THÈSE

présentée en vue de l'obtention du titre de

DOCTEUR de L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DE L'AÉRONAUTIQUE ET DE L'ESPACE

Spécialité : ÉNERGÉTIQUE ET DYNAMIQUE DES FLUIDES

Par

Guilhem CHANTEPERDRIX

Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques à interface libre. Application à l'étude des mouvements de liquides dans les réservoirs de véhicules spatiaux.

Soutenue le 22 mars 2004 devant la Commission d'Examen :

M J.-P. Caltagirone M R. Saurel M D. Jamet M P. Kuentzmann M J. Magnaudet M B. Vieille M J.-P. Vila M P. Villedieu rapporteur rapporteur examinateur invité examinateur invité co-directeur de thèse co-directeur de thèse Centre National d'Études Spatiales

et

Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales Département Traitement de l'Information et Modélisation Unité de Recherche Modélisation Mathématique et Simulation Numérique

THÈSE

présentée en vue de l'obtention du titre de

DOCTEUR

de

L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DE L'AÉRONAUTIQUE ET DE L'ESPACE

Spécialité : ÉNERGÉTIQUE ET DYNAMIQUE DES FLUIDES

par

Guilhem CHANTEPERDRIX

Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques à interface libre. Application à l'étude des mouvements de liquides dans les réservoirs de véhicules spatiaux.

Soutenue le 22 mars 2004 devant la Commission d'Examen :

M JP. Caltagirone	Professeur à l'Université de Bordeaux I	rapporteur
M R. Saurel	Professeur à l'IUSTI - Marseille	rapporteur
M D. Jamet	Ingénieur de Recherche CEA - Grenoble	examinateur
M P. Kuentzmann	Directeur Scientifique ONERA - Châtillon	invité
M J. Magnaudet	Directeur de Recherche CNRS, IMFT - Toulouse	examinateur
M B. Vieille	Ingénieur CNES, DLA - Évry	parrain CNES, invité
M JP. Vila	Professeur à l'INSA - Toulouse	co-directeur de thèse
M P. Villedieu	Maître de Recherche ONERA - Toulouse	co-directeur de thèse

Remerciements

La prévision est difficile surtout lorsqu'elle concerne l'avenir. Pierre Dac

La réussite de ma thèse a essentiellement dépendu de son encadrement, au sens large. Si Philippe Villedieu a grandement contribué à cette réussite par sa disponibilité quotidienne et sa patience non moins journalière, la confiance dont il a fait preuve envers mon travail a constitué pour moi une source indispensable de motivation. Sa bienveillance dans la relecture de ce mémoire a été remarquable, je me demande encore comment il ne s'est pas arraché plus de cheveux... Jean-Paul Vila a su patiemment écouter mes questions. Ses réponses ont toujours éclairé d'un jour nouveau mon travail, renouvelant sans cesse mon intérêt pour le sujet et ses applications. La liberté de parole qu'il m'a accordé au sein du programme COMPERE ont été une source indéniable de motivation. Merci donc à mon équipe de directeurs de thèse pour la qualité et la complémentarité de leur encadrement.

Je remercie Joël Pauchet, mon premier parrain CNES, d'avoir initié un sujet de thèse si passionnant. Son successeur Bruno Vieille, par sa confiance et sa sympathie, a contribué à ce que mes travaux trouvent un lieu d'expression bien au delà du programme COMPERE. Je ne l'en remercierai jamais assez et lui suis reconnaissant d'avoir accepté d'assister à mon jury de soutenance de thèse.

Jean-Paul Caltagirone et Richard Saurel ont accepté d'être rapporteurs de ce mémoire. Tous mes remerciements pour le temps qu'ils ont bien voulu consacré à la lecture bienveillante de ce document. Merci à Didier Jamet, avec qui j'ai eu l'occasion et la chance de collaborer, et à Jacques Magnaudet qui m'ont tous deux fait la joie et l'honneur de participer à mon jury de thèse. Toute ma reconnaissance va à Paul Kuentzmann, tant pour sa présence lors de ma soutenance de thèse que pour nos discussions lors de nos rencontres dans le cadre du programme COMPERE.

Je me suis toujours considéré privilégié d'effectuer ma thèse dans l'unité M2SN de l'ONERA Toulouse. Daniel Kalfon, qui dirige cette équipe, a toujours veillé au bon déroulement de mon travail en me faisant profiter de tous les moyens matériels nécessaires. La qualité des conseils que peuvent donner tous les membres de cette véritable équipe est indiscutable et n'a d'égal que la diversité si appréciable de leur culture. Que Pierre-Alain Mazet, François Rogier et Dominique Volpert trouvent ici les marques de ma profonde reconnaissance. Quant à Patricia Harran-Klotz, sans qui rien de tout cela ne serait arrivé et qui m'a fait l'amitié d'accepter, de supporter devrais-je dire, ma présence dans son bureau, il me serait difficile d'exprimer ici tout ce que ma thèse lui doit. Patricia, ces années passées à ton contact sont plus qu'un excellent souvenir ! Au cours de ces années à l'ONERA, j'ai pu rencontrer beaucoup d'autres personnes. Ma sympathie va à Jean-Luc Estivalezes avec qui j'ai beaucoup échangé, tant sur les méthodes numériques pour les écoulements diphasiques que sur les "bonnes adresses" toulousaines. Toute ma sympathie va également aux thésards, stagiaires et post-doctorants que j'ai eu l'occasion de cotoyer à l'ONERA : Lionel, Stéphane, Jean-Marie, Jouke, Philippe, Samuel, Yoann, Guillaume, Frédéric, Géraldine, ainsi qu'à mes camarades de l'IMFT : Axel, "Maurice" et Pascal. Mes excuses à ceux que j'ai oubliés...

Que tout mon entourage, famille et amis, trouve ici les marques de ma reconnaissance pour leur soutien et leurs encouragements. Mes remerciements vont en particulier à Avit, Laurent et Lilian dont les 200 mails quotidiens, ne contenant parfois que 2 ou 3 mots (ces chiffres sont donnés en unité de Marseille), ont largement contribué à ce que mon moral ne faiblisse pas trop. Carine a eu la lourde charge de me supporter, dans tous les sens du terme, pendant ces trois années et quelques moi. Elle s'est acquittée de cette tache ingrate avec une abnégation exemplaire et la rédaction de ce mémoire ainsi que l'aboutissement de ma thèse lui doivent énormément.

Table des matières

Ta	Table des figures			12
In	Introduction			
Ι	Mo	délisa	tion	19
1	Déri	vation of	d'un modèle bifluide	21
	1.1	Établis	ssement des équations de bilan	21
		1.1.1	Conservation de la masse	. 22
		1.1.2	Bilan de quantité de mouvement	23
		1.1.3	Fermetures pour le modèle bifluide isotherme	23
	1.2	Effets	capillaires	26
		1.2.1	Manifestations	26
		1.2.2	Modélisation volumique des effets de courbure	. 27
		1.2.3	Conditions aux parois : angle de contact	. 29
	1.3	Effets	thermiques	. 35
		1.3.1	Rappel sur le modèle Boussinesq de convection naturelle	. 35
		1.3.2	Application au cas du modèle bifluide	36
	1 4	1.3.3 D	Effet Marangoni	37
	1.4	Remar	ques sur les lois d'état	. 38
		1.4.1		. 38
		1.4.2	Fraction volumique d'equilibre	. 39
2	Étuc	le du m	odèle	43
	2.1	Étude	mathématique du modèle	43
		2.1.1	Hyperbolicité	44
		2.1.2	Entropie de Lax et flux associé pour le modèle (\mathcal{E})	46
	2.2	Modèl	e de relaxation	49
		2.2.1	Introduction du modèle de relaxation	49
		2.2.2	Propriétés mathématiques du modèle (\mathcal{R})	50
		2.2.3	Développement de type Chapman-Enskog	55
	2.3	Étude	thermodynamique du modèle bifluide isotherme	57
		2.3.1	Présentation des équations de bilan	57
		2.3.2	Calcul de la dissipation d'énergie libre	58
		2.3.3	Fermeture thermodynamique	61
		2.3.4	Retour aux équations de bilan	62
		2.3.5	Proposition d'extension au cas de <i>n</i> fluides	65

II Méthode numérique

3	Sché	éma nur	nérique pour la partie hyperbolique des équations	71
	3.1	Schém	a de relaxation pour le modèle bifluide	71
		3.1.1	Etape de transport	71
		3.1.2	Etape de relaxation	74
	3.2	Résolu	tion du problème de Riemann	74
		3.2.1	Éléments propres et champs associés	75
		3.2.2	Invariants de Riemann	76
		3.2.3	Lois d'état particulières	77
		3.2.4	Ondes de choc et discontinuités de contact	78
		3.2.5	Détentes	81
		3.2.6	Récapitulatif et résolution pratique du problème de Riemann	83
	3.3	Validat	tion 1D de l'étape hyperbolique	85
	3.4	Cas sir	mple de ballottement	87
		3.4.1	Présentation du problème et solution analytique	87
		3.4.2	Résultats numériques	92
4	Sché	éma nur	nérique pour les termes de diffusion	95
	4.1	Introdu	uction	95
	4.2	Traiter	nent des forces de viscosité	95
		4.2.1	Discrétisation	95
		4.2.2	Stabilité du schéma numérique	99
	4.3	Traiter	nent de la conduction thermique	99
		4.3.1	Discrétisation et stabilité	99
		4.3.2	Conditions aux limites	101
	4.4	Validat	tion des schémas	102
		4.4.1	Viscosité	102
		4.4.2	Conduction thermique	107
		4.4.3	Phénomènes de convection naturelle	112
5	Sché	éma nur	nérique pour les termes capillaires	123
	5.1	Introdu	uction	123
	5.2	Traiter	nent du tenseur des forces superficielles	123
		5.2.1	Choix du schéma de discrétisation dans le cas isotherme	123
		5.2.2	Condition aux limites et angle de contact	125
		5.2.3	Discrétisation des effets Marangoni	126
	5.3	Validat	tion des effets introduits	134
	2.0	5.3.1	Bulle statique et courants parasites	134
		532	Ménisques et microgravité	137
		533	Oscillations de forme d'une bulle et transferts d'énergie	139
		534	Écoulement de Couette - Marangoni	142
		5.3. 4 5.3.5	Écoulement de Poiseuille - Marangoni	1 <u>7</u> 2
		5.5.5		1-10

III Application au comportement des fluides dans les réservoirs de véhicules spatiaux 149

6	Ball	ottement et grandes déformations d'une interface	151
	6.1	Ballottement dans un dièdre	151
		6.1.1 Cas linéaire	151
		6.1.2 Cas non-linéaire	157
	6.2	Formation de geysers	165
7	Réo 7.1 7.2	rientation d'une interface après réduction de gravité Introduction	177 177 178
	7.3	Cas d'un angle de contact élevé	182
	7.4	Conclusion sur le cas test	102

Conclusion

187

IV	A	nnexes	S	189				
A	Conv	vexité d	e l'entropie	191				
	A.1	Convex	kité de l'entropie du modèle (\mathcal{E})	191				
	A.2	Convex	kité de l'entropie du modèle (\mathcal{R})	192				
B	Propriétés de la fonction δu							
	B.1	Décrois	ssance	196				
		B.1.1	1-onde	196				
		B.1.2	3-onde	196				
		B.1.3	Bilan	196				
	B.2	Limites	s aux bornes	197				
		B.2.1	Pression de mélange infinie	197				
		B.2.2	Pression de mélange critique \tilde{P}_0	197				
	B.3	Convex	xité	198				
		B.3.1	1-onde	198				
		B.3.2	3-onde	198				
		B.3.3	Remarque	198				
С	Vers	ion axis	ymétrique du code de calcul	199				

