha)^2} \partial_x u \\ &\quad - \left(\frac{m_1 \zeta_1}{\tilde{z}_1} - \frac{m_2 \zeta_2}{\tilde{z}_2} \right) \left(\sum_\alpha \mathcal{S}_y^\alpha \frac{\partial \tilde{z}}{\partial m_\alpha} \right) + \left(\sum_\alpha \tilde{z}_\alpha \mu_\alpha - \left(\frac{m_1 \zeta_1}{\tilde{z}_1} - \frac{m_2 \zeta_2}{\tilde{z}_2} \right) \frac{\partial \tilde{z}}{\partial T} \right) \frac{dT}{dt}. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Pour trouver l'équation vérifiée par la température, on utilise l'énergie interne

$$\begin{aligned} \frac{d(\rho\varepsilon)}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\sum_\alpha m_\alpha \varepsilon_\alpha \left(\frac{m_\alpha}{\tilde{z}_\alpha}, T \right) \right) \\ &= - \sum_\alpha m_\alpha \varepsilon_\alpha \partial_x u + \sum_\alpha \varepsilon_\alpha \mathcal{S}_y^\alpha - \sum_\alpha \tilde{z}_\alpha \rho_\alpha^2 \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \rho_\alpha} \right)_{T_\alpha} \partial_x u + \sum_\alpha \rho_\alpha \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \rho_\alpha} \right)_{T_\alpha} \mathcal{S}_y^\alpha \\ &\quad - \sum_\alpha \rho_\alpha^2 \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \rho_\alpha} \right)_{T_\alpha} \frac{d\tilde{z}_\alpha}{dt} + \sum_\alpha m_\alpha \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial T_\alpha} \right)_{\rho_\alpha} \frac{dT}{dt}. \end{aligned}$$

En remarquant que

$$\rho_\alpha^2 \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \rho_\alpha} \right)_{T_\alpha} = P_\alpha - T_\alpha \left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial T_\alpha} \right)_{\rho_\alpha} = P - T\mu_\alpha,$$

et en posant

$$\rho c_v = \sum_\alpha m_\alpha \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial T_\alpha} \right)_{\rho_\alpha} = \sum_\alpha m_\alpha c_{v_\alpha},$$

on en déduit

$$\begin{aligned} \frac{d(\rho\varepsilon)}{dt} &= -(\rho\varepsilon + P)\partial_x u + \rho c_v \frac{dT}{dt} + T \sum_\alpha \check{z}_\alpha \mu_\alpha \partial_x u - \sum_\alpha (P - T\mu_\alpha) \frac{d\check{z}_\alpha}{dt} \\ &\quad + \sum_\alpha \left(\varepsilon_\alpha + \rho_\alpha \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \rho_\alpha} \right)_{T_\alpha} \right) \mathcal{S}_y^\alpha, \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} - \sum_\alpha (P - T\mu_\alpha) \frac{d\check{z}_\alpha}{dt} &= T(\mu_1 - \mu_2) \frac{d\check{z}}{dt} \\ &= -T(\mu_1 - \mu_2) \left(\frac{m_1 \zeta_1 / \check{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \check{z}_2}{\sum_\alpha m_\alpha \zeta_\alpha / (\check{z}_\alpha)^2} \right) \partial_x u \\ &\quad + T(\mu_1 - \mu_2) \sum_\alpha \mathcal{S}_y^\alpha \frac{\partial \check{z}}{\partial m_\alpha} + \frac{T(\mu_1 - \mu_2)^2}{\sum_\alpha \zeta_\alpha m_\alpha / (\check{z}_\alpha)^2} \frac{dT}{dt}, \end{aligned}$$

donc l'équation sur la température peut s'écrire

$$\begin{aligned} \left[\rho c_v + \frac{T(\mu_1 - \mu_2)^2}{\sum_\alpha \zeta_\alpha m_\alpha / (\check{z}_\alpha)^2} \right] \frac{dT}{dt} &= \left\{ -T \sum_\alpha \check{z}_\alpha \mu_\alpha + T(\mu_1 - \mu_2) \left(\frac{m_1 \zeta_1 / \check{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \check{z}_2}{\sum_\alpha m_\alpha \zeta_\alpha / (\check{z}_\alpha)^2} \right) \right\} \partial_x u \\ &\quad - T(\mu_1 - \mu_2) \sum_\alpha \mathcal{S}_y^\alpha \frac{\partial \check{z}}{\partial m_\alpha} - \sum_\alpha \left(\varepsilon_\alpha + \rho_\alpha \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \rho_\alpha} \right)_{T_\alpha} \right) \mathcal{S}_y^\alpha. \end{aligned} \tag{6.37}$$

On note désormais

$$\mathcal{A} = \rho c_v + \frac{T(\mu_1 - \mu_2)^2}{\sum_\alpha \zeta_\alpha m_\alpha / (\check{z}_\alpha)^2} > 0,$$

et

$$\mathcal{R} = -T(\mu_1 - \mu_2) \sum_\alpha \mathcal{S}_y^\alpha \frac{\partial \check{z}}{\partial m_\alpha} - \sum_\alpha \left(\varepsilon_\alpha + \rho_\alpha \left(\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \rho_\alpha} \right)_{T_\alpha} \right) \mathcal{S}_y^\alpha,$$

qui ne contient que des termes d'ordre zéro.

En utilisant les relations (6.36) et (6.37), on déduit l'équation sur la pression

$$\begin{aligned}
\frac{dP}{dt} &= - \sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} \partial_x u + \sum_{\alpha} \zeta_{\alpha} \mathcal{S}_y^{\alpha} + \frac{\left(m_1 \zeta_1 / \check{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \check{z}_2\right)^2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} / (\check{z}_{\alpha})^2} \partial_x u - \left(\frac{m_1 \zeta_1}{\check{z}_1} - \frac{m_2 \zeta_2}{\check{z}_2}\right) \left(\sum_{\alpha} \mathcal{S}_y^{\alpha} \frac{\partial \check{z}}{\partial m_{\alpha}}\right) \\
&\quad + \frac{1}{\mathcal{A}} \left\{ \sum_{\alpha} \check{z}_{\alpha} \mu_{\alpha} - \left(\frac{m_1 \zeta_1}{\check{z}_1} - \frac{m_2 \zeta_2}{\check{z}_2}\right) \frac{\mu_1 - \mu_2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} (\check{z}_{\alpha})^2} \right\} \\
&\quad \left\{ \left(-T \sum_{\alpha} \check{z}_{\alpha} \mu_{\alpha} + T(\mu_1 - \mu_2) \left(\frac{m_1 \zeta_1 / \check{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \check{z}_2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} / (\check{z}_{\alpha})^2} \right) \right) \partial_x u + \mathcal{R} \right\} \\
&= - \left\{ \sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} - \frac{\left(m_1 \zeta_1 / \check{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \check{z}_2\right)^2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} / (\check{z}_{\alpha})^2} + \frac{T}{\mathcal{A}} \left(\sum_{\alpha} \check{z}_{\alpha} \mu_{\alpha}\right)^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{2T}{\mathcal{A}} (\mu_1 - \mu_2) \left(\sum_{\alpha} \check{z}_{\alpha} \mu_{\alpha}\right) \left(\frac{m_1 \zeta_1 / \check{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \check{z}_2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} / (\check{z}_{\alpha})^2} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{T}{\mathcal{A}} (\mu_1 - \mu_2)^2 \left(\frac{m_1 \zeta_1 / \check{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \check{z}_2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} / (\check{z}_{\alpha})^2} \right)^2 \right\} \partial_x u + \mathcal{R}',
\end{aligned}$$

où $\mathcal{R}'$ ne contient que des termes d'ordre zéro.

En remarquant que

$$\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} - \frac{\left(m_1 \zeta_1 / \check{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \check{z}_2\right)^2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} / (\check{z}_{\alpha})^2} = \frac{m_1 m_2 \zeta_1 \zeta_2 / (\check{z}_1 \check{z}_2)^2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} / (\check{z}_{\alpha})^2},$$

on en déduit que

$$\frac{dP}{dt} = - \left\{ \frac{m_1 m_2 \zeta_1 \zeta_2 / (\check{z}_1 \check{z}_2)^2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} / (\check{z}_{\alpha})^2} + \frac{T}{\mathcal{A}} \left[\sum_{\alpha} \check{z}_{\alpha} \mu_{\alpha} - (\mu_1 - \mu_2) \left(\frac{m_1 \zeta_1 / \check{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \check{z}_2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} / (\check{z}_{\alpha})^2} \right) \right]^2 \right\} \partial_x u + \mathcal{R}'.$$

Par conséquent, en notant

$$\rho(c^*)^2 = \frac{m_1 m_2 \zeta_1 \zeta_2 / (\check{z}_1 \check{z}_2)^2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} / (\check{z}_{\alpha})^2} + \frac{T}{\mathcal{A}} \left[\sum_{\alpha} \check{z}_{\alpha} \mu_{\alpha} - (\mu_1 - \mu_2) \left(\frac{m_1 \zeta_1 / \check{z}_1 - m_2 \zeta_2 / \check{z}_2}{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \zeta_{\alpha} / (\check{z}_{\alpha})^2} \right) \right]^2,$$

le système (6.34) peut être mis sous la forme équivalent pour des solutions régulières

$$\partial_t \mathbf{W} + A(\mathbf{W}) \partial_x \mathbf{W} = \mathcal{S},$$

où la matrice A est définie par

$$A(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} u & 0 & m_1 & 0 \\ 0 & u & m_2 & 0 \\ 0 & 0 & u & 1/\rho \\ 0 & 0 & \rho(c^*)^2 & u \end{pmatrix}.$$

La matrice A possède les quatres valeurs propres suivantes

$$\lambda_1 = u - c^*, \quad \lambda_2 = \lambda_3 = u, \quad \lambda_4 = u + c^*,$$

et l'espace propre associé à la valeur propre double u est bien de dimension 2. On en déduit que le système (6.34) est hyperbolique.

Remarque 6.2. *Le système (6.34) est hyperbolique mais n'est pas strictement hyperbolique comme dans le cas du système M-équilibre (5.25).*

6.2.3 Système limite équilibre mécanique et thermodynamique (MTT-équilibre)

On considère le modèle bifluide de changement de phase avec la fermeture isotherme. La condition $\kappa = +\infty$ et $\lambda = +\infty$ revient formellement à imposer l'équilibre mécanique ($P_1 = P_2$) et thermodynamique ($g_1 = g_2$) donc à déterminer $m_1 \geq 0$, $m_2 \geq 0$ et $z \in [0, 1]$ vérifiant

$$\begin{cases} P_1\left(\frac{m_1}{z}, T\right) = P_2\left(\frac{m_2}{1-z}, T\right), \\ g_1\left(\frac{m_1}{z}, T\right) = g_2\left(\frac{m_2}{1-z}, T\right), \\ \rho = m_1 + m_2, \end{cases} \quad (6.38)$$

où $\rho > 0$ est fixé.

On adopte la même approche que dans le cas du système MT-équilibre. Trouver $m_\alpha \geq 0$ et $z \in [0, 1]$ solution de (6.38) revient à trouver $\rho_\alpha > 0$ et $z \in [0, 1]$ solution de

$$\begin{cases} P_1(\rho_1, T) = P_2(\rho_2, T), \\ g_1(\rho_1, T) = g_2(\rho_2, T), \\ \rho = z\rho_1 + (1-z)\rho_2. \end{cases} \quad (6.39)$$

On a alors vu une condition suffisante de résolubilité de (6.39). En supposant qu'il existe un unique $\rho^* \in (0, +\infty)$ solution de

$$F_1(\rho^*, T) = F_2(\rho^*, T),$$

où $F_\alpha = \rho_\alpha f_\alpha$ désigne l'énergie libre volumique, alors le système

$$\begin{cases} P_1(\rho_1, T) = P_2(\rho_2, T), \\ g_1(\rho_1, T) = g_2(\rho_2, T), \end{cases} \quad (6.40)$$

admet une unique solution $(\rho_1^*, \rho_2^*) = (\rho_1^*(T), \rho_2^*(T))$. Dans ce cas, en supposant $\rho_1^* < \rho_2^*$, z^* est simplement donné par

$$z^* = \begin{cases} 1 & \text{si } \rho < \rho_1^*, \\ \frac{\rho - \rho_2^*}{\rho_1^* - \rho_2^*} & \text{si } \rho_1^* < \rho < \rho_2^*, \\ 0 & \text{si } \rho_2^* < \rho. \end{cases}$$

Le système MTT-équilibre ainsi obtenu s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = 0, \end{cases} \quad (6.41)$$

avec

$$P = P_1 = P_2 = P(\rho, T).$$

On a montré que le système MT-équilibre est faiblement hyperbolique (les valeurs propres sont réelles mais la jacobienne du flux n'est pas diagonalisable) mais ici, on ne sait pas dire si le système (6.41) est ou n'est pas hyperbolique.

6.3 Schémas numériques

Comme dans le modèle isotherme de changement de phase, on utilise une méthode de splitting en temps pour discrétiser le système (6.24) qui consiste à intégrer numériquement pendant un demi pas de temps le système homogène (6.25) à l'aide d'une méthode quasi-conservative basée sur un schéma de Roe [5] puis à projeter la solution approchée ainsi obtenue sur la variété MT-équilibre.

6.3.1 Traitement numérique de la partie convective

Comme dans la section 5.4.2, on va décrire une méthode quasi-conservative basée sur un schéma de Roe pour discrétiser le système homogène (6.25). Pour cela on reprend le calcul des vecteurs propres à droite et à gauche effectué dans la section 6.2.1. En notant

$$\Delta \mathbf{V} = (\Delta(\rho_1 z_1), \Delta(\rho_2 z_2), \Delta(\rho u), \Delta(\rho e), \Delta z)$$

la différence de $\mathbf{V} = (\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, \rho u, \rho e, z)$ entre les deux états gauche (indice L) et droit (indice R), la projection de $\Delta \mathbf{V}$ dans la base des vecteurs propres à droite $r_k(\mathbf{V})$ s'écrit

$$\Delta \mathbf{V} = \sum_k \mu_k(\mathbf{V}) r_k(\mathbf{V}),$$

où les coefficients $\mu_k(\mathbf{V}) = \langle l_k(\mathbf{V}), \Delta \mathbf{V} \rangle$ associés aux valeurs propres $\lambda_1 = u - c$, $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = u$ et $\lambda_5 = u + c$ sont donnés par

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \frac{1}{2\xi c^2} \left(-\sum_{\alpha} \delta_{\alpha} \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) + \left(\frac{u^2}{2} + \xi u c \right) \Delta \rho - (u + c\xi) \Delta(\rho u) + \Delta(\rho e) + M\xi \Delta z \right), \\ \mu_2 &= \frac{1}{\xi c^2} \left(-y_2 \frac{u^2}{2} \Delta \rho + y_2 \sum_{\alpha} \delta_{\alpha} \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) + \xi c^2 \Delta(\rho_2 z_2) + y_2 u \Delta(\rho u) - y_2 \Delta(\rho e) - y_2 M\xi \Delta z \right), \\ \mu_3 &= \frac{1}{\xi c^2} \left(-y_1 \frac{u^2}{2} \Delta \rho + y_1 \sum_{\alpha} \delta_{\alpha} \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) + \xi c^2 \Delta(\rho_1 z_1) + y_1 u \Delta(\rho u) - y_1 \Delta(\rho e) - y_1 M\xi \Delta z \right), \\ \mu_4 &= \Delta z, \\ \mu_5 &= \frac{1}{2\xi c^2} \left(-\sum_{\alpha} \delta_{\alpha} \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) + \left(\frac{u^2}{2} - \xi u c \right) \Delta \rho - (u - c\xi) \Delta(\rho u) + \Delta(\rho e) + M\xi \Delta z \right). \end{aligned}$$

Pour décrire complètement la méthode basée sur un solveur de Roe, il faut trouver un état moyen $\mathbf{V}^*$ vérifiant l'égalité

$$\begin{bmatrix} \rho_1 z_1 u \\ \rho_2 z_2 u \\ \rho u^2 + P \\ (\rho e + P)u \\ zu \end{bmatrix}_R - \begin{bmatrix} \rho_1 z_1 u \\ \rho_2 z_2 u \\ \rho u^2 + P \\ (\rho e + P)u \\ zu \end{bmatrix}_L = \Pi \left[A(\mathbf{V}^*)(\mathbf{V}_R - \mathbf{V}_L) \right], \quad (6.42)$$

où Π est l'opérateur de projection sur les quatre premières coordonnées de $\mathbf{V}$.

Proposition 6.7. [5] *En supposant qu'il existe des états moyens δ_1^* , δ_2^* et M^* vérifiant la relation de saut discrète*

$$\Delta(\rho\varepsilon) = \xi^* \Delta P - \xi^* M^* \Delta z + \sum_{\alpha} \delta_{\alpha}^* \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}), \quad (6.43)$$

alors un état $\mathbf{V}^*$ vérifiant (6.42) peut être choisi de la façon suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} y_{\alpha}^* = \overline{y_{\alpha}}, \\ z^* = \overline{z}, \\ u^* = \overline{u}, \\ H^* = \overline{H}, \\ \xi^* = \overline{\xi}. \end{array} \right.$$

Preuve

L'équation (6.42) montre que l'état moyen $\mathbf{V}^*$ doit vérifier les relations suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta(\rho_1 z_1 u) = u^* y_2^* \Delta(\rho_1 z_1) - u^* y_1^* \Delta(\rho_2 z_2) + y_1^* \Delta(\rho u), \\ \Delta(\rho_2 z_2 u) = -u^* y_2^* \Delta(\rho_1 z_1) + u^* y_1^* \Delta(\rho_2 z_2) + y_2^* \Delta(\rho u), \\ \Delta(\rho u^2 + P) = \sum_{\alpha} (\beta_{\alpha}^* - (u^*)^2) \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) + \left(2 - \frac{1}{\xi^*}\right) u^* \Delta(\rho u) + \frac{1}{\xi^*} \Delta(\rho e) + M^* \Delta z, \\ \Delta[(\rho e + P)u] = \sum_{\alpha} (\beta_{\alpha}^* - H^*) u^* \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) + \left(H^* + \frac{(u^*)^2}{\xi^*}\right) \Delta(\rho u) \\ \quad + \left(1 + \frac{1}{\xi^*}\right) \Delta(\rho e) + M^* \xi^* \Delta z. \end{array} \right.$$

La première relation montre que

$$\begin{aligned} \Delta(\rho_1 z_1 u) &= \underline{\rho_1 z_1} \Delta u + \overline{u} \Delta(\rho_1 z_1) \\ &= y_2^* u^* \Delta(\rho_1 z_1) - u^* y_1^* \Delta \rho + u^* y_1^* \Delta(\rho_1 z_1) + y_1^* \overline{u} \Delta \rho + y_1^* \underline{\rho} \Delta u \\ &= u^* \Delta(\rho_1 z_1) + y_1^* (\overline{u} - u^*) \Delta \rho + y_1^* \underline{\rho} \Delta u, \end{aligned}$$

ainsi il suffit de prendre

$$u^* = \overline{u},$$

et

$$y_1^* = \frac{\rho_1 z_1}{\underline{\rho}} = \overline{y_1},$$

pour que la première relation soit toujours vérifiée. La deuxième relation est également vérifiée puisqu'il suffit d'invertir 1 en 2.

On s'intéresse maintenant à la troisième relation, en utilisant

$$\Delta(\rho u^2) = -\overline{u}^2 \Delta \rho + 2\overline{u} \Delta(\rho u),$$

on a

$$\Delta P - \overline{u}^2 \Delta \rho + 2\overline{u} \Delta(\rho u) - M^* \Delta z = \sum_{\alpha} (\beta_{\alpha}^* - \overline{u}^2) \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) + \left(2 - \frac{1}{\xi^*}\right) \overline{u} \Delta(\rho u) + \frac{1}{\xi^*} \Delta(\rho e).$$

En utilisant la définition de β_{α} , on en déduit

$$\xi^* \Delta P - \xi^* M^* \Delta z = - \sum_{\alpha} \delta_{\alpha}^* \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) + \frac{\overline{u}^2}{2} \Delta \rho - \overline{u} \Delta(\rho u) + \Delta(\rho e),$$

puis comme $\Delta(\rho\varepsilon) = (\bar{u}/2)\Delta\rho - \bar{u}\Delta(\rho u) + \Delta(\rho e)$, à l'aide de (6.43), on en déduit que la troisième relation a toujours lieu.

En ce qui concerne la quatrième relation, on peut la récrire en

$$\Delta(\rho H u) = \bar{u} \left[\sum_{\alpha} (\beta_{\alpha}^* - H^*) \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) - \frac{\bar{u}}{\xi^*} \Delta(\rho u) + \left(1 + \frac{1}{\xi^*}\right) \Delta(\rho e) + M^* \Delta z \right] + H^* \Delta(\rho u),$$

qui en introduisant la définition des β_{α} et $\Delta(\rho\varepsilon)$ donne

$$\Delta(\rho H u) = \bar{u} \left[-H^* \Delta\rho - \sum_{\alpha} \frac{\delta_{\alpha}^*}{\xi^*} \Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) + \Delta(\rho e) + \frac{1}{\xi^*} \Delta(\rho\varepsilon) + M^* \Delta z \right] + H^* (\underline{\rho} \Delta u + \bar{u} \Delta\rho).$$

La relation (6.43) montre alors que la relation précédente est équivalente à

$$\begin{aligned} \Delta(\rho H u) &= \bar{u} [\Delta P + \Delta(\rho e)] + \underline{\rho} H^* \Delta u \\ &= \bar{u} \Delta(\rho H) + \underline{\rho} H^* \Delta u. \end{aligned}$$

Cette relation sera donc vrai si $H^* = \bar{H}$ puisque $\Delta(\rho H u) = \bar{u} \Delta(\rho H) + \underline{\rho} \bar{H} \Delta u = \bar{u} \Delta(\rho H) + \underline{\rho} \bar{H} \Delta u$.

□

En utilisant cet état moyen et sous l'hypothèse (6.43), les coefficients $\mu_k(\mathbf{V}^*)$ se simplifie de la façon suivante

$$\begin{aligned} \mu_1(\mathbf{V}^*) &= \frac{1}{2(c^*)^2} (\Delta P - \underline{\rho} c^* \Delta u), \\ \mu_2(\mathbf{V}^*) &= \frac{1}{(c^*)^2} (-\bar{y}_2 \Delta P + (c^*)^2 \Delta(\rho_2 z_2)), \\ \mu_3(\mathbf{V}^*) &= \frac{1}{(c^*)^2} (-\bar{y}_1 \Delta P + (c^*)^2 \Delta(\rho_1 z_1)), \\ \mu_4(\mathbf{V}^*) &= \Delta z, \\ \mu_5(\mathbf{V}^*) &= \frac{1}{2(c^*)^2} (\Delta P + \underline{\rho} c^* \Delta u), \end{aligned}$$

de telles sorte que le saut $\Delta \mathbf{V} = \mathbf{V}_R - \mathbf{V}_L$ est donné par

$$\Delta \mathbf{V} = \sum_{\alpha} \mu_k(\mathbf{V}^*) r_k(\mathbf{V}^*).$$

Nous sommes donc en mesure d'écrire l'algorithme de discrétisation du système (5.21) à l'aide d'un schéma de Roe. Notons $\mathbf{U} = (\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, \rho u, \rho e)^T$ le vecteur des quatres premières coordonnées de $\mathbf{V}$ et considérons un état $\mathbf{V}_i^n$ dans la maille i au temps $t^n = n\Delta t$. L'état $\mathbf{U}_i^{n+1/2}$ obtenu pendant la première étape du splitting en temps (*i.e.* avant la projection sur la variété d'équilibre) est défini par

$$\mathbf{U}_i^{n+1/2} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathbf{F}_{i+1/2}^n - \mathbf{F}_{i-1/2}^n),$$

où le flux numérique $\mathbf{F}_{i+1/2}^n = \mathbf{F}(\mathbf{V}_{i+1}^n, \mathbf{V}_i^n)$ entre les mailles i et $i+1$ s'écrit sous la forme

$$\mathbf{F}(\mathbf{V}_R, \mathbf{V}_L) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \rho_1 z_1 u \\ \rho_2 z_2 u \\ \rho u^2 + P \\ \rho H u \end{bmatrix}_R + \begin{bmatrix} \rho_1 z_1 u \\ \rho_2 z_2 u \\ \rho u^2 + P \\ \rho H u \end{bmatrix}_L - \frac{1}{2} |\mathbf{R}(\mathbf{U}_R, \mathbf{U}_L)|,$$

où le vecteur $\mathbf{R}$ est défini par

$$\begin{aligned} |\mathbf{R}(\mathbf{V}_R, \mathbf{V}_L)| = & |\bar{u} - c^*| \mu_1(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} \frac{\bar{y}_1}{\bar{y}_2} \\ \frac{\bar{u} - c^*}{\bar{H} - \bar{u}c^*} \end{bmatrix} + |\bar{u}| \mu_2(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \bar{u} \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + |\bar{u}| \mu_3(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \bar{u} \\ 0 \end{bmatrix} + |\bar{u}| \mu_4(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ B \end{bmatrix} + |\bar{u} + c| \mu_5(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} \frac{\bar{y}_1}{\bar{y}_2} \\ \frac{\bar{u} + c}{\bar{H} + \bar{u}c^*} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

et où B est défini par

$$B = \left(\Delta\rho - \frac{\Delta P}{(c^*)^2} \right) \frac{\bar{u}^2}{2} + \Delta(\rho\varepsilon) - \frac{h^*}{(c^*)^2} \Delta P.$$

Le vecteur $|\mathbf{R}|$ est défini par

$$\begin{aligned} |\mathbf{R}(\mathbf{V}_R, \mathbf{V}_L)| &= \sum_k |\lambda_k(\mathbf{V}^*)| \mu_k(\mathbf{V}^*) r_k(\mathbf{V}^*) \\ &= |\bar{u} - c^*| \mu_1(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} \frac{\bar{y}_1}{\bar{y}_2} \\ \frac{\bar{u} - c^*}{\bar{H} - \bar{u}c^*} \end{bmatrix} + |\bar{u}| \mu_2(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \bar{u} \\ \bar{u}^2/2 + \delta_2^* \end{bmatrix} \\ &\quad + |\bar{u}| \mu_3(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \bar{u} \\ \bar{u}^2/2 + \delta_1^* \end{bmatrix} + |\bar{u}| \mu_4(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -M^* \xi^* \end{bmatrix} \\ &\quad + |\bar{u} + c| \mu_5(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} \frac{\bar{y}_1}{\bar{y}_2} \\ \frac{\bar{u} + c}{\bar{H} + \bar{u}c^*} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

La quatrième coordonnée des termes correspondants à μ_2 , μ_3 et μ_4 peut s'écrire

$$\begin{aligned} \mu_2(\mathbf{V}^*) \left(\frac{\bar{u}^2}{2} + \delta_2^* \right) + \mu_1(\mathbf{V}^*) \left(\frac{\bar{u}^2}{2} + \delta_1^* \right) - \mu_4(\mathbf{V}^*) M^* \xi^* \\ = \frac{\bar{u}^2}{2} \frac{\mu_2(\mathbf{V}^*) + \mu_3(\mathbf{V}^*)}{2} + \mu_2(\mathbf{V}^*) \delta_2^* + \mu_3(\mathbf{V}^*) \delta_1^* - \mu_4(\mathbf{V}^*) M^* \xi^* \\ = \frac{\bar{u}^2}{2} \left(\Delta\rho - \frac{\Delta P}{(c^*)^2} \right) + \sum_{\alpha} \left(\Delta(\rho_{\alpha} z_{\alpha}) - \frac{\bar{y}_{\alpha}}{(c^*)^2} \Delta P \right) \delta_{\alpha}^* - M^* \xi^* \Delta z \\ = \frac{\bar{u}^2}{2} \left(\Delta\rho - \frac{\Delta P}{(c^*)^2} \right) + \Delta(\rho\varepsilon) - \xi^* \Delta P - \frac{\Delta P}{(c^*)^2} \sum_{\alpha} \bar{y}_{\alpha} \delta_{\alpha}^*, \end{aligned}$$

en utilisant la relation de saut discrète (6.43) et le calcul des $\mu_k(\mathbf{V}^*)$.