Table des figures

1.1	Image d'un vecteur a par le tenseur des contraintes capillaires τ^C . Le vecteur t _{<i>I</i>} désigne la (une) tangente à l'interface.	29
1.2	Coin de liquide formant un angle θ avec une paroi et se déplaçant à la vitesse moyenne V. Pour établir le modèle d'angle dynamique, le champ de vitesse est supposé être parabolique.	31
1.3	Modèle d'angle dynamique : θ_d en fonction du nombre capillaire, loi de Tanner pour $\theta_s = 5.5^\circ$, $\ell = 50$, paramètres utilisés pour traiter les phénomènes de réorien- tation d'interface après réduction de la gravité dans le cas d'un angle de contact	20
1.4	Modèle d'angle dynamique, θ_d en fonction du nombre capillaire : loi de Tanner ($\theta_s = 55^\circ$, $\ell = 20$) et modèle proposé par [35] ($\theta_s = 55^\circ$, $\Delta \theta = 2, 5^\circ$), paramètres utilisés pour traiter les phénomènes de réorientation d'interface après réduction de la gravité dans le cas d'un grand angle de contact.	32 33
1.5	Modèle d'angle dynamique, θ_d en fonction du nombre capillaire : loi de Tanner; en haut $\theta_s = 5, 5^\circ$, ℓ varie de 5 à 80; en bas $\theta_s = 55^\circ$, ℓ varie de 10 à 200	34
3.1	Validation 1D. En haut : discontinuité de contact instationnaire, en bas : tube à choc : ordre 1 (•) ; ordre 2 (+) ; solution exacte (-). Maillage comportant 50 points.	86
3.2	Definition du problème de ballottement	87
3.3	Définition du cas test de ballottement	92
3.4	Résultats du cas simple de ballottement. En haut : maillage 40×100 , en bas : maillage 80×150 .	93
4.1	Écoulement diphasique de Couette plan, évolution du débit moyen au cours du temps.	04
4.2	Écoulement diphasique de Poiseuille plan. En haut : comparaison au profil exact des profils de vitesse obtenus avec les deux schémas de viscosité (4.3) (moyenne harmonique) et (4.14) (moyenne arithmétique). En bas : différence relative à la vitesse exacte et erreur sur le débit moyen	06
4.3	Réservoir stratifié : en haut : profil de température ; en bas : évolution de la varia- tion de l'enthalpie moyenne au cours du temps.	10
4.4	Stratification d'un réservoir par chauffage aux parois : en haut : profils de tempé- rature à différents instants, profil de température final et exact ; en bas évolution de la variation d'enthalpie moyenne au cours du temps	11
4.5	Mise en vitesse de deux fluides du fait de l'existence d'un gradient de température transverse à la direction de la gravité : en haut : profil de vitesse (\bullet) calculé, ($-$) exact ; en bas : profil de température (\bullet) calculé, ($-$) exact	15

4.6	Mise en vitesse de deux fluides du fait de l'existence d'un gradient de température transverse à la direction de la gravité : en haut : évolution de l'énergie cinétique en fonction du temps : en bas : évolution au cours du temps de la vitesse movennée	
4.7	(-) sur tout le domaine, (-·-) dans le fluide 1, () dans le fluide 2 Instabilité de Rayleigh-Bénard, cas stable ($Ra \sim 10^3$) : en haut : champ de tempé-	. 116
4.8	fature final, isothermes espacees de 0,1°, $(): T < 500$, $(-): T > 500$; en bas : évolution de la moyenne sur le domaine de la norme du rotationnel Instabilité de Rayleigh-Bénard, cas instable ($Ra \sim 3.10^3$) : en haut : champ de température final, isothermes espacées de 0,1°, $(): T < 300$, $(-): T > 300$:	. 119
4.9	en bas : évolution de la moyenne sur le domaine de la norme du rotationnel Instabilité de Rayleigh-Bénard, évolution de la moyenne de l'énergie cinétique sur le domaine au cours du temps : en haut : $g = 39.764 \text{ m.s}^{-2}$; en bas : $g = 39.765 \text{ m.s}^{-2}$. 120 . 121
5.1	Résultats bulle statique : en haut, courants parasites ; en bas, champ de pression .	. 135
5.2	Résultats bulle statique. Courants parasites en fonction du rapport des compressi- bilités gaz et liquide : en haut rapport 10 : en has rapport 100	136
5.3	Configuration initiale pour les cas de ménisques en microgravité.	. 137
5.4	Cas de ménisques en microgravité, solution stationnaire : en haut configuration bi- dimensionnelle, en bas configuration axisymétrique. La ligne rouge est la solution	
55	théorique correspondante	. 138
5.5	totale en fonction du temps. En haut à droite : variation de l'énergie totale sur le	
	domaine Ω au cours du temps et sa transformée de Fourier discrète (DFT). Au mi-	
	lieu, à gauche : énergie capillaire et sa DFT. Au milieu, à droite : énergie cinétique	
	En bas à droite : diamètre vertical (selon l'axe) de la bulle et sa DFT. Les raies	
	rouges dans les diagrammes de Fourier correspondent aux fréquences théoriques	
	des modes $n = 2$ et $n = 4$. 141
5.6	Ecoulement de Couette-Marangoni : en haut : profil de température calculé (•) et exact($-$); en bas : profil de vitesse calculé (•), exact ($-$) et profil isotherme	1 4 4
5.7	Écoulement de Couette-Marangoni : en haut : évolution au cours du temps des	. 144
5.7	températures moyennes dans les deux fluides ; en bas : évolution au cours du temps	
	des vitesses moyennes dans les deux fluides	. 145
5.8	Écoulement de Poiseuille-Marangoni : profil de vitesse obtenu pour les deux sché-	
	mas avec (•) et sans correction (\bigstar), en haut : 10 points ; en bas : 80 points. La ligne en trait plein est le profil exact la ligne en pointillés le profil de vitesse en	
	l'absence d'effets Marangoni.	. 147
5.9	Écoulement de Poiseuille-Marangoni : convergence en maillage des schémas avec	
	(•) et sans correction (\bigstar).	. 148
6.1	Définition du cas test 2 du benchmark Compere : cas linéaire	. 152
6.2	Résultats du cas test 2 du benchmark Compere : cas linéaire, $L/\Delta x = 25$; en haut :	1.50
63	z_a , en bas : z_b	. 153
0.5	de la transformée de Fourier en haut : z_a ; en bas : z_b	. 154
6.4	Résultats du cas test 2 du benchmark Compere : cas linéaire, $L/\Delta x = 40$; en haut :	
	z_a , en bas : z_b	. 155

0; module
156
157
3.4 m.s^{-1} ,
159
$.13 \text{ m.s}^{-1}$,
160
0.2 m.s^{-1} ,
161
⁻¹ 162
$^{-1}$
s^{-1} 164
166
as A4 · en
167
al : en haut
itiation du
\cdot hauteur
168 Induced
\cdots
n, on naut
· hauteur
160 Induced
initial an
iiiiiiai, eii
100, en bas
$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2} $
ar; en naut
· · · · · · · · 1/1
1 a droite :
geyser; en
\cdots
ar; en naut
au milieu
e : nauteur
1/3
il; en haut
au milieu
: hauteur
1/4
al; en haut
au milieu
e : haufeur
175
175

Résultats du cas COMPERE 3.1 (petit angle de contact). Forme initiale de la surface	
libre, maillage grossier.	179
Résultats du cas COMPERE 3.1 (petit angle de contact). En haut : évolution de la position de la surface libre sur la paroi, maillage grossier. En bas : évolution de la position de la surface libre sur l'axe, maillage grossier.	180
Résultats du cas COMPERE 3.1 (petit angle de contact). En haut : évolution de la	
position de l'interface sur l'axe et la paroi, maillage fin. En bas : forme finale de la	101
	191
Maillage pour le cas COMPERE 3.2 (grand angle de contact).	182
Résultats du cas COMPERE 3.2 (grand angle de contact). Forme initiale de la sur-	
face libre.	183
Résultats du cas COMPERE 3.2 (grand angle de contact). En haut : évolution de	
la position de la surface libre sur la paroi. En bas : évolution de la position de la	
surface libre sur l'axe.	184
Résultats du cas COMPERE 3.2 (grand angle de contact). Évolution de la position	
de l'interface sur l'axe et la paroi, modèle avec hysteresis.	185
	Résultats du cas COMPERE 3.1 (petit angle de contact). Forme initiale de la surface libre, maillage grossier

Introduction

Pour de nombreuses applications, la connaissance de l'état thermo-mécanique des fluides présents dans un réservoir est cruciale. Dans les réservoirs des lanceurs spatiaux, la diversité des conditions extérieures durant les différentes phases de vie du lanceur (mise en froid des réservoirs cryogéniques, transport des réservoirs stockables sur la zone de lancement, allumage et extinction des moteurs, phase propulsée avec ou sans vidange, largage des charges utiles, phase balistique,...) rend encore plus complexe ce problème. S'il existe quelques outils prédictifs ayant un niveau de fiabilité satisfaisant, ceux-ci n'ont été développés qu'au cas par cas sur la base d'hypothèses simplificatrices pour répondre à des besoins spécifiques et certains phénomènes restent encore mal compris.

Les évolutions du lanceur Ariane 5 prévoient d'augmenter sa "versatilité" vis-à-vis des missions de mise en orbite, par des allumages successifs des moteurs à ergols liquides de l'étage supérieur. Mais l'alimentation de ces moteurs doit être réalisée selon des contraintes bien précises (température des ergols, taux de gaz dissous,...) et dans le dôme gazeux, il faut aussi maîtriser la pression qui évolue en raison des conditions thermiques extérieures et de l'alimentation/prélèvement en gaz. Ces évolutions d'Ariane 5 rendent donc la connaissance de l'état des fluides dans les réservoirs à la fois plus complexe, mais aussi plus capitale.

Dans les autres domaines d'activité demandeurs de solutions à ce problème (transport de fluides, réservoirs d'avions, de satellites,...), la tendance de ces dernières années est de chercher à mettre au point des outils de simulation numérique. Le Centre National d'Études Spatiales a donc décidé le lancement du programme de recherche COMPERE (COMPortement des Ergols dans les REservoirs) dont l'objectif est l'élaboration et la validation expérimentale de modèles physiques et numériques permettant de prédire l'évolution des caractéristiques des fluides contenus dans des réservoirs de lanceurs soumis à des niveaux d'accélération et de flux de chaleur variables dans le temps.

Cette thèse se situe dans le cadre scientifique de ce programme de recherche. Elle porte sur le développement de modèles et de méthodes numériques, adaptés au suivi d'interface entre deux fluides, et permettant de prendre en compte les effets capillaires ainsi que les phénomènes de transfert de masse et de chaleur à l'interface. Le modèle obtenu doit donc être apte à reproduire les écoulements diphasiques dits "à interface libre" et inclure les différents effets physiques pertinents pour les applications visées : forces de vicosité, forces de tension superficielle (y compris les effets Marangoni), prise en compte d'un angle de contact entre une interface et une paroi, conduction thermique, convection naturelle et dilatation thermique.

Le qualificatif "interface libre" se rapporte aux écoulements pour lesquels la dimension des interfaces entre les deux fluides en présence est comparable aux dimensions du domaine d'étude, et ce par opposition (par exemple) aux écoulements à phases dispersées où chaque interface est de petite dimension par rapport à celles du domaine étudié. Ce type d'écoulements est également différent des écoulements à surface libre pour lequel le domaine considéré est généralement beaucoup plus vaste, voire non borné, et où l'un des fluides est un gaz dont on peut considérer le plus souvent que l'influence sur le mouvement de l'autre fluide se réduit à la pression qu'il exerce sur lui à l'interface. À chacun de ces types d'écoulements correspond une modélisation bien spécifique. Par exemple, les équations de Saint-Venant sont particulièrement adaptées aux écoulements à surface libre. De la même façon, s'agissant des écoulements à phases dispersées, le comportement de gouttes ou de particules dans un écoulement porteur gazeux est bien reproduit par une modélisation lagrangienne.

Les méthodes numériques utilisées pour simuler les écoulements à interface libre sont généralement basées sur la résolution de modèles dits "à un fluide incompressible". On peut distinguer (au moins) deux types de méthodes pour résoudre les équations de ces modèles : les méthodes de capture d'interface eulériennes et lagrangiennes. Pour ces dernières, les difficultés de mise en oeuvre lorsque la géométrie de l'interface devient complexe, nous ont poussé à resteindre notre choix aux méthodes eulériennes.

Dans ces approches eulériennes, une équation de transport pour une grandeur supplémentaire permettant de localiser la position de l'interface est résolue. Dans le cas des méthodes VOF (Volume-Of-Fluid) [58, 62], qui sont sans doute les plus utilisées, cette quantité peut être interprétée comme la fraction volumique de l'un des deux fluides et l'interface est caractérisée par une variation brutale de celle-ci. Cependant, la diffusion numérique des schémas provoque un épaississement de cette zone de transition, rendant difficile la localisation précise de l'interface. De la même manière, dans la méthode Level-Set [17, 109, 117], la quantité supplémentaire transportée est la distance à l'interface, matérialisée par l'ensemble des points où elle s'annule. Pour cette méthode, la complexité de l'équation vérifiée par le champ de distance à l'interface rend difficile sa résolution et, même avec des schémas précis, peut conduire à une perte de masse de l'un des deux fluides. Face aux problèmes posés par ces deux méthodes, on distingue alors plusieurs types d'adaptations : l'amélioration des techniques numériques [53, 94, 100, 122] ainsi que la reconstruction d'interface [75, 97, 98, 99] pour les méthodes de type VOF, et la redistanciation ainsi que la Ghost-Fluid-Method [30, 41, 43] pour les méthodes de type Level-Set.

Une autre façon de faire face aux problèmes des méthodes eulériennes est de revenir sur la modélisation effectuée. De nombreux travaux ont été réalisés dans cette voie au cours des dernières années.

Une première solution proposée consiste à considérer les modèles à un fluide comme issus d'un processus de moyenne [7, 34, 37] et donner ainsi un sens plus précis aux zones de mélange apparaissant dans les simulations. Dès lors, la difficulté est reportée sur le choix des lois de mélange que l'on peut interpréter comme des "lois de sous-mailles diphasiques".