Maintenant en utilisant la définition de la vitesse du son (6.32), on a

$$\xi c^2 = h - \sum_{\alpha} y_{\alpha} \delta_{\alpha},$$

donc

$$\begin{aligned} \mu_2(\mathbf{V}^*) \left(\frac{\bar{u}^2}{2} + \delta_2^* \right) + \mu_1(\mathbf{V}^*) \left(\frac{\bar{u}^2}{2} + \delta_1^* \right) - \mu_4(\mathbf{V}^*) M^* \zeta^* \\ = \left(\Delta \rho - \frac{\Delta P}{(c^*)^2} \right) \frac{\bar{u}^2}{2} + \Delta(\rho \varepsilon) - \frac{h^*}{(c^*)^2} \Delta P \\ = B. \end{aligned}$$

L'équation d'advection sur z est discrétisée comme dans le cas d'un écoulement isotherme par un schéma upwind classique

$$z_i^{n+1/2} = z_i^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left((u_i^n - |u_i^n|) \Delta z_{i+1/2}^n + (u_i^n + |u_i^n|) \Delta z_{i-1/2}^n \right).$$

6.3.2 Ajout d'un flux de chaleur pour le modèle avec fermeture isotherme

On rappelle une propriété remarquable de la fermeture isotherme est l'existence d'une température de mélange qui est simplement celle donnée par $T_1 = T_2$ et qui est également celle donnée par

$$T = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \eta} \right)_{\rho, y, z}.$$

Cette propriété nous permet d'ajouter une flux de chaleur pour le modèle bifluide de changement de phase avec fermeture isotherme. Supposons que lorsque le fluide est pur le flux de chaleur soit donné par une loi de Fourier

$$\mathbf{q}_\alpha = -\theta_\alpha \nabla T_\alpha,$$

où θ_α désigne la conductivité thermique du fluide α . On peut alors définir le flux de chaleur pour le mélange de la façon suivante

$$\mathbf{q} = \sum_{\alpha} \mathbf{q}_\alpha = - \left(\sum_{\alpha} z_\alpha \theta_\alpha \right) \nabla T := -\theta \nabla T.$$

Seule l'équation sur l'énergie se trouve modifiée et celle-ci devient

$$\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = -\operatorname{div}(\mathbf{q}). \quad (6.44)$$

Pour discrétiser 6.44, on utilise comme pour la discrétisation de la partie convective une méthode de volumes finis. En intégrant donc 6.44 sur une maille, on en déduit le schéma (en une dimension)

$$\frac{(\rho e)_i^{n+1} - (\rho e)_i^n}{\Delta t} + \frac{\mathbf{F}_{i+1/2}^n - \mathbf{F}_{i-1/2}^n}{\Delta x} = \frac{\mathbf{G}_{i+1/2}^n - \mathbf{G}_{i-1/2}^n}{\Delta x},$$

où le flux numérique $\mathbf{G}_{i+1/2}^n$ entre les mailles $i+1$ et i est donné par

$$\mathbf{G}_{i+1/2}^n = \theta_{i+1/2}^n \frac{T_{i+1}^n - T_i^n}{\Delta x},$$

où $\theta_{i+1/2}^n$ désigne une moyenne entre θ_{i+1}^n et θ_i^n . Par exemple, on peut choisir $\theta_{i+1/2}^n$ de la façon suivante

$$\theta_{i+1/2}^n = \frac{\theta_{i+1}^n + \theta_i^n}{2}.$$

6.3.3 Schéma numérique basé sur le MTT-équilibre ($\lambda = \kappa = +\infty$)

Dans la suite, ce solveur sera référencé comme le schéma MTT-équilibre. Comme dans le cas du modèle bifluide de changement de phase isotherme, le schéma numérique est basé sur une méthode de splitting en temps. Dans un premier temps, on résout le système (5.21) à l'aide du schéma de Roe détaillé dans la section 6.3.1. Cette étape donne à partir d'un état approché

$$\mathbf{V}_i^n = \left((\rho_1 z_1)_i^n, (\rho_2 z_2)_i^n, (\rho u)_i^n, (\rho e)_i^n, z_i^n \right)^T,$$

un état intermédiaire $\mathbf{V}_i^{n+1/2}$.

On impose ensuite formellement $\kappa = +\infty$ et $\lambda = +\infty$ (i.e. on impose formellement $P_1 = P_2$ et $g_1 = g_2$) en projetant $\mathbf{V}_i^{n+1/2}$ sur la variété MTT-équilibre. Durant cette étape, on utilise le fait que $\partial_t \rho = 0$, $\partial_t(\rho u) = 0$ et $\partial_t(\rho e) = 0$ pour définir

$$\begin{cases} \rho_i^{n+1} = \rho_i^n + 1/2, \\ (\rho u)_i^{n+1} = (\rho u)_i^{n+1/2}, \\ (\rho e)_i^{n+1} = (\rho e)_i^{n+1/2}. \end{cases}$$

Ensuite, on utilise les $\rho_\alpha^* = \rho_\alpha^*(T)$ définissant l'équilibre de pressions et l'équilibre d'enthalpies libres pour définir z_i^{n+1} de la façon suivante

$$z_i^{n+1} = \begin{cases} 1 & \text{si } \rho_i^{n+1} < \rho_1^*, \\ \frac{\rho_i^{n+1} - \rho_2^*}{\rho_1^* - \rho_2^*} & \text{si } \rho_1^* < \rho_i^{n+1} < \rho_2^*, \\ 0 & \text{si } \rho_2^* < \rho_i^{n+1}, \end{cases}$$

en supposant que $\rho_1^* < \rho_2^*$.

Ensuite, les densités partielles m_α sont mises à jour en utilisant z_i^{n+1} de la façon suivante

$$(m_1)_i^{n+1} = \begin{cases} \rho_i^{n+1} & \text{si } \rho_i^{n+1} < \rho_1^*, \\ \rho_1^* z_i^{n+1} & \text{si } \rho_1^* < \rho_i^{n+1} < \rho_2^*, \\ 0 & \text{si } \rho_2^* < \rho_i^{n+1}, \end{cases}$$

et $(m_2)_i^{n+1} = \rho_i^{n+1} - (m_1)_i^{n+1}$.

6.3.4 Choix des lois d'états des deux phases

Lors des tests numériques, on utilisera des lois d'états de type gaz parfaits. Il est vrai que ce type de loi d'état ne rend pas compte des propriétés physiques du liquide mais l'avantage est d'avoir des expressions analytiques. En effet, en utilisant des lois d'états de type *stiffened gas*, il faut trouver les zéros d'une fonction non linéaire et des problèmes de précision machine apparaissent. On rappelle la définition des densités d'équilibre $\rho_\alpha^*(T)$ servant dans le schéma MTT-équilibre

$$\begin{cases} \rho_1^* = \exp\left(-\frac{b_1 - b_2}{a_1 - a_2}\right) \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^{\frac{a_2}{a_1 - a_2}}, \\ \rho_2^* = \exp\left(-\frac{b_1 - b_2}{a_1 - a_2}\right) \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^{\frac{a_1}{a_1 - a_2}}, \end{cases}$$

où

$$\begin{cases} a_\alpha = (\gamma_\alpha - 1)c_{v_\alpha}T, \\ b_\alpha = \left\{ \gamma_\alpha c_{v_\alpha} + (\gamma_\alpha - 1)c_{v_\alpha} \log [(\gamma_\alpha - 1)c_{v_\alpha}] \right\} T - c_{v_\alpha}T \log(T). \end{cases}$$

Ces coefficients interviennent dans la définition des pressions et des enthalpies libres de chaque phase de la façon suivante

$$\begin{cases} P_\alpha = a_\alpha \rho_\alpha, \\ g_\alpha = b_\alpha + a_\alpha \log(\rho_\alpha). \end{cases}$$

6.4 Résultats numériques

6.4.1 Surchauffage d'une bulle de vapeur dans du liquide

On considère un domaine bidimensionnel de 1 m de long sur 1 m de large. On plonge une bulle de vapeur d'eau dans de l'eau liquide au centre du domaine. La géométrie de cette compression est donnée dans la figure 6.1.

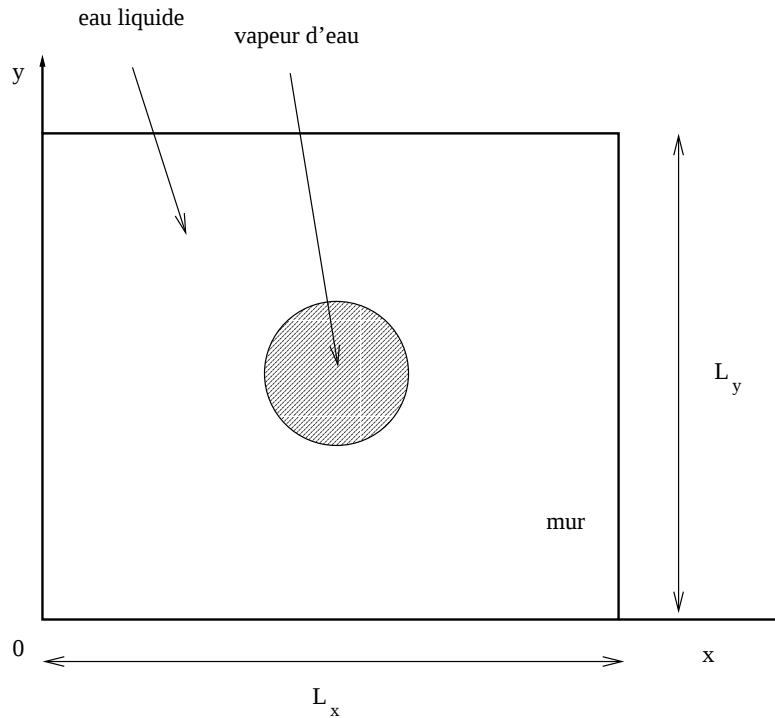


FIG. 6.1 – Géométrie de la bulle de vapeur surchauffée dans du liquide.

Les lois d'états utilisées sont des lois d'états de type gaz parfaits sont les coefficients sont donnés dans le tableau 6.1. La température de la vapeur est fixée à 3000 K tandis que celle du liquide est fixée à 300 K. Les densités des deux phases sont choisies de telle sorte qu'on ait équilibre thermodynamique au temps initial (égalité des enthalpies libres) ainsi $\rho_1^* \simeq 0.13 \text{ kg.m}^{-3}$ pour la vapeur et $\rho_2^* \simeq 16.7 \text{ kg.m}^{-3}$ pour le liquide.

Toutes les conditions aux limites sont des conditions aux limites de type mur et le maillage est un maillage 100×100 . La discrétisation de la partie convective est effectuée à l'aide du schéma de Roe quasi-conservatif détaillé dans la section 6.3.1. La relation de fermeture utilisée est la la fermeture isotherme.

La figure 6.2 compare le contour de z obtenu à l'aide du schéma MTT-équilibre et celui obtenu à l'aide du schéma de Roe quasi-conservatif sur le système homogène tandis que les figures 6.3

	vapeur	liquide
c_v (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	200	1
$\gamma = c_p/c_v$	2.5	1.5
θ (W.K ⁻¹ .m ⁻¹)	1	0.1
T (K)	300	3 000

TAB. 6.1 – Paramètres des deux fluides pour le cas test d’une bulle de vapeur surchauffée dans du liquide.

et 6.4 comparent les contours de respectivement la densité et la pression obtenus à l’aide de ces mêmes schémas.

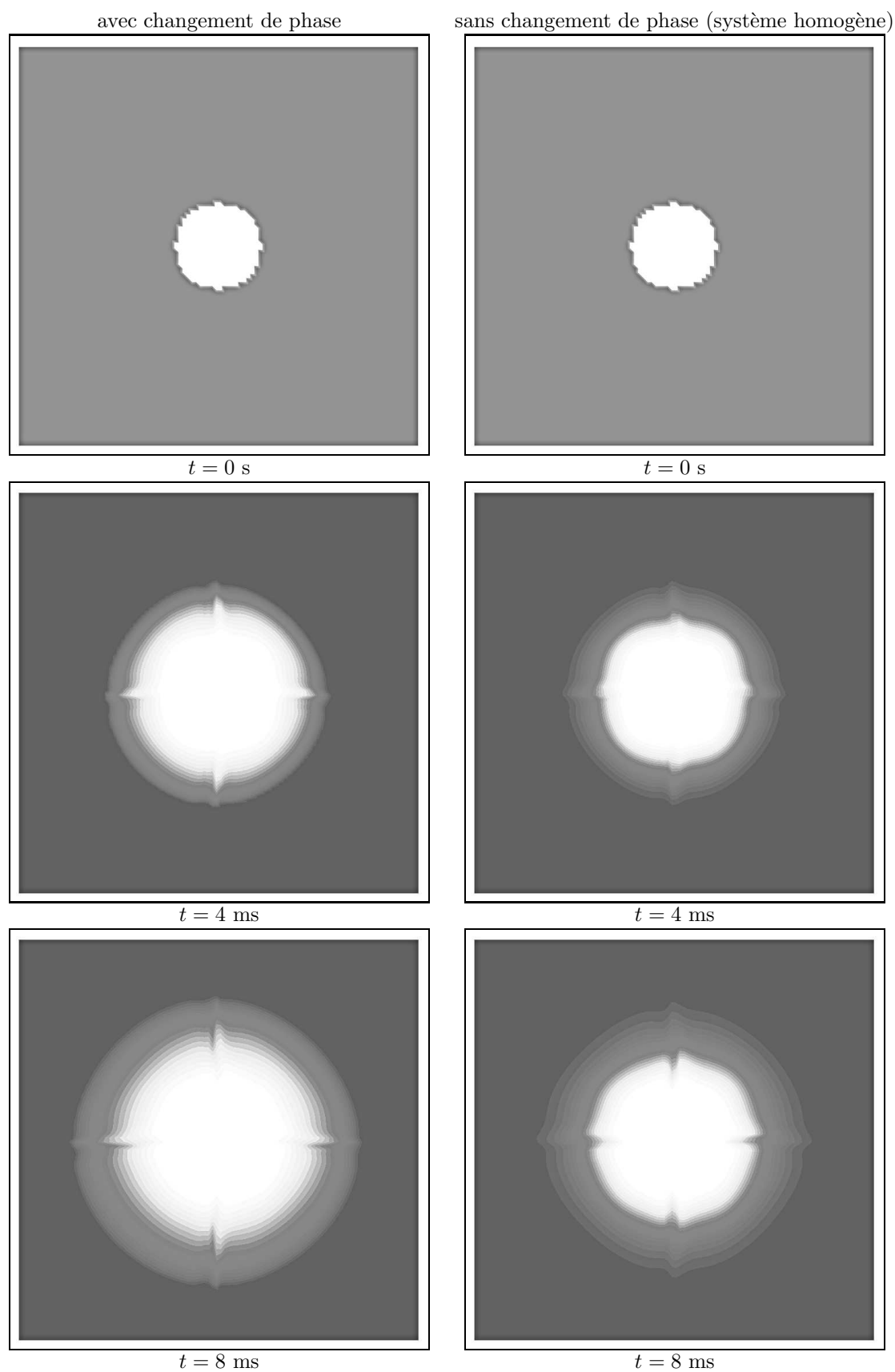


FIG. 6.2 – Comparaison des profils de z obtenus avec le schéma MTT-équilibre (gauche) et avec le système homogène (droite) ; t varie de 0 s à 8 ms.

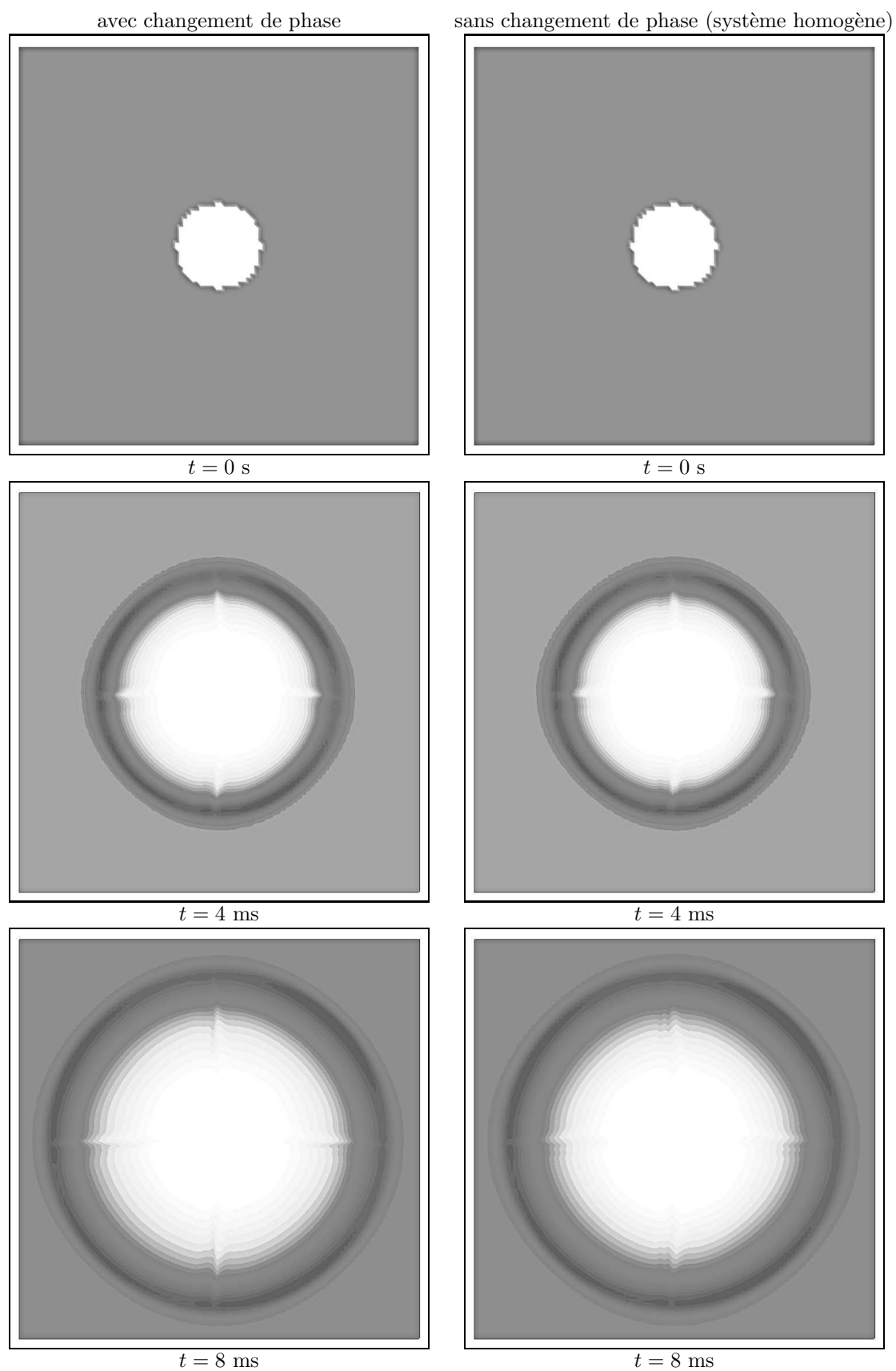


FIG. 6.3 – Comparaison des profils de la densité obtenus avec le schéma MTT-équilibre (gauche) et avec le système homogène (droite) ; t varie de 0 s à 8 ms.

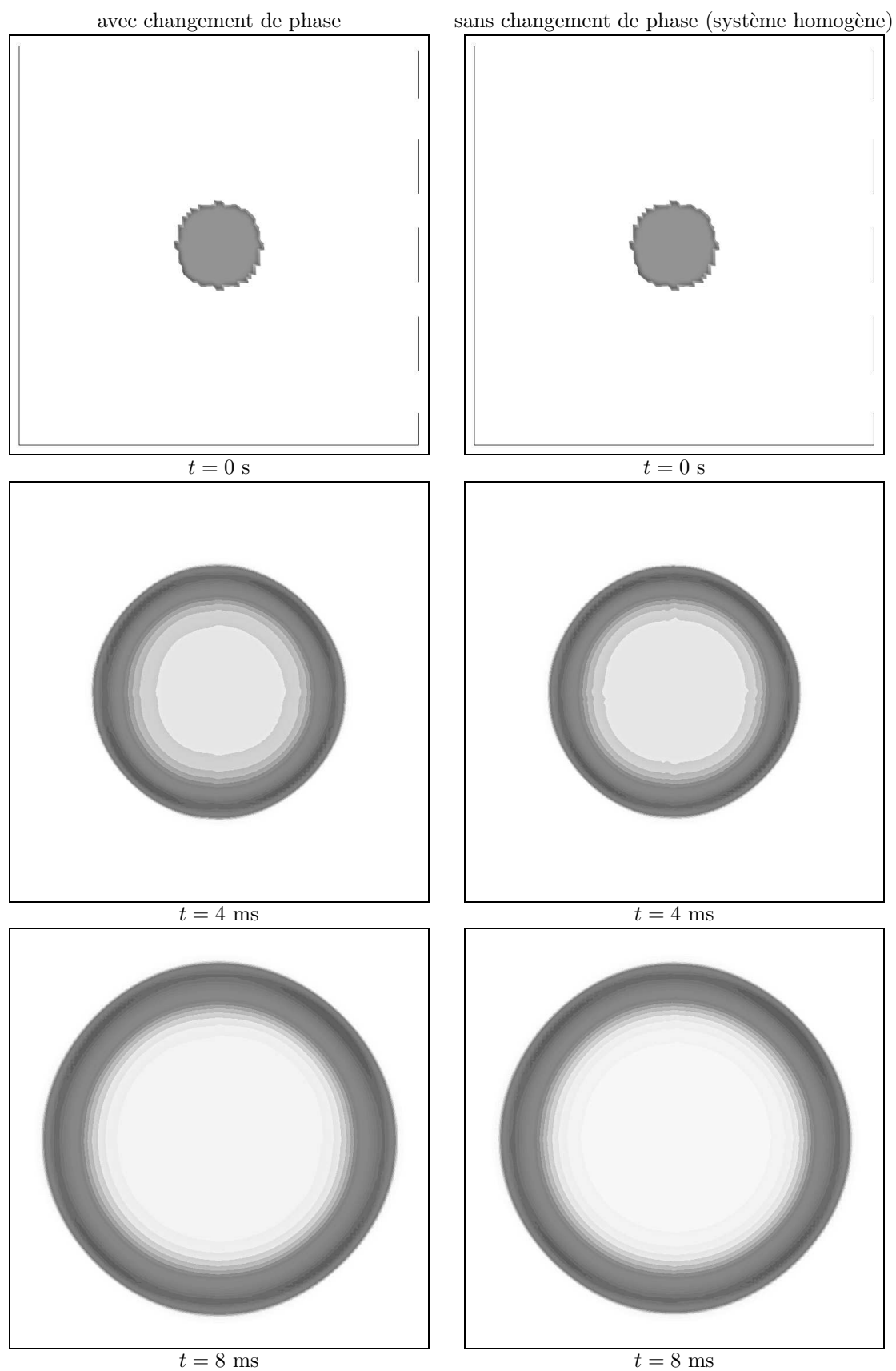


FIG. 6.4 – Comparaison des profils de la pression obtenus avec le schéma MTT-équilibre (gauche) et avec le système homogène (droite) ; t varie de 0 s à 8 ms.

6.4.2 Création d'un film de vapeur à l'aide d'une paroi chauffante

On considère de nouveau un domaine de 1 m de long sur 1 m de large rempli d'eau liquide. En bas du domaine (*i.e.* pour $y = 0$) sont disposées des bulles de vapeur comme dans la figure 6.5.

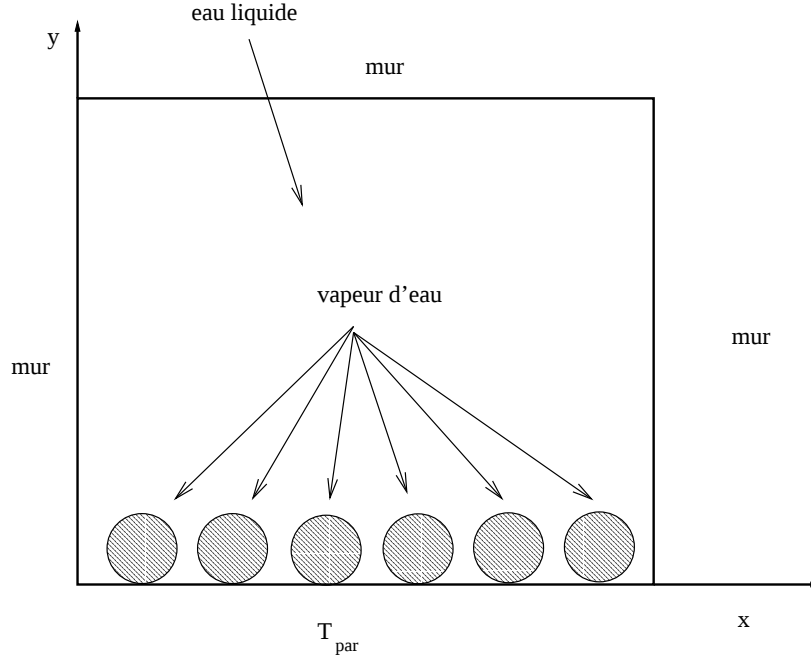


FIG. 6.5 – Géométrie du cas test avec paroi chauffante.

Les deux phases suivent des lois d'états de type gaz parfaits dont les coefficients sont donnés dans le tableau 6.2. Initialement les deux phases sont à l'équilibre mécanique, thermique et thermodynamique et la température est fixée à 300 K dans tous le domaine. Les densités de la vapeur et du liquide sont donc respectivement données par $\rho_1^* \simeq 5.6 \text{ kg.m}^{-3}$ et $\rho_2^* \simeq 17 \text{ kg.m}^{-3}$.

	vapeur	liquide
$c_v \text{ (J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1})$	1000	1
$\gamma = c_p/c_v$	2.5	1.5
$\theta \text{ (W.K}^{-1}.\text{m}^{-1})$	1	0.6

TAB. 6.2 – Paramètres des deux fluides.

On chauffe le bas du domaine en imposant une température $T_{par} = 500 \text{ K}$. On utilise alors le modèle avec fermeture isotherme pour pouvoir ajouter la conduction thermique dans le modèle bifluide de changement de phase avec fermeture isotherme.

On utilise le schéma MTT-équilibre pour discrétiser ce modèle bifluide de changement de phase avec fermeture isotherme. Le maillage utilisé est un maillage 100×100 . Les figures 6.6, 6.7, 6.8, 6.9, 6.10, 6.11, 6.12 et 6.13 représentent les contours de respectivement z , la densité, la pression et la température pour t variant 0 s à 80 ms.

Grâce au flux de chaleur imposé par la température T_{par} , les bulles de vapeur coalescent pour former un film de vapeur.

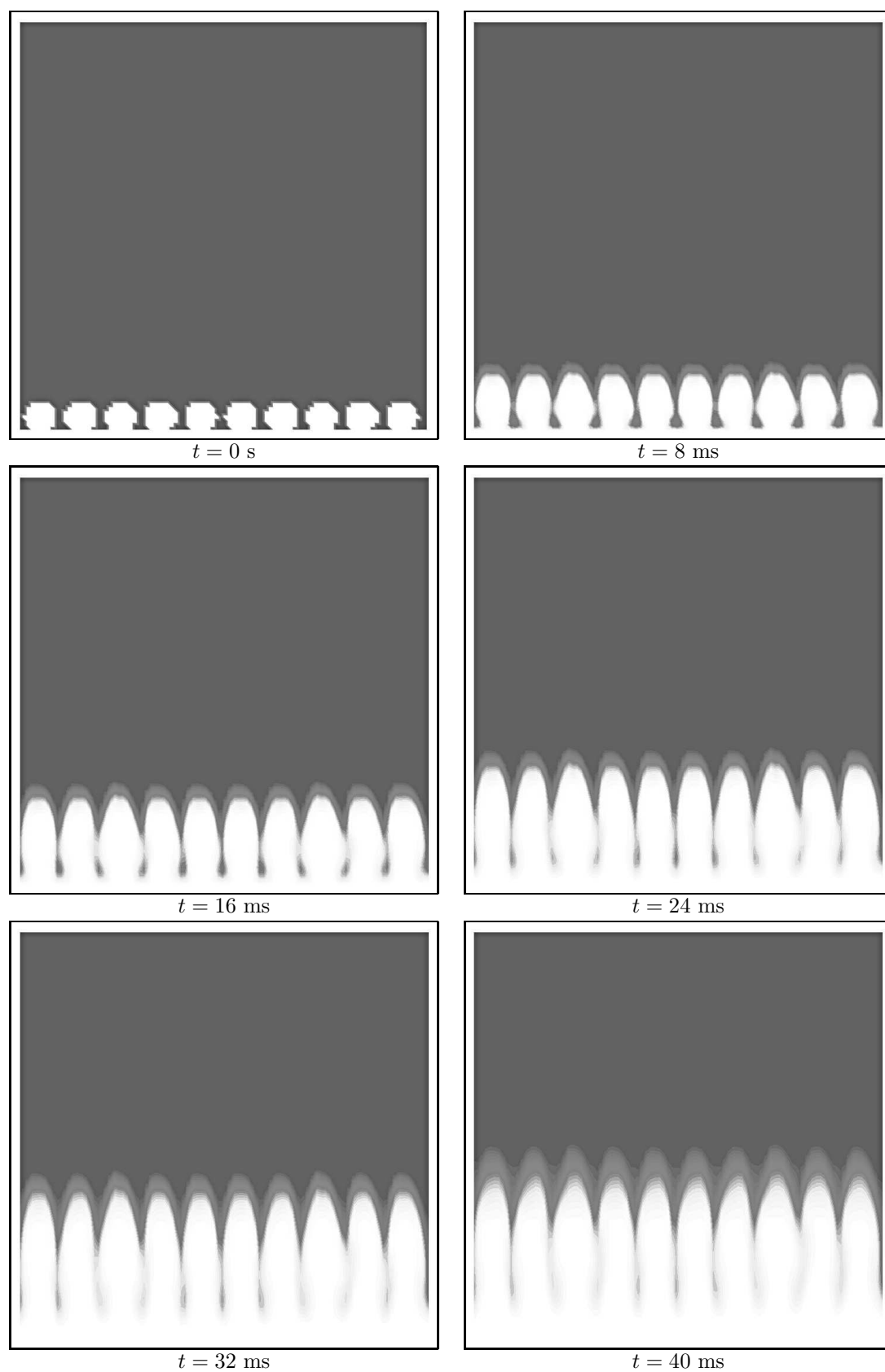


FIG. 6.6 – Profil de z obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 0 s à 40 ms.