Une deuxième solution consiste à introduire dans le modèle continu une épaisseur d'interface. Ceci peut être un point de vue avantageux lorsqu'on cherche à modéliser les phénomènes de tension superficielle et de changement de phase : les modèles obtenus sont généralement appelés modèles "à interface diffuse". La dérivation de ces modèles est généralement basée sur un approche plus thermodynamique, les différences résidant dans le choix de l'énergie libre de mélange. Parmi ces modèles, citons l'approche Second-Gradient [65, 66, 67] où l'énergie libre de mélange est exprimée en fonction de la masse volumique de mélange ainsi que de son gradient, et les modèles de type Phase-Field [64, 92, 123] où l'énergie libre de mélange est définie à partir d'un potentiel possédant deux minima correspondant à l'équilibre de chacune des deux phases.

Une autre classe de modèle, bien qu'ayant fait l'objet de peu d'études quant à leur application au cas des écoulements à interface libre, propose une voie alternative : les modèles multifluides compressibles [103, 105]. Ceux-ci, ainsi que des modèles à un fluide compressible, ont été le sujet de nombreuses études récentes [2, 27, 38, 39, 72, 73, 102, 104, 114] pour des applications où la

compressibilité joue un rôle prédominant. L'interface est alors une discontinuité de contact pour le modèle. On peut ainsi utiliser les méthodes numériques issues de la simulation numérique des écoulements compressibles. Des adaptations de ces méthodes doivent cependant être faites, par exemple à cause de l'existence de termes non conservatifs dans certains modèles [1]. Les discontinuités de contact, donc les interfaces, sont bien sûr épaissies par la diffusion numérique des schémas. On conçoit donc aisément que pour ces modèles, le choix des lois de mélange est crucial [27, 95, 116], si l'on ne prend pas le parti de reconstruire l'interface. Ces lois de mélange sont d'autant plus importantes qu'elles influent sur la nature hyperbolique du modèle ainsi que sur l'existence d'une entropie au sens de Lax (généralement reliée à l'entropie au sens thermodynamique). Des liens plus précis avec la thermodynamique, comme ceux dont bénéficient les approches de type Second-Gradient et Phase-Field, peuvent d'ailleurs être exhibés pour cette classe de modèles [48].

Dans le cadre de cette thèse, compte tenu de l'objectif déjà mentionné de développer un modèle général permettant de traiter des situations dans lesquelles les phénomènes mécaniques peuvent être étroitement couplés aux effets thermiques, nous avons privilégié ces approches récentes basées sur l'utilisation d'un modèle à deux fluides compressibles. Ce choix présente en outre l'avantage de conduire à des développements qui seront plus facilement intégrables, à terme, dans les grands codes de mécanique des fluides de l'ONERA, tous basés sur des algorithmes et des modélisations spécifiques des écoulements compressibles. L'un des enjeux importants de ce travail était de montrer la faisabilité d'une telle approche lorsque les écoulements à traiter sont à faible vitesse et donc quasi-incompressibles.

Ce mémoire est organisé de la façon suivante. Il comporte trois parties structurées en sept chapitres. La première partie (chapitres 1 et 2) concerne la présentation du modèle physique retenu et de ses propriétés mathématiques. La deuxième partie (chapitres 3, 4 et 5) concerne les méthodes numériques employées pour traiter les différents phénomènes physiques mis en jeu ainsi que des cas simples de validation pour chacun de ces phénomènes. Enfin, dans la dernière partie (chapitres 6 et 7) nous présentons des résultats numériques, obtenus avec la méthode développée, pour des cas tests qui concernent directement les activités de l'ONERA dans sa participation au programme COMPERE.

L'objectif du **premier chapitre** est d'exposer le modèle physique retenu. Les équations de bilan de masses et de quantité de mouvement sont déduites de principes simples, ceux de la mécanique des milieux continus. Nous présentons ensuite la modélisation retenue pour les effets capillaires et nous montrons que le terme correspondant peut s'écrire sous forme conservative, c'est à dire sous la forme de la divergence d'un tenseur. En imposant des conditions aux limites sur ce tenseur, nous obtenons un moyen simple d'imposer un angle de contact entre une paroi et l'interface. Les modèles d'angle dynamique utilisés dans les applications du dernier chapitre sont détaillés. Une équation de bilan d'enthalpie permet de traiter les phénomènes de convection-diffusion de la chaleur, la prise en compte de la convection naturelle étant réalisée par une approche de type Boussinesq. Nous cloturons ce chapitre en donnant un exemple de loi d'état possible pour chacun des deux fluides, en vue de l'application à des écoulements quasi-incompressibles.

Les propriétés mathématiques du modèle sont étudiées au **deuxième chapitre**. Nous montrons tout d'abord que le modèle est hyperbolique et qu'il admet une entropie au sens de Lax. Cette entropie n'est autre que la densité volumique d'énergie libre de mélange. Pour la mise en oeuvre numérique, nous introduisons alors un deuxième modèle, appelé modèle de relaxation, pour lequel nous prouvons que les solutions sont proches de celles du premier. Ce second modèle permet de préciser les liens thermodynamiques entre l'approche adoptée et les approches du type Second-Gradient et Phase-Field¹. Nous montrons ainsi, par une méthodologie originale de dérivation, que le tenseur des contraintes superficielles présenté au premier chapitre dérive d'une énergie de tension de surface. Sur la base de la même méthodologie, nous proposons également une extension possible pour le cas où un nombre quelconque de fluides non miscibles sont présents dans l'écoulement.

Dans le **troisième chapitre**, nous exposons la méthode numérique retenue pour traiter la partie hyperbolique du modèle. Cette méthode, de type volumes finis, est basée sur le solveur exact de Godunov, qui consiste à résoudre un problème de Riemann à chaque face du maillage entre deux états correpondant aux états dans les deux cellules voisines à la face. Nous présentons donc la solution du problème de Riemann associée au modèle et prouvons l'existence et l'unicité de cette solution dans le cas des lois d'état que nous utilisons dans les applications. L'existence inconditionnelle (absence de condition pour prévenir l'apparition du vide) confère au schéma numérique une grande robustesse et une grande simplicité de mise en oeuvre. La validation de cette partie de la méthode numérique, outre un cas simple de tube à choc, est effectuée sur un cas académique de ballottement sous gravité de deux fluides dans un réservoir, de dimensions suffisamment grandes pour que les autres effets physiques (capilarité, viscosité) soient négligeables. La façon d'obtenir la solution exacte de ce problème est également rappelée.

Le **quatrième chapitre** rassemble les méthodes numériques retenues pour traiter les phénomènes de diffusion de quantité de mouvement (forces de viscosité) et de diffusion thermique (conduction thermique). Pour choisir la discrétisation de ces termes, nous avons imposé au schéma correspondant de laisser invariantes certaines solutions stationnaires du modèle continu : l'écoulement diphasique de Couette plan pour le terme de viscosité et la stratification pour le terme de conduction thermique. Les schémas obtenus sont alors validés sur des cas tests simples et pertinents pour les applications visées.

Le **cinquième chapitre** présente la discrétisation retenue pour la prise en compte des effets capillaires. Dans un premier temps, nous exposons le schéma retenu lorsque l'écoulement est isotherme. En particulier, nous exposons la façon dont nous imposons l'angle de contact à la paroi. Dans un second temps, nous montrons que pour prendre en compte les effets Marangoni de dépendance de la tension de surface avec la température, il est nécessaire de modifier le schéma de discrétisation du tenseur des contraintes visqueuses. Pour cela, nous effectuons une étude de consistance rigoureuse qui permet de comprendre précisément les effets de la correction adoptée. Le schéma obtenu constitue un des aspects originaux de notre travail. Un travail de validation sur des cas simples est ensuite effectué. En particulier, le cas test académique des oscillations d'une bulle dans un fluide au repos permet de revenir sur des aspects théoriques du modèle, à savoir la nature (dans notre modèle) des transferts énergétiques entre capillarité et inertie.

Dans les **sixième et septième chapitres**, nous présentons des résultats de simulations numériques pour des situations ayant trait au comportement des fluides dans les réservoirs de véhicules spatiaux. Les études correspondantes ont été réalisées en accompagnement d'autres activités de l'ONERA dans le cadre scientifique du programme COMPERE, comme par exemple l'organisation d'un benchmark en 1999 et 2000, ou encore la préparation d'un deuxième workshop portant plus spécifiquement sur les aspects thermo-capilaires. Pour tous les cas traités, nous disposons de résultats d'expériences réalisées par le ZARM [35] ou le LEGI [47] dans le cadre du programme COMPERE.

¹ Dans notre cas, on peut parler de *méthode numérique* à interface diffuse, alors que dans le cas des approches de type Second-Gradient et Phase-Field on doit plutôt parler de *modèle* à interface diffuse.

Le **sixième chapitre** concerne plus particulièrement des situations de ballottement, linéaire ou non, et de grandes déformations d'un interface (déferlement, formation de geyser). Les expériences de formation de geyser que nous étudions étaient initialement prévues comme cas tests pour un deuxième benchmark du programme COMPERE. Notre étude a permis de montrer que la paroi, utilisée dans les expériences pour retenir le liquide à l'instant initial, a dans certaines conditions une influence non négligeable sur la forme et la hauteur des geysers.

Dans le **septième chapitre**, nous obtenons des résultats numériques de simulation de phénomènes capillaires en microgravité. Deux cas sont étudiés, l'un où l'angle de contact statique entre l'interface et la paroi est faible, et l'autre où cet angle est plus grand. La prise en compte de modèles d'angle dynamique permet d'améliorer significativement les résultats. Le bon accord obtenu avec les résultats expérimentaux dans le cas d'un angle de contact statique faible constitue un point original de notre travail.

Première partie

Modélisation

Chapitre 1

Dérivation d'un modèle bifluide pour les écoulements diphasiques à interface libre

1.1 Établissement des équations de bilan

On s'intéresse aux écoulements de deux fluides visqueux non miscibles. À ce stade de l'exposé, nous ne considérons de plus que des écoulements isothermes sans changement de phase. Dans ce cadre, nous supposons que les fluides en présence sont *barotropes*, c'est à dire que la pression p_k du fluide *k* est reliée à sa masse volumique ρ_k par la relation :

$$p_k = p_k(\mathbf{\rho}_k) \,, \tag{1.1}$$

où les p_k sont des fonctions données, suffisamment régulières, convexes et croissantes, conformément à la définition donnée dans [51]. Cependant, nous cherchons à obtenir un modèle pour la simulation numérique d'écoulements quasi-incompressibles, c'est à dire pour lequel les masses volumiques restent quasiment constantes : $\rho_k \simeq \rho_{k0}$. Nous aurons donc à revenir sur la validité de l'hypothèse de barotropie en situation d'écoulement quasi-incompressible isotherme (paragraphe 1.4).

Bien que dans les applications visées les fluides soient miscibles, il est plus commode (et non restrictif) de supposer que les fluides coexistent en tout point de l'espace, le taux de présence du fluide *k* étant caractérisé par sa fraction volumique α_k , avec :

$$\sum_{k} \alpha_k = 1 . \tag{1.2}$$

Cette dernière équation traduit le fait que les deux fluides occupent tout le domaine en volume : c'est la contrainte de saturation. Par convention, et dans toute la suite, on pose $\alpha = \alpha_1$ et donc $\alpha_2 = 1 - \alpha$. Le cas qui nous intéresse ici des écoulements dits "à interface libre" correspond au cas particulier où α_1 (respectivement α_2) est nul (ou presque nul d'un point de vue numérique) dans toute la partie du domaine occupée par le fluide 2 (repectivement le fluide 1). Dans le cas particulier de ces écoulements, il n'y a donc qu'un seul champ de vitesse, noté **V**.

Remarques :

1. Dans le cas de fluides non miscibles séparés par une interface infiniment fine, la fraction volumique d'un fluide est exactement la fonction indicatrice du domaine occupé par ce fluide. 2. Cette fraction volumique s'interprète également comme la *densité volumique de volume* du fluide au sens de la mécanique des milieux continus. En effet, si \mathcal{V} désigne un domaine fluide contenant une interface, on a :

$$\mathcal{V}_k = \int_{\mathcal{V}} \alpha_k d\mathcal{V}$$

où \mathcal{V}_k désigne le volume occupé par le fluide k dans \mathcal{V} .

Munis de ces hypothèses, nous pouvons écrire les lois de conservation de la masse pour chacun des fluides ainsi que le bilan de quantité de mouvement associé à l'unité de volume de fluide.