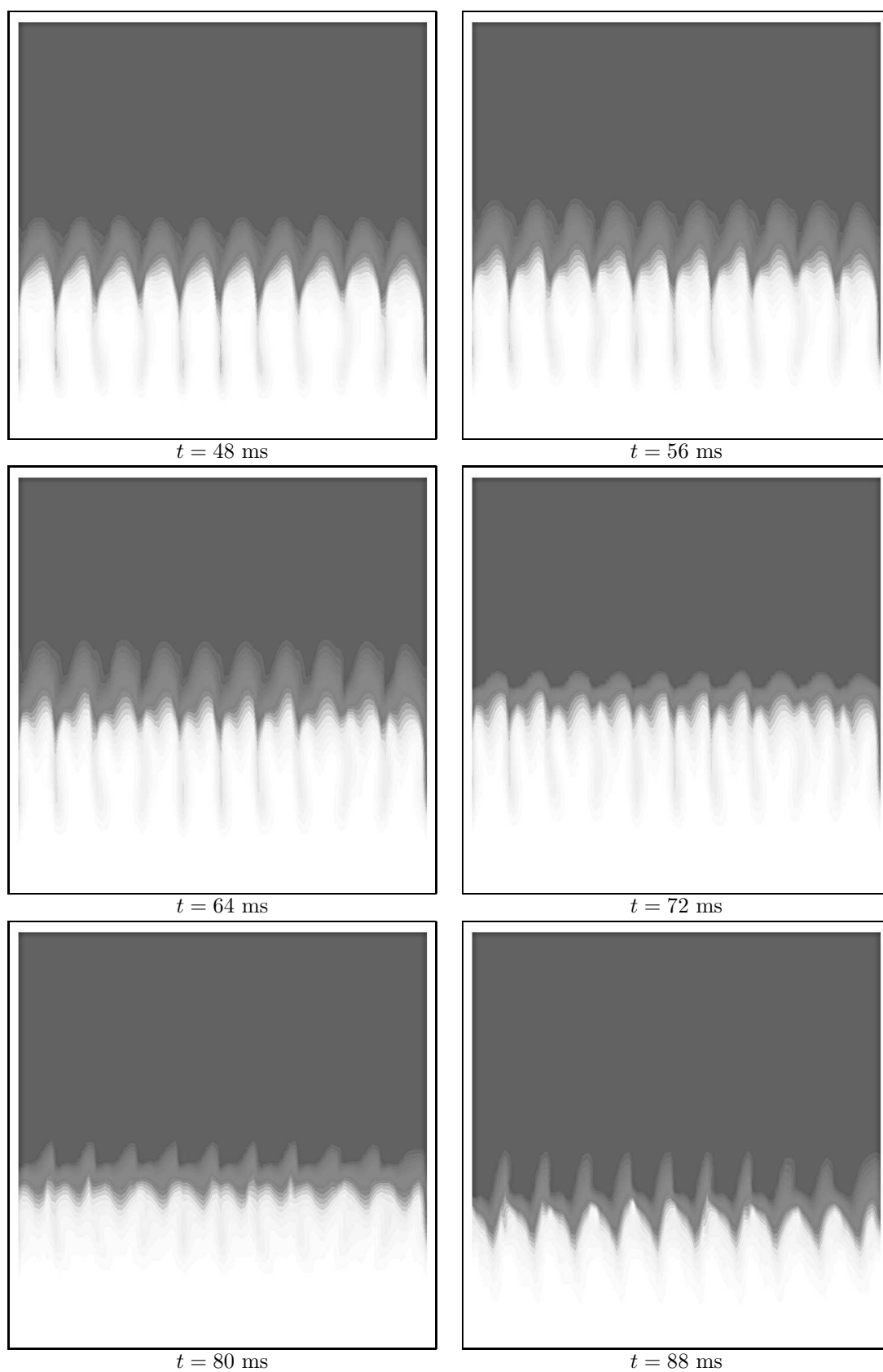


FIG. 6.7 – Profil de z obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 48 ms à 88 ms.

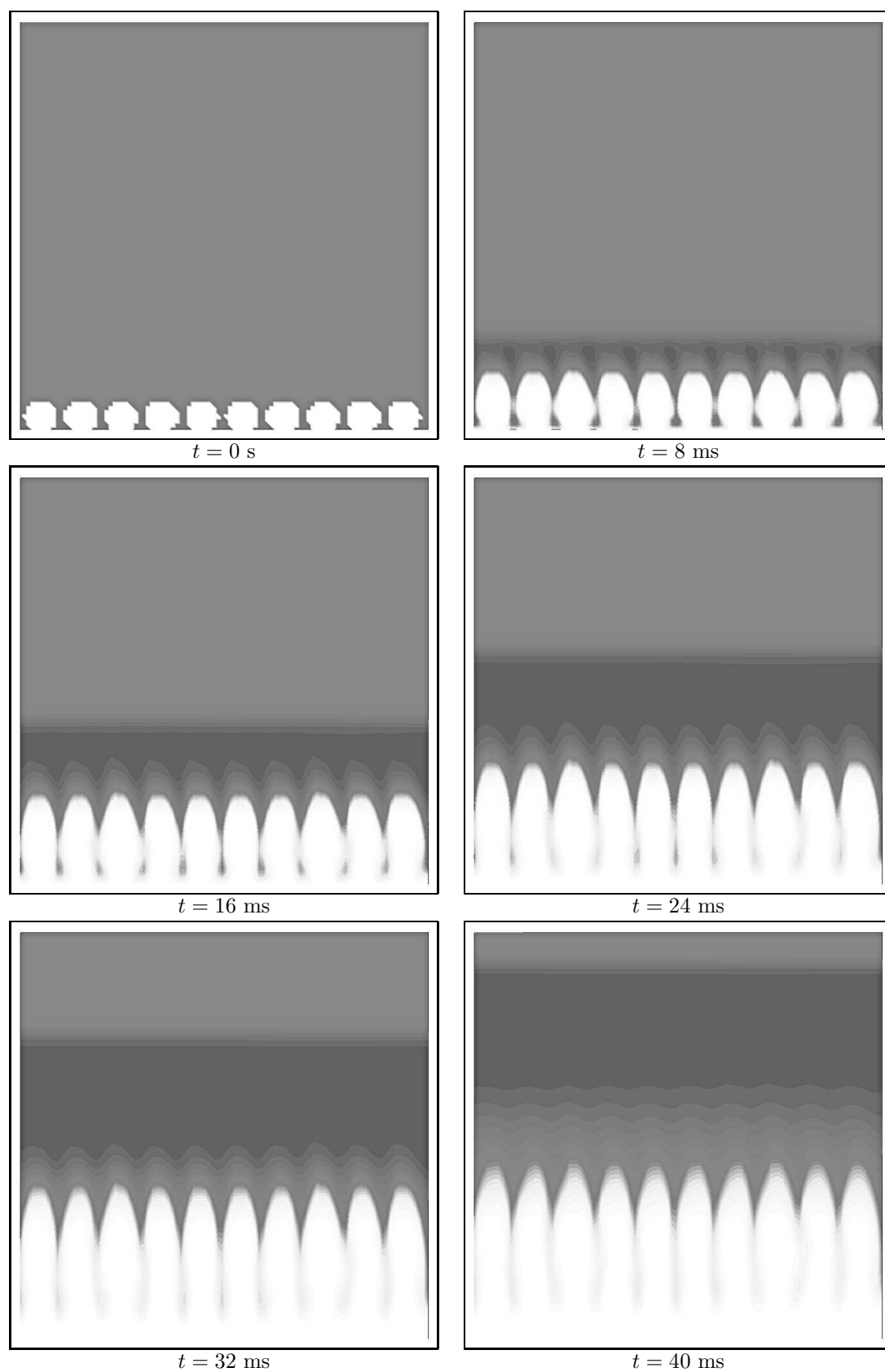


FIG. 6.8 – Profil de la densité obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 0 s à 40 ms.

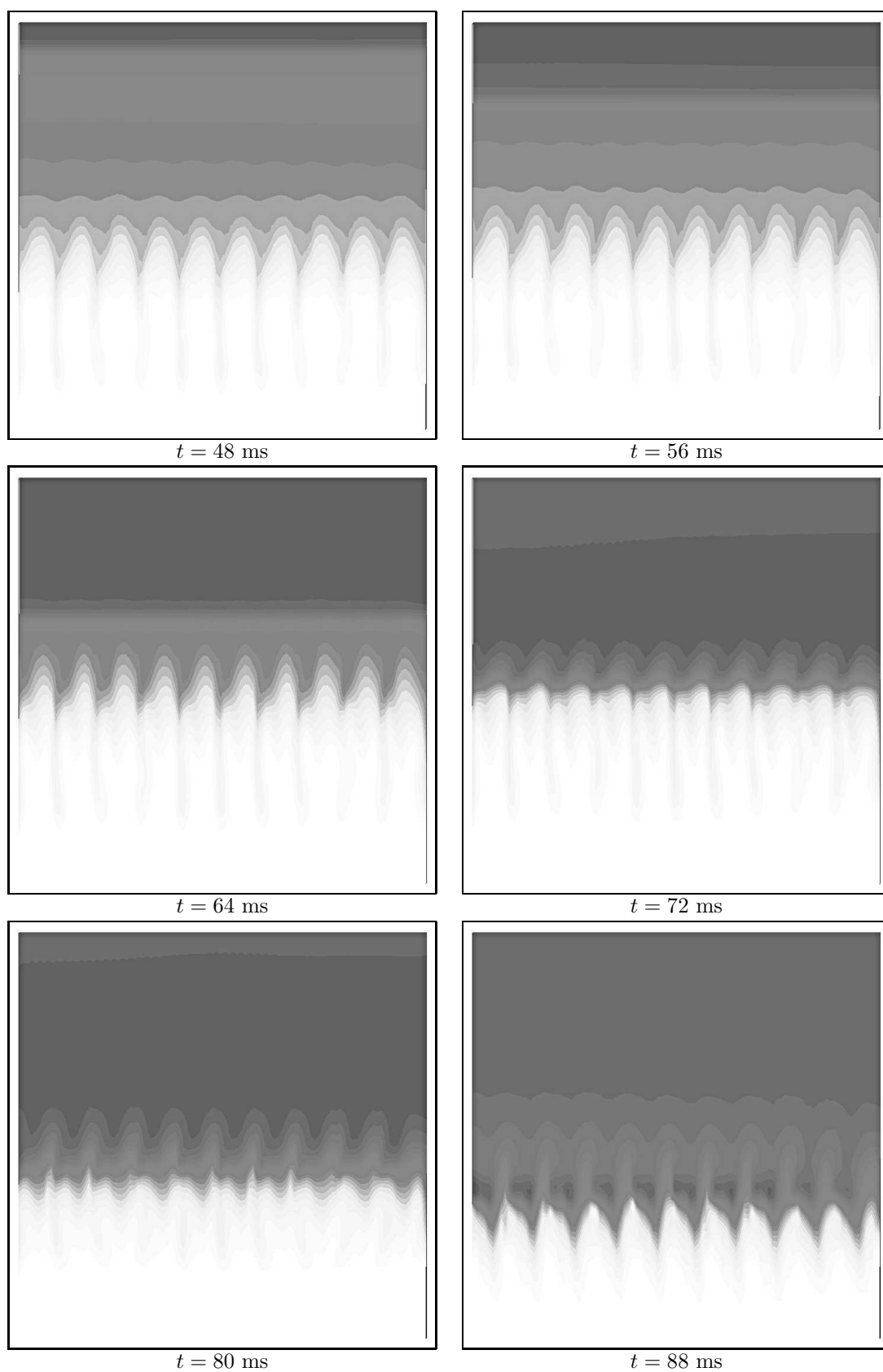


FIG. 6.9 – Profil de la densité obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 48 ms à 88 ms.

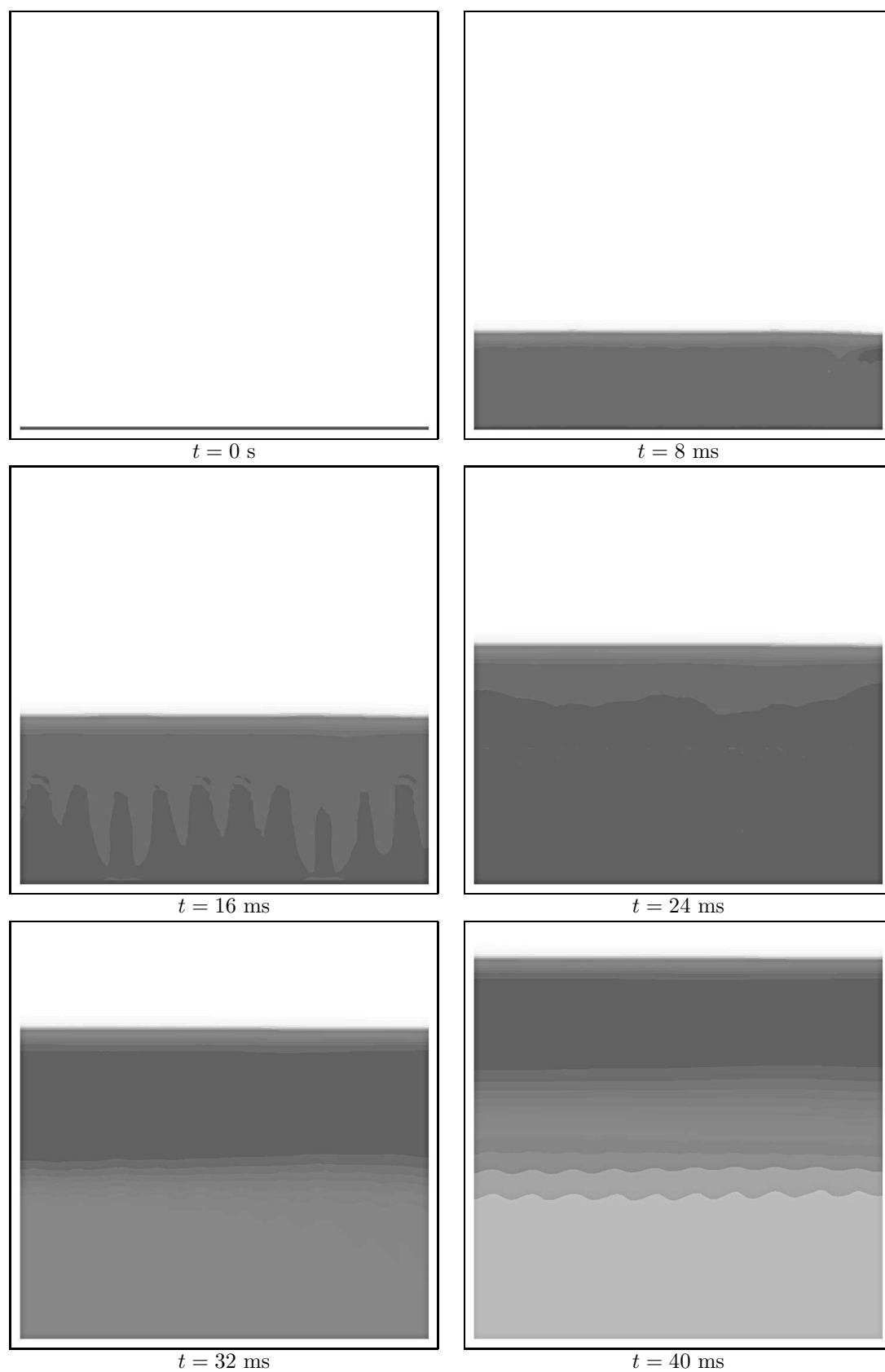
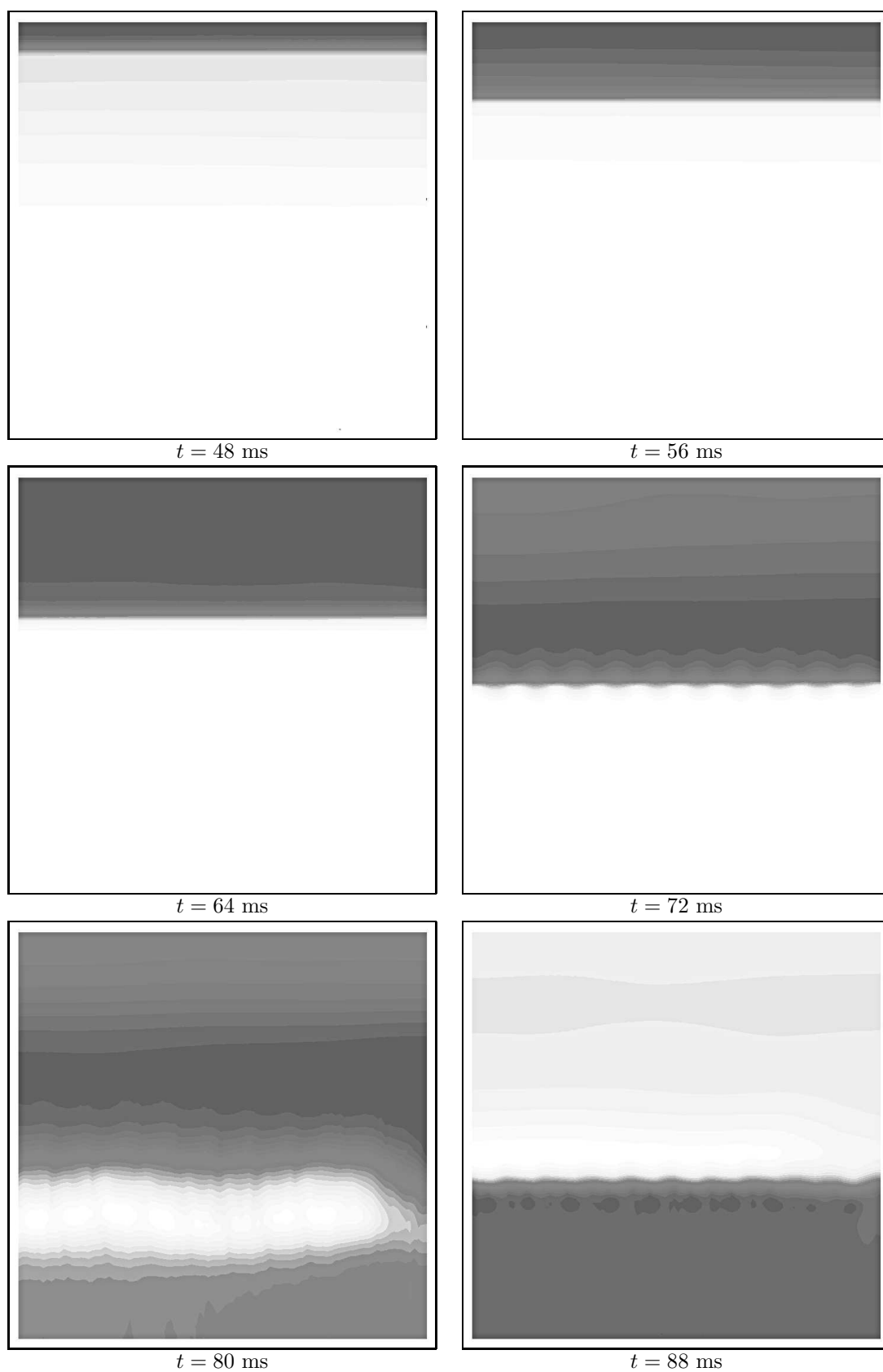


FIG. 6.10 – Profil de la pression obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 0 s à 40 ms.

FIG. 6.11 – Profil de la pression obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 48 ms à 88 ms.

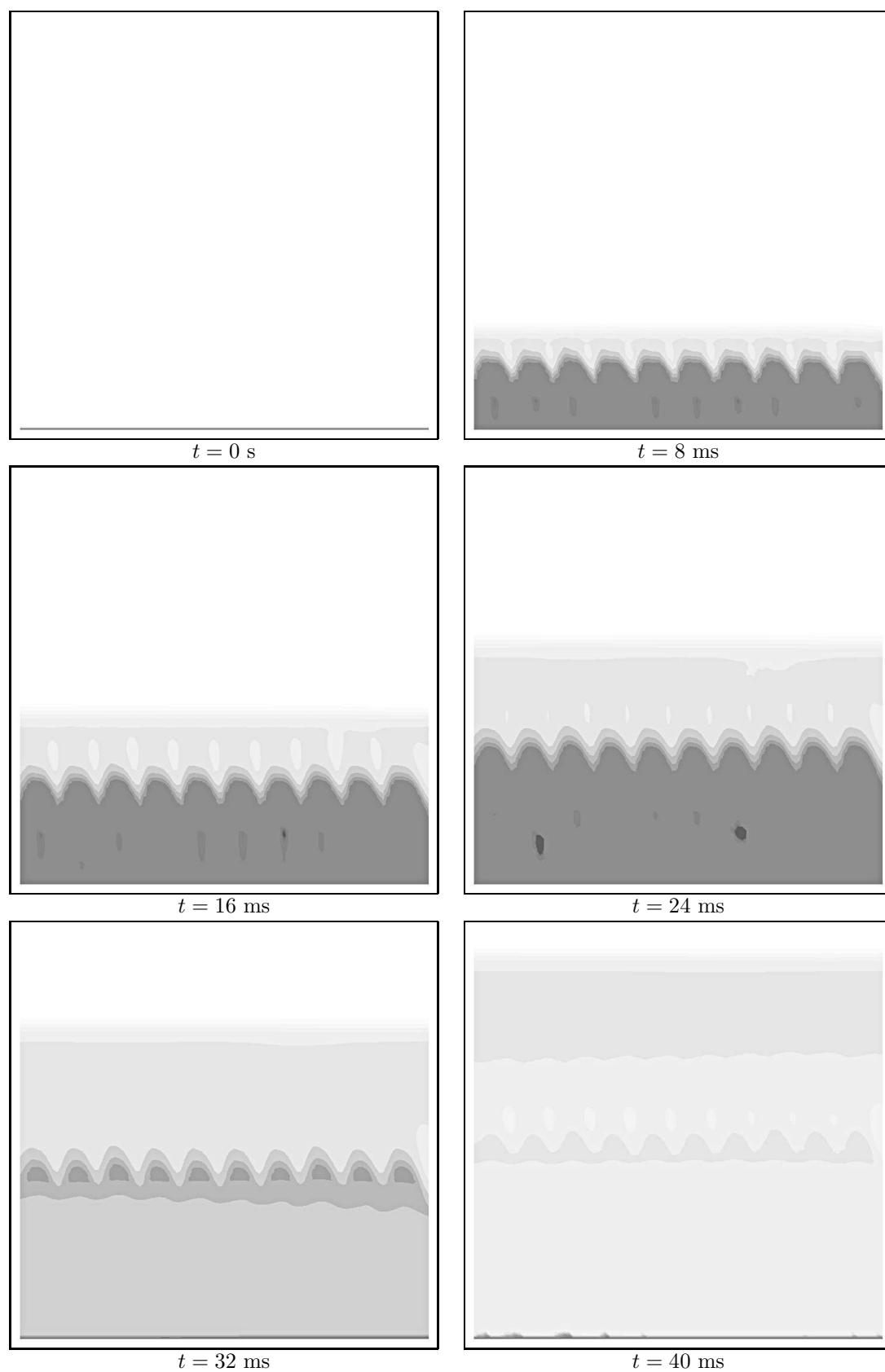


FIG. 6.12 – Profil de la température obtenu avec le schéma MTT-équilibre ; t varie de 0 s à 40 ms.

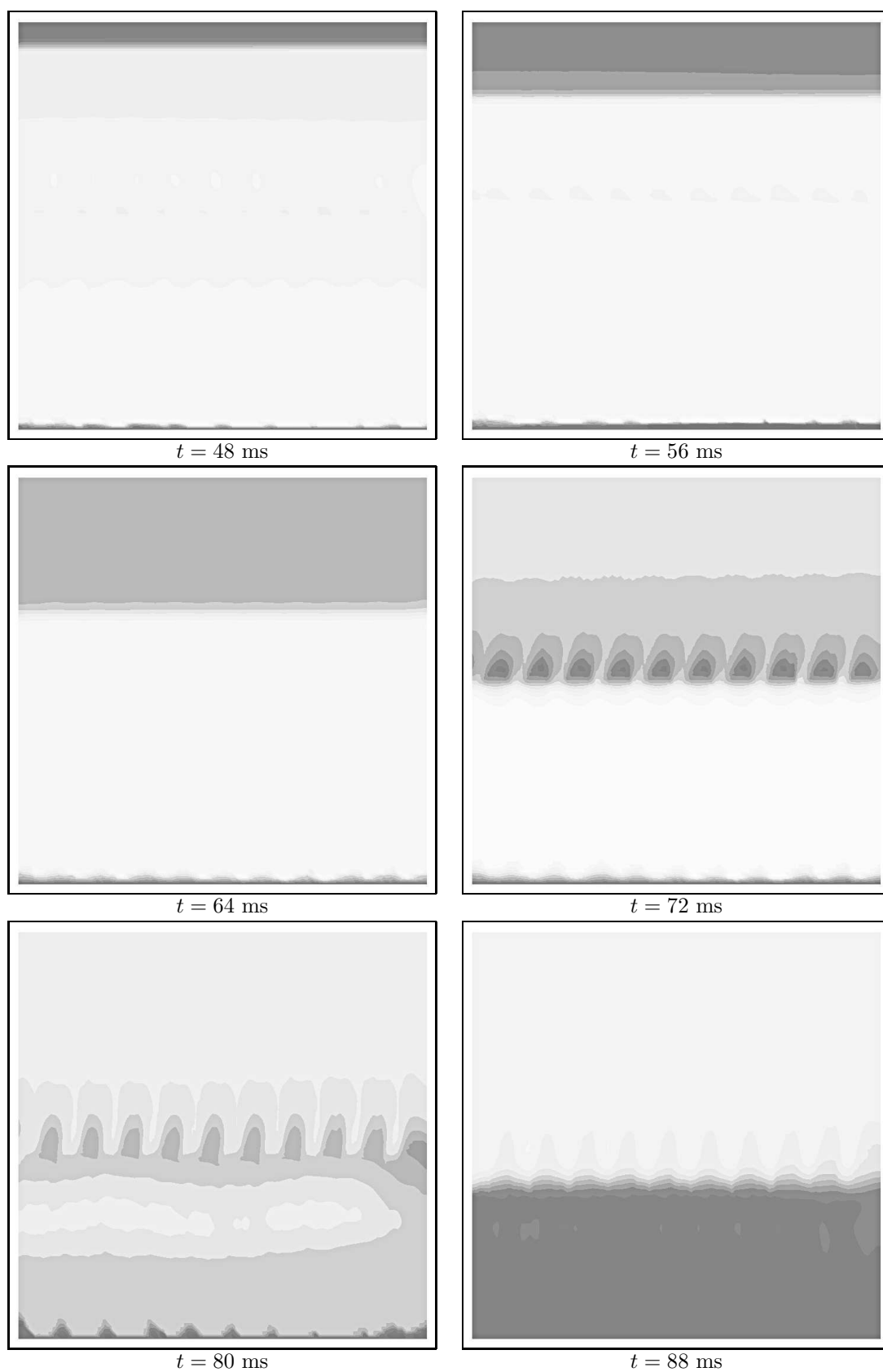


FIG. 6.13 – Profil de la température obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 48 ms à 88 ms.

6.4.3 Nucléation d'une bulle de vapeur à l'aide d'une paroi chauffante

On considère un domaine de 1 m de long sur 1 m de large contenant entièrement du liquide. La température est fixée à $T_0 = 300$ K dans tout le domaine et on impose un profil de température au niveau de la paroi $y = 0$ comme dans la figure 6.14.

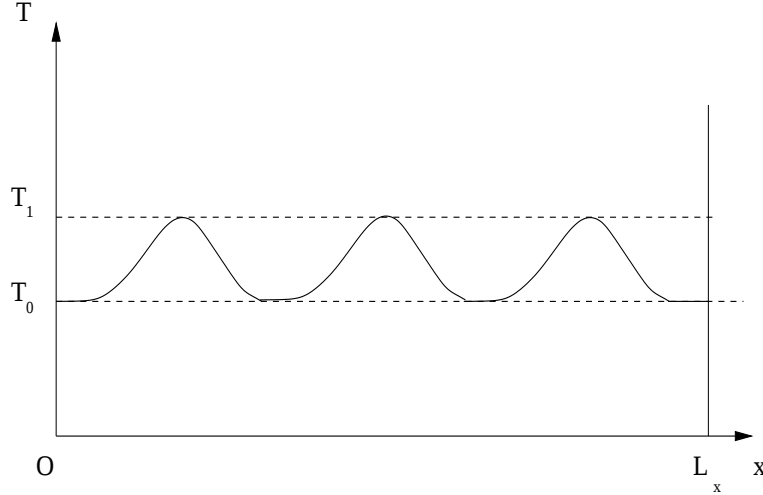


FIG. 6.14 – Profil de température imposé au niveau de la paroi $\{y = 0\}$.

La température T_1 est fixée à 350 K et les deux fluides sont supposés suivre des lois d'états de type gaz parfaits dont les caractéristiques sont données dans le tableau 6.3. La pression imposée dans le domaine est la pression de saturation et est donnée par $P^{sat}(T_0) \simeq 2534$ Pa.

	vapeur	liquide
c_v (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	1000	1
$\gamma = c_p/c_v$	2.5	1.5
θ (W.K ⁻¹ .m ⁻¹)	23.10^{-5}	6.10^{-2}

TAB. 6.3 – Paramètres des deux fluides.

On utilise le schéma MTT-équilibre auquel on a ajouté la gravité ainsi qu'un flux de chaleur comme décrit dans la section 6.3.2. Le maillage utilisé est un maillage 100×100 . Les conditions aux limites sur les autres bords du domaine sont de type mur. Les figures 6.15, 6.16, 6.17, 6.18, 6.19, 6.20, 6.21 et 6.22 représentent respectivement les profils de z , de la densité, de la pression et de la température pour t variant de 0 ms à 500 ms.

Grâce au profil sinusoïdale de la température imposée au niveau de la paroi $\{y = 0\}$, des bulles de vapeur vont se former au niveau des maximum de la température (lorsque $T = T_1 > T_0$). Sous l'effet de la gravité, ces bulles vont alors monter vers le haut du domaine. La température de ces bulles étant supérieure à celle du liquide, elles vont non seulement se refroidir et par conséquent se liquéfier mais aussi réchauffer le liquide environnant. Ce réchauffement combiné avec la source de chaleur imposé au niveau de la paroi va ensuite créer une colonne de vapeur s'élevant grâce à la gravité. On note également l'apparition d'instabilités hydrodynamiques dues au cisaillement entre la phase vapeur (en mouvement) et la phase liquide (immobile).

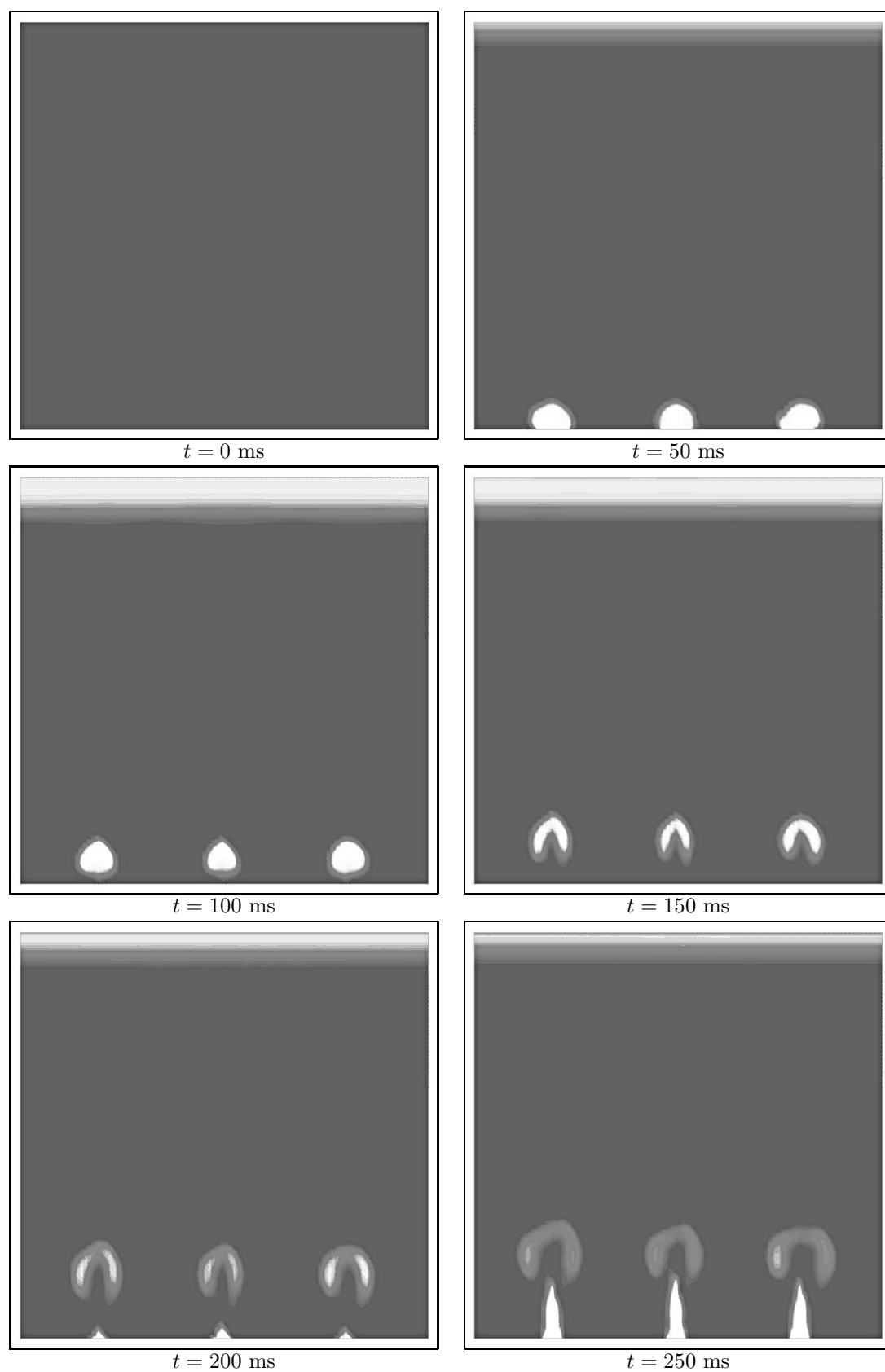


FIG. 6.15 – Profil de z obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 0 ms à 250 ms.

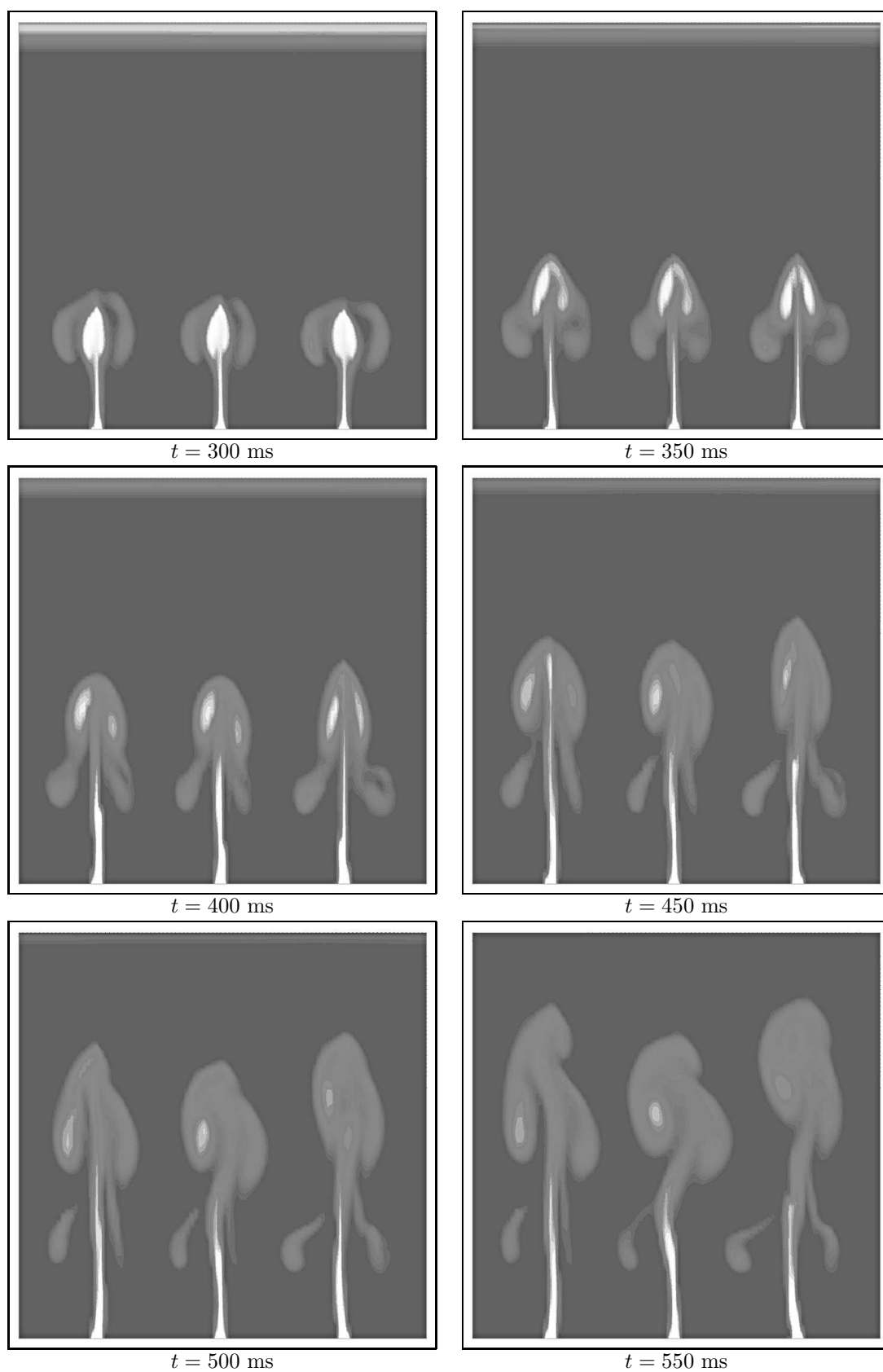


FIG. 6.16 – Profil de z obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 300 ms à 550 ms.

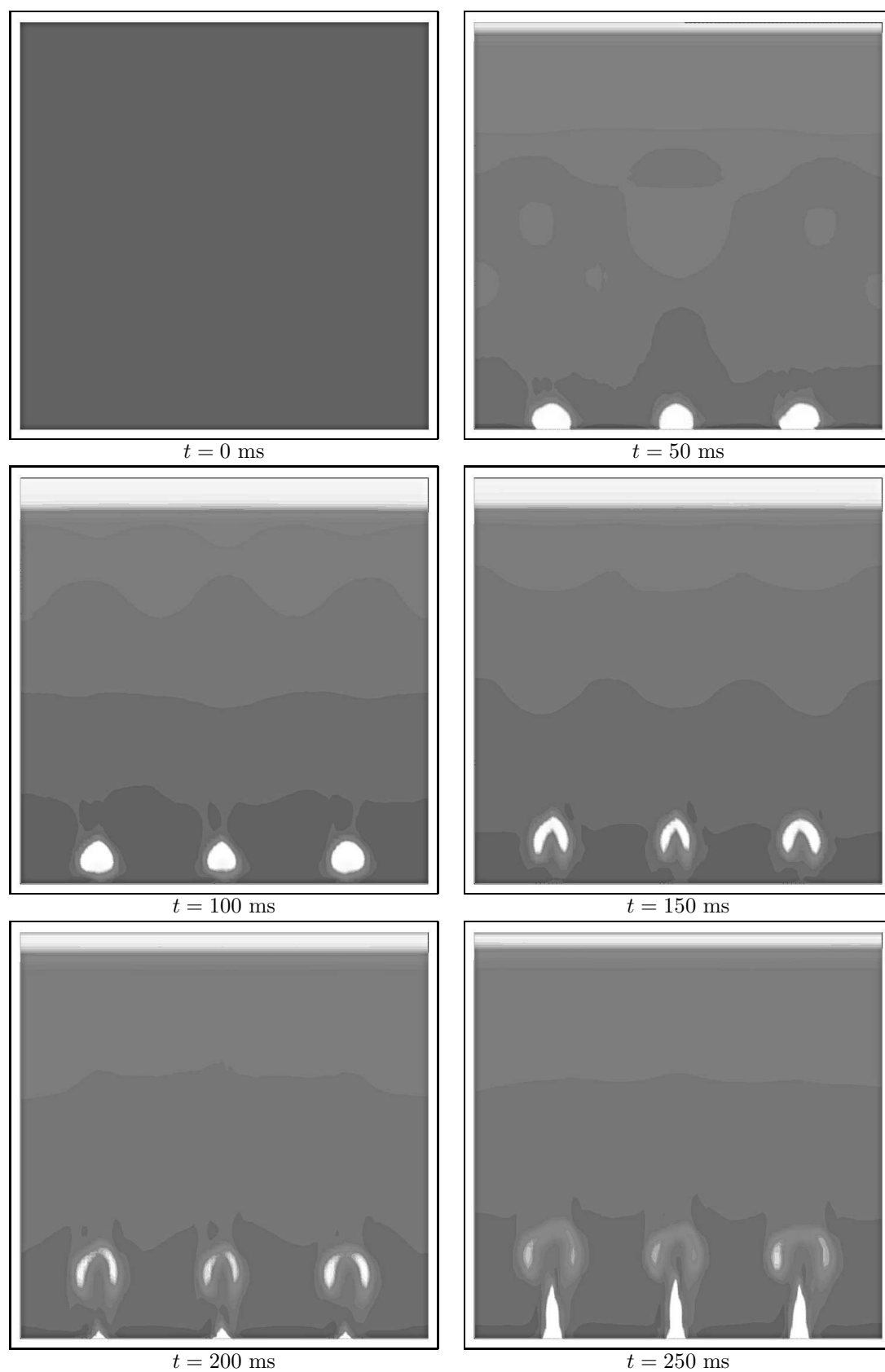


FIG. 6.17 – Profil de la densité obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 0 ms à 250 ms.

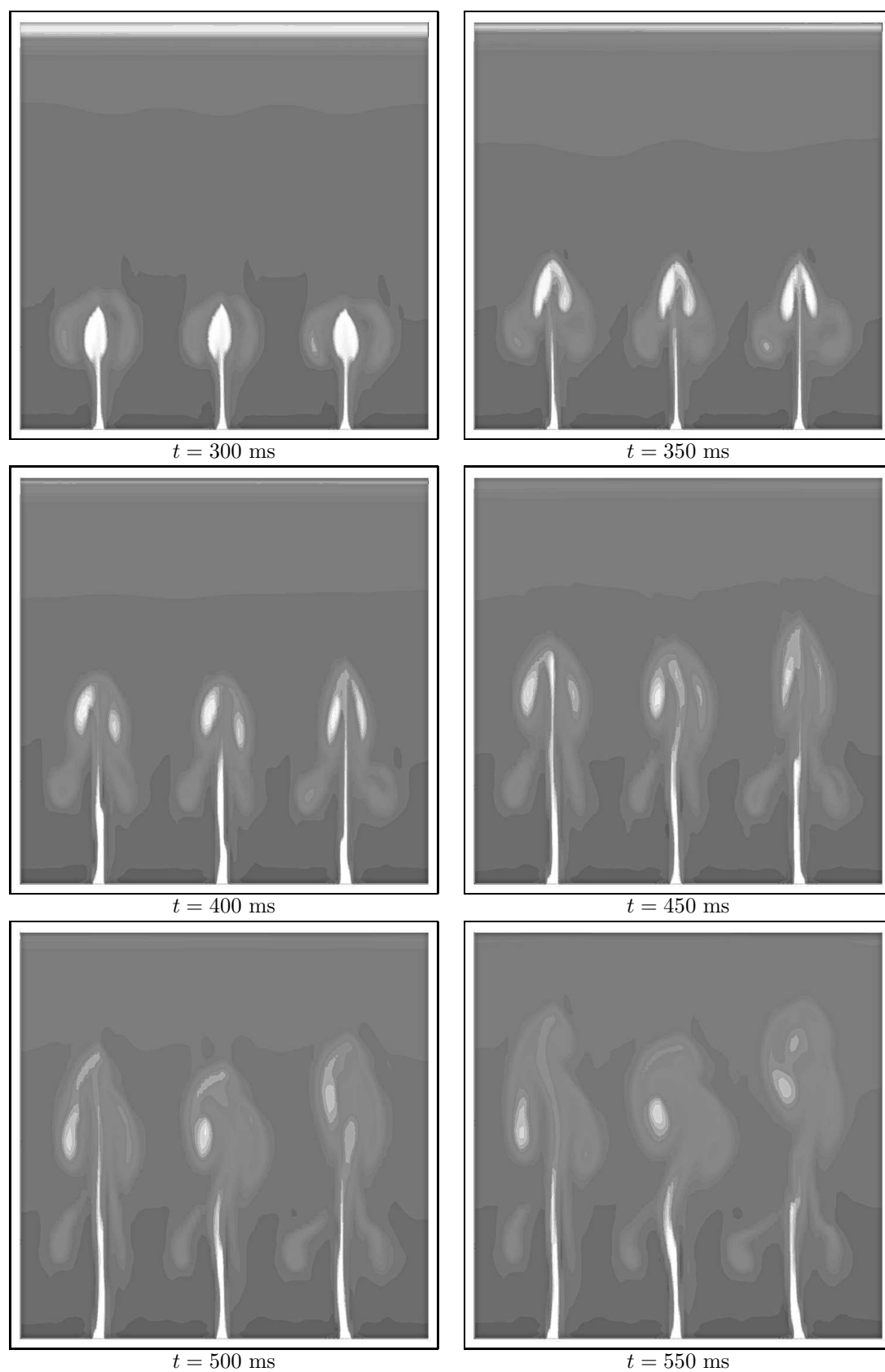
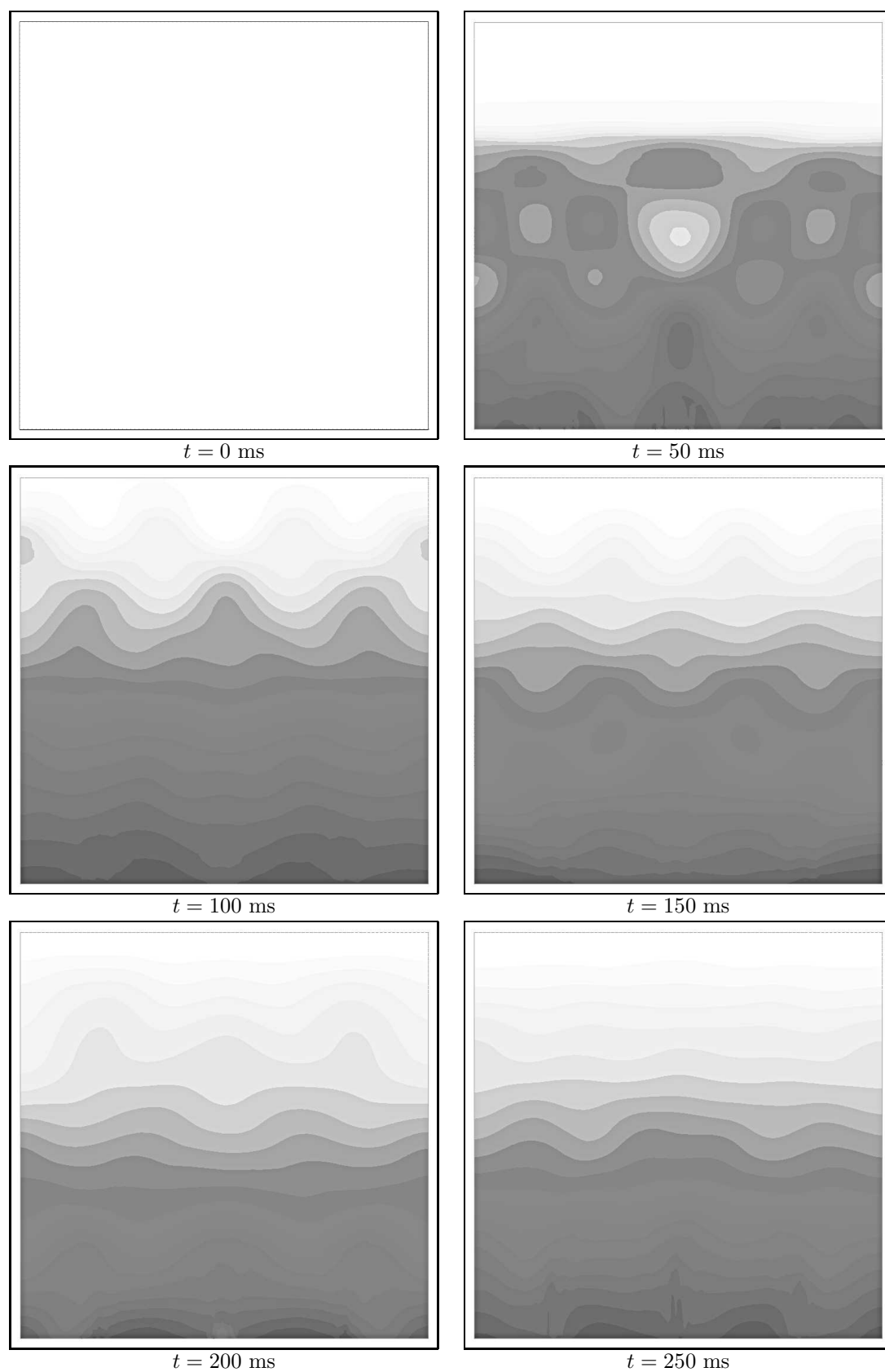


FIG. 6.18 – Profil de la densité obtenu avec le schéma MTT-équilibre ; t varie de 300 ms à 550 ms.

FIG. 6.19 – Profil de la pression obtenu avec le schéma MTT-équilibre ; t varie de 0 ms à 250 ms.

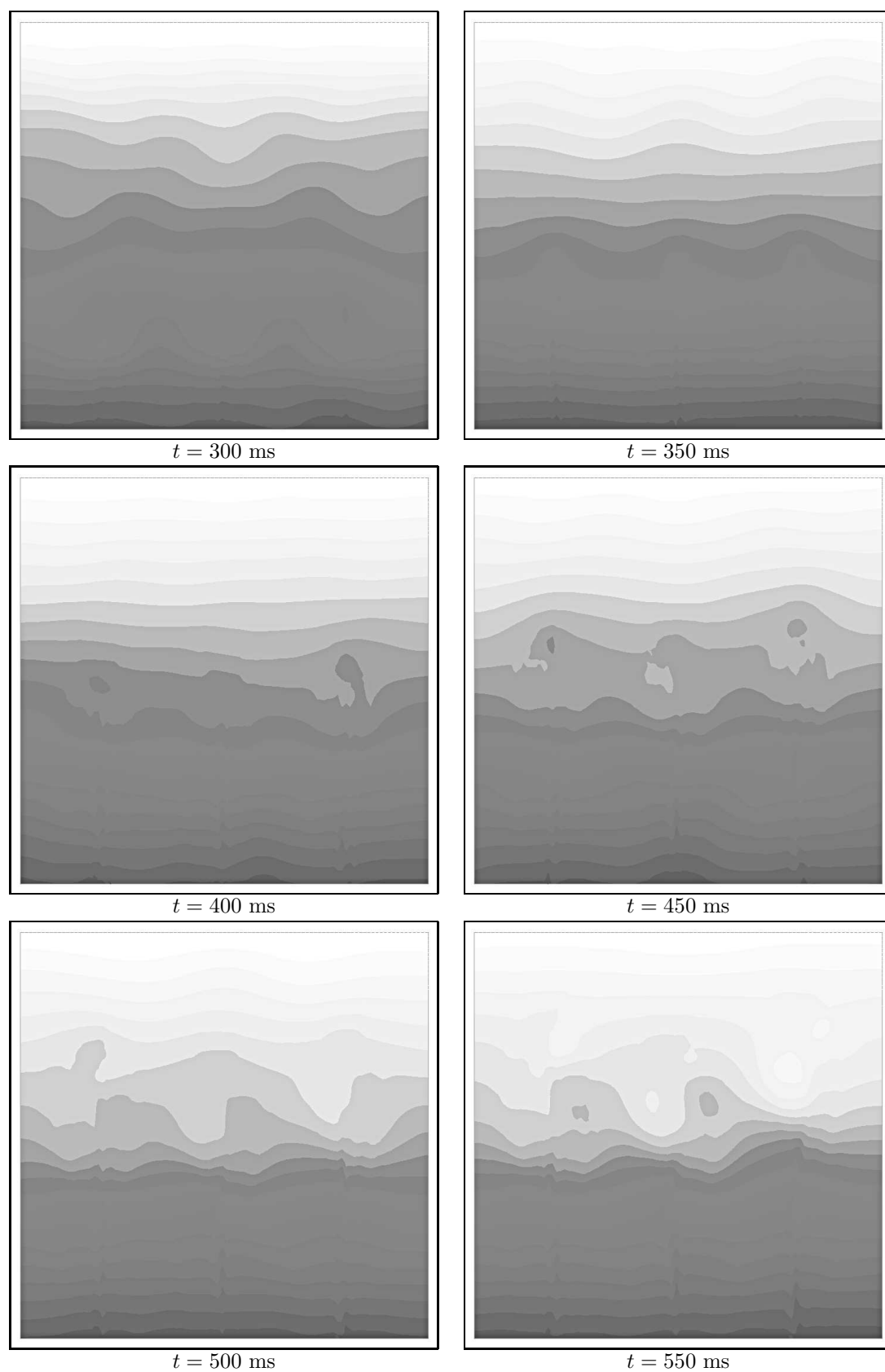


FIG. 6.20 – Profil de la pression obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 300 ms à 550 ms.

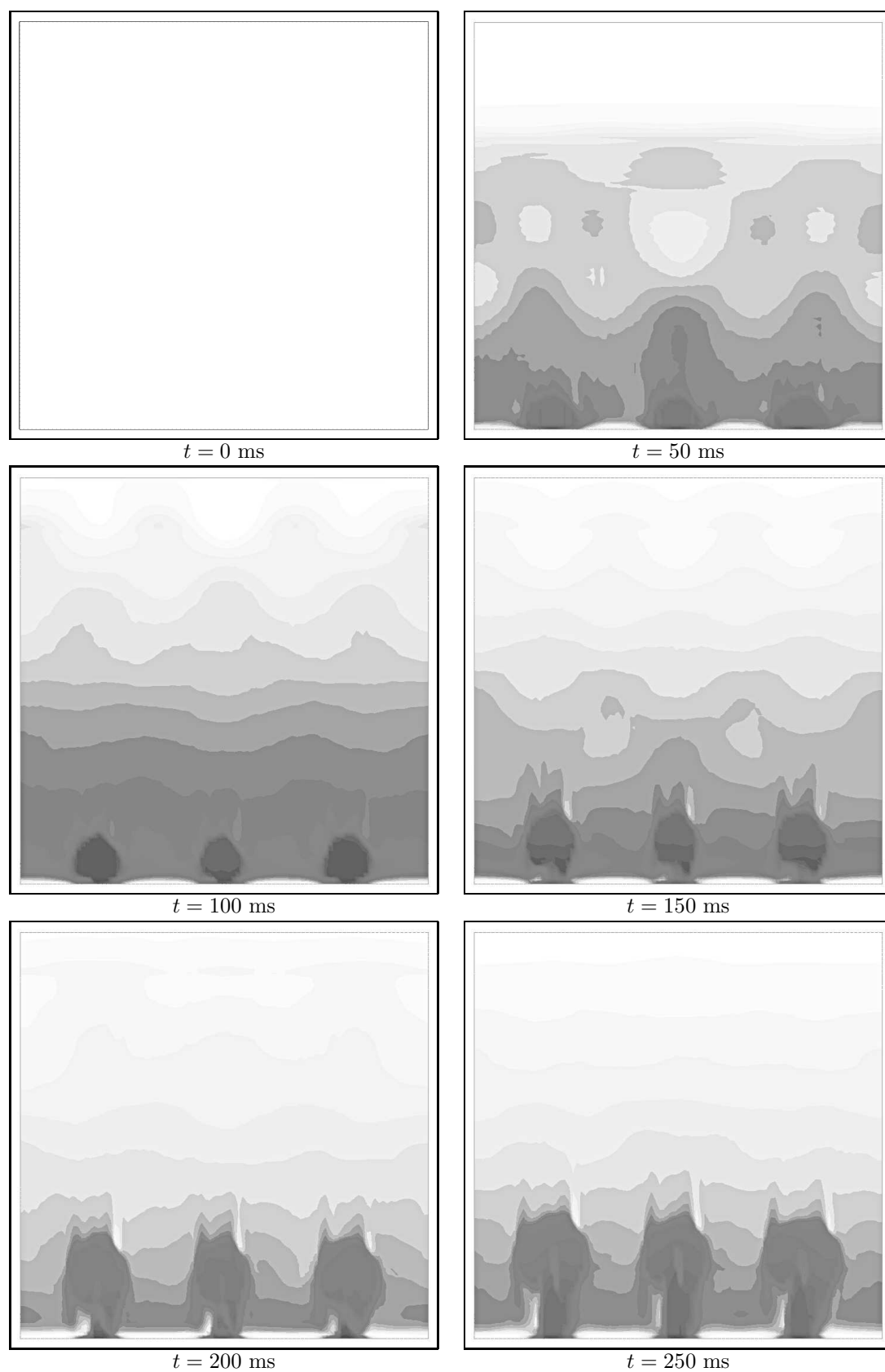


FIG. 6.21 – Profil de la température obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 0 ms à 250 ms.