1.1.1 Conservation de la masse

On sait que la masse *m* d'un fluide, de masse volumique ρ , contenue dans un volume \mathcal{V} est donnée par :

$$m(\mathcal{V}) = \int_{\mathcal{V}} \rho d\mathcal{V} \,.$$

Dans le contexte de la mécanique des milieux continus, ρ est alors appelée *densité volumique de masse* du fluide considéré. Dans le cas d'un volume V contenant deux fluides non miscibles (et donc une interface), c'est à dire le cas d'un volume contenant une masse m_k de fluide k, celle-ci est donnée par :

$$m_k = \int_{\mathcal{V}} \alpha_k \rho_k d\mathcal{V},$$

puisque α_k vaut 1 dans le volume occupé par le fluide *k* et 0 partout ailleurs. La *densité volumique de masse du fluide k* est donc $\alpha_k \rho_k$. Pour plus de clarté dans la suite, nous posons :

$$\tilde{\rho}_k = \alpha_k \rho_k$$

Avec ces notations, la conservation de la masse du fluide k s'écrit :

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_k \mathbf{V}) = 0.$$
(1.3)

Remarques :

- 1. Cette équation est valable dans tout le domaine considéré, y compris en des points où le fluide *k* n'est pas présent.
- La quantité ρ = ρ˜₁ + ρ˜₂ représente la densité volumique de masse totale de fluide. Bien qu'au niveau continu il n'y ait aucun mélange entre les deux fluides, nous l'appelons également *densité volumique de masse de mélange*, ou encore *masse volumique de mélange*, par abus de language. Cette quantité obéit à l'équation :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0. \qquad (1.4)$$

Sous l'hypothèse de fluides barotropes (1.1), cette seule équation ne suffit pas. En effet, en anticipant, la pression va dépendre des deux masses volumiques ρ_1 et ρ_2 et les deux "informations" $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$ seront nécessaires à son évaluation.

1.1.2 Bilan de quantité de mouvement

La loi fondamentale de la dynamique appliquée à l'unité de volume du milieu continu "de mélange" s'écrit :

$$\rho \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{F} \; ,$$

où τ est le tenseur des contraintes associé aux actions de surfaces et **F** la densité volumique des forces extérieures, d'inertie ou de tension de surface agissant sur le milieu continu de mélange. Le tenseur des contraintes s'écrit :

$$\tau = -P_* \mathbb{I} + \tau^D$$

où P_* est la pression "de mélange" et τ^D le tenseur des contraintes visqueuses "de mélange". Ainsi, compte tenu de la conservation de la masse volumique "de mélange" (1.4), l'équation traduisant le bilan de quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \mathbf{V} \right) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{V} \otimes \mathbf{V} + P_* \,\mathbb{I} \right) = \nabla \cdot \tau^D + \mathbf{F} \,. \tag{1.5}$$

Pour les applications qui nous intéressent, **F** contient l'accélération de la gravité $\rho \mathbf{g}$ (éventuellement nulle) ainsi que la force d'inertie $-\rho \boldsymbol{\gamma}_e$, où $\boldsymbol{\gamma}_e$ est une accélération subie par le réservoir contenant le fluide et due, par exemple, au pilotage du lanceur. Ce terme source de quantité de mouvement contient également une densité volumique de force associée aux effets capillaires \mathbf{F}^C sur laquelle nuos reviendrons § 1.2. La densité volumique de forces **F** s'écrit donc :

$$\mathbf{F} = \boldsymbol{\rho} \left(\mathbf{g} - \boldsymbol{\gamma}_e \right) + \mathbf{F}^C \ .$$

Remarques :

- 1. Nous notons P_* la pression de mélange car elle correspond à une valeur d'équilibre en un sens précisé au paragraphe suivant.
- 2. Dans le cas de deux fluides non visqueux, soumis à aucune force extérieure, on obtient l'équation de *conservation* suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{V} \right) + \nabla \cdot \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{V} \otimes \mathbf{V} + P_* \mathbb{I} \right) = 0 \; .$$

1.1.3 Fermetures pour le modèle bifluide isotherme

Le modèle, formé des équations (1.3) pour chacun des deux fluides et de l'équation (1.5), doit être complété par des lois de fermeture, adaptées au type d'écoulements auquel nous nous intéressons. Nous exigeons en particulier que le modèle dégénère (au moins formellement) vers les équations de Navier-Stokes dans le cas où les deux fluides ont exactement les mêmes propriétés. Il faut aussi que le modèle dégénère vers les équations monophasiques dans les zones où la fraction volumique est constante. Nous appelons ces lois de fermeture *loi de mélange* car elle peuvent être interprétées comme telles, même si nous ne nous intéressons pas à des applications où le mélange existe réellement. Un moyen de respecter facilement ces contraintes est de choisir la quantité "mélangée" ϕ_m en fonction des quantités ϕ_1 et ϕ_2 issues des fluides 1 et 2 sous la forme :

$$\phi_m = \alpha \phi_1 + (1 - \alpha) \phi_2 , \qquad (1.6)$$

où α désigne la fraction volumique de fluide 1.

L'avantage de ce type de lois de mélange est de redonner formellement les équations monophasiques d'une part dans les zones où un seul fluide est présent ($\alpha = 0$ ou $\alpha = 1$), et d'autre part dans le cas où les deux fluides ont les mêmes propriétés ($\phi_1 = \phi_2$).

Leur inconvénient est d'introduire une nouvelle inconnue, la fraction volumique α . Il faut donc disposer d'un modèle déterminant cette fraction volumique sous la forme d'une équation algébrique (donnant la dépendance de la fraction volumique en fonction, par exemple, des quantités conservées $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$), ou bien sous la forme d'une équation aux dérivées partielles. Une telle équation doit alors être l'expression du bilan (ou de la conservation) de la densité volumique de volume de fluide 1, voir les remarques du début du § 1.1. Pour le(s) modèle(s) utilisé(s) dans les méthodes VOF [62, 7], l'équation adoptée est une simple équation de transport à la vitesse de l'écoulement **V** :

$$\frac{\partial \boldsymbol{\alpha}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \boldsymbol{\alpha} = 0 \; ,$$

que l'on peut effectivement interpréter comme une équation de conservation du volume de fluide 1 dans le cas où les fluides sont incompressibles (champ de vitesse à divergence nulle) :

$$\frac{\partial \boldsymbol{\alpha}}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\alpha} \mathbf{V}) = 0 \; .$$

Cependant, dans le cas de fluides faiblement compressibles, il n'y a pas de raison *a priori* pour qu'une telle quantité se conserve. Nous reviendrons sur ce point au § 2.3.

1.1.3.1 Pression de mélange et fraction volumique d'équilibre

Supposant l'absence de glissement entre les deux phases en présence, nous n'avons écrit qu'une seule équation de bilan de quantité de mouvement, n'introduisant ainsi qu'une seule pression P_* , dite de mélange. Afin d'obtenir la dégénérescence vers un modèle monophasique dans les zones où la fraction volumique est constante, nous choisissons donc de définir cette pression conformément à la relation (1.6) :

$$P_*=\alpha p_1+(1-\alpha)p_2.$$

La pression p_1 (respectivement p_2) n'étant pas définie dans les zones où seul le fluide 2 (resp. fluide 1) est présent, il convient de lui donner une valeur, c'est à dire de choisir une "pression partielle" de fluide 1 (resp. fluide 2) en de tels points : nous choisissons simplement de fixer la valeur de la pression du fluide non présent à celle du fluide présent, soit $p_1 = p_2$. Ce choix est simple et arbitraire et l'on aurait pu en faire un autre. Il sera justifié *a posteriori* par les propriétés mathématiques du modèle, notamment l'hyperbolicité du modèle obtenu. Les liens détaillés entre fermeture en pression et hyperbolicité de ce type de modèle ont été récemment étudiés par Coquel *et al* [27, 5]. La loi de pression "de mélange" $P_* = P_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2)$ retenue est donc :

$$P_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = \alpha_* p_1\left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha_*}\right) + (1 - \alpha_*) p_2\left(\frac{\tilde{\rho}_2}{1 - \alpha_*}\right) . \tag{1.7}$$

où $\alpha_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2)$ est la solution de l'équation en α :

$$p_1(\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha}) = p_2(\frac{\tilde{\rho}_2}{1-\alpha}). \tag{1.8}$$

à $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$ fixées. Ainsi la fraction volumique est définie de manière implicite comme une fonction de $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$, deux des variables conservatives de notre système. Cette définition est licite : on peut en effet montrer, voir § 1.4.2, que pour tout couple ($\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2$), l'équation (1.8) possède une

unique solution, et ceci quelles que soient les lois de pressions choisies vérifiant les hypothèses énoncées plus haut. Cette solution sera appelée *fraction volumique d'équilibre*. De même que pour la pression de mélange, le qualificatif "équilibre" se rapporte à l'équilibre des pressions des deux fluides.

1.1.3.2 Viscosité dynamique de mélange

Comme pour la pression de mélange, un seul tenseur des contraintes visqueuses apparait dans l'équation de bilan de quantité de mouvement (1.5). Supposant le comportement du "milieu continu de mélange" Newtonien, ce tenseur est proportionnel au tenseur des déformations. Le coefficient de proportionnalité, la viscosité dynamique "de mélange", demande donc une fermeture $\mu = \mu(\mu_1, \tilde{\rho}_1, \mu_2, \tilde{\rho}_2)$ qui vérifie les contraintes imposées plus haut : loin de toute interface ($\alpha = 0$ ou $\alpha = 1$) et en situation monophasique ($\mu_1 = \mu_2$), le modèle doit dégénérer vers les équations de Navier-Stokes. Le tenseur des contraintes visqueuses retenu est donc :

$$\tau^{D} = \mu \left(\nabla \mathbf{V} + {}^{t} \nabla \mathbf{V} \right), \qquad (1.9)$$

avec μ la viscosité dynamique "de mélange" :

$$\mu = \alpha_* \mu_1 + (1 - \alpha_*) \mu_2 , \qquad (1.10)$$

et μ_k la viscosité dynamique du fluide k.

Remarque :

Ce choix n'est pas le seul possible, on pourrait par exemple choisir le modèle suivant de viscosité dynamique de mélange :

$$\mu =
ho
u = ilde{
ho}_1
u_1 + ilde{
ho}_2
u_2 \; ,$$

basée sur les viscosités cinématiques v_1 et v_2 des fluides 1 et 2 respectivement et sur la viscosité cinématique de mélange $v = \mu/\rho$. Cette viscosité dynamique de mélange, parmi d'autres, est testée dans [68] et les résultats obtenus *dans des situations isothermes simples* ne permettent pas de conclure sur le choix d'une viscosité de mélange.

1.2 Effets capillaires

1.2.1 Manifestations

Loin de toute paroi et en situation isotherme, les effets de capilarité se manifestent par un saut de pression de part et d'autre d'interfaces non planes, dans le cas d'une bulle par exemple. L'intensité de ce saut est le produit de la courbure moyenne locale κ de l'interface par le coefficient de tension de surface σ entre les deux fluides, [79, 57] :

$$[P]] = \mathbf{\sigma}\mathbf{\kappa} \,, \tag{1.11}$$

relation connue sous le nom de loi de Laplace.

Ce saut est le résultat de forces de *tension superficielle* que l'on peut mettre en évidence par l'expérience du film de savon tendu à l'intérieur d'un cadre rectangulaire dont l'un des côtés est mobile, décrite par exemple dans [57] : pour que le film soit en équilibre, c'est à dire pour qu'il garde une surface constante, il faut exercer une force sur la partie mobile, ou encore appliquer au film une certaine tension. Ainsi dans le cas d'une interface courbe en équilibre, la somme de ces forces de tension doit être contre-balancée par une différence de pression de part et d'autre de l'interface.

Les effets de capillarité peuvent également être localisés près de parois solides avec l'apparition de ménisques de mouillage de dimensions de l'ordre de la longeur capillaire,

$$\ell_c = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho g}} ,$$

dans le cas où l'accélération de la gravité, d'intensité *g*, est présente. Par contre la taille de ces ménisques est de l'ordre des dimensions du réservoir contenant le fluide en situation de microgravité (ou lorsque ces dimensions sont inférieures à la longueur capillaire). À l'échelle de description à laquelle nous nous plaçons, nous supposons que la présence de ces ménisques s'explique uniquement par un déficit dans le bilan des forces tangentielles (par unité de longueur transverse) à la paroi solide imposant à l'interface de former un angle θ , compté depuis la paroi, différent de 90°. La relation traduisant cet équilibre est la loi de Young-Dupré [31] :

$$\sigma\cos\theta=\sigma_{1S}-\sigma_{2S}\,,$$

où σ_{1S} est la tension solide/fluide 1 et σ_{2S} la tension solide/fluide 2. Autrement dit, la seule donnée de cet angle de contact "macroscopique" entre l'interface et la paroi doit suffire à déterminer la forme d'équilibre de l'interface : nous ne tiendrons pas compte de la formation éventuelle d'un film au dessus de la limite apparente de l'interface [57], ni d'effets microscopiques [31] pouvant intervenir. Nous ne modélisons pas non plus les effets se produisant à des échelles intermédiares [88] (petites devant la longueur capillaire, mais grandes devant les échelles de longueur associées aux effets microscopiques) bien que ceux ci aient sans doute un rôle à jouer dans les phénomènes d'angle de contact dynamique [9, 110, 111, 112, 113].

Une troisième manifestation de la capillarité est l'effet Marangoni. Ce phénomène apparaît par exemple dans le cas où le coefficient de tension de surface dépend de la température, induisant des courants de surface si la température n'est pas homogène. Plus précisément, un gradient de température interfacial entraine un gradient de tension superficielle, modifiant ainsi le bilan des contraintes tangentielles à l'interface [31, 57]. Ce gradient de tension superficielle doit être incorporé au saut des contraintes visqueuses à l'interface, nul en situation isotherme :

$$\left[\!\left[\mu \frac{\partial \mathbf{V}_{t}}{\partial n_{I}}\right]\!\right] + \left(\nabla \boldsymbol{\sigma}\right)_{t} = 0, \qquad (1.12)$$

avec :

$$(\nabla \sigma)_{t} = \sigma_{T} (\nabla T)_{t}$$

où $\sigma_T = \frac{d\sigma}{dT}$ mesure la variation de la tension superficielle avec la température. Généralement ce coefficient est négatif, ce qui signifie qu'une interface chaude se tend moins qu'une interface froide. La notation $(\mathbf{A})_t$ désigne le vecteur \mathbf{A} projeté sur le plan tangent à l'interface :

$$(\mathbf{A})_t = \mathbf{A} - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}_I)\mathbf{n}_I$$
.

La notation $\llbracket \cdot \rrbracket$ désigne le saut à travers l'interface et suivant la normale : *le signe de ce saut dépend donc du choix d'orientation de la normale*.

Remarques :

1. Pour tenir compte des effets Marangoni dans le modèle, il faut donc ajouter au second membre de l'équation de bilan de quantité de mouvement le terme source :

$$\delta_{I}(\nabla\sigma)_{t}$$
,

où δ_I est la distribution de Dirac portée par l'interface.

- 2. Dans la relation (1.12), nous avons choisi comme convention pour la définition de la tangente à l'interface que le repère $(\mathbf{n}_I, \mathbf{t})$ soit direct, c'est à dire que la tangente à l'interface soit l'image de la normale par la rotation d'angle $+\pi/2$ dans le plan $(\mathbf{n}_I, \pm \mathbf{t})$.
- 3. Le même type de phénomène se produit si des gradients de concentration en tensio-actifs sont présents à l'interface [79, 31, 57]. On parle encore dans ce cas d'effet Marangoni [31].
- 4. On peut se demander ce que signifierait la présence d'un gradient de tension superficielle à l'interface entre deux fluides non visqueux. On peut faire correspondre à ce gradient de tension superficielle un gradient interfacial de pression . Dans l'approximation de fluides incompressibles, les ondes de pression se propagent instantanément : ce gradient de pression s'étend donc dans les deux fluides. Loin de l'interface, le fluide se met donc en mouvement dans la direction de la tangente à l'interface, créant un saut de vitesse tangentielle à l'interface. Dans la même situation, si la viscosité est présente, la vitesse tangentielle doit être continue à l'interface : le résultat se traduit alors par un raccord des contraintes visqueuses donné par la relation (1.12).

1.2.2 Modélisation volumique des effets de courbure

Pour rendre compte des effets de courbure, il faut adjoindre la relation de saut (1.11) à l'équation bilan de quantité de mouvement (1.5). Dans l'optique d'une mise en oeuvre numérique, cette formulation est difficilement exploitable car elle suppose de savoir *exactement* localiser l'interface à chaque pas de temps. C'est dans cette optique que Fedkiw *et al* [43, 42, 41, 12, 45, 71, 44] ont développé la Ghost Fluid Method (GFM) sur la base de méthodes Level-Set [17, 117]. Pour les méthodes VOF [58, 62, 99, 53, 94, 100], d'autres travaux [11, 67] tendent à montrer qu'il suffit d'ajouter une densité volumique de force \mathbf{F}^{C} au second membre de l'équation de bilan de quantité de mouvement qui vérifie au sens des distributions :

$$\mathbf{F}^{C} \simeq \mathbf{\sigma} \, \mathbf{\kappa} \, \boldsymbol{\delta}_{I} \, \mathbf{n}_{I} \,, \tag{1.13}$$

où δ_I est la distribution de Dirac portée par l'interface et \mathbf{n}_I la normale à l'interface, réalisant de la sorte la bonne relation de saut. Dans [11], les auteurs proposent l'approximation, appelée CSF (Continuum Surface Force), et largement adoptée depuis :

$$\mathbf{F}^{C} = -\boldsymbol{\sigma} \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_{*}}{\|\nabla \alpha_{*}\|} \right) \nabla \alpha_{*} , \qquad (1.14)$$

où $\nabla \alpha_*$ approxime $\delta_I \mathbf{n}_I^1$, et où la courbure κ est modélisée par :

$$-
abla \cdot \left(rac{
abla lpha_*}{\|
abla lpha_*\|}
ight)$$
 .

C'est cette approximation que nous retenons pour prendre en compte les effets de tension de surface dans le modèle. Toutefois, nous utilisons, pour des raisons numériques, une forme conservative équivalente de cette relation, appelée CSS [56, 93] (Continuum Surface Stress) :

$$\mathbf{F}^{C} = \nabla \cdot \left(\sigma \| \nabla \alpha_{*} \| \mathbb{I} - \sigma \frac{\nabla \alpha_{*}}{\| \nabla \alpha_{*} \|} \otimes \nabla \alpha_{*} \right).$$
(1.15)

Pour s'en convaincre, supposons le coefficient de tension de surface σ constant et développons le second terme de la divergence au second membre de (1.15). Grâce à la relation suivante, valable pour deux vecteurs *A* et *B* quelconques :

$$abla \cdot (A \otimes B) = (\nabla \cdot A)B + (A \cdot \nabla)B$$
,

nous obtenons :

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_*}{\|\nabla \alpha_*\|} \otimes \nabla \alpha_*\right) = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_*}{\|\nabla \alpha_*\|}\right) \nabla \alpha_* + \left(\frac{\nabla \alpha_*}{\|\nabla \alpha_*\|} \cdot \nabla\right) \nabla \alpha_* .$$
(1.16)

Développons ensuite le premier terme sous la divergence de (1.15) à l'aide de la relation de dérivée des fonctions composées :

$$\nabla \cdot (\|\nabla \alpha_*\|\mathbb{I}) = \nabla (\|\nabla \alpha_*\|) = \left(\frac{\nabla \alpha_*}{\|\nabla \alpha_*\|} \cdot \nabla\right) \nabla \alpha_* , \qquad (1.17)$$

ce qui donne bien la relation (1.14) par soustraction de (1.16) à (1.17).

Les effets capillaires sont ainsi pris en compte dans le modèle sous la forme d'une densité volumique de force qui s'écrit :

$$\mathbf{F}^{C} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^{C} , \quad \text{avec} \ \ \boldsymbol{\tau}^{C} = \boldsymbol{\sigma} \| \nabla \boldsymbol{\alpha}_{*} \| \mathbb{I} - \boldsymbol{\sigma} \frac{\nabla \boldsymbol{\alpha}_{*}}{\| \nabla \boldsymbol{\alpha}_{*} \|} \otimes \nabla \boldsymbol{\alpha}_{*} ,$$

et qui permet donc d'interpréter les forces de tension de surface comme des forces volumiques intérieures au "milieu continu de mélange". On s'attend à ce que ces efforts soient portés par la direction tangente à l'interface. Afin de s'en convaincre, appliquons le tenseur τ^C à un vecteur quelconque **a**, voir FIGURE 1.1 :

$$\tau^{C} \cdot \mathbf{a} = \sigma \| \nabla \alpha_{*} \| \left(\mathbf{a} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_{I}) \, \mathbf{n}_{I} \right)$$

qui s'écrit encore :

$$\boldsymbol{\tau}^{C} \cdot \boldsymbol{a} = \boldsymbol{\sigma} \| \nabla \boldsymbol{\alpha}_{*} \| \Pi_{It} \cdot \boldsymbol{a} , \qquad (1.18)$$

où $\mathbf{n}_I = \frac{\nabla \alpha_*}{\|\nabla \alpha_*\|}$ approxime la normale à l'interface², et Π_{It} l'opérateur de projection sur le plan tangent à l'interface : la relation (1.18) montre bien que les efforts intérieurs associés au tenseur τ^C sont tangents à l'interface, ce qui est bien cohérent avec des efforts de tension de surface.

¹ Il suffit pour ce la que α_* soit une approximation de la fonction indicatrice de l'une des deux phases en présence.

² Plus exactement, la valeur (vectorielle) que prend le champ $\frac{\nabla \alpha_*}{\|\nabla \alpha_*\|}$ en un point *x* est la normale à l'iso-fraction volumique passant par ce point.



FIG. 1.1 – Image d'un vecteur **a** par le tenseur des contraintes capillaires τ^C . Le vecteur **t**_I désigne la (une) tangente à l'interface.

Remarques :

1. L'ajout de la force de tension surface (1.13) au second membre de l'équation de quantité de mouvement entraîne un saut de pression (de mélange) à l'interface. Ce saut de pression à l'interface n'est pas incompatible avec la loi de fermeture (1.8). En effet, en un point x_I de l'interface, on a la relation de Laplace :

$$P(x_I^+) = P(x_I^-) + \sigma \kappa \,.$$

Cette relation peut très bien être réalisée avec :

$$\begin{array}{rcl} p_1(x_I^+) &=& p_2(x_I^+) \\ p_1(x_I^-) &=& p_2(x_I^-) \end{array},$$

de chaque côté de l'interface.

2. La quantité $\|\nabla \alpha_*\|$ peut s'interpréter au sens de la mécanique des milieux continus. En effet, puisque $\nabla \alpha_*$ est une aproximation de $\delta_I \mathbf{n}_I$, $\|\nabla \alpha_*\|$ approche δ_I et on a donc la relation :

$$\int_{\mathcal{V}} \|\nabla \alpha_*\| d\mathcal{V} \simeq \int_{\mathcal{V}} \delta_I d\mathcal{V} = \operatorname{Aire}(I \cap \mathcal{V}) ,$$

ce qui signifie que $\|\nabla \alpha_*\|$ est une approximation de la *densité volumique d'aire interfaciale*.

1.2.3 Conditions aux parois : angle de contact

Comme annoncé plus haut, nous prenons en compte l'angle de contact entre une interface et une paroi solide par l'intermédiaire des conditions aux limites. Nous imposons au tenseur capillaire d'obéir à la relation :

$$\tau^{C} \cdot \mathbf{n} = \sigma \| \nabla \alpha_{*} \| \mathbf{n} + \sigma \cos \theta \nabla \alpha_{*} ,$$

où **n** désigne la normale extérieure à la paroi solide. Cette relation supplémentaire introduit donc une nouvelle inconnue θ . En effet, cet angle dépend de la vitesse à laquelle se déplace la ligne triple, intersection de l'interface avec la paroi. Au repos, cet angle de contact est donné : on l'appelle alors *angle de contact statique*, noté par la suite θ_s . Mais cet angle statique n'est pas unique, des phénomènes d'hystérésis pouvant apparaître. Ces hysteresis s'expliquent [31] par des inhomogénéités de la surface solide en contact avec l'interface. Ces inhomogénéités peuvent être d'origines chimique (tache de substrat sur la surface) ou physique (rugosité de la surface). Généralement on mesure qualitativement ce phénomène par l'existence de deux angles seuils : un angle d'avancée θ_a et un angle de recul θ_r vérifiant l'inégalité $\theta_r \leq \theta_s \leq \theta_a$.

D'autre part, lorsque la ligne triple se déplace, l'angle n'est plus égal à cet angle statique mais à un angle appelé *angle de contact dynamique*, noté θ_d , dépendant généralement de la vitesse V_{lt} de déplacement de la ligne triple.

Ces effets d'angle de contact peuvent être rassemblés dans un *modèle d'angle dynamique* sous la forme d'une relation :

$$\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_d(\boldsymbol{\theta}_s, V_{\mathrm{lt}}, \boldsymbol{\theta}_r, \boldsymbol{\theta}_a) \; ,$$

devant vérifier les conditions :

Ainsi les phénomènes d'hysteresis sont modélisés par une discontinuité dans la relation angle de contact-vitesse. Enfin, il faudra préciser la relation entre la vitesse V_{lt} et la vitesse locale V du fluide.

Le modèle de dépendance entre vitesse et angle de contact que nous adoptons est le modèle proposé dans [31] et appelé *loi de Tanner* [57] :

$$3\operatorname{Ca}\ell = \tan\theta_d \left(\cos\theta_s - \cos\theta_d\right) \,, \tag{1.19}$$

où Ca est le nombre capillaire basé sur la vitesse de déplacement de la ligne triple :

$$\operatorname{Ca} = \frac{\mu V_{\mathrm{lt}}}{\sigma},$$

et ℓ un rapport logarithmique d'échelle. Ce nombre capillaire peut être vu comme le rapport entre la vitesse de la ligne triple et la vitesse visco-capilaire $V^* = \frac{\sigma}{\mu}$. Pour établir ce modèle, les auteurs écrivent un bilan d'énergie dans un coin de liquide et suppose que le champ de vitesse est de type Poiseuille dans le liquide, voir FIGURE 1.2. La vitesse de déplacement de la ligne triple est alors la vitesse moyenne dans chaque section orthogonale à la paroi. Le modèle d'angle dynamique est ensuite obtenu en équilibrant la puissance nécessaire au déplacement de la ligne triple et une partie de la dissipation visqueuse dans le coin de liquide. Cette dissipation étant singulière, il faut introduire une échelle de "coupure" *a*, typiquement de l'ordre d'une taille moléculaire. Le résultat est l'apparition dans le modèle du rapport d'échelle $\ell = \log \frac{L}{a}$ où *L* est la dimension caractéristique du coin de liquide. Expérimentalement, ce rapport vaut entre 15 et 20 [31].