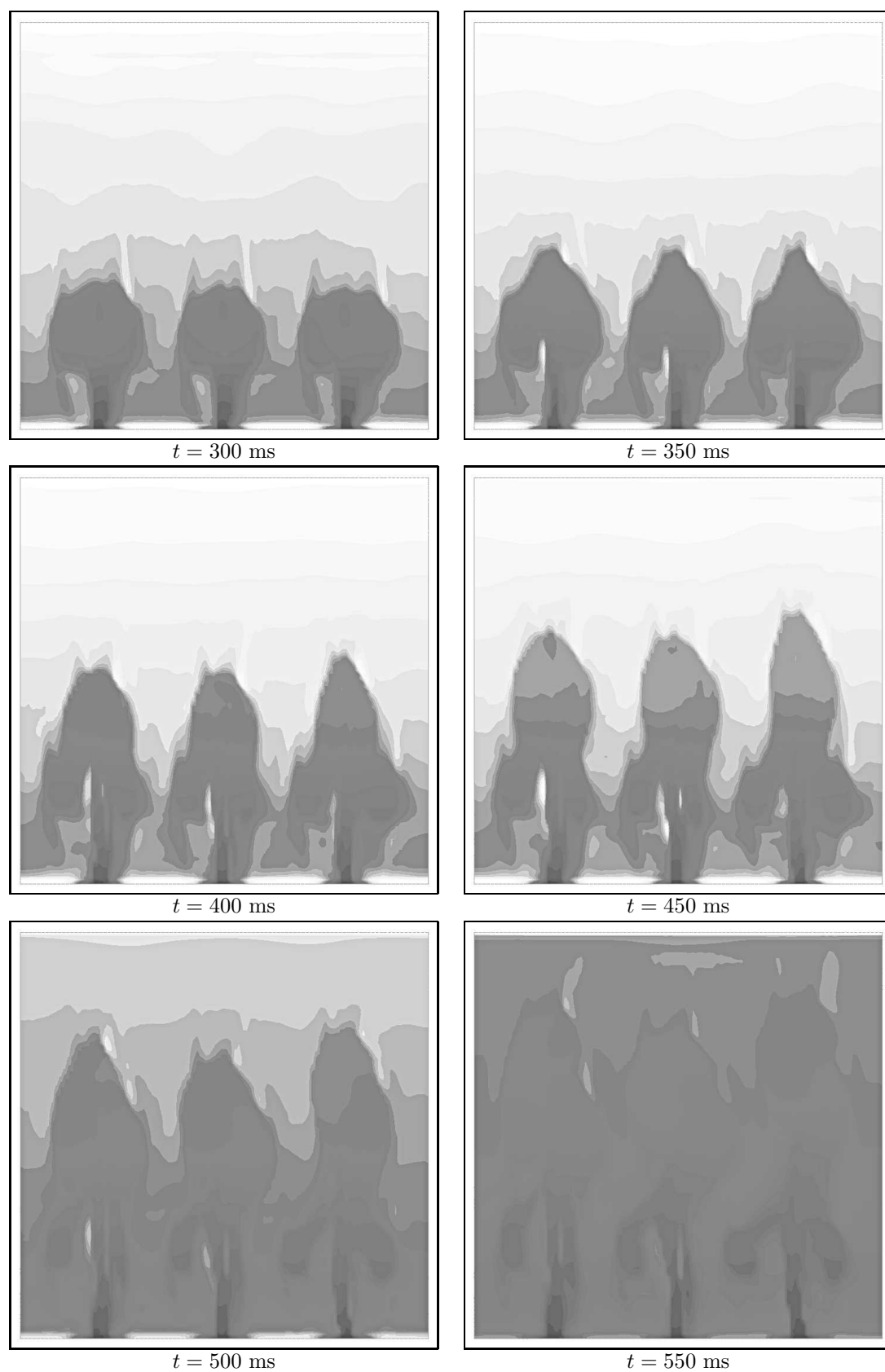


FIG. 6.22 – Profil de la température obtenu avec le schéma MTT-équilibre; t varie de 300 ms à 550 ms.

6.5 Conclusion

Grâce à une méthodologie générale, on a construit deux modèles bifluïdes de changement de phase. Pour cela deux relations de fermetures ont été utilisées à savoir la fermeture isotherme et la fermeture isobare. On peut donner une signification physique aux termes sources portant sur le modèle bifluïde de changement de phase avec fermeture isotherme alors que ce n'est pas le cas de la fermeture isobare. En ayant choisi le modèle avec la fermeture isotherme, on a montré certaines propriétés sur les modèles relaxés. On a également mis en évidence la possibilité de nucléer des bulles de vapeur dans du liquide à l'aide d'une paroi chauffante sans avoir une barre de seuil d'énergie. Cette propriété est fondamentale puisque le modèle était a priori un modèle à deux fluïdes et donc ne pouvaient pas "créer" du z .

Chapitre 7

Conclusion générale et perspectives

Notre travail a consisté dans un premier temps à étudier le p-système avec une loi d'état de type Van Der Waals. Une telle loi d'état est en effet susceptible de décrire des transitions de phase. En introduisant des dérivées spatiales sur le volume spécifique d'ordre deux (viscosité) et trois (capillarité), on définit un nouveau critère appelé critère visco-capillaire. En étudiant ce nouveau critère, on en déduit que si un état à gauche de l'interface est dans la phase liquide, alors il existe une seule vitesse de changement de phase $\sigma \geq 0$ et un seul état dans l'autre phase admissibles pour ce critère. On utilise ensuite ce critère pour étudier le problème de Riemann avec deux états à gauche et à droite de l'interface dans deux phases distinctes et proches des points de Maxwell. On montre que la solution de ce problème de Riemann est constituée de trois ondes dont l'une est une transition de phase. De plus, cette solution est unique dans la classe des solutions à trois ondes. On met ensuite en pratique ce résultat pour construire un solveur "exact" du problème de Riemann. La définition de la courbe de changement de phase est définie à l'aide d'une méthode de tir basée sur le critère visco-capillaire.

Pour approfondir cette approche, il faudrait étudier plus en détails ce critère et le problème de Riemann lorsque les états initiaux ne sont pas proches des points de Maxwell. Ces travaux sont actuellement à l'étude [47] et [28]. On pourrait également s'intéresser à une version approchée de la relation cinétique pour définir plus simplement la vitesse de changement de phase et donc la courbe de changement de phase. La résolution numérique du problème de Riemann serait ainsi plus aisée.

Nous avons ensuite travaillé sur la création d'un modèle bifluide de changement de phase thermodynamiquement cohérent avec le second principe de la thermodynamique. Pour simplifier la problématique, nous avons tout d'abord supposé que l'écoulement était isotherme. Pour construire le modèle, on a introduit un paramètre d'ordre abstrait $z \in [0, 1]$. L'interface est alors repérée par les (x, t) vérifiant $0 < z(x, t) < 1$. Par analogie avec les théories type théories du second gradient, nous avons supposé que l'énergie libre de mélange dépend des variables classiques de la thermodynamique mais aussi du gradient de z . En considérant ensuite le lagrangien du système (énergie cinétique diminuée de l'énergie libre massique), on a déduit les équations du mouvement par minimisation de l'action hamiltonienne. Le flux de masse sur les densités partielles et l'équation sur le paramètre d'ordre z sont ensuite choisis de tel sorte que la production d'entropie (physique) de mélange soit positive. En ne considérant plus ensuite la dépendance en gradient de z dans l'énergie libre, on note que le flux de masse correspond à une différence d'enthalpies libres des deux phases (terme en $\lambda(g_2 - g_1)$, $\lambda \geq 0$) et le terme source portant sur l'équation d'advection sur z correspond à une différence de pressions des deux phases (terme en $\kappa(P_1 - P_2)$, $\kappa \geq 0$). Ces deux termes peuvent être interprétés comme respectivement des déséquilibres thermodynamiques et mécaniques. Sachant qu'un retour à l'équilibre mécanique est plus rapide qu'un retour

à l'équilibre thermodynamique, nous avons étudié le sous-système obtenu par retour à l'équilibre mécanique ($P_1 = P_2$) appelé système M-équilibre et le sous-système obtenu par retour à l'équilibre mécanique et thermodynamique ($P_1 = P_2$ et $g_1 = g_2$) appelé système MT-équilibre. On montre alors que le système M-équilibre est strictement hyperbolique tandis que le système MT-équilibre est seulement faiblement hyperbolique. Il existe pour ce dernier système un intervalle $I = (\rho_1^*, \rho_2^*)$ dans lequel la pression est constante. Les valeurs propres sont donc réelles mais la jacobienne du flux n'est plus diagonalisable.

On a ensuite construit deux schémas numériques résolvant les systèmes M-équilibre et MT-équilibre basée sur une méthode de splitting en temps : on résout dans un premier temps le système obtenu avant retour à l'équilibre sans termes sources avec un schéma de Roe quasi-conservatif puis, dans le cas du système M-équilibre, on projette la solution obtenue sur la variété définie par l'équilibre de pressions $P_1 = P_2$ et on intègre le terme source portant sur les densités partielles et, dans le cas du système MT-équilibre, on projette la solution obtenue sur la variété définie par l'équilibre de pressions et d'enthalpies libres $P_1 = P_2$ et $g_1 = g_2$. Le premier schéma est alors appelé schéma M-équilibre et le second schéma, schéma MT-équilibre.

On montre alors que la solution obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre converge lorsque le pas d'espace et le pas de temps tendent vers zéro. Cette propriété montre donc qu'on arrive à capturer la bonne vitesse du front de changement de phase. On montre également que la solution obtenue à l'aide du schéma M-équilibre converge vers la solution obtenue à l'aide du schéma MT-équilibre lorsque λ tend vers $+\infty$.

Des travaux restent encore à effectuer pour justifier proprement les différents retours à l'équilibre et donc le passage à la limite $\kappa \rightarrow +\infty$ et $\lambda \rightarrow +\infty$. Un autre domaine de recherche serait l'étude du système faiblement hyperbolique MT-équilibre : stabilité, existence unicité de solutions...

Une autre perspective à plus long terme est la prise en compte dans le modèle de la dépendance en gradient de z dans l'énergie libre.

Le travail qui suit est naturel et consiste à étendre le modèle bifluide de changement de phase isotherme au cas des écoulements non isothermes. Pour cela, on a utilisé la même méthodologie : on s'est donné un lagrangien pour le système (énergie cinétique diminuée de l'énergie interne massique) et on a minimisé l'action hamiltonienne sous la contrainte des équations de masse. L'utilisation d'un tel principe ne rend pas compte des effets dissipatifs et c'est pourquoi on a effectué les calculs à entropie de mélange constante. Les énergies internes de chaque phase étant définies en fonction des densités et des entropies de chaque phase, en définissant l'énergie interne de mélange comme une moyenne pondérée des énergies internes des deux phases, il a fallu prescrire une relation de fermeture pour clore le système. Deux types de relation de fermeture ont été envisagées : la fermeture isotherme ($T_1 = T_2$) et la fermeture isobare ($P_1 = P_2$). On a ensuite de nouveau utilisé le second principe de la thermodynamique pour en déduire le flux de masse sur les densités partielles ainsi que l'équation sur le paramètre d'ordre z . Dans le cas de la fermeture isotherme, on retrouve les mêmes termes sources que pour le modèle bifluide de changement de phase isotherme tandis que dans le cas de la fermeture isobare, le flux de masse entre les deux phases est une différence d'enthalpies (terme en $\lambda(h_2 - h_1)$, $\lambda \geq 0$) et le terme source portant sur l'équation sur z est de la forme $\kappa(\rho_1\eta_1T_1 - \rho_2\eta_2T_2)$, $\kappa \geq 0$. On remarque donc que les termes obtenus avec la fermeture isotherme sont les mêmes que pour le modèle isotherme mais pas dans le cas de la fermeture isobare. De plus il n'y a pas de signification physique à ces termes obtenus dans le cas de la fermeture isobare. C'est pourquoi, on s'est intéressé par la suite au seul modèle avec fermeture isotherme. Nous avons ensuite montré que ce système est hyperbolique et nous avons étudié le système obtenu après passage à la limite (formelle) $\kappa \rightarrow +\infty$ tandis que λ reste fini (système MTH-équilibre) et le système obtenu après passage à la limite (formelle) $\kappa \rightarrow +\infty$ et $\lambda \rightarrow +\infty$ (système MTT-équilibre). On montre alors que le système MTH-équilibre est hyperbolique.

Malgré la non-hyperbolicité du système MTT-équilibre, on construit un schéma numérique pour discrétiser le système MTT-équilibre basée encore sur une méthode de splitting en temps

comme dans le cas du modèle bifluide de changement de phase isotherme : on résout dans un premier temps le système obtenu avant retour à l'équilibre sans termes sources puis on projette cette solution sur la variété d'équilibre définie par l'équilibre de pressions et d'enthalpies libres. Ce schéma est alors appelé schéma MTT-équilibre.

On montre ensuite des résultats numériques. On montre en particulier que ce modèle est capable de créer des bulles de vapeur lorsqu'on chauffe du liquide. Le système MTT-équilibre permet donc de nucléer des bulles de vapeur sans avoir besoin d'imposer des seuils d'énergie.

Les lois d'états utilisées lors des tests numériques sont des lois d'états de type gaz parfaits parce qu'elles permettent d'avoir une description analytique de la variété d'équilibre. Or, une telle loi d'état ne rend pas compte de la physique des liquides. Une perspective immédiate de ce travail est l'utilisation de lois d'états de type *stiffened gas* [54] ou plus généralement de lois d'états tabulées. La difficulté essentielle est de décrire convenablement la variété MTT-équilibre.

Une autre piste d'étude est la justification du passage à la limite $\kappa \rightarrow +\infty$ et ceci afin de valider complètement le système MTT-équilibre.

Troisième partie

Annexes

Annexe A

Quelques rappels sur les systèmes dynamiques

On s'intéresse à la stabilité de l'équilibre x^* du système autonome suivant

$$\frac{dx}{dt} = f(x), \quad x(0) = x_0, \quad (\text{A.1})$$

où $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ est régulière et $x : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^N$, N étant la dimension d'espace.

Rappelons qu'un équilibre de (A.1) est un point x^* tel que $f(x^*) = 0$. Dans la suite, on rappelle quelques définitions puis on donne quelques théorèmes généraux qui nous sont utiles dans l'étude des transitions de phase dynamiques.

Enfin, on notera $\phi(t, x_0)$ le flot de (A.1), c'est à dire la solution de (A.1) telle que $\phi(0, x_0) = x_0$. Pour une étude plus approfondie des systèmes dynamiques, on peut consulter par exemple [33, 36, 60].

A.1 Les premiers résultats

Définition A.1. Un équilibre x^* de (A.1) est dit

1. *stable si*

$$\forall \epsilon > 0 \quad \exists \eta > 0 \quad |x_0 - x^*| < \eta \Rightarrow |\phi(t, x_0) - x^*| < \epsilon, \quad \forall t \geq 0.$$

2. *instable sinon.*

Définition A.2. Un équilibre x^* de (A.1) est dit *asymptotiquement stable* s'il est stable et en addition

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \phi(t, x_0) = x^*,$$

lorsque $|x_0 - x^*| < \eta$.

Remarque A.1. Dans la suite il n'y aura que des équilibres instables ou asymptotiquement stables, on ne fera donc plus la distinction entre stable et asymptotiquement stable sauf cas contraire.

Théorème A.1. Supposons que la fonction f de (A.1) soit une matrice A ($f(x) = Ax$, $\forall x$) alors

1. si toutes les valeurs propres de A ont une partie réelle négative $x^* = 0$ est stable.
2. si toutes les valeurs propres de A ont une partie réelle strictement négative, $x^* = 0$ est asymptotiquement stable. De plus, il existe $\alpha > 0$ et $K > 0$ telles que

$$|\phi(t, x_0)| < K e^{-\alpha t} |x_0|, \quad \forall t > 0 \text{ et } x_0 \in \mathbb{R}^N.$$

3. s'il existe une valeur propre de A à partie réelle > 0 , 0 est instable.

On suppose désormais que 0 est un équilibre de (A.1), comme $f(x)$ est proche de $\nabla f(0)$ pour x petit, on peut se demander s'il existe un théorème analogue.

Théorème A.2. *Sous les hypothèses précédentes, notant $A = \nabla f(0)$, on a les résultats suivants*

1. si toutes les valeurs propres de A ont une partie réelle < 0 , alors 0 est asymptotiquement stable.
2. si toutes les valeurs propres de A ont une partie réelle ≤ 0 et s'il existe une valeur propre de A à partie réelle nulle, on ne peut rien dire.
3. s'il existe une valeur propre de A à partie réelle > 0 alors 0 est instable.

Remarque A.2. *Pour lever l'ambiguïté du deuxième point, il faut utiliser des fonctions de Liapounov (voir [36] ou [33]) qui sont des fonctions décroissantes le long des trajectoires.*

Définition A.3. *On suppose que $N = 2$ et on note λ_1 et λ_2 les valeurs propres de $\nabla f(0)$, alors on a les différents cas suivants :*

1. λ_i réelles et $\lambda_i < 0$, $i = 1, 2$ alors 0 est appelé un noeud stable ou attractif.
2. λ_i réelles et $\lambda_i > 0$, $i = 1, 2$ alors 0 est appelé un noeud instable ou répulsif.
3. λ_i réelles, $\lambda_1 < 0$ et $\lambda_2 > 0$ alors 0 est appelé un point selle ou un col.
4. λ_i imaginaires pures (et conjuguées) alors 0 est appelé un centre.
5. $\text{Im}(\lambda_i) \neq 0$ et $\text{Re}(\lambda_i) < 0$ (resp. > 0) alors 0 est appelé un foyer attractif (resp. répulsif).

A.2 Espaces invariants et sous-variétés stables et instables

Définition A.4. *Un sous-ensemble Ω de $\mathbb{R}^N$ est dit positivement (resp. négativement) invariant pour l'équation différentielle (A.1) si pour tout $x_0 \in \Omega$,*

$$\gamma^+(x_0) = \{\phi(t, x_0); t \geq 0\} \subseteq \Omega,$$

$$(\text{resp. } \gamma^-(x_0) = \{\phi(t, x_0); t \leq 0\} \subseteq \Omega)$$

et est dit invariant s'il est à la fois positivement et négativement invariant.

Définition A.5. *Soit U un voisinage d'un point d'équilibre x^* de (A.1). Alors on appelle ensemble local stable $W^s(x^*, U)$ et instable $W^u(x^*, U)$ de (A.1) les ensembles*

$$W^s(x^*, U) = \{x_0 \in U; \phi(t, x_0) \in U \quad \forall t \geq 0, \text{ et } \phi(t, x_0) \rightarrow x^*, t \rightarrow +\infty\},$$

$$W^u(x^*, U) = \{x_0 \in U; \phi(t, x_0) \in U \quad \forall t \leq 0, \text{ et } \phi(t, x_0) \rightarrow x^*, t \rightarrow -\infty\}.$$

Définition A.6. *On définit alors les ensembles globaux stables et instables par*

$$W^s(x^*) = \{x_0 \in \mathbb{R}^N; \phi(t, x_0) \rightarrow x^*, t \rightarrow +\infty\},$$

$$W^u(x^*) = \{x_0 \in \mathbb{R}^N; \phi(t, x_0) \rightarrow x^*, t \rightarrow -\infty\}.$$

Théorème A.3. *Soit un ouvert $\Omega \subseteq \mathbb{R}^N$ un ouvert tel que $0 \in \Omega$ et $f \in \mathcal{C}^1(\Omega)$. Soit $\phi(t, \cdot)$ le flot de (A.1). On suppose que $f(0) = 0$ et que $\nabla f(0)$ a k valeurs propres vérifiant $\text{Re}(\lambda) < 0$ et $(d - k)$ valeurs propres vérifiant $\text{Re}(\lambda) > 0$.*

Alors, il existe une sous-variété W^s de Ω de classe $\mathcal{C}^1$ et de dimension k tangente à

$$E^s = \bigoplus_{\text{Re} \lambda < 0} \text{Ker}(\nabla f(0) - \lambda \text{Id}),$$

telle que, $\phi(t, W^s) \subseteq W^s$ pour tout $t \geq 0$ et pour tout $x_0 \in W^s$, $\phi(t, x_0) \longrightarrow 0$, $t \rightarrow +\infty$.

De même, il existe une sous-variété W^u de Ω de classe $\mathcal{C}^1$ et de dimension $d - k$ tangente à

$$E^u = \bigoplus_{\operatorname{Re} \lambda > 0} \operatorname{Ker}(\nabla f(0) - \lambda \operatorname{Id})$$

telle que, $\phi(t, W^u) \subseteq W^u$ pour tout $t \leq 0$ et pour tout $x_0 \in W^u$, $\phi(t, x_0) \longrightarrow 0$, $t \rightarrow -\infty$.

Remarque A.3. Cela signifie que les espaces stables et instables de (A.1) ressemblent, à ceux du linéarisé près des points d'équilibres.

Pour plus de détails, on peut aller consulter [60].

Annexe B

Rappels généraux de thermodynamique

B.1 Description thermodynamique des états de la matière

De manière générale, on peut appeler la thermodynamique comme la science des transformations des états de la matière. Celle-ci doit permettre de calculer les principales grandeurs thermodynamiques qui caractérisent des états et elle fournit les méthodes pour préciser les conditions d'existence d'états physiques et de leurs transformations (la transition d'une phase à une autre, la stabilité ou l'instabilité).

Un état de la matière est caractérisé par un ensemble de propriétés physiques auxquelles on associe des grandeurs macroscopiques : le volume V , la masse m , l'aimantation M s'il s'agit d'un système magnétique, ... Pour caractériser cet état de la matière, on introduit une grandeur macroscopique appelée variable d'état. Par exemple, dans le cas des fluides, cela peut être le volume, la pression, la température ou encore la masse. Pour décrire les propriétés énergétiques du système, on introduit des fonctions d'états comme par exemple l'énergie interne, l'enthalpie ...

Soit ψ une fonction d'état des variables X et Y alors sa différentielle s'écrit

$$d\psi = \psi_X dX + \psi_Y dY$$

et ψ étant une différentielle totale exacte (aller d'un état (1) à un état (2) est indépendant du chemin emprunté), on a

$$\left(\frac{\partial \psi_X}{\partial Y}\right)_X = \left(\frac{\partial \psi_Y}{\partial X}\right)_Y$$

ce qui signifie encore que la variation de ψ d'un état initial (1) à un état final (2) ne dépend pas du processus mis en oeuvre de (1) à (2).

Il existe deux grandes catégories de variables et de fonctions d'état :

- celles qui sont invariantes par dilatation ou compression du système, que l'on qualifie d'intensives, telles que la température ou la pression
- celles qui dépendent de la dimension du système, que l'on qualifie d'extensives, telles que le volume, la masse ou l'énergie interne.

B.2 Potentiels thermodynamiques

Une manière générale d'obtention de toutes les fonctions d'état décrivant un système à l'aide de variables d'état et auxquelles on associe des formes différentielles exactes est la transformée de

Legendre. Celle-ci consiste à partir d'une courbe $Y = Y(X)$ à considérer l'abscisse A à l'origine de la tangente à la courbe $Y(X)$ en X

$$A = Y - \frac{dY}{dX}X,$$

puis à remplacer le couple de variables (X, Y) par le couple (Z, A) où Z est la dérivée de la courbe Y en X . Ceci revient à décrire la courbe $Y(X)$ par la famille des tangentes en chacun de ses points. Autrement dit, $Y(X)$ est la courbe enveloppe des tangentes définies par l'ensemble des couples (Z, A) . Ainsi, partant de la fonction d'état Y de la variable X , on aboutit à la définition d'une autre fonction d'état A de la variable Z , variable conjuguée de X .

D'une manière générale, les fonctions d'états que l'on peut obtenir par transformations de Legendre sont appelées potentiels thermodynamiques.

B.2.1 Principaux potentiels thermodynamiques

Le premier principe de la thermodynamique s'écrit

$$d\varepsilon = \delta Q + \delta W$$

où $d\varepsilon$ est la variation de l'énergie interne du système, δQ est la quantité de chaleur fournie au système et δW est la travail des forces fournies au système.

En supposant que la transformation est réversible et que le travail des forces est dû uniquement aux forces de pression, alors on peut écrire

$$\delta Q = Td\eta,$$

$$\delta W = -Pd\tau,$$

où η est l'entropie du système, P est la pression et τ est le volume spécifique. Ainsi, on a l'identité

$$d\varepsilon = Td\eta - Pd\tau. \quad (\text{B.1})$$

Remarquons que, puisque ε est une fonction d'état (postulat), ainsi que η et τ , la forme différentielle (B.1) est toujours valide, quelle que soit la transformation considérée. L'expression de la différentielle de ε (B.1) fait apparaître que les variables d'états *naturelles* associées à ε sont η et τ . On peut souhaiter travailler avec la pression plutôt qu'avec le volume spécifique τ . On introduit alors la transformée de Legendre correspondante pour obtenir une nouvelle fonction d'état h , appelée enthalpie définie par

$$h = \varepsilon + P\tau, \quad (\text{B.2})$$

de différentielle

$$dh = Td\eta + \tau dP. \quad (\text{B.3})$$

On peut également préférer travailler avec la température plutôt que l'entropie et l'on introduit la transformée de Legendre correspondante pour obtenir une nouvelle fonction d'état f , appelée énergie libre, définie par

$$f = \varepsilon - T\eta, \quad (\text{B.4})$$

de différentielle

$$df = -\eta dT - Pd\tau. \quad (\text{B.5})$$

Enfin, si on souhaite travailler avec les variables T et P , on introduit pour cela l'enthalpie libre g également appelée enthalpie de Gibbs définie par

$$g = \varepsilon - T\eta + P\tau, \quad (\text{B.6})$$

de différentielle

$$dg = -\eta dT + \tau dP. \quad (\text{B.7})$$

B.2.2 Grandeurs dérivées des potentiels thermodynamiques

Les potentiels thermodynamiques étant des différentielles totales exactes, on peut en déduire un certain nombre de relations entre les variables d'états et les dérivées de ces potentiels thermodynamiques.

Potentiel	Forme différentielle	Variables conjuguées	Relations de Maxwell
ε énergie interne	$d\varepsilon = Td\eta - Pd\tau$ Variables : η, τ	$T = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \eta}\right)_\tau$ $P = -\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right)_\eta$	$\left(\frac{\partial T}{\partial \tau}\right)_\eta = -\left(\frac{\partial P}{\partial \eta}\right)_\tau$
f énergie libre $\varepsilon - T\eta$	$df = -\eta dT - Pd\tau$ Variables : T, τ	$\eta = -\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_\tau$ $P = -\left(\frac{\partial f}{\partial \tau}\right)_T$	$\left(\frac{\partial \eta}{\partial \tau}\right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\tau$
h enthalpie $\varepsilon + P\tau$	$dh = Td\eta + \tau dP$ Variables : η, P	$T = \left(\frac{\partial h}{\partial \eta}\right)_P$ $\tau = \left(\frac{\partial h}{\partial P}\right)_\eta$	$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_\eta = \left(\frac{\partial \tau}{\partial \eta}\right)_P$
g enthalpie libre $\varepsilon - T\eta + P\tau$	$dg = -\eta dT + \tau dP$ Variables : T, P	$\eta = -\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_P$ $\tau = \left(\frac{\partial g}{\partial P}\right)_T$	$\left(\frac{\partial \eta}{\partial P}\right)_T = -\left(\frac{\partial \tau}{\partial T}\right)_P$

TAB. B.1 – Potentiels thermodynamiques usuels et relations de Maxwell

Il existe également une autre relation utile permettant de relier différentes dérivées partielles. Soit une fonction d'état ψ fonction de deux variables d'état X et Y . On a alors la relation générale suivante

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial X}\right)_Y \left(\frac{\partial X}{\partial Y}\right)_\psi \left(\frac{\partial Y}{\partial \psi}\right)_X = -1. \quad (\text{B.8})$$

Par exemple, si on prend l'équation d'état $P = P(\tau, T)$ alors

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \tau}\right)_T \left(\frac{\partial \tau}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_\tau = -1$$

et donc

$$\left(\frac{\partial \tau}{\partial T}\right)_P = \frac{(\partial P / \partial T)_\tau}{(\partial P / \partial \tau)_T}.$$

Bibliographie

- [1] R. Abeyaratne and J. K. Knowles. Kinetic relations and the propagation of phase boundaries in solid. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 114 :119–154, 1991.
- [2] R. Abgrall. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : a quasi-conservative approach. *J. Comp. Phys.*, 125 :150–160, 1996.
- [3] R. Abgrall and R. Saurel. A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. *J. Comp. Phys.*, 150 :425–467, 1999.
- [4] G. Allaire, S. Clerc, and S. Kokh. A five-equation model for the numerical simulation of interfaces in two-phase flows. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 2000.
- [5] G. Allaire, S. Clerc, and S. Kokh. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *J. Comp. Phys.*, 181 :577–616, 2002.
- [6] S. Benzoni-gavage. Stability of subsonic planar phase boundaries in a van der waals fluid. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 150 :23–55, 1999.
- [7] P. A. Bois. *Introduction à la mécanique théorique des fluides*. Ellipses, 2000.
- [8] F. Bouchut, Y. Brenier, J. Cortes, and J. F. Ripoll. A hierarchy of models for two-phase flows. *J. Nonlinear Sci.*, 10 :639–660, 2000.
- [9] F. Bouchut and F. James. One-dimensional transport equations with discontinuous coefficients. *Nonlinear Analysis theory methods & applications*, 32(7) :891–933, 1998.
- [10] F. Bouchut, S. Jin, and X. Li. Numerical approximations of pressurless and isothermal gas dynamics. *SIAM J. Numer. Anal.*, 41(1) :135–158, 2003.
- [11] F. Caro, F. Coquel, D. Jamet, and S. Kokh. DINMOD : A diffuse interface model for two-phase flows modelling. *Numerical method for hyperbolic and kinetic problems, IRMA series in mathematics and theoretical physics*, à paraître.
- [12] P. Casal and H. Gouin. Sur les interfaces liquide-vapeur non isothermes. *J. of theoretical and applied mechanics*, 7 :689–718, 1988.
- [13] C. Chalons and P. G. LeFloch. High-order entropy-conservative schemes and kinetic relations for van der waals fluids. *J. Comp. Phys.*, 168 :184–206, 2001.
- [14] G. Chantepredrix, P. Villedieu, and J. P. Vila. A compressible model for separated two-phase flows computations. *Proc. of ASME FEDSM'02*, 2002.
- [15] G.-Q. Chen, C. D. Levermore, and T.-P. Liu. Hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms and entropy. *Comm. Pure Appl. Math.*, 1992.
- [16] J. Cocchi and R. Saurel. A Riemann problem based method for the resolution of compressible multimaterial flows. *J. Comp. Phys.*, 137 :265–298, 1997.
- [17] C. G. Conley and J. A. Smoller. Viscosity matrices for two-dimensional nonlinear hyperbolic systems. *Comm. Pure Applied Math.*, XXIII :867–884, 1970.
- [18] F. Coquel, E. Godlewski, and B. Perthame. Some new Godunov and relaxation methods for two-phase flow problems. In *Godunov methods : Theory and applications*. Kluwer Academic Publishers, 2001.