Ce modèle n'est théoriquement valable que pour des angles de contact faibles et pour des nombres capillaires modérés. Il faut noter que la façon d'établir ce modèle n'exclut pas une vitesse négative de ligne triple. Cependant la relation obtenue n'est valable que jusqu'à la vitesse négative limite :

$$V_{\rm lim}^- = -\frac{V^*}{3\ell}\sin^3\theta_{\rm lim} \; ,$$



FIG. 1.2 – Coin de liquide formant un angle θ avec une paroi et se déplaçant à la vitesse moyenne *V*. Pour établir le modèle d'angle dynamique, le champ de vitesse est supposé être parabolique.

où θ_{lim} est l'angle, compris entre 0 et θ_s :

$$\theta_{\rm lim} = {\rm acos}\left[\left(\cos\theta_s\right)^{1/3}\right]$$

Cette vitesse limite peut être rapprochée de la valeur limite de la vitesse de tirage d'une plaque en contact avec une interface et en-deçà de laquelle il y a formation d'un film liquide "au dessus" de la ligne triple.

Ce modèle ne prend pas en compte les effets d'hysteresis, la relation angle de contact-vitesse étant continue en $V_{lt} = 0$. Disposant d'un modèle d'angle dynamique $\theta_d(\theta_s, V_{lt}, \theta_a)$ valable pour une vitesse de ligne triple positive, un moyen d'introduire de tels effets est de symétriser le modèle pour les vitesses négatives avec :

$$[\theta_d(\theta_s, V_{\mathrm{lt}} < 0, \theta_r) - \theta_r] = - [\theta_d(\theta_s, -V_{\mathrm{lt}}, \theta_a) - \theta_a] ,$$

avec de plus :

$$\theta_s = \frac{\theta_r + \theta_a}{2}$$

Cette dernière relation n'a aucun caractère général, mais dans le cas d'existence d'hysteresis, l'angle de contact statique n'est pas vraiment défini, puisque une interface immobile peut être en contact avec la paroi selon tous les angles compris entre θ_r et θ_a . En général, la quantité $\Delta \theta = \theta_a - \theta_r$ mesure l'intensité de l'hysteresis et est un paramètre important de ce type de modèle.

Nous disposons de deux modèles d'angle dynamique : le modèle basé sur la loi de Tanner et donné par la relation (1.19), le second étant un modèle proposé par le ZARM dans [35] et donné par la relation suivante, pour les nombres capillaires Ca positifs :

$$\theta_d = \operatorname{acos}\left[\cos\theta_a - (1 + \cos\theta_a) \tanh\left(1.4\operatorname{Ca}^{0.59}\right)\right], \qquad (1.20)$$

les valeurs de θ_d pour Ca< 0 étant définies de la manière expliquée précédemment. Ce modèle a été établi sur la base de corrélations avec les expériences réalisés par le ZARM et ce pour différentes valeurs de l'angle contact statique θ_s (vérifiant toutefois $\theta_s \gtrsim 10^\circ$) ainsi que du paramètre σ/ρ . Ce

modèle a également fait l'objet d'études numériques réalisées avec le code *FLOW3D* et montre un bon comportement sur les cas tests de réorientation d'interface après réduction de gravité, tout au moins lorsque l'angle de contact statique est suffisamment grand ($\theta_s \gtrsim 10^\circ$).

Nous avons représenté FIGURE 1.3 et FIGURE 1.4 la dépendance de l'angle de contact en fonction du nombre capillaire pour ces modèles. Nous testerons l'effet de ces modèles sur des cas test de réorientation d'interface en microgravité, voir § 7. C'est pourquoi, les courbes ont été tracées pour les différents jeux de paramètres que nous avons utilisés pour les calculs.

Afin d'illustrer la dépendance du modèle d'angle dynamique donné par la loi de Tanner (1.19) en fonction du paramètre ℓ , nous avons tracé FIGURE 1.5, pour les deux valeurs de l'angle de contact statique utilisées dans les applications du § 7, l'angle de contact dynamique en fonction du nombre capillaire pour différentes valeurs de ℓ .



FIG. 1.3 – Modèle d'angle dynamique : θ_d en fonction du nombre capillaire, loi de Tanner pour $\theta_s = 5.5^\circ$, $\ell = 50$, paramètres utilisés pour traiter les phénomènes de réorientation d'interface après réduction de la gravité dans le cas d'un angle de contact faible.



FIG. 1.4 – Modèle d'angle dynamique, θ_d en fonction du nombre capillaire : loi de Tanner ($\theta_s = 55^\circ$, $\ell = 20$) et modèle proposé par [35] ($\theta_s = 55^\circ$, $\Delta \theta = 2, 5^\circ$), paramètres utilisés pour traiter les phénomènes de réorientation d'interface après réduction de la gravité dans le cas d'un grand angle de contact.



FIG. 1.5 – Modèle d'angle dynamique, θ_d en fonction du nombre capillaire : loi de Tanner; en haut $\theta_s = 5,5^\circ$, ℓ varie de 5 à 80; en bas $\theta_s = 55^\circ$, ℓ varie de 10 à 200.

1.3 Effets thermiques

1.3.1 Rappel sur le modèle Boussinesq de convection naturelle

Une condition nécessaire pour qu'un fluide soumis à une accélération, celle de la pesanteur terrestre par exemple, soit en équilibre mécanique stable (vitesse nulle) est que les gradients de température existants dans le fluide soient (nuls ou) de même direction que cette accélération [79, 57]. Mais cette condition n'est pas suffisante : il faut de plus que ces gradients soient de faible intensité, l'équilibre mécanique n'étant stable qu'en deçà d'une valeur limite. Au delà de cette valeur limite, un écoulement apparaît dans le fluide. Dans le cas où l'accélération est celle de la gravité, on parle alors de *convection naturelle*.

Ces phénomènes sont bien reproduits par le modèle dit d'Oberbeck-Boussinesq. La validité de ce modèle est contrainte par plusieurs hypothèses :

- la température et la masse volumique du fluide varient peu par rapport à leur valeur constante d'équilibre T_0 et ρ_0 ;
- les perturbations de température et de masse volumique par rapport à ces valeurs d'équilibre sont reliées par la relation :

$$\rho' = \rho - \rho_0 = -\rho_0 \beta \underbrace{(T - T_0)}_{T'},$$

où β est le coefficient de dilatation thermique du fluide ;

les variations de masse volumique dûes aux variations de pression induites par le mouvement du fluide (effets de compressibilité), doivent rester petites devant les variations de masse volumique dûes aux variations thermiques (effets de dilatation thermique). Ces variations de pression correspondent à l'écart, noté p', entre la pression réelle du fluide et la pression correspondant à l'équilibre mécanique du fluide, lorsque celui-ci est au repos.

Avec ces hypothèses on peut déduire des équations de Navier-Stokes, voir [79] par exemple, le modèle suivant :

$$\frac{\partial \mathbf{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{\rho} \mathbf{V}) = 0$$
$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{\rho} \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\mathbf{\rho} \mathbf{V} \otimes \mathbf{V} + p' \mathbb{I}) = \nabla \cdot \tau^D - \mathbf{\rho} \beta T' \mathbf{g}$$
$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{\rho} C_p T') + \nabla \cdot (\mathbf{\rho} C_p T' \mathbf{V}) = -\nabla \cdot q^T + \tau^D : \nabla \mathbf{V}$$

où $q^T = -\lambda \nabla T$ est la densité du flux d'énergie transportée par conduction thermique. Il faut noter que pour obtenir la dernière équation, il est nécessaire de supposer le fluide incompressible. D'autre part, l'hypothèse de faible variation de pression par rapport à la pression d'équilibre permet de négliger le terme en $\frac{dp'}{dt}$ dans l'équation d'énergie.

Ce modèle est apte à reproduire les phénomènes de convection naturelle. De nombreux articles traitent en effet de la mise en oeuvre numérique de ce modèle, avec pour exemple le cas particulier de l'instabilité de Rayleigh-Bénard (*e.g.* [21, 50, 26]). Le critère d'instabilité, basé sur un nombre de Rayleigh critique, est en particulier retrouvé par le calcul avec une très bonne précision.
Remarques :

- 1. On peut constater que le couplage des équations du mouvement à l'équation d'énergie ne se fait que par l'intermédiaire d'un terme source au second membre de l'équation de bilan de quantité de mouvement, le terme source de dissipation visqueuse τ^D : ∇V étant souvent négligeable devant le terme de diffusion thermique [79].
- 2. Le modèle de Bousinnesq n'est valable que dans la limite $\beta T' = \beta \Delta T \ll 1$.

1.3.2 Application au cas du modèle bifluide

Jusqu'à présent, nous nous sommes intéressés à la modélisation d'écoulements *isothermes* de deux fluides non miscibles, pouvant être considérés comme incompressibles, et nous avons proposé de les approcher par des écoulements faiblement compressibles faisant intervenir des vitesses du son finies, mais grandes devant les autres échelles de vitesse du problème.

Les effets thermiques que nous introduisons restent dans le cadre des écoulements incompressibles mais dans l'approximation de Boussinesq : les deux fluides sont supposés dilatables, leur masse volumique étant une fonction affine de la température.

Cependant, comme pour le modèle de Boussinesq, nous pouvons ne tenir compte de cette dépendance que dans le terme source de poussée d'Archimède et/ou dans le terme de tension de surface, *via* la dépendance du coefficient de tension de surface σ avec la température. Ainsi l'équation d'énergie régissant l'évolution de la température n'est couplée dans ce cas au bilan de quantité de mouvement que par l'intermédiaire de termes sources.

L'équation de bilan d'énergie de mélange retenue est donc la suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho C_p (T - T_0) \right) + \nabla \cdot \left(\rho C_p (T - T_0) \mathbf{V} \right) = \nabla \cdot \left(\lambda \nabla T \right) \,, \tag{1.21}$$

où ρC_p est la chaleur volumique de mélange à pression constante définie par :

$$\rho C_p = \tilde{\rho}_1 C_{p1} + \tilde{\rho}_2 C_{p2} , \qquad (1.22)$$

les chaleurs massiques à pression constante des deux fluides C_{p1} et C_{p2} étant supposées indépendantes de la température. Le coefficient de conduction thermique λ pour le mélange est donné par :

$$\lambda = \alpha_* \lambda_1 + (1 - \alpha_*) \lambda_2 , \qquad (1.23)$$

les coefficients λ_1 et λ_2 désignant les coefficients de conduction thermique des deux fluides.

Il faut également introduire au second membre de l'équation de bilan de quantité de mouvement les termes sources correspondant aux effets de dilatation thermique. Nous modélisons les effets de la poussée d'Archimède par l'ajout d'un terme source identique à celui intervenant dans le cas monophasique, mais avec un coefficient de dilatation thermique pour le mélange défini par :

$$\rho\beta = \tilde{\rho}_1\beta_1 + \tilde{\rho}_2\beta_2 , \qquad (1.24)$$

les coefficients β_1 et β_2 étant les coefficients correspondant pour chacun des deux fluides.

Remarque :

L'équation de bilan d'énergie est en fait un bilan d'enthalpie pour le mélange. Nous préférons l'enthalpie à l'énergie interne car si l'on veut introduire à l'avenir des effets de changement de phase dans le modèle, l'enthalpie est mieux adaptée.

1.3.3 Effet Marangoni

Nous pouvons maintenant en venir au terme source qu'il faut ajouter pour tenir compte de la variation de la tension superficielle avec la température. La relation (1.18) permet d'écrire le tenseur capillaire de la façon suivante :

$$\tau^C = \sigma \| \nabla \alpha_* \| \Pi_{It}$$
.

En vue de la modélisation d'éventuels effets Marangoni, le calcul de la divergence de ce tenseur montre que si σ dépend de la température, on obtient un terme supplémentaire :

$$\nabla \cdot \tau^{C} = \underbrace{\sigma \nabla \cdot (\|\nabla \alpha_{*}\|\Pi_{It})}_{\text{effets de courbure}} + \underbrace{\|\nabla \alpha_{*}\|\Pi_{It} \cdot \nabla \sigma}_{\text{effet Maragoni}}.$$

Ce second terme donne bien un terme localisé à l'interface (proportionnel à $\|\nabla \alpha_*\|$), et porté par la tangente à l'interface puisque :

$$\Pi_{It} \cdot \nabla \sigma = (\nabla \sigma)_t = \sigma_T (\nabla T)_t .$$

Ainsi, l'écriture du terme source de tension de surface de Brackbill [11] sous sa forme conservative, incluant le coefficient de tension de surface sous la divergence, donne directement la bonne relation de saut concernant les efforts tangentiels dûs aux effets Marangoni.

Pour les applications visées, on peut supposer [57] que le coefficient de tension de surface dépend linéairement de la température :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_0 + \boldsymbol{\sigma}_T (T - T_0) , \qquad (1.25)$$

où σ_0 désigne le coefficient de tension de surface à la température T_0 . Rappelons que nous avons choisi de prendre comme convention $\sigma_T \leq 0$. Théoriquement, cette relation ne peut être valable que pour de faibles écarts de température par rapport à la température de référence T_0 .

Remarque :

Signalons que le coefficient de tension de surface d'un fluide en équilibre avec sa vapeur s'annule à la température critique et est généralement donné par une relation de la forme [63] :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_0 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^n,$$

où n est un coefficient empirique.

1.4 Remarques sur les lois d'état

1.4.1 Choix de lois d'état

À ce stade, nous introduisons la loi d'état choisie pour chacun des deux fluides, loi que nous employons dans les applications. Ayant fait l'hypothèse d'absence d'effet thermique (dus à des variations de pression) et de faible nombre de Mach, c'est à dire de faibles variations relatives des masses volumiques des deux fluides :

$$\frac{\delta \rho}{\rho_0} \ll 1$$
,

nous pouvons *linéariser* chacune des lois d'état autour d'un état de référence de densité ρ_0 et de pression p_0 . Ainsi, nous prenons pour les deux fluides la loi suivante :

$$p_i = p_0 + c_i^2 (\rho_i - \rho_{i0}), \qquad (1.26)$$

 c_i désignant la vitesse du son (indépendante de la masse volumique) dans le fluide considéré. On peut relier cette vitesse du son au coefficient de compressibilité isotherme χ_T :

$$\chi_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \bigg|_T,$$

qui pour la loi d'état choisie s'écrit :

$$\chi_T = \frac{1}{\rho c^2} \, .$$

Cette loi d'état est dite *loi d'état pseudo-compressible*. En effet, en pratique (pour les effets mécaniques), nous ne choisirons jamais une vitesse du son réelle, introduisant ainsi une compressibilité artificielle qu'il faudra contrôler. On peut alors se poser la question de la validité de cette loi d'état en configuration d'écoulement incompressible, c'est à dire se demander comment choisir la pseudo-vitesse du son. Tout d'abord, rappelons qu'un *fluide incompressible* est un fluide pour lequel la vitesse du son est infinie (ou encore le coefficient de compressibilité est nul). Ensuite, on peut caractériser un *écoulement incompressible* par le fait que les variations relatives de la masse volumique du fluide sont faibles :

$$\frac{\delta\rho}{\rho_0}\ll 1\;.$$

Pour satisfaire cette contrainte, il faudra donc s'assurer que l'ordre de grandeur des variations de pression ΔP dans les écoulements qui nous intéressent vérifie :

$$\chi_T \Delta P \ll 1 , \qquad (1.27)$$

et ce pour chacun des deux fluides. Par exemple, l'ordre de grandeur des variations de pression dans un écoulement dominé par la capillarité est :

$$\Delta P = \frac{2\sigma}{R}$$

où *R* est la grandeur caractéristique de la courbure de l'interface. On choisira donc les vitesses du son de manière à ce que :

$$\frac{2\sigma}{\rho c^2 R} \ll 1 \; .$$

En choisissant cette loi d'état pour les deux fluides, nous montrons § 1.4.2 que la fraction volumique d'équilibre se calcule explicitement en fonction des variables $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$. Nous résolvons de plus le problème de Riemann (§ 3.2) associé au modèle de relaxation, introduit § 2.2, dans le cas particulier de ces lois d'état, ce qui nous permet d'utiliser le schéma de Godunov dans notre méthode numérique.

1.4.2 Fraction volumique d'équilibre

1.4.2.1 Cas des lois linéarisées isothermes

Supposons que les deux fluides suivent chacun une loi d'état de type (1.26). Soient ρ_{10} et c_1 les masse volumique et vitesse du son de référence du fluide 1, ρ_{20} et c_2 celles du fluide 2. On a donc :

$$p_1(\rho_1) = p_0 + c_1^2(\rho_1 - \rho_{10}) p_2(\rho_2) = p_0 + c_2^2(\rho_2 - \rho_{20})$$

Il s'agit ici d'appliquer sur l'exemple de ces lois d'état très simples les résultats annoncés précédemment : nous allons voir que la fraction volumique d'équilibre α_* peut ici être *explicitement* calculée.

Tout d'abord, on note que ces deux lois de pression sont strictement croissantes, et admettent une limite infinie lorsque la masse volumique tend vers l'infini. Nous cherchons à résoudre l'équation (1.8) pour ces deux lois d'état particulières. Il s'agit donc de résoudre l'équation en α :

$$\frac{\tilde{\rho}_1 c_1^2}{\alpha} - \frac{\tilde{\rho}_2 c_2^2}{1-\alpha} + \rho_{20} c_2^2 - \rho_{10} c_1^2 = 0, \qquad (1.28)$$

les masses $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$ étant fixées. On pose $\gamma = \frac{\alpha}{1-\alpha}$, $q = \rho_{20}c_2^2 - \rho_{10}c_1^2$, et $\tilde{q} = \tilde{\rho}_2 c_2^2 - \tilde{\rho}_1 c_1^2$. Avec ces notations, l'équation (1.28) devient :

$$\tilde{\rho}_2 c_2^2 \gamma^2 - \gamma (q - \tilde{q}) - \tilde{\rho}_1 c_1^2 = 0$$

On montre aisément que cette équation admet deux racines réelles, de signes opposés. On ne retient que la racine positive γ^+ :

$$\gamma^{+} = rac{q - ilde{q} + \sqrt{(q - ilde{q})^2 + 4 ilde{
ho}_1 c_1^2 ilde{
ho}_2 c_2^2}}{2 ilde{
ho}_2 c_2^2}$$

la fraction volumique d'équilibre α_* est alors donnée par :

$$\alpha_* = \frac{\gamma^+}{1 + \gamma^+}$$

On retrouve bien que la solution à l'équation (1.8) est unique et comprise entre 0 et 1.

Remarques :

- 1. Nous avons fait le calcul avec la variable intermédiaire γ , car en travaillant directement avec α , il est difficile de prouver simplement *a posteriori* que la solution est bien comprise entre 0 et 1. Par contre ici, puisque γ^+ est positive, nous sommes bien assurés de ce que $\alpha_* \in]0,1[$.
- 2. Il apparaît également que α_* est bien fonction de $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$.
- 3. Le fait qu'il existe deux solutions réelles de signes opposés de l'équation (1.28) dépend entièrement du fait que les deux masses $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$, fixées, sont positives. En anticipant, on voit l'importance de disposer d'un schéma numérique respectant cette positivité si l'on veut pouvoir calculer α_* .

1.4.2.2 Équation vérifiée par la fraction volumique d'équilibre

Il s'agit ici de prouver un résultat précédemment annoncé concernant l'existence et l'unicité de α_* solution de (1.8), moyennant quelques hypothèses non restrictives sur les lois d'état. On peut aussi écrire une équation aux dérivées partielles vérifiée par la fraction volumique d'équilibre et ce également pour des lois d'état quelconques. Bien sur, cette équation est redondante puisque la fraction volumique d'équilibre α_* est fonction des deux densités volumiques de masse $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$. Nous résumons ces résultats dans la proposition suivante :

Proposition 1 (Fraction volumique d'équilibre)

Pour tout couple $(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2)$ *de* $\mathbb{R}^{+*} \times \mathbb{R}^{+*}$ *, et pour tout couple de lois de pressions* (p_1, p_2) *vérifiant :*

- les deux lois p_1 et p_2 sont des fonctions C^1 strictement croissantes sur \mathbb{R}^+ ,

- chacune des fonctions admet une limite infinie lorsque la masse volumique tend vers l'infini, l'équation (1.8) admet une unique solution $\alpha = \alpha_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2)$ comprise entre 0 et 1.

De plus, dans le cas des solutions C^1 du modèle formé des équations (1.3) et (1.5), la fraction volumique d'équilibre α_* obéit à l'équation :

$$\frac{\partial \alpha_*}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \alpha_* = K(\alpha_*, \rho_1, \rho_2) \nabla \cdot \mathbf{V}, \qquad (1.29)$$

avec :

$$K(\alpha_*, \rho_1, \rho_2) = \alpha_*(1 - \alpha_*) \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\alpha_* \rho_2 c_2^2 + (1 - \alpha_*) \rho_1 c_1^2} .$$
(1.30)

et :

$$\rho_1 = \frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha_*} \quad , \, \rho_2 = \frac{\tilde{\rho}_2}{1-\alpha_*} \; .$$

Remarques :

- Dans les situations qui nous intéressent, le terme au second membre de (1.29) sera généralement petit. En effet, nous avons déja remarqué que dans le cas d'interfaces infiniment fines, la fraction volumique n'est autre qu'une fonction caractéristique de phase : le produit α_{*}(1 − α_{*}) est donc identiquement nul dans ce cas. De plus, nous intéressant à des écoulements artificiellement compressibles, le terme ∇ · V sera petit.
- 2. L'équation (1.29) s'écrit également :

$$rac{\partial m{lpha}_*}{\partial t} +
abla \cdot (m{lpha}_* \mathbf{V}) \ = \ rac{m{lpha}_*}{m{
ho}_1 c_1^2 m{
ho} c_*^2}
abla \cdot \mathbf{V} \ ,$$

où ρc_*^2 est l'inverse de la compressibilité de mélange, voir (2.3), § 2.1.1. Ainsi, dans les zones où le fluide 2 est présent ($\alpha_* = 0$), la fraction volumique de fluide 1, non présent, se conserve. Dans les zones ou le fluide 1 est présent ($\alpha_* = 1$), on trouve que le "défaut de conservation" de fluide 1 est inversément proportionnel à la vitesse du son dans le fluide 1.

Preuve :

On définit la fonction φ :

$$\varphi(\alpha, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = p_1\left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha}\right) - p_2\left(\frac{\tilde{\rho}_2}{1-\alpha}\right).$$

Elle est bien définie pour tout α compris strictement entre 0 et 1, et pour tout couple ($\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2$), $\tilde{\rho}_1 > 0$ et $\tilde{\rho}_2 > 0$. Les deux masses $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$ étant fixées, nous appelons $\tilde{\varphi}$, la fonction qui à α associe $\tilde{\varphi}(\alpha) = \varphi(\alpha, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2)$. Cette fonction est strictement décroissante, comme somme de la composée d'une fonction croissante (p_1) par une fonction décroissante ($p_1(\tilde{\rho}_1/\alpha)$ est donc décroissante), et de la composée d'une fonction décroissante ($-p_2$) par une fonction croissante ($-p_2(\tilde{\rho}_2/(1-\alpha))$) est donc décroissante).

D'autre part, lorsque α tend vers 0 (respectivement vers 1), $\tilde{\varphi}(\alpha)$ tend vers $+\infty$ (resp. $-\infty$), par hypothèse sur la loi de pression p_1 (resp. p_2). Ceci prouve que $\tilde{\varphi}$ s'annule une et une seule fois en $\alpha = \alpha_*$. Le raisonnement étant valable pour tout couple ($\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2$), nous venons de définir implicitement *la* fonction $\alpha_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2)$ telle que :

$$\varphi(\alpha_*(\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2),\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2)=0$$
.

De plus, un corollaire du théorème des fonctions implicites, nous assure de la même régularité pour α_* que pour φ , et donne les dérivées partielles :

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} = -\frac{\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{\rho}_1}}{\frac{\partial \phi}{\partial \alpha}} \\ \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_2} = -\frac{\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{\rho}_2}}{\frac{\partial \phi}{\partial \alpha}} \end{cases}$$

On peut donc légitimement écrire :

$$\frac{\partial \alpha_*}{\partial t} = \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} \frac{\partial \tilde{\rho}_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_2} \frac{\partial \tilde{\rho}_2}{\partial t}$$

conservation

$$= -\left(\frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} \nabla(\tilde{\rho}_1 \mathbf{V}) + \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_2} \nabla(\tilde{\rho}_2 \mathbf{V})\right) \quad \text{de la masse}$$

pour chacun des fluides

$$= -\mathbf{V} \cdot \underbrace{\left(\frac{\partial \alpha_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{1}} \nabla(\tilde{\rho}_{1}) + \frac{\partial \alpha_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{2}} \nabla(\tilde{\rho}_{2})\right)}_{= \nabla(\alpha_{*})} - \left(\tilde{\rho}_{1} \frac{\partial \alpha_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{1}} + \tilde{\rho}_{2} \frac{\partial \alpha_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{2}}\right) \nabla \cdot \mathbf{V}$$

le passage de la deuxième à la troisième égalité n'étant valable que pour des solutions C^1 . On pose donc :

$$K = -\left(\tilde{\rho}_1 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} + \tilde{\rho}_2 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_2}\right) \quad , \tag{1.31}$$

,

et il suffit de retrouver (1.30) pour conclure.