- [19] F. Coquel and B. Perthame. Relaxation of energy and approximate Riemann solvers for general pressure laws in fluids dynamics. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35(6) :2223–2249, 1998.
- [20] J. M. Delhaye, M. Giot, and M. L. Riethmuller. *Thermohydraulics of two-phase systems for industrial design and nuclear engineering*. Hemisphere Publishing Corporation, 1981.
- [21] H. Fan. Traveling waves and riemann problems and computations of a model of the dynamics of liquid/vapor phase transitions. *D. Diff. Eq.*, 150 :385–437, 1998.
- [22] H. Fan. On a mode of the dynamics of liquid/vapor phase transitions. *SIAM J. Appl. Math.*, 60(4) :1270–1301, 2000.
- [23] H. Fan and M. Slemrod. *Dynamics flows with liquid/vapor phase transitions*. Handbook of Fluid Dynamics.
- [24] H. Fan and M. Slemrod. The riemann problem for systems of conservation laws of mixed type. In R. F. et al., editor, *Shock induced transitions and phase structures in general media*. Springer Verlag, Berlin, 1991.
- [25] C. Fife. *Mathematical aspects of reacting and diffusing systems*. Springer Verlag, 1980.
- [26] S. Gavrilyuk and H. Gouin. A new form of governing equations of fluids arising from Hamilton’s principle. *Int. Journal of Eng. Sci.*, 37 :1495–1520, 1999.
- [27] S. Gavrilyuk and R. Saurel. Mathematical and numerical modeling of two-phase compressible flows with micro-inertia. *J. Comp. Phys.*, 175 :326–360, 2002.
- [28] P. Goatin and P. LeFloch. The Riemann problem for a class of resonant hyperbolic systems of balance laws. preprint.
- [29] E. Godlewski and P.-A. Raviart. *Hyperbolic systems of conservation laws*. Mathématiques et applications, 1991.
- [30] E. Godlewski and P.-A. Raviart. *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*, volume 118. Springer, 1996.
- [31] M. Grinfeld. Nonisothermal dynamic phase transitions. *Quarterly of applied Math.*, XL-VII(1) :71–94, 1989.
- [32] M. E. Gurtin. On a theory of phase transitions with interfacial energy. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 87 :187–212, 1984.
- [33] J. Hale and H. Kocak. *Dynamics and bifurcations*. Springer Verlag, 1991.
- [34] B. T. Hayes and P. G. LeFloch. Nonclassical shocks and kinetic relations : strictly hyperbolic systems. *SIAM, J. Math. Anal.*
- [35] P. Helluy and T. Barberon. Finite volume simulation of cavitating flows. Technical Report 4824, INRIA, 2003.
- [36] M. Hirsch and S. Smale. *Differential equations, dynamical systems and linear algebra*. Academic Press, 1974.
- [37] E. Isaacson and B. temple. Nonlinear resonance in systems of conservation laws. *SIAM J. Appl. Math.*, 52(5) :1260–1278, 1992.
- [38] D. Jamet. *Etude des potentialités de la théorie du second gradient pour la simulation numérique directe des écoulements liquide-vapeur avec changement de phase*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1998.
- [39] D. Jamet. Thermodynamique et transitions de phase. Technical report, CEA/DEN/DTP/SMTH/LDTA, 2003.
- [40] D. Jamet, O. Lebaigue, N. Coutris, and J. M. Delhaye. The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid-vapor flows with phase change. *J. Comp. Phys.*, 169 :624–651, 2001.
- [41] S. Jaouen. *Etude mathématique et numérique de stabilité pour des modèles hydrodynamiques avec transition de phase*. PhD thesis, Univ. Paris 6, 2001.

- [42] S. Jin and C. Levermore. Numerical schemes for hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms. *J. Comp. Phys.*, 126 :449–467, 1996.
- [43] D. Juric and G. Tryggvason. A front tracking method for dendritic solidification. *J. Comp. Phys.*, 123 :127, 1996.
- [44] S. Kokh. *Aspects numériques et théoriques de la modélisation des écoulements diphasiques compressibles par des méthodes de capture d'interface*. PhD thesis, Univ. Paris 6, 2001.
- [45] S. Kotake and I. I. Glass. Flows with nucleation and condensation. *Prog. Aerospace Sci.*, 19 :129–196, 1981.
- [46] F. Lagoutière. *Modélisation mathématique et résolution numérique de problèmes de fluides à plusieurs constituants*. PhD thesis, Univ. Paris 6, 2002.
- [47] P. LeFloch and M. Shearer. Nonclassical Riemann solvers with nucleation. preprint.
- [48] P. G. LeFloch and M. D. Thanh. Nonclassical riemann solvers and kinetic relations i. a nonconvex hyperbolic model of phase transitions.
- [49] R. J. LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*. Birkhäuser Verlag, Berlin, 1990.
- [50] R. J. LeVeque. Balancing source terms and flux gradients in high-resolution Godunov methods : the quasi-steady wave-propagation algorithm. *J. Comp. Phys.*, 146 :346–365, 1998.
- [51] R. J. LeVeque and H. C. Yee. A study of numerical methods for hyperbolic conservation laws with stiff source terms. *J. Comp. Phys.*, 86 :187–210, 1990.
- [52] T.-P. Liu. The riemann problem for general 2×2 conservation laws. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 199 :89–112, 1974.
- [53] J. Massoni, R. Saurel, B. Nkonga, and R. Abgrall. Proposition de méthodes et modèles eulériens pour les problèmes à interfaces entre fluides compressibles en présence de transfert de chaleur : Some models and eulerian methods for interface problems between compressible fluids with heat transfer. *Int. J. of Heat and Mass Transfert*, 45(6), 2002.
- [54] O. L. Metayer. *Modélisation et résolution de la propagation de fronts perméables : application aux fronts d'évaporation et de détonation*. PhD thesis, Université de Provence (Aix-Marseille 1), 2003.
- [55] K. Mischaikow. Dynamic phase transitions : a connection matrix approach. In B. L. Keyfitz and M. Shearer, editors, *Nonlinear evolution equations that change type*. Springer Verlag, 1990.
- [56] S. Osher and J. Sethian. Front propagating with curvature dependent speed : algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *J. Comp. Phys.*, 78 :12–49, 1988.
- [57] P. Papon and J. Leblond. *Thermodynamique des états de la matière*. Hermann, 1990.
- [58] P. Papon, J. Leblond, and P. H.E.Meijer. *Physique des transitions de phases*. 1999.
- [59] L. Pareschi. Central differencing based numerical schemes for hyperbolic conservation laws with relaxation terms. *SIAM J. Numer. Anal.*, 39(4) :1395–1417, 2000.
- [60] L. Perko. *Differential equations and dynamical systems*. Springer Verlag, 1991.
- [61] A. Quarteroni and A. Valli. *Numerical approximation of partial differential equations*. Springer Verlag, 1991.
- [62] F. M. Salam. The Melnikov technique for highly dissipative systems. *SIAM J. Appl. Math.*, 47(2) :232–243, 1987.
- [63] R. Saurel and R. Abgrall. A simple method for compressible multifluid flows. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(3) :115–1145, 1999.
- [64] S. Schechter and M. Shearer. Transversality for undercompressive shocks in riemann problems. In M. Shearer, editor, *Viscous profiles and numerical methods for shock waves*, chapter 13. SIAM, 1991.
- [65] J. Serrin. *New perspectives in thermodynamics*. Springer Verlag, 1986.

- [66] M. Shearer. The riemann problem for a class of conservation laws of mixed type. *J. Diff. Eq.*, 46 :426–443, 1982.
- [67] M. Shearer. Admissibility criteria for shock wave solutions of a system of conservation laws of mixed type. *Proc. Royal Soc. Edinburgh*, 93A :133–244, 1983.
- [68] K. Shyue. A fluid–mixture type algorithm for compressible multicomponent flow with Van Der Walls equation of state. *J. Comp. Phys.*, (156) :43–88, 1999.
- [69] M. Slemrod. Admissibility criteria for propagating phase boundaries in a van der waals fluid. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 83 :301–316, 1983.
- [70] J. Smoller. *Shock waves and reaction diffusion equations*. Springer Verlag, 1983.
- [71] E. Tadmor. The numerical viscosity of entropy stable schemes for systems of conservation laws. *Math. of Comp.*, 49(179) :91–103, 1987.
- [72] E. F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics, a practical introduction*. Springer Verlag, 1999.
- [73] L. Truskinovsky. Kinks versus shocks. In R. Fosdick and al., editors, *Shock induced transitions and phase structures in general media*. Springer Verlag, Berlin, 1991.
- [74] A. Tzavaras. Viscosity and relaxation approximations for hyperbolic systems of conservation laws. In D. Kroener, M. Ohlberger, and C. Rohde, editors, *An introduction to recent developments in theory and numerics for conservation laws*, volume 5, pages 73–122. Springer Berlin/Heidelberg, 1998.

Publication

DINMOD, A Diffuse Interface Model for Two-Phase Flows Modelling

*Florian Caro**

*Frédéric Coquel[†]
Samuel Kokh**

Didier Jamet[‡]

Abstract. We present an isothermal model for liquid-vapor phase transition. We use a Hamilton principle to derive the conservative part of the system and we propose additional stiff phase change source terms that are compatible with the second thermodynamic principle. These terms are considered as relaxation terms and defined an equilibrium manifold for the system. We formally study the equilibrium return process. While the original system is hyperbolic, the equilibrium limit system is only weakly hyperbolic. Finally, we propose a numerical scheme based on the relaxed system.

1. Introduction

With the rise of computing power the simulation of small scales phenomena is becoming an important challenge for the study of phase transitions. This aims at the description of physical processes involved in a wide range of industrial applications such as the boiling crisis prediction.

We adopt here a compressible diffuse interface model: the interface is defined thanks to the introduction of an abstract order parameter z . This parameter takes the value 1 (*resp.* 0) in phase 1 (*resp.* 2) denoting here the liquid (*resp.* vapor) phase. Therefore, the interface evolution is totally described by the function $(x, t) \mapsto z(x, t)$.

For a given interface position, the fluids properties are prescribed through the following lines: for points belonging to the interface, *i.e.* for (x, t) such that $0 < z(x, t) < 1$, fluids governing equations are coupled thanks to a non-classical thermodynamical description which allows mass transfer between phases. In pure fluids areas, each phase is subjected to its own classical thermodynamical Equation Of State (EOS).

We restrict our study to the case of isothermal flows and isothermal equilibrium between phases. In order to derive a thermodynamically consistant model including mass transfer we shall make use of the following lines: prescribe a free energy for the diffuse interface system (potential energy), retrieve the motion equations thanks to a Hamilton principle. The mathematical entropy production (free energy plus kinetic energy) is then constrained to be non-negative which provides us an entropy inequality, it also leads us to a dissipation compatible model for both mass transfer and evolution process for z .

The resulting system issued from our modelling task can be analyzed as a non-homogeneous hyperbolic system endowed with an entropy inequality that embraces the stiff source terms actions. Instead of a direct numerical discretization work we pursue the model study by looking into the

*DEN/DM2S/SFME/LETR, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

[†]LJLL, Paris VI University, 175 rue du Chevaleret, 75013 Paris, France

[‡]DEN/DTP/SMTH/LDTA, CEA Grenoble, 17 rue des Martyrs, 38054 Grenoble cedex 9, France

equilibrium states manifolds connected to the source terms. We determine two such manifolds, the first one is related to a mechanical process, which we shall refer to as the “M-equilibrium”. The second one relates to a thermodynamical process occurring after the M-equilibrium, this shall be referred to as the “MT-equilibrium”. We shall see that the return to MT-equilibrium process, can be interpreted thanks to energy based arguments. This sheds some light on the MT-equilibrium system structures. Unfortunately this system fails to fit the classical hyperbolic well-posedness criteria. Nevertheless, the relaxed systems will allow us to design two numerical schemes: these schemes when tested against two simple simulations display numerical stability and a coherent behaviour as for the MT-equilibrium states when reaching space convergence.

2. System Modelling

2.1. General Modelling Assumptions

The starting point of our roadmap is the postulate of a Lagrangian associated with the system. We introduce a few notations: let ρ_α be the density of the phase $\alpha = 1, 2$, we define the system density ρ by

$$\rho = z\rho_1 + (1 - z)\rho_2,$$

Let $y_\alpha = \rho_\alpha z_\alpha / \rho$ be the phase $\alpha = 1, 2$ concentration, where $z_1 = z$, $z_2 = 1 - z$ and $y = y_1$. Fluids are supposed to have the same velocity $\mathbf{u}$ and we note $\mathbf{j} = \rho\mathbf{u}$ the fluid momentum. We first make the following general assumption concerning the system free energy f , we suppose that

$$f = f(\rho, y, z, \nabla z).$$

Let us note that we allow dependences on ∇z until applications in section 3 by analogy with microstructure driven continuum mechanics [2, 11] such as capillarity effects in second gradient fluids theory.

Finally we define the lagrangian density L for the two-phase system using the classical expression

$$L(\rho, \mathbf{j}, y, z, \nabla z) = \frac{1}{2}\rho|\mathbf{u}|^2 - \rho f = \frac{|\mathbf{j}|^2}{2\rho} - \rho f \quad (2.1)$$

2.2. Lagrangian Action Minimization

We consider the motion of a volume of fluid Ω between two instants t_1 and $t_2 > t_1$. According to (2.1), this volume is subjected to transformations which are totally described by $(x, t) \mapsto (\rho, \mathbf{j}, y, z, \nabla z)(x, t)$. If we note X the lagrangian material reference coordinates and x the eulerian coordinates, there exists a map χ such that $x = \chi(X, t)$.

Let $(x, t, \nu) \mapsto (\hat{\rho}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{y}, \hat{z}, \widehat{\nabla z})(x, t, \nu)$ be a perturbation of given functions $(x, t) \mapsto (\rho, \mathbf{j}, y, z, \nabla z)(x, t)$ parametrized by a real coefficient ν . We add here some classical assumptions: the pertubated motion verifies mass conservation, for any physical quantity a if $\hat{a}$ is its corresponding perturbed state, we suppose that $\hat{a}(x, t, \nu = 0) = a(x, t)$ and that $\hat{a}(x, t, \nu) = 0$ for $x \in \partial\Omega$.

Let us define the virtual displacement ξ associated to the perturbation

$$\xi(X, t) = \left(\frac{\partial \hat{x}}{\partial \nu} \right)_{X, t} (X, t, \nu = 0).$$

For any physical quantity a we define the operator δ as follows

$$\delta a(x, t) = \left(\frac{\partial \hat{a}}{\partial \nu} \right)_{\hat{x}, t} (x, t, \nu = 0).$$

We shall now connect $\delta \rho$ and $\delta \mathbf{j}$ to ξ thanks to the mass conservation ansatz, this hypothesis reads

$$\left(\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \nu} \right)_{\hat{x}, t} + \sum_i \frac{\partial}{\partial \hat{x}_i} \left[\hat{\rho} \left(\frac{\partial \hat{x}_i}{\partial \nu} \right)_{X, t} \right] = 0,$$

which gives immediately

$$\boxed{\delta \rho = -\text{div}(\rho \xi)} \quad (2.2)$$

We now turn to the expression of $\delta \mathbf{u}$. We have

$$\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial \nu} \right)_{X, t} = \frac{\partial}{\partial \nu} \left(\hat{\mathbf{u}} \left[\hat{\chi}(X, t, \nu), t, \nu \right] \right) = \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial \nu} \right)_{\hat{x}, t} + \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial \hat{x}} \right)_{\nu, t} \left(\frac{\partial \hat{\chi}}{\partial \nu} \right)_{X, t}. \quad (2.3)$$

The definition of $\hat{\mathbf{u}}$ reads $\hat{\mathbf{u}}(X, t, \nu) = (\partial \hat{\chi} / \partial t)_{X, \nu}$, differentiating this expression according to t and using the definition of ξ provides

$$\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial \nu} \right)_{X, t} (X, t, \nu = 0) = \left(\frac{\partial \xi}{\partial t} \right)_X (X, t) = \frac{d\xi}{dt}(x, t),$$

where $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla$. Hence, by setting $\nu = 0$ in (2.3), using the above relation, we find

$$\delta \mathbf{u} = \frac{d\xi}{dt} - \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \xi.$$

As $\delta \mathbf{j} = \rho \delta \mathbf{u} + \mathbf{u} \delta \rho$, and relation (2.2), we have

$$\boxed{\delta \mathbf{j} = \frac{\partial}{\partial t}(\rho \xi) + \text{div}(\xi \otimes \mathbf{j} - \mathbf{j} \otimes \xi),} \quad (2.4)$$

where if $a = (a_i)_i$ and $b = (b_i)_i$ are two vectors, $\text{div}(a \otimes b)$ is a vector defined as

$$\text{div}(a \otimes b)_i = \sum_j \frac{\partial (a_i b_j)}{\partial x_j}.$$

In the following, we will note

$$R = \frac{\partial L}{\partial \rho}. \quad (2.5)$$

We now define the Hamilton action associated to Ω between t_1 and t_2

$$\mathcal{A}(\nu) = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega} L(\hat{\rho}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{y}, \hat{z}, \widehat{\nabla z}) \, dx \, dt.$$

According to the classical least action principle, $(\rho, \mathbf{j}, y, z, \nabla z)$ verifies relations that extremize $\mathcal{A}$ over the set of selected perturbations. And supposing that the virtual displacements of ξ , δz and δy are regular functions, by differentiation according to ν , we find that

$$\delta \mathcal{A} = \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ \frac{\partial L}{\partial \mathbf{j}} \delta \mathbf{j} + \frac{\partial L}{\partial \rho} \delta \rho + \frac{\partial L}{\partial y} \delta y + \frac{\partial L}{\partial z} \delta z + \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \delta (\nabla z) \right\} dx \, dt. \quad (2.6)$$

As differentiation according to ν at constant $\hat{x}$ commutes with differentiation according to $\hat{x}$, we have the straightforward commutation property

$$\boxed{\delta (\nabla z) = \nabla (\delta z).} \quad (2.7)$$

Thus, integrating by parts in (2.6) together with (2.2), (2.4) and (2.7) provides

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A} = & \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ -\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} + \rho \nabla R \right\} \cdot \xi \, dx \, dt \\ & + \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ \frac{\partial L}{\partial z} - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right) \right\} \delta z \, dx \, dt + \int_{\Omega \times [t_1, t_2]} \left\{ \frac{\partial L}{\partial y} \right\} \delta y \, dx \, dt. \end{aligned}$$

Since the above relation is true for arbitrary ξ , δz and δy , the minimization of the Hamilton action $\mathcal{A}$ is equivalent to

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} - \rho \nabla R = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial z} - \operatorname{div} \left(\frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right) = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial y} = 0, \end{cases} \quad (2.8)$$

which provides the following equation for the impulsion

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} &+ \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \operatorname{div}[(\rho |\mathbf{u}|^2 + \rho R) \mathbf{Id}] \\ &- \operatorname{div} \left(\nabla z \otimes \frac{\partial L}{\partial (\nabla z)} \right) + \operatorname{div}(L \mathbf{Id}) = 0. \end{aligned}} \quad (2.9)$$

The motion equations have been derived using a general free energy for the system. We shall detail in the next section a specific free energy that will be used for modelling work.

2.3. Free Energy Choice

In the following, we will note f_α , g_α and P_α respectively the free energy, the free enthalpy (or Gibbs enthalpy) and the pressure of the phase α . In the case of an isothermal process, these quantities only depend on ρ_α and are connected by

$$\begin{cases} P_\alpha &= \rho_\alpha^2 \frac{df_\alpha}{d\rho_\alpha} \\ \frac{dP_\alpha}{d\rho_\alpha} &= \rho_\alpha \frac{dg_\alpha}{d\rho_\alpha}, \end{cases} \quad (2.10)$$

which also read equivalently in term of the volumic free energy $F_\alpha = \rho_\alpha f_\alpha$

$$\begin{cases} g_\alpha &= \frac{dF_\alpha}{d\rho_\alpha}, \\ P_\alpha &= \rho_\alpha \frac{dF_\alpha}{d\rho_\alpha} - F_\alpha. \end{cases} \quad (2.11)$$

We now postulate the following expression for f

$$\boxed{\rho f = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} z_{\alpha} f_{\alpha} + \mathcal{H}(z) + \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2,} \quad (2.12)$$

where $\mu_0 \geq 0$ and $\mathcal{H}$ is a double-well Cahn-Hilliard type potential.

The definition (2.5) of R gives

$$R = -\frac{1}{2} \frac{|\mathbf{j}|^2}{\rho^2} - f - \rho \sum_{\alpha} \frac{y_{\alpha}^2}{z_{\alpha}} \frac{df_{\alpha}}{d\rho_{\alpha}}.$$

Joint to relation (2.10) this reads

$$\boxed{\rho R = -\frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 - \rho f - \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha}.} \quad (2.13)$$

Relations (2.9), (2.12) and (2.13) provide the following equation for the impulsion

$$\boxed{\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \operatorname{div}(P \operatorname{Id}) = -\mu_0 \operatorname{div}(\nabla z \otimes \nabla z)} \quad (2.14)$$

where P is a generalized pressure given by

$$\boxed{P = \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha} - \mathcal{H}(z) - \frac{\mu_0}{2} |\nabla z|^2.} \quad (2.15)$$

2.4. Dissipative Structures

Euler equations for isothermal flows are equipped with the natural entropy

$$\eta = \rho \left(f + \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} \right).$$

In order to prescribe the flux mass between phase 1 and phase 2, we will use the second thermodynamical principle which claims that the dissipation of η has to be non-negative.

The evolution of η reads

$$\rho \frac{d}{dt} \left(f + \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} \right) = -\operatorname{div}(\mathbf{q}) - \operatorname{div}[(P \operatorname{Id} + \mu_0 \nabla z \otimes \nabla z) \mathbf{u}] - \Delta_{\eta} \quad (2.16)$$

where Δ_{η} is entropy dissipation and q is a heat flux.

Multiply the impulsation equation (2.9) by $\mathbf{u}$ gives the kinetic energy equation

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{|\mathbf{u}|^2}{2} \right) = -\mathbf{u} \cdot \operatorname{div}(P \operatorname{Id} + \mu_0 \nabla z \otimes \nabla z).$$

We compute the left hand side of (2.16) using (2.10) and (2.12)

$$\begin{aligned} \rho \frac{d}{dt} \left(f + \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} \right) &= \operatorname{div} \left(\mu_0 \nabla z \frac{dz}{dt} \right) - \operatorname{div}(P \operatorname{Id} + \mu_0 \nabla z \otimes \nabla z) \mathbf{u} \\ &\quad + \rho \frac{dy}{dt} (g_1 - g_2) + \frac{dz}{dt} \left(P_2 - P_1 + \frac{d\mathcal{H}}{dz} - \operatorname{div}(\mu_0 \nabla z) \right). \end{aligned}$$

The above relation and the relation (2.16) provide

$$\mathbf{q} = -\mu_0 \nabla z \frac{dz}{dt}$$

and

$$\Delta_{\eta} = \rho \frac{dy}{dt} (g_2 - g_1) + \frac{dz}{dt} \left(P_1 - P_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \operatorname{div}(\mu_0 \nabla z) \right). \quad (2.17)$$

Let us remark that no ansatz has been made so far concerning the relations verified by dy/dt and dz/dt . Indeed, such assumptions are still to be prescribed. We see that relation (2.17) leads us to a very simple choice for dy/dt and dz/dt that ensures Δ_η positivity, namely

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{dy}{dt} = \lambda(g_2 - g_1), \\ \frac{dz}{dt} = \kappa \left(P_1 - P_2 - \frac{d\mathcal{H}}{dz} + \mu_0 \Delta z \right), \end{array} \right. \quad (2.18)$$

where λ and κ are non-negative modelization functions which can be interpreted as relaxation parameters.

3. System Properties

We assume now that $\mathcal{H} \equiv 0$ and $\mu_0 = 0$. For regular solutions, model reads

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\rho_1 z_1) + \text{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) = \lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \text{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) = -\lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \text{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \text{Id}) = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z = \kappa(P_1 - P_2), \end{array} \right. \quad (3.19)$$

with P defined as

$$P = \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha}.$$

We will consider in the following the study of the sole convective terms

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\rho_1 z_1) + \text{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \text{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \text{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \text{Id}) = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z = 0. \end{array} \right. \quad (3.20)$$

3.1. Hyperbolicity of The Homogeneous System

Considering smooth solutions of (3.20) and let be $\mathbf{V} = (\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, \rho u, z)^T$ then (3.20) reads in 1-D

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \mathbf{V} + A(\mathbf{V}) \partial_x \mathbf{V} = 0, \\ A(\mathbf{V}) = \begin{pmatrix} uy_2 & -uy_1 & y_1 & 0 \\ -uy_2 & uy_1 & y_2 & 0 \\ c_1^2 - u^2 & c_2^2 - u^2 & 2u & M \\ 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}, \end{array} \right.$$

where

$$c_{\alpha}^2 = \frac{dP_{\alpha}}{d\rho_{\alpha}}, \quad M = \frac{\partial P}{\partial z}.$$

Denoting by c the mixture sound velocity

$$\boxed{c^2 = \sum_{\alpha} y_{\alpha} c_{\alpha}^2}, \quad (3.21)$$

A possesses the following eigenvalues

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_2 = \lambda_3 = u, \quad \lambda_4 = u + c,$$

with the corresponding left eigenvectors l_k and right eigenvectors r_k

$$\begin{aligned} l_1 &= \frac{1}{2c^2} \begin{pmatrix} c_1^2 + uc \\ c_2^2 + uc \\ -c \\ M \end{pmatrix}, \quad l_2 = \frac{1}{c^2} \begin{pmatrix} -y_1 c_1^2 + c^2 \\ -y_1 c_2^2 \\ 0 \\ -y_1 M \end{pmatrix}, \\ l_3 &= \frac{1}{c^2} \begin{pmatrix} -y_2 c_1^2 \\ c^2 - y_2 c_2^2 \\ 0 \\ -y_2 M \end{pmatrix}, \quad l_4 = \frac{1}{2c^2} \begin{pmatrix} c_1^2 - uc \\ c_2^2 - uc \\ c \\ M \end{pmatrix}, \\ r_1 &= \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ u - c \\ 0 \end{pmatrix}, \quad r_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ u \\ -c_1^2/M \end{pmatrix}, \\ r_3 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ u \\ -c_2^2/M \end{pmatrix}, \quad r_4 = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ u + c \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

This shows system (3.20) is hyperbolic. Nevertheless, the entropy of the system is not strictly convex. Indeed, there is a loss of convexity in the z direction, thus we do not know if the system (3.20) is symmetrizable.

3.2. Limit System $\kappa = +\infty$, $\lambda < +\infty$ (M-equilibrium)

3.2.1. Equilibrium Existence and Unicity. In the first place, we remark that λ^{-1} and κ^{-1} are two characteristic time scales for the source terms that drive the system back to equilibrium. The $(P_2 - P_1)$ term corresponds to a mechanical equilibrium, while $(g_2 - g_1)$ corresponds to a thermodynamical equilibrium. We suppose here that the mechanical equilibrium occurs faster than the thermodynamical one. Therefore we are now interested in the (formal) behavior of (3.19) when $\kappa \rightarrow \infty$ while λ remains finite (M-equilibrium).

The $\kappa = +\infty$ assumption in the system (3.19) is formally equivalent to compute $z \in [0, 1]$ such that

$$P_1\left(\frac{m_1}{z}\right) = P_2\left(\frac{m_2}{1-z}\right)$$

for given fixed values of $m_1 = \rho_1 z_1$ and $m_2 = \rho_2 z_2$ (see [3]).

Proposition 3.1. *We suppose that the functions $P_\alpha : \rho_\alpha \mapsto P_\alpha(\rho_\alpha)$ are $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^+)$, are strictly increasing on $\mathbb{R}^+$ and tend to $+\infty$ when $\rho_\alpha \rightarrow +\infty$. Then there exists a unique $z^*(m_1, m_2) \in [0, 1]$ solution of the equation*

$$P_1\left(\frac{m_1}{z}\right) = P_2\left(\frac{m_2}{1-z}\right). \quad (3.22)$$

Moreover

- $m_1 \mapsto z^*(m_1, m_2)$ is increasing on $\mathbb{R}^+$,

- $m_2 \mapsto z^*(m_1, m_2)$ is non-increasing on $\mathbb{R}^+$,
- $(m_1, m_2) \mapsto z^*(m_1, m_2)$ is regular as the pressure P_α , $\alpha = 1, 2$.

Proof.

Let us define

$$\begin{cases} \phi : [0, 1] & \longrightarrow \mathbb{R} \\ z & \longmapsto P_1\left(\frac{m_1}{z}\right) - P_2\left(\frac{m_2}{1-z}\right) \end{cases}.$$

Then $\phi \rightarrow +\infty$ when $z \rightarrow 0$ and $\phi \rightarrow -\infty$ when $z \rightarrow 1$. Moreover

$$\frac{d\phi}{dz} = -\frac{m_1}{z^2} \frac{dP_1}{d\rho_1}\left(\frac{m_1}{z}\right) - \frac{m_2}{(1-z)^2} \frac{dP_2}{d\rho_2}\left(\frac{m_2}{1-z}\right) < 0$$

which provides existence and uniqueness for $z^* \in [0, 1]$. The regularity of z^* follows from the implicit functions theorem.

For the monotonicity of z^* , using the equation (3.22) we have

$$\frac{\partial z^*}{\partial m_1} = \frac{c_1^2/z^*}{\frac{c_1^2 m_1}{(z^*)^2} + \frac{c_2^2 m_2}{(1-z^*)^2}} \geq 0,$$

and

$$\frac{\partial z^*}{\partial m_2} = -\frac{c_2^2/(1-z^*)}{\frac{c_1^2 m_1}{(z^*)^2} + \frac{c_2^2 m_2}{(1-z^*)^2}} \leq 0,$$

which ends the proof. □

Let us briefly remark that it is possible to obtain an analytical expression for z^* for some given specific EOS. For example, if we consider as Chanteperdrix, Villedieu and Vila [3] the case of two stiffened gases, then P_α reads

$$P_\alpha = P^0 + c_\alpha^2(\rho_\alpha - \rho_\alpha^0),$$

where c_α , ρ_α^0 and P^0 are constants. Let us define q , $\tilde{q}$ by

$$q = \rho_2^0 c_2^2 - \rho_1^0 c_1^2, \quad \tilde{q} = m_2 c_2^2 - m_1 c_1^2.$$

Then z^* verifies

$$z^* = \frac{\beta}{1+\beta}, \quad \beta = \frac{q - \tilde{q} + \sqrt{(q - \tilde{q})^2 + 4m_1 m_2 c_1^2 c_2^2}}{2m_2 c_2^2}.$$

We now turn back to the study of $\kappa = +\infty$ limit system in the general case. Formally, the system reads

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \operatorname{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) & = \lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \operatorname{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) & = -\lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) & = 0, \end{cases} \quad (3.23)$$

with

$$P = \sum_{\alpha} z_\alpha^* P_\alpha = P_1 = P_2.$$

Let us show that (3.23) is strictly hyperbolic. Let us note $\mathbf{W} = (\rho_1 z_1, \rho_2 z_2, u)^T$. For smooth solutions, system (3.23) is equivalent to

$$\partial_t \mathbf{W} + B(\mathbf{W}) \partial_x \mathbf{W} = \mathcal{S}$$

with

$$B(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} u & 0 & \rho_1 z_1 \\ 0 & u & \rho_2 z_2 \\ 1/\rho \partial_{m_1} P & 1/\rho \partial_{m_2} P & u \end{pmatrix}, \quad \mathcal{S} = \begin{pmatrix} \lambda(g_2 - g_1) \\ -\lambda(g_2 - g_1) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

B possesses the three following distinct eigenvalues

$$\lambda_1 = u - c^*, \quad \lambda_2 = u, \quad \lambda_3 = u + c^*$$

with c^* such that

$$\frac{1}{\rho(c^*)^2} = \sum_{\alpha} \frac{(z_{\alpha}^*)^2}{m_{\alpha} c_{\alpha}^2}$$

which proves the strict hyperbolicity of the pressure equilibrium system (3.23).

We can also show that there is no 3×3 symmetric matrix $B_0(\mathbf{W})$ such that $B_0(\mathbf{W})B(\mathbf{W})$ is symmetric and then the system (3.23) is not symmetrizable. As in part 3.1, it comes from convexity loss of the entropy.

3.3. $\kappa = +\infty$, $\lambda = +\infty$ Limit System (MT-equilibrium)

3.3.1. Conditional Equilibrium Existence and Unicity. The condition $\kappa = +\infty$, $\lambda = +\infty$ (MT-equilibrium) is formally equivalent to determine m_1 , m_2 and z , for a given ρ , such that

$$\begin{cases} P_1\left(\frac{m_1}{z}\right) &= P_2\left(\frac{m_2}{1-z}\right), \\ g_1\left(\frac{m_1}{z}\right) &= g_2\left(\frac{m_2}{1-z}\right), \\ \rho &= m_1 + m_2. \end{cases} \quad (3.24)$$

Solving system (3.24) is equivalent to find ρ_1 , ρ_2 and z solutions of the following system

$$\begin{cases} P_1(\rho_1) &= P_2(\rho_2) \\ g_1(\rho_1) &= g_2(\rho_2) \\ \rho &= z\rho_1 + (1-z)\rho_2 \end{cases} \quad (3.25)$$

with the constraint

$$\rho_{\alpha} \geq 0 \text{ and } z \in [0, 1]. \quad (3.26)$$

We propose a sufficient solvability condition for (3.25)–(3.26) based on a geometrical argument.

Proposition 3.2. *Let $F_{\alpha} = \rho_{\alpha} f_{\alpha}$ be the volumic free energy. If there exists a unique $\rho^* \in (0, +\infty)$ such that*

$$F_1(\rho^*) = F_2(\rho^*)$$

then the system

$$\begin{cases} P_1(\rho_1) = P_2(\rho_2), \\ g_1(\rho_1) = g_2(\rho_2), \end{cases} \quad (3.27)$$

has a unique solution $(\rho_1^, \rho_2^*) \in (0, +\infty)^2$.*

Let $\mathcal{C}_{\alpha}$ be the curves $\rho_{\alpha} \mapsto F_{\alpha}(\rho_{\alpha})$ in the (ρ, F) plane. Suppose $(\rho_1^*, \rho_2^*, z^*)$ is a solution of (3.25). Then consider D_{α} the tangent line to $\mathcal{C}_{\alpha}$ at ρ_{α}^* . Then (3.25) imposes D_1 and D_2 to have

the same slope and the same F -intercept (see figure 1). In this case z^* is given by

$$\begin{cases} z^* = 1 & \text{if } \rho < \rho_1^*, \\ z^* = \frac{\rho - \rho_2^*}{\rho_1^* - \rho_2^*} & \text{if } \rho_1^* < \rho < \rho_2^*, \\ z^* = 0 & \text{if } \rho_2^* < \rho. \end{cases} \quad (3.28)$$

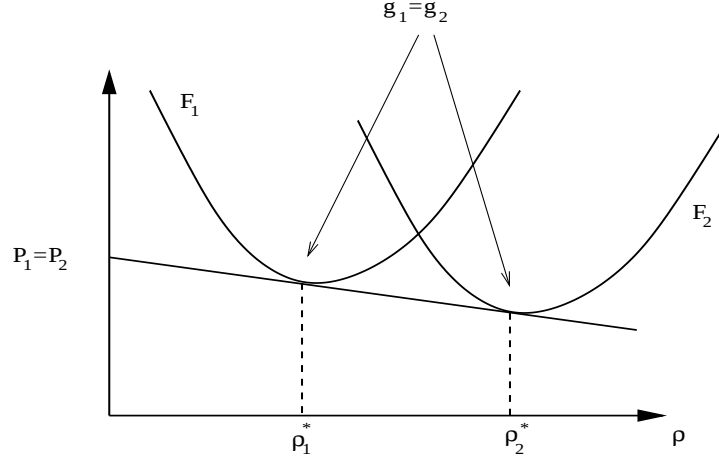


Figure 1: A geometric condition for the existence of an equilibrium

Using this geometrical interpretation, we can easily see, as depicted in figure 2, that it is possible to draw two curves $\mathcal{C}_1$ and $\mathcal{C}_2$ such that (3.25) has no solution. Consequently, it is not possible to ensure existence nor uniqueness for a general choice of EOS. Nevertheless, given two specific EOS, the above lines allow us to check whether both existence and uniqueness of the equilibrium states stand. Moreover, the same lines provide (at least geometrically), when they exist, the equilibrium states ρ_1^* and ρ_2^* . This means we have a tool to check the EOS compatibility as regards the MT-equilibrium return process.

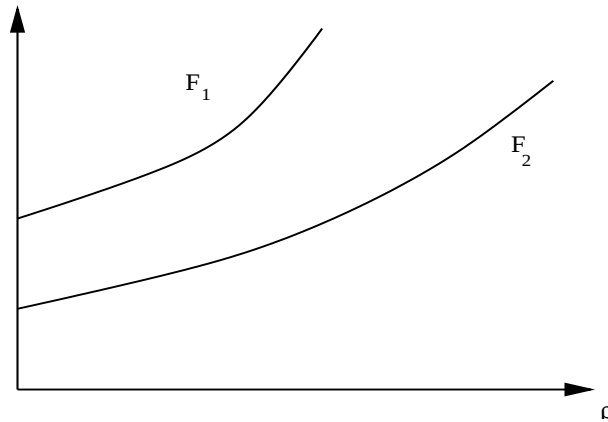


Figure 2: An example of F_α where there is no equilibrium points

In the following, we suppose that there exists a unique solution (ρ_1^*, ρ_2^*) of (3.27) and without loss of generality we suppose $\rho_1^* < \rho_2^*$. The MT-equilibrium system reads

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) &= 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) &= 0 \end{cases} \quad (3.29)$$

with

$$P = P(\rho).$$

Before going any further, we shall look into the behaviour of the MT-equilibrium pressure law $\rho \mapsto P(\rho)$. If we consider the volumic free energy F_α graph in the $F - \rho$ plane, then the MT-equilibrium free energy can be interpreted as the convex envelope of the function $\rho \mapsto \min\{F_1(\rho), F_2(\rho)\}$ (solid line on the figure 3). The pressure behaviour follows from $P = \rho dF/d\rho - F$. As depicted on figure 3, we see that the pressure (and consequently the system flux) is $\mathcal{C}^1$ for $\rho \in \mathbb{R}^+$ except for $\rho = \rho_1^*$ and $\rho = \rho_2^*$ where it is only $\mathcal{C}^0$. Let us note that the result system corresponds to a particular case of the system derived by S. Jaouen [9] using a convexification principle.

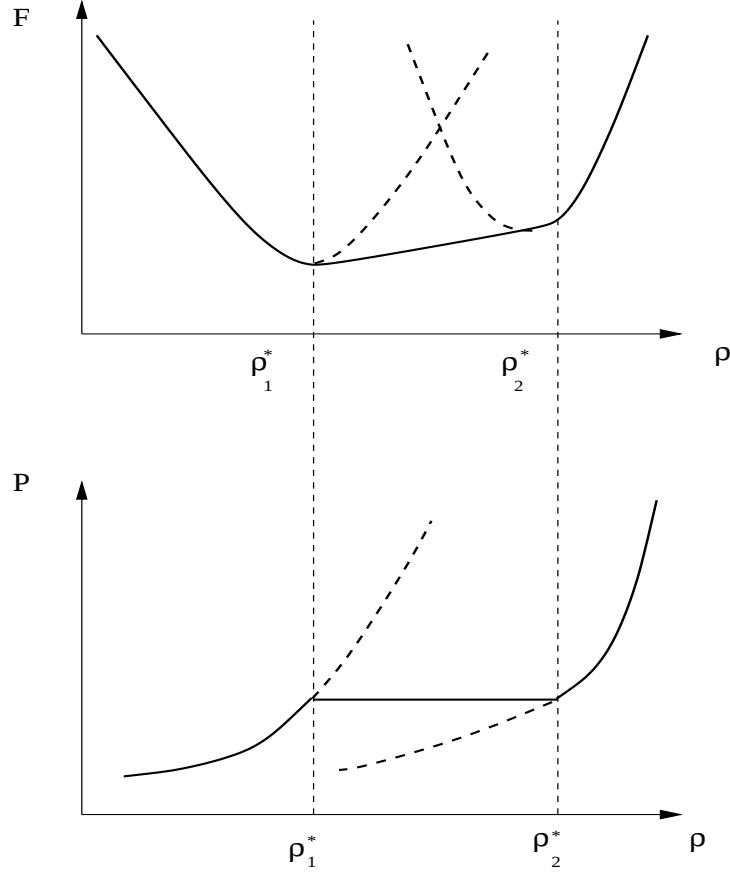


Figure 3: Volumic free energy F and pressure at the equilibrium

For $\rho \notin \{\rho_1^*, \rho_2^*\}$ and $\rho \in \mathbb{R}^+$, we can compute the jacobian A matrix of the system flux (3.29). In primitives variables $\mathbf{U} = (\rho, u)^T$, we have

$$A(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} u & \rho \\ 1/\rho(\partial P/\partial \rho) & u \end{pmatrix}$$

with eigenvalues

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_2 = u + c, \quad c = \frac{dP}{d\rho}.$$

For $\rho \notin (\rho_1^*, \rho_2^*)$, c is strictly positive therefore the system is strictly hyperbolic. In the region $\rho_1^* < \rho < \rho_2^*$, we have $c = 0$, thus the characteristic polynomial associated with $A(\mathbf{U})$ possesses a single root u . Consequently, the system is not hyperbolic.

3.3.2. First-Order Correction for the System (3.23). Let us write the system (3.23) in lagrangian coordinates

$$\begin{cases} \partial_t y &= \lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t \tau - \partial_X u &= 0, \\ \partial_t u + \partial_X P &= 0, \end{cases} \quad (3.30)$$

with P defined as

$$P = \sum_{\alpha} z_{\alpha}^* P_{\alpha} \left(\frac{y_{\alpha}}{\tau z_{\alpha}^*} \right) = P_1 \left(\frac{y_1}{\tau z_1^*} \right) = P_2 \left(\frac{y_2}{\tau z_2^*} \right).$$

We now want to check whether the relaxed system (3.30) solutions possess formally another attractor with good stability properties, beside the MT-equilibrium system (3.29) solutions. We remark that (3.30) is of the form of the system studied in [4]

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{V} + \partial_x \mathcal{F}(a, \mathbf{V}) &= 0 \\ \partial_t a + \partial_x \mathcal{G}(a, \mathbf{V}) &= \frac{1}{\epsilon} \mathcal{S}(a, \mathbf{V}) \end{cases} \quad (3.31)$$

with $\mathbf{V}(x, t) \in \mathbb{R}^N$ and $a(t, x) \in \mathbb{R}$. In [4], the equation

$$\mathcal{S}(a, \mathbf{V}) = 0$$

is supposed to have a unique solution $a^*(\mathbf{V})$ for all $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^N$ with $a \mapsto \mathcal{S}(a, \mathbf{V})$ strictly monotonic. System (3.31) is formally shown to be equivalent for $\epsilon \rightarrow 0$ to the first-order system

$$\partial_t \mathbf{V} + \partial_x \mathcal{F}^*(\mathbf{V}) = \epsilon \partial_x \left\{ \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial a} \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial a} \right)^{-1} \left[\frac{\partial a^*}{\partial \mathbf{V}} \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial a} \frac{\partial a^*}{\partial \mathbf{V}} \partial_x \mathbf{V} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{V}} \partial_x \mathbf{V} \right) - \left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial a} \frac{\partial a^*}{\partial \mathbf{V}} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{V}} \right) \partial_x \mathbf{V} \right] \right\} \quad (3.32)$$

We apply formula (3.32) with $\mathcal{G} = 0$, $\mathbf{V} = (\tau, u)^T$, $\mathcal{F} = (-u, P)^T$, $a = y$, $\mathcal{S} = g_2 - g_1$ and $\epsilon = \lambda^{-1}$. Using the notations

$$M = \frac{1}{\tau} \left(\frac{1 - y^*}{1 - z^*} c_2^2 - \frac{y^*}{z^*} c_1^2 \right), \quad K = \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2 y_{\alpha}^*}{(z_{\alpha}^*)^2},$$

then

$$\frac{\partial z^*}{\partial \tau} = \frac{1}{\tau} \frac{M}{K}, \quad \frac{\partial z^*}{\partial y} = \frac{1}{K} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*},$$

and

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial y} &= - \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{y_{\alpha}^*} + \frac{1}{K} \left(\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} \right)^2 \\ &= - \frac{c_1^2 c_2^2}{K z^* (1 - z^*) y^* (1 - y^*)} (z^* (1 - y^*) - y^* (1 - z^*))^2 < 0. \end{aligned}$$

The first-order correction for the system (3.23) reads

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X u &= 0 \\ \partial_t u + \partial_X P &= \frac{1}{\lambda} \partial_X \left(\frac{\partial P}{\partial y} \frac{\partial y^*}{\partial \tau} \left(-\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial y} \right) \partial_X u \right) \end{cases}, \quad (3.33)$$

with

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{c_1^2 - c_2^2}{\tau} + \frac{M}{\tau K} \left(\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} \right), \quad \frac{\partial y^*}{\partial \tau} = \frac{\frac{c_1^2 - c_2^2}{\tau} + \frac{M}{\tau K} \left(\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} \right)}{\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{y_{\alpha}^*} - \frac{1}{K} \left(\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{z_{\alpha}^*} \right)^2} = \frac{\frac{\partial P}{\partial y}}{-\frac{\partial h}{\partial y}}.$$

Hence (3.33) is equivalent to the following system

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_X u &= 0 \\ \partial_t u + \partial_X P &= \frac{1}{\lambda} \partial_X \left(\left(\frac{\partial P / \partial y}{\partial \mathcal{S} / \partial y} \right)^2 \partial_X u \right) \end{cases},$$

which proves that the λ^{-1} first-order correction of the system (3.23) is dissipative.

4. Numerical Treatment

From now on, we suppose both fluids to be perfect gases. We recall the expressions of P_{α} , f_{α} and g_{α}

$$\begin{cases} P_{\alpha} &= b_{\alpha} \rho_{\alpha}, \\ f_{\alpha} &= a_{\alpha} + b_{\alpha} (\log(\rho_{\alpha}) - 1), \\ g_{\alpha} &= a_{\alpha} + b_{\alpha} \log(\rho_{\alpha}), \\ b_{\alpha} &= (\gamma_{\alpha} - 1) C_{v\alpha} T, \end{cases}$$

where a_{α} is constant.

4.1. Numerical Scheme Based On The M-Equilibrium System

$$(\kappa = +\infty, \lambda < +\infty)$$

In the sequel, this solver will be referred to as “scheme 1”. In the case of a two-perfect gas flow, we have a simple expression for pressure equilibrium z^*

$$z^* = \frac{b_1 m_1}{b_1 m_1 + b_2 m_2}. \quad (4.34)$$

The adopted numerical method is a time splitting method wich consists of two steps:

1. Solve the system (3.20)

$$\begin{cases} \partial_t(\rho_1 z_1) + \operatorname{div}(\rho_1 z_1 \mathbf{u}) &= 0, \\ \partial_t(\rho_2 z_2) + \operatorname{div}(\rho_2 z_2 \mathbf{u}) &= 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) &= 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \nabla z &= 0, \end{cases}$$

with a classical hyperbolic solver. This step computes from a state

$$\mathbf{V}_i^n := \left((\rho_1 z_1)_i^n, (\rho_2 z_2)_i^n, (\rho \mathbf{u})_i^n, z_i^n \right)^T$$

an intermediate state $\mathbf{V}_i^{n+1/2}$.

2. Solve the differential system

$$\begin{cases} \partial_t m_1 &= \lambda(g_2 - g_1), \\ \partial_t \rho &= 0, \\ \partial_t(\rho u) &= 0, \\ \partial_t z &= \kappa(P_1 - P_2), \end{cases} \quad (4.35)$$

over $[0, \Delta t]$ with $\mathbf{V}_i^{n+1/2}$ as initial condition for large values of λ and κ .

In (4.35), we use $\lambda := \tilde{\lambda}m_1(\rho - m_1)$ where $\tilde{\lambda} > 0$ is a constant; we freeze $(g_2 - g_1)$ to its time $t^{n+1/2}$ value and integrate exactly over $[0, \Delta t]$

$$\begin{cases} \partial_t m_1 = \tilde{\lambda}m_1(\rho_i^{n+1/2} - m_1)(g_2 - g_1)_i^{n+1/2}, \\ m_1(t=0) = (m_1)_i^{n+1/2}, \end{cases}$$

which gives $(m_1)_i^{n+1} := m_1(\Delta t; (m_1)_i^{n+1/2})$. Using $\partial_t \rho = 0$, $\partial_t u = 0$, we define

$$\begin{cases} (m_2)_i^{n+1} &= \rho_i^{n+1/2} - (m_1)_i^{n+1}, \\ \rho_i^{n+1} &= \rho_i^{n+1/2}, \\ u_i^{n+1} &= u_i^{n+1/2}. \end{cases}$$

In order to define z_i^{n+1} , the parameter κ is formally set to $+\infty$ which implies that z_i^{n+1} is given by

$$\begin{aligned} z_i^{n+1} &:= z^*((m_1)_i^{n+1}, (m_2)_i^{n+1}) \\ &= \frac{b_1(m_1)_i^{n+1}}{b_1(m_1)_i^{n+1} + b_2(m_2)_i^{n+1}} \end{aligned}$$

4.2. Numerical Scheme Based On The MT-Equilibrium System ($\kappa = \lambda = +\infty$)

In the sequel, this solver will be referred to as “scheme 2”. For the MT-equilibrium system, we have to compute ρ_1^* and ρ_2^* such that $P_1 = P_2$ and $g_1 = g_2$. Using the perfect gas EOS, a simple calculation gives

$$\begin{cases} \rho_1^* = \exp\left(-\frac{a_1 - a_2}{b_1 - b_2}\right) \left(\frac{b_1}{b_2}\right) \frac{b_2}{b_1 - b_2}, \\ \rho_2^* = \exp\left(-\frac{a_1 - a_2}{b_1 - b_2}\right) \left(\frac{b_1}{b_2}\right) \frac{b_1}{b_1 - b_2}, \end{cases}$$

and

$$z^* = \begin{cases} 1 & \text{si } \rho < \rho_1^*, \\ \frac{\rho - \rho_2^*}{\rho_1^* - \rho_2^*} & \text{si } \rho_1^* < \rho < \rho_2^*, \\ 0 & \text{si } \rho_2^* < \rho. \end{cases}$$

As previously, the adopted numerical method is a time splitting method which consists of two steps:

1. Solve the system (3.20) with a classical hyperbolic solver. This step computes from a state

$$\mathbf{V}_i^n = \left((\rho_1 z_1)_i^n, (\rho_2 z_2)_i^n, (\rho \mathbf{u})_i^n, z_i^n \right)^T$$

an intermediate state $\mathbf{V}_i^{n+1/2}$.

2. Set formally $\kappa = +\infty$ and $\lambda = +\infty$ by projecting $\mathbf{V}_i^{n+1/2}$ on the equilibrium manifold. This projection gives z_i^{n+1} by

$$\begin{cases} z_i^{n+1} = 1 & \text{if } \rho_i^{n+1/2} < \rho_1^*, \\ z_i^{n+1} = \frac{\rho_i^{n+1/2} - \rho_2^*}{\rho_1^* - \rho_2^*} & \text{if } \rho_1^* < \rho_i^{n+1/2} < \rho_2^*, \\ z_i^{n+1} = 0 & \text{if } \rho_2^* < \rho_i^{n+1/2}, \end{cases} \quad (4.36)$$

$(m_\alpha)_i^{n+1/2}$, $\alpha = 1, 2$ by

$$\begin{cases} (m_1)_i^{n+1} = \rho_i^{n+1/2} & (m_2)_i^{n+1} = 0 & \text{if } \rho_i^{n+1/2} < \rho_1^*, \\ (m_1)_i^{n+1} = \rho_1^* z_i^{n+1} & (m_2)_i^{n+1} = \rho_2^* (1 - z_i^{n+1}) & \text{if } \rho_1^* < \rho_i^{n+1/2} < \rho_2^*, \\ (m_1)_i^{n+1} = 0 & (m_2)_i^{n+1} = \rho_i^{n+1/2} & \text{if } \rho_2^* < \rho_i^{n+1/2}, \end{cases} \quad (4.37)$$

and we set $\rho_i^{n+1} = \rho_i^{n+1/2}$, $u_i^{n+1} = u_i^{n+1/2}$.

4.3. Numerical Results

4.3.1. Pure Interface Advection. We consider a one dimensional advection problem: a 1 m long domain contains liquid and vapor initially separated by an interface located at $x = 0.5$ m. The characteristic parameters of the fluids are given in table 1. The velocity of both fluids is initially $u = 100$ m.s⁻¹, and the densities are chosen on each side of the interface so that we have a constant pressure in the whole domain, namely $\rho = \rho_1^* \simeq 2.25 \cdot 10^{-4}$ kg.m⁻³ at the left of the interface and $\rho = \rho_2^* \simeq 225 \cdot 10^{-4}$ kg.m⁻³ at the right (pressure equilibrium).

	left	right
C_v (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	5 000	25
$\gamma = C_p/C_v$	3	5
a (kJ.kg ⁻¹)	8 407	47 038
b (kJ.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	10^3	10^3
T (K)	100	100

Table 1: Fluids parameters for the advection test.

Boundary conditions are constant states kept on both side of the domain which is discretized over 500 cells.

Figure 4 displays the solution obtained with the scheme 2 (the solid line) and the solution obtained with a Rusanov scheme applied to the system (3.20) (dots): neglecting the source terms in favor of the convective part.

Although this test is a simple Riemann problem which does not involve phase change but purely kinetic effects, we emphasize the fact that the MT-equilibrium system we deal with does not match the classical hyperbolic well-posedness criteria. However we can check that the scheme 2 seems to capture the same advected profile as the Rusanov scheme applied to (3.20). Indeed, despite the source terms effects, we have the same propagation speed without any pressure nor velocity perturbations.

4.3.2. A One Dimensional Isothermal Phase Change Problem. We now turn to the case of a one dimensional phase change test. As previously, we consider a 1 m domain containing liquid

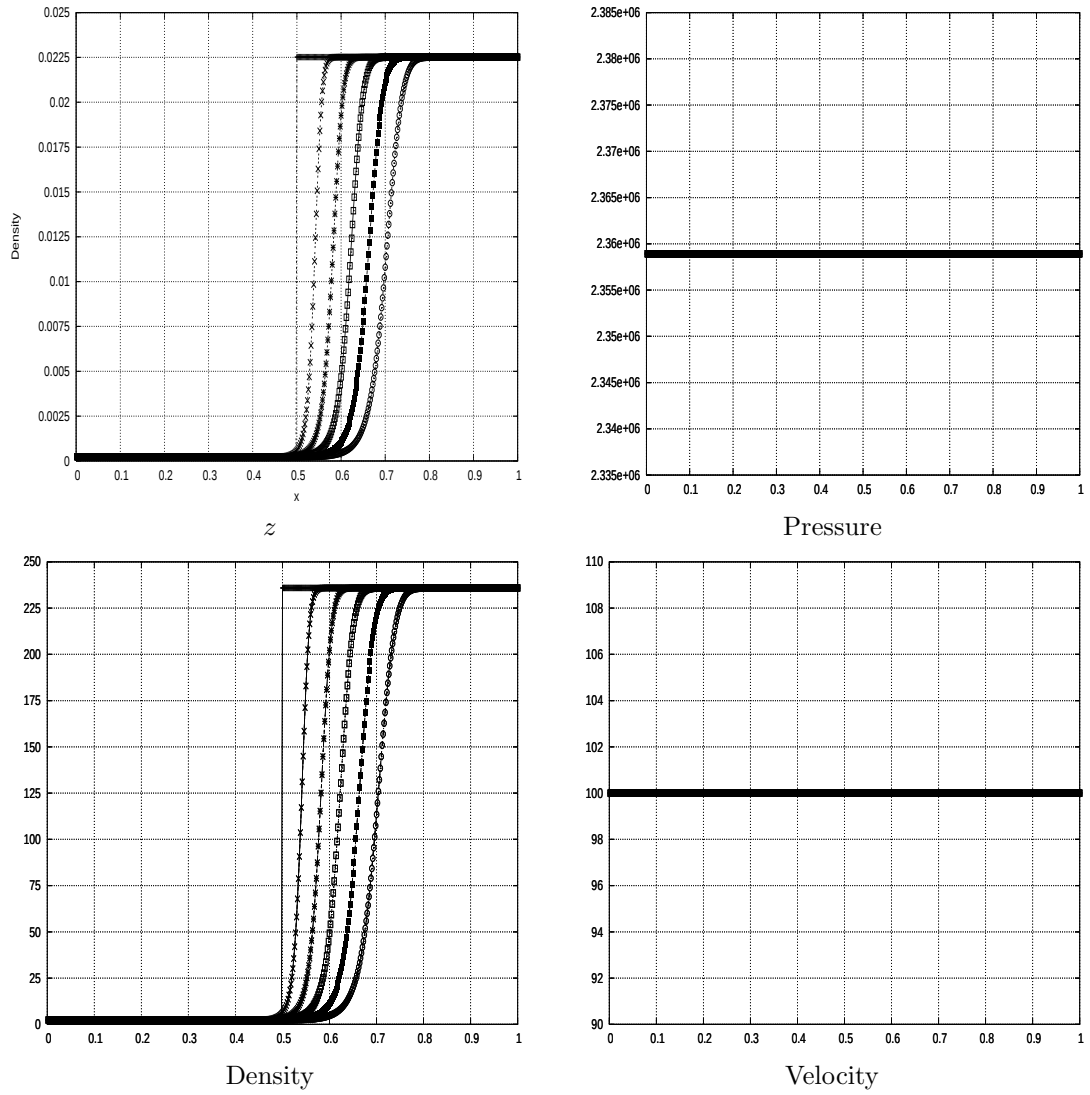


Figure 4: Time evolution of the MT-equilibrium solution computed with scheme 2 and the solution of the pure convective system (3.20) computed with a Rusanov scheme; t varies from $t = 0$ s to $T_{max} = 0.002$ s

and vapor initially separated by an interface located at $x = 0.5$ m (the characteristic parameters of the fluids are given in table 2). In the whole domain the fluid is supposed to be initially at rest, and the densities are once again chosen so that pressure is constant: $\rho = \rho_1^* \simeq 6.10^{-4}$ kg.m⁻³ at the left of the interface and $\rho = \rho_2^* \simeq 33.10^{-4}$ kg.m⁻³ at the right.

We now suppose that the left boundary is a piston which moves towards left at constant speed. This motion will generate an acoustic wave travelling from left to right that will reach the interface location, perturbing its thermodynamical equilibrium and triggering the system source terms. A phase change process occurs.

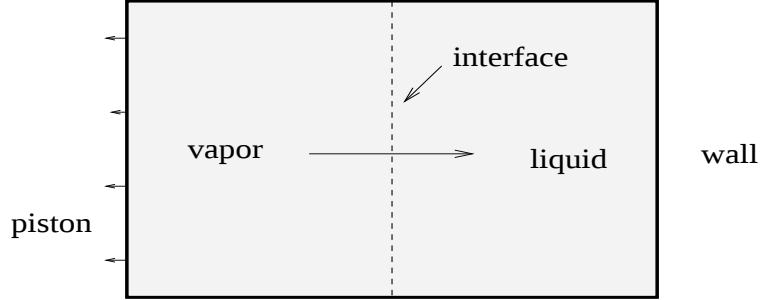


Figure 5: Sketch of the one-dimensional piston isothermal phase-change problem.

	left	right
C_v (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	1 816	1 040
$\gamma = C_p/C_v$	2.35	1.43
a (kJ.kg ⁻¹)	1 504	-57.3
b (kJ.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	245.16	245.16
T (K)	100	100

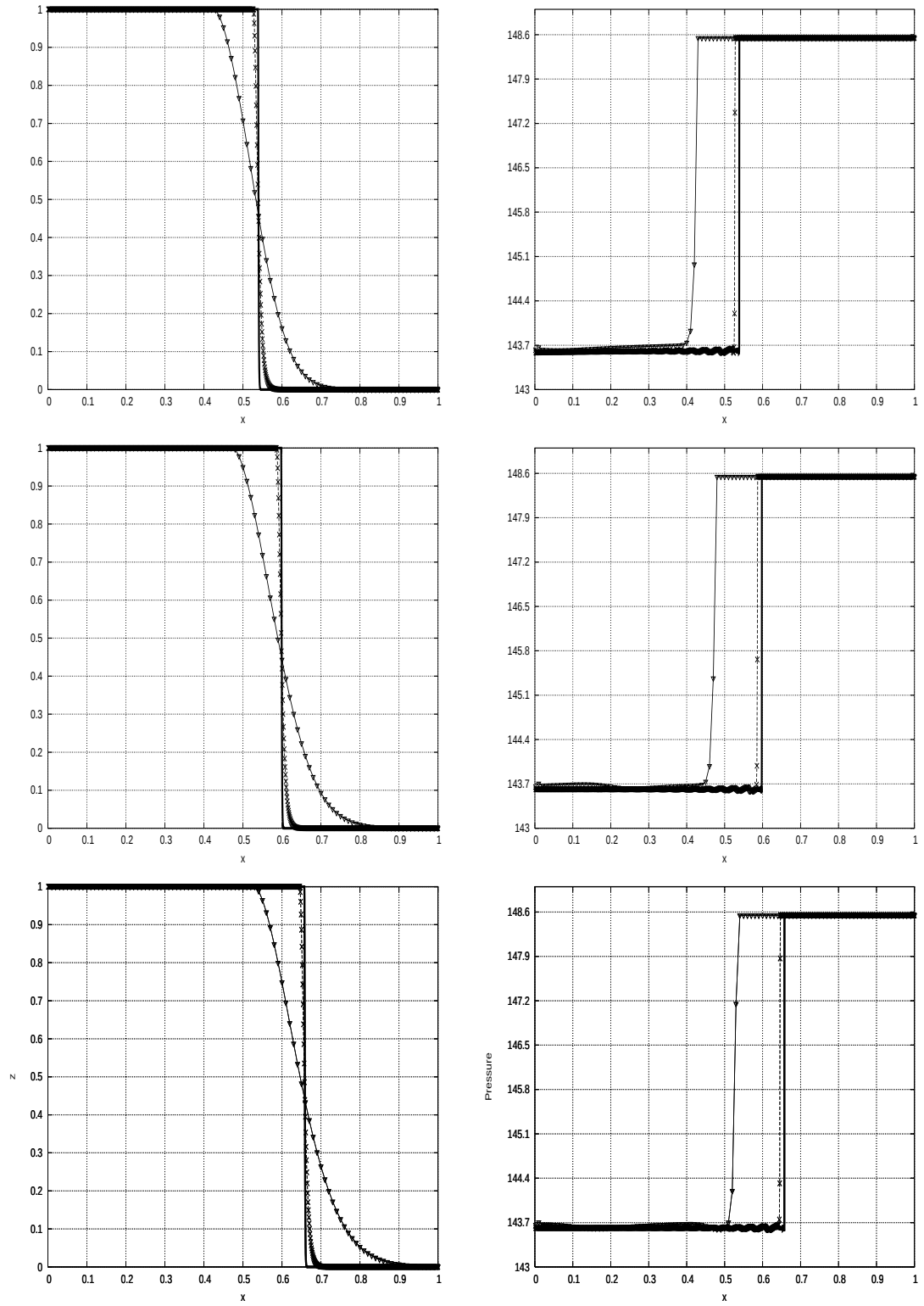
Table 2: Fluids parameters for the piston test.

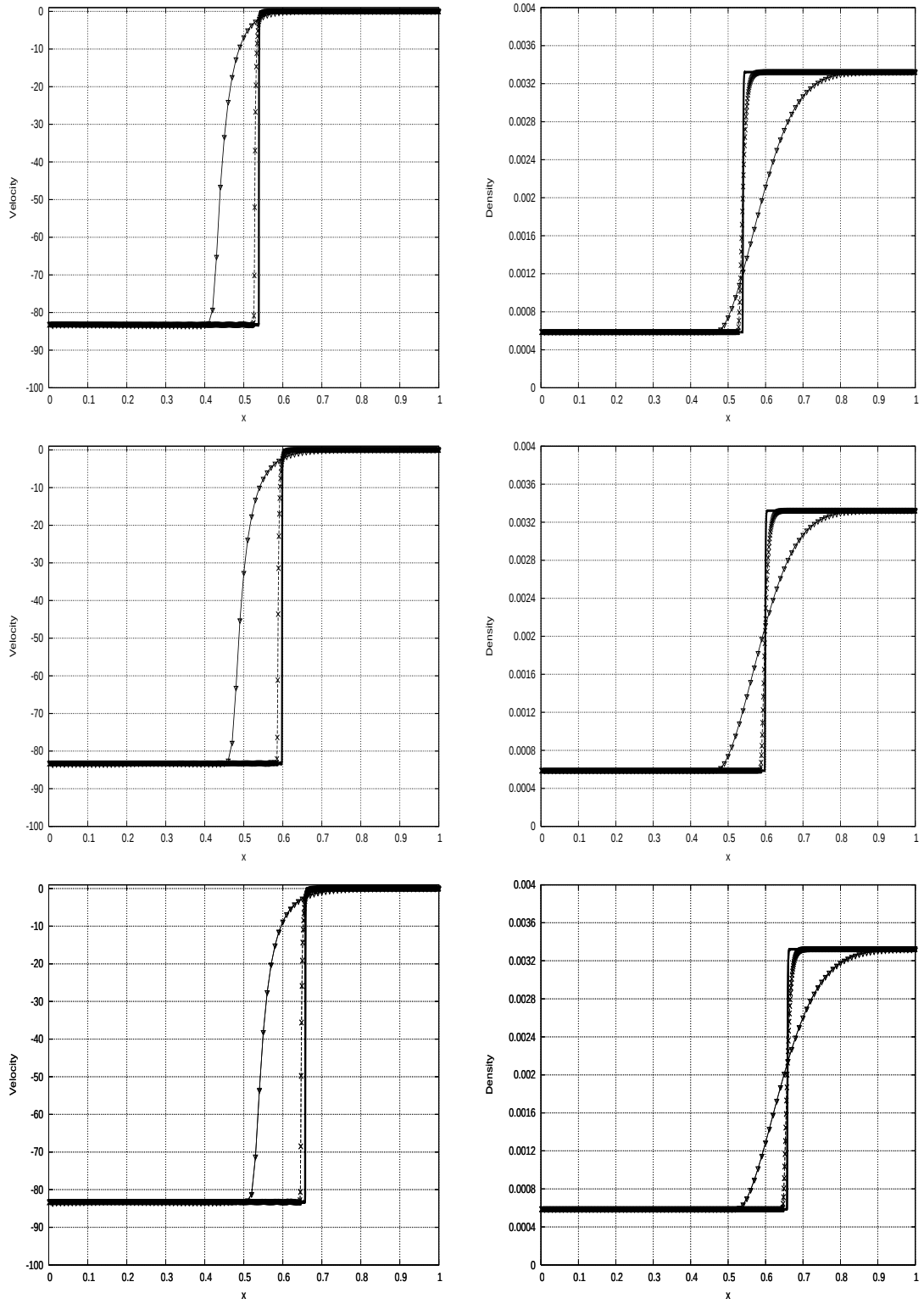
The piston effect is realized by imposing a left boundary condition $u_p = -100$ m.s⁻¹ with a null mass flux, while the right boundary condition is kept constant.

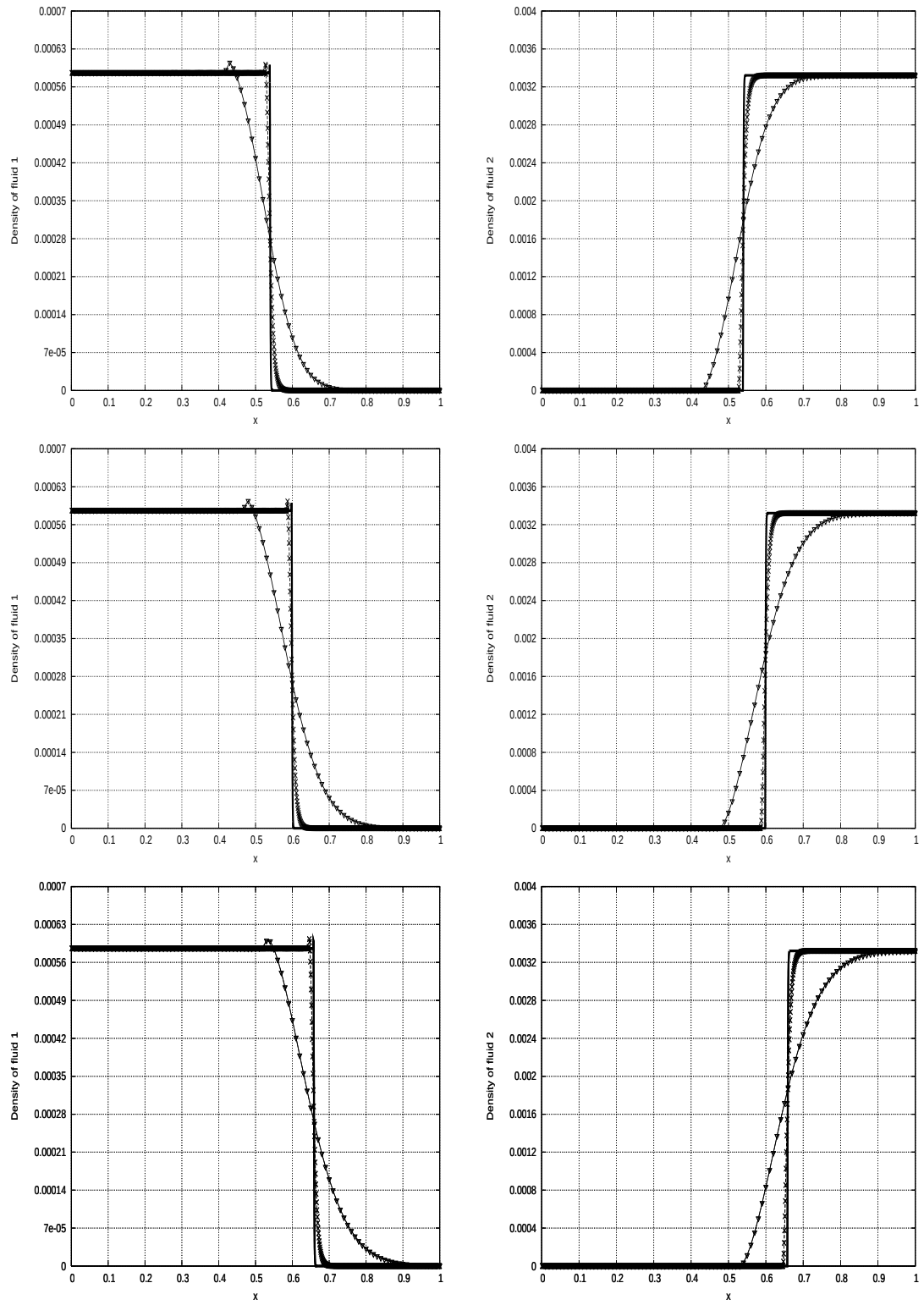
We use here the scheme 2 with different space steps. Figures 6, 7 and 8 display the profiles of z , pressure P , velocity u , density ρ and partial densities m_α for $\alpha = 1, 2$, at instants (from the top to the bottom) 3.33 ms, 6.66 ms and 10 ms. The solid lines represent the approximate solution with 9000 cells, the $\times$ symbol lines represent the solution with 1000 cells and the ∇ symbol lines represent the solution with 100 cells. This allows us to check the convergence behaviour of the solution when the space step goes to zero. We note that no instability occurs.

We now turn to the convergence of the solution obtained with the scheme 1 to the one obtained with scheme 2. Figures 9 and 10 show the profiles computed with both schemes for z , ρ , P and u at $t = 10$ ms in the case of the piston test. We use a λ range from 1 up to 10^4 (from the top to the bottom). The solid lines represent the scheme 1 solution while the dots represent the scheme 2 one.

We take the scheme 2 solution $\mathbf{V}_h^{\text{ref}}$ as the reference solution. Let $\mathbf{V}_h^\lambda$ be the solution obtained with the off-equilibrium scheme 1. Figure 11 displays the function $\lambda \mapsto \ln (\|\mathbf{V}_h^{\text{ref}} - \mathbf{V}_h^\lambda\|_{L^1})$. We

Figure 6: Profile of z and P with scheme 2.

Figure 7: Profile of u and ρ with scheme 2.

Figure 8: Profile of m_1 and m_2 with scheme 2.

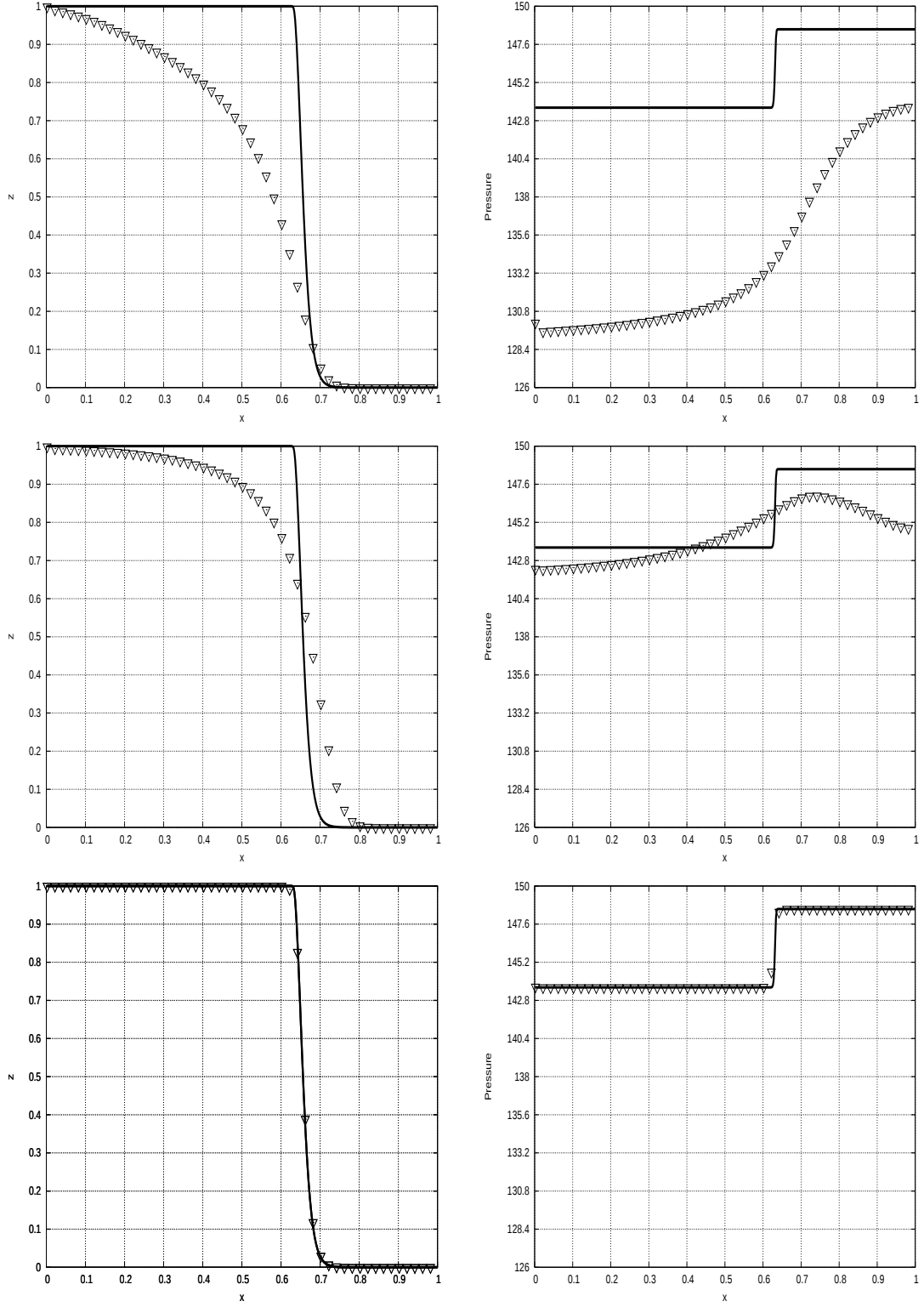


Figure 9: Profiles comparison between scheme 1 and 2 for z and P at time $t = 0.01$ s, $\lambda = 1$ (top), $\lambda = 10^2$ (center) and $\lambda = 10^4$ (bottom).

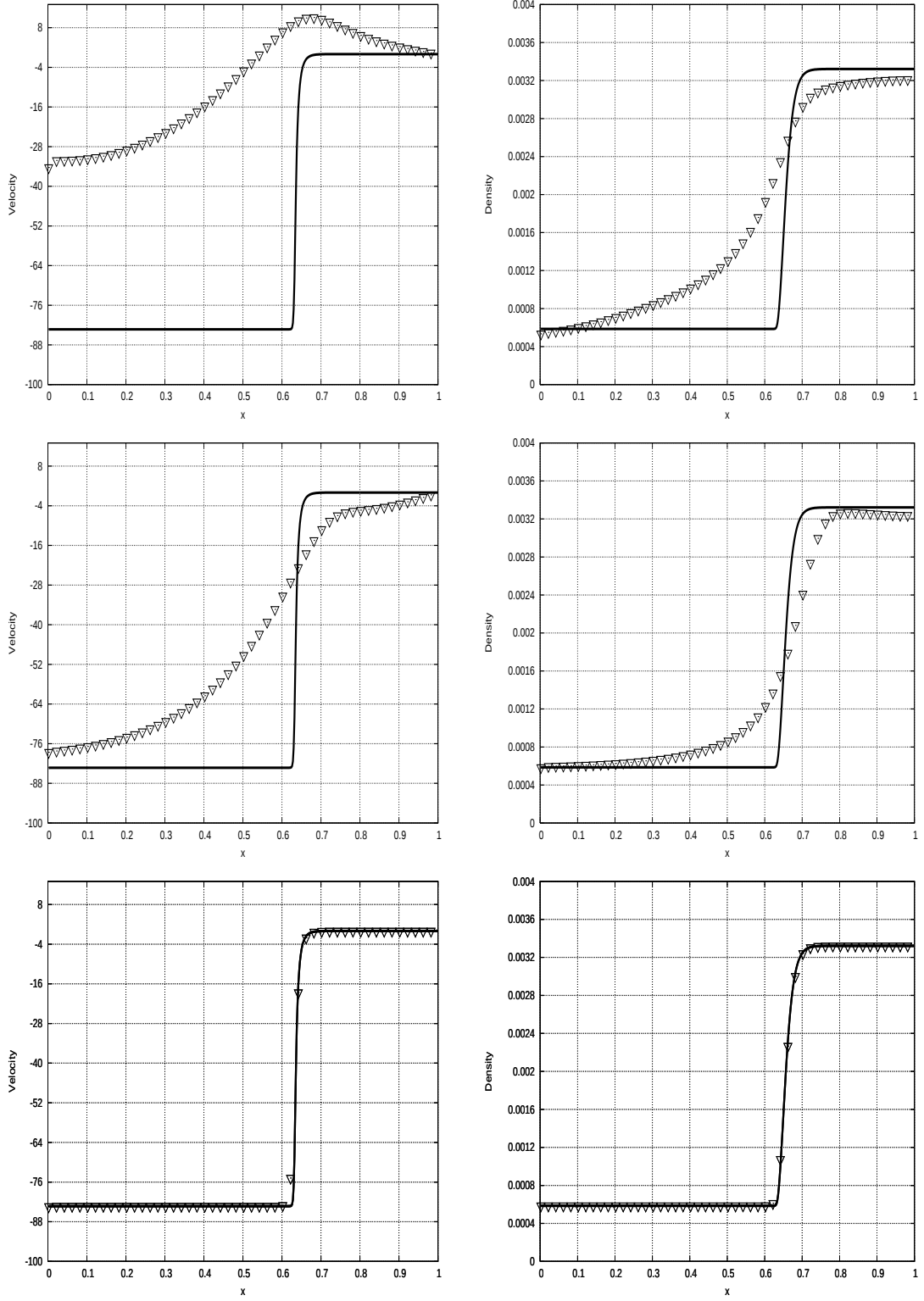


Figure 10: Profiles comparison between scheme 1 and 2 for u and ρ at time $t = 0.01$ s, $\lambda = 1$ (top), $\lambda = 10^2$ (center) and $\lambda = 10^4$ (bottom).

numerically check that for $\lambda \rightarrow +\infty$

$$\|\mathbf{V}_h^\lambda - \mathbf{V}_h^{ref}\|_{L^1} = \mathcal{O}(1/\lambda)$$

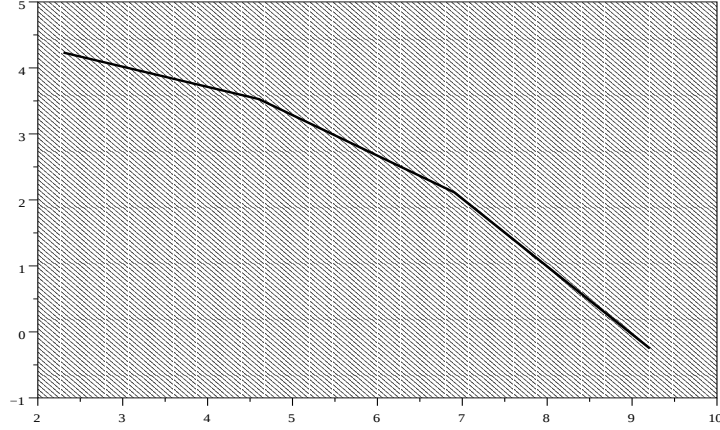


Figure 11: $\lambda \mapsto \ln(\|\mathbf{V}_h^{ref} - \mathbf{V}_h^\lambda\|_{L^1})$ graph.

5. Conclusion and perspectives

We have presented an isothermal model for two-phase flow problems. The core method used to derive the system is general and it ensures a thermodynamical consistency. The additional source terms we obtain are interpreted as relaxation coefficients related to equilibrium manifolds states. Although the equilibrium system is not hyperbolic, we are able to design two numerical solvers based on the relaxed system. The first one uses the mechanical equilibrium and a source term integration step while the second one uses both mechanical and thermodynamical equilibriums. The solvers have been tested against two simulations: good behaviour for the space and time convergence is observed. The schemes preserve properties like density positivity or maximum principle for z . The convergence of the source term integration method to the mechanical and thermodynamical equilibrium solution has been checked.

A straightforward sequel to this study would be an extensive test of the obtained models with various EOS along with comparisons to basic physical experiments. It is possible to extend the present work by looking into systems involving more complex equilibrium manifolds, *e.g.* by adding extra-potential functions to the system energy. The $+\infty$ relaxation parameters limit in the continuous systems are still to be carefully studied within a proper mathematical framework. The same modelling lines can be used when working in an anisothermal context. However the derived systems involve a much higher complex structure, and therefore more sophisticated theoretical tools seem required for their study.

References

- [1] G. Allaire, S. Clerc, and Kokh S. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *J. Comp. Phys.*, 181:577–616, 2002.
- [2] A. Bedford. *Hamilton's principle in continuum mechanics*. Research Notes in Mathematics, 1985.
- [3] C. Chantepedrix, P. Villedieu, and J.P. Vila. A compressible model for separated two-phase flows computations. *Proc. of ASME FEDSM'02*, 2002.
- [4] Gui-Qiang Chen, C. David Levermore, and Tai-Ping Liu. Hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms and entropy. *Comm. Pure and Appl. Math.*, 1992.
- [5] S. Gavrilyuk and H. Gouin. A new form of governing equations of fluids arising from hamilton's principle. *Ing. J. Eng. Sci.*, 37:1495, 1999.
- [6] S. Gavrilyuk and R. Saurel. Mathematical and numerical modeling of two-phase compressible flows with micro-inertia. *J. Comp. Phys.*, 175:326–360, 2002.
- [7] H. Gouin and S. L. Gavrilyuk. Hamilton's principle and rankine-hugoniot conditions for general motions of mixtures. *Meccanica*, 34:39, 1999.
- [8] D. Jamet, O. Lebaigue, N. Coutris, and J. M. Delhay. The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid-vapor flows with phase change. *J. Comp. Phys.*, 169:624–651, 2001.
- [9] S. Jaouen. *Etude mathématique et numérique de stabilité pour des modèles hydrodynamiques avec transition de phase*. PhD thesis, Univ. Paris 6, 2001.
- [10] R. Saurel and A. Abgall. A simple method for compressible multifluid flows. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(3):1115–1145, 1999.
- [11] L. Truskinovsky. Kinks versus shocks. In R. Fosdick et al., editor, *Shock Induced Transitions and Phase Structures in General Media*. Springer Verlag, Berlin, 1991.

Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide-vapeur

Résumé

Ce travail de thèse est consacré à la modélisation et à la simulation numérique des transitions de phase liquide-vapeur. L'étude effectuée se découpe en deux grandes parties : une première où on étudie les phénomènes de transition de phase avec une loi d'état de type Van Der Waals (perte de monotonie de la loi d'état) et une deuxième partie où on choisit une approche alternative avec deux loi d'états.

La première partie consiste à étudier les critères visqueux classiques de sélection des solutions du système d'équations utilisé lorsque la loi d'état n'est pas monotone. Les critères classiques ne sélectionnant pas des solutions a priori physiques, un critère plus récent est introduit : le critère visco-capillaire. L'utilisation de ce critère avec un solveur de Riemann *exact* (sous la contrainte de trouver le zéro d'une fonction non linéaire) permet d'obtenir des résultats mais avec un coût de calcul trop élevé. Une approche alternative est alors envisagée avec deux lois d'états (une pour chaque phase). A l'aide d'un procédé de minimisation de l'action hamiltonienne, un modèle bifluide de changement de phase est proposé. Celui-ci respecte alors le second principe de la thermodynamique. Deux sous-systèmes en sont déduits à l'aide d'un procédé de retour à l'équilibre : mécanique dans un premier temps puis mécanique et thermodynamique dans un deuxième temps. Malgré la faible hyperbolicité du dernier sous-système obtenu, des schémas numériques stables basés sur une méthode de splitting sont proposés. On montre alors que le système ainsi obtenu est naturellement capable de nucléer des bulles de vapeur dans du liquide.

Mots-clés : Transition de phase, équation de Van Der Waals, critère visco-capillaire, méthode de splitting, schéma numérique, hyperbolicité, problème de Riemann, relaxation, simulation numérique directe.

Abstract

This work deals with the modelization and numerical simulation of liquid-vapor phase transition phenomena. The study is divided into two part : first we investigate phase transition phenomena with a Van Der Waals equation of state (non monotonic equation of state), then we adopt an alternative approach with two equations of state.

In the first part, we study the classical viscous criteria for selecting weak solutions of the system used when the equation of state is non monotonic. Those criteria do not select physical solutions and therefore we focus a more recent criterion : the visco-vapillar criterion. We use this criterion to *exactly* solve the Riemann problem (which imposes solving an algebraic scalar non linear equation). Unfortunately, this step is quite costly in term of CPU which prevent from using this method as a ground for building Godunov solvers. That is why we propose an alternativ approach two equations of state. Using the least action principle, we propose a phase changing two-phase flow model which is based on the second thermodynamic principle. We shall then describe two equilibrium submodels issued from the relaxations processes when instantaneous equilibrium is assumed. Despite the weak hyperbolicity of the last submodel, we propose stable numerical schemes based on a two-step strategy involving a convective step followed by a relaxation step. We show the ability of the system to simulate vapor bubbles nucleation.

Keywords : Phase transition, Van Der Waals equation, visco-capillar criterium, splitting method, numerical scheme, hyperbolicity, Riemann problem, relaxation, direct numerical simulation.