Calculons donc les dérivées partielles de $\phi(\alpha, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = p_1(\tilde{\rho}_1/\alpha) - p_2(\tilde{\rho}_2/(1-\alpha))$:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{\rho}_1} = \frac{c_1^2}{\alpha}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{\rho}_2} = -\frac{c_2^2}{1-\alpha} ,$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \alpha} = -\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha^2} c_1^2 - \frac{\tilde{\rho}_2}{(1-\alpha)^2} c_2^2$$

ce qui donne pour les dérivées de α_* :

$$\frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} = \frac{\frac{c_1^2}{\alpha_*}}{\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha_*^2}c_1^2 + \frac{\tilde{\rho}_2}{(1-\alpha_*)^2}c_2^2}$$
$$\frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_2} = -\frac{\frac{c_2^2}{1-\alpha_*}}{\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha_*^2}c_1^2 + \frac{\tilde{\rho}_2}{(1-\alpha_*)^2}c_2^2}$$

et finalement pour K :

$$\begin{split} K &= -\left(\tilde{\rho}_1 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} + \tilde{\rho}_2 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_2}\right) \\ &= \alpha_* (1 - \alpha_*) \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\alpha_* \rho_2 c_2^2 + (1 - \alpha_*) \rho_1 c_1^2} \end{split},$$

en multipliant haut et bas de la fraction par $\alpha_*(1-\alpha_*)$, et en posant $\rho_1 = \tilde{\rho}_1/\alpha_*$ et $\rho_2 = \tilde{\rho}_2/(1-\alpha_*)$.

Chapitre 2

Étude des propriétés mathématiques et de la consistance thermodynamique du modèle bifluide isotherme

2.1 Étude mathématique du modèle

Il s'agît ici de présenter et prouver des résultats mathématiques relatifs au modèle présenté dans sa globalité au premier chapitre. Pour ce genre d'étude, seule les dérivées du premier ordre sont prises en compte. D'autre part, l'invariance par rotation (de la "partie Euler" des équations) permet de n'étudier que le modèle écrit en une dimension d'espace. Par la suite, nous appelons modèle à l'équilibre, et notons modèle (\mathcal{E}), le système de lois de conservation suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_1 \\ \tilde{\rho}_2 \\ \rho u \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_1 u \\ \tilde{\rho}_2 u \\ \rho u^2 + P_* \end{pmatrix} = 0 \quad , \tag{2.1}$$

où on rappelle que la pression d'équilibre P_* est définie par la relation (1.7) :

$$P_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = \alpha_* p_1\left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha_*}\right) + (1 - \alpha_*) p_2\left(\frac{\tilde{\rho}_2}{1 - \alpha_*}\right),$$

la fraction volumique d'équilibre α_* étant définie par la relation (1.8) :

$$p_1(\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha}) = p_2(\frac{\tilde{\rho}_2}{1-\alpha}).$$

D'autre part *u* désigne l'unique composante de la vitesse suivant la seule direction spatiale *x*.

2.1.1 Hyperbolicité

La première propriété que nous étudions est l'hyperbolicité d'un système linéarisé correspondant. Il s'agit donc de prouver que :

Proposition 2 (Hyperbolicité du modèle (\mathcal{E}))

Le modèle (\mathcal{E}) est hyperbolique, les valeurs propres de la jacobienne des flux étant $u - c_*, u, u + c_*$, où la vitesse du son de mélange c_* est définie par :

$$\rho c_*^2 = \alpha_* \rho_1 c_1^2 + (1 - \alpha_*) \rho_2 c_2^2 - (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) K \quad , \tag{2.2}$$

avec :

$$K(\alpha_*, \rho_1, \rho_2) = \alpha_*(1 - \alpha_*) \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\alpha_* \rho_2 c_2^2 + (1 - \alpha_*) \rho_1 c_1^2}$$

Remarque :

On peut réécrire la relation (2.2) sous la forme :

$$\frac{1}{\rho c_*^2} = \frac{\alpha_*}{\rho_1 c_1^2} + \frac{1 - \alpha_*}{\rho_2 c_2^2} \,. \tag{2.3}$$

Or le coefficient de compressibilité isotherme $\chi_T^{(i)}$ associé au fluide *i* est, on l'a vu :

$$\chi_T^{(i)} = \frac{1}{\rho_i} \frac{d\rho_i}{dp_i} \bigg|_T = \frac{1}{\rho_i c_i^2} \,,$$

donc on peut définir la vitesse du son de mélange par la relation :

$$c_* = \frac{1}{\sqrt{\rho \chi_T^m}} ,$$

où χ_T^m est la compressibilité isotherme du mélange définie par :

$$\chi_T^m = \alpha_* \chi_T^{(1)} + (1 - \alpha_*) \chi_T^{(2)}$$
.

La relation (2.3) montre également que le carré de la vitesse du son est positif, ce qui assure que les valeurs propres sont réelles et que le modèle (\mathcal{E}) est hyperbolique.

Preuve :

On réécrit le modèle (\mathcal{E}) sous la forme quasi-linéaire suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_1 \\ \tilde{\rho}_2 \\ \rho u \end{pmatrix} + A_1 \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_1 \\ \tilde{\rho}_2 \\ \rho u \end{pmatrix} = 0 \quad ,$$

avec :

$$A_{1} = \begin{pmatrix} \frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho}u & -\frac{\tilde{\rho}_{1}}{\rho}u & \frac{\tilde{\rho}_{1}}{\rho} \\ -\frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho}u & \frac{\tilde{\rho}_{1}}{\rho}u & \frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho} \\ -u^{2} + \frac{\partial P_{*}}{\partial\tilde{\rho}_{1}} & -u^{2} + \frac{\partial P_{*}}{\partial\tilde{\rho}_{2}} & 2u \end{pmatrix}$$

La matrice A_1 est simplement la jacobienne des flux par rapport aux variables conservatives $W = {}^t(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u)$. Il faut donc calculer les deux dérivées de la pression de mélange par rapport à $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$. Rappelons d'abord que $P_* = \alpha_* p_1 + (1 - \alpha_*) p_2$ où $\alpha_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2)$ est la fraction volumique d'équilibre réalisant l'égalité des pressions partielles. On a donc :

$$\frac{\partial P_*}{\partial \tilde{\rho}_1} = p_1 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} + \alpha_* c_1^2 \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_1} \left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha_*}\right) - p_2 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} + (1 - \alpha_*) \tilde{\rho}_2 c_2^2 \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_1} \left(\frac{1}{1 - \alpha_*}\right)$$

$$= \underbrace{(p_1 - p_2)}_{=0 \text{ par definition de } \alpha_*} \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} + \alpha_* c_1^2 \frac{1}{\alpha_*^2} \left(\alpha_* - \tilde{\rho}_1 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1}\right) + \rho_2 c_2^2 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1}$$

$$= c_1^2 + \left(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2\right) \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1}$$

On calcule $\frac{\partial P_*}{\partial \tilde{\rho}_2}$ de la même manière pour obtenir :

$$\frac{\partial P_*}{\partial \tilde{\rho}_2} = c_2^2 + \left(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2\right) \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_2}$$

Pour plus de clarté, nous n'introduisons ces relations qu'à la fin du calcul, et notons $P_{\tilde{\rho}_k}$ pour $\frac{\partial P_*}{\partial \tilde{\rho}_k}$.

Il faut ensuite calculer les valeurs propres de A_1 . Pour cela, développons le polynôme caractéristique de A_1 par rapport à la première ligne :

$$\begin{aligned} \mathscr{P}_{A_{1}}(\zeta) &= \left(\frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho}u - \zeta\right) \left[\left(\frac{\tilde{\rho}_{1}}{\rho}u - \zeta\right) (2u - \zeta) - \frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho} (-u^{2} + P_{\tilde{\rho}_{2}}) \right] \\ &+ \frac{\tilde{\rho}_{1}}{\rho}u \left[-\frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho}u (2u - \zeta) - \frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho} (-u^{2} + P_{\tilde{\rho}_{1}}) \right] \\ &+ \frac{\tilde{\rho}_{1}}{\rho} \left[-\frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho}u (-u^{2} + P_{\tilde{\rho}_{2}}) - \left(\frac{\tilde{\rho}_{1}}{\rho}u - \zeta\right) (-u^{2} + P_{\tilde{\rho}_{1}}) \right] \end{aligned}$$

On regroupe alors dans les deux premiers termes, ceux en $(2u - \zeta)$ et ceux en $\frac{\tilde{\rho}_2}{\rho}$. En développant également le troisième terme, on aboutit à :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{A_{1}}(\zeta) &= (2u-\zeta)\zeta(\zeta-u) + \frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho} \left[u^{2}(u-\zeta) - \frac{u}{\rho} \left(\tilde{\rho}_{1}P_{\tilde{\rho}_{1}} + \tilde{\rho}_{2}P_{\tilde{\rho}_{2}} \right) + \zeta P_{\tilde{\rho}_{2}} \right] \\ &+ \frac{\tilde{\rho}_{1}}{\rho} \left[u^{2}(u-\zeta) - \frac{u}{\rho} \left(\tilde{\rho}_{1}P_{\tilde{\rho}_{1}} + \tilde{\rho}_{2}P_{\tilde{\rho}_{2}} \right) + \zeta P_{\tilde{\rho}_{1}} \right] \end{aligned}$$

soit, avec $\tilde{\rho}_1 + \tilde{\rho}_2 = \rho$:

$$\mathcal{P}_{A_1}(\zeta) = (u - \zeta) \left[(u - \zeta)^2 - \frac{1}{\rho} \left(\tilde{\rho}_1 P_{\tilde{\rho}_1} + \tilde{\rho}_2 P_{\tilde{\rho}_2} \right) \right]$$

On pose alors $\rho c_*^2 = \tilde{\rho}_1 P_{\tilde{\rho}_1} + \tilde{\rho}_2 P_{\tilde{\rho}_2}$, et il suffit alors d'aboutir à (2.2) pour conclure. On remplace donc $P_{\tilde{\rho}_1}$ et $P_{\tilde{\rho}_2}$ par leur valeur :

$$\rho c_*^2 = \tilde{\rho}_1 c_1^2 + \tilde{\rho}_2 c_2^2 + (\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2) \left(\tilde{\rho}_1 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} + \tilde{\rho}_2 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_2} \right)$$

,

On reconnaît :

$$K = -\left(\tilde{\rho}_1 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} + \tilde{\rho}_2 \frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_2}\right),\,$$

voir equation (1.31), et on obtient bien le résultat voulu.

Bien que la relation (2.3) assure la positivité du carré de la vitesse du son, on peut le montrer différemment. Pour cela, remarquons que :

- d'une part, on peut écrire ρc_*^2 sous la forme :

$$\rho c_*^2 = \alpha \rho_1 c_1^2 (1 + \frac{K}{\alpha}) + (1 - \alpha) \rho_2 c_2^2 (1 - \frac{K}{1 - \alpha}),$$

– et d'autre part, on a :

$$K = (1 - \alpha)(1 - \frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha \rho_2 c_2^2 + (1 - \alpha)\rho_1 c_1^2}) = -\alpha(1 - \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha \rho_2 c_2^2 + (1 - \alpha)\rho_1 c_1^2}),$$

ce qui assure l'encadrement $-\alpha \leq K \leq 1 - \alpha$ et montre que ρc_*^2 est la somme de deux termes positifs.

2.1.2 Entropie de Lax et flux associé pour le modèle (\mathcal{E})

Nous avons ainsi prouvé que le modèle (\mathcal{E}) est hyperbolique. Une propriété importante des systèmes hyperboliques de lois de conservation est l'existence d'une entropie de Lax qui confère alors au modèle une consistance thermodynamique.

Proposition 3 (Entropie de Lax pour le modèle (\mathcal{E}))

Le couple de fonction (S_*, H_*) :

$$\begin{cases} S_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u) &= \frac{1}{2}\rho u^2 + \tilde{\rho}_1 f_1\left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha_*}\right) + \tilde{\rho}_2 f_2\left(\frac{\tilde{\rho}_2}{1-\alpha_*}\right) \\ H_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u) &= u\left(S_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u) + P_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2)\right) \end{cases}$$

où α_* est la fraction volumique d'équilibre définie par (1.8), et avec f_1 et f_2 vérifiant :

$$f'_1 = \alpha_*^2 \frac{p_1}{\tilde{\rho}_1^2}$$
 et $f'_2 = (1 - \alpha_*)^2 \frac{p_2}{\tilde{\rho}_2^2}$

est un couple d'entropie de Lax usuel pour le modèle (\mathcal{E}) .

Remarque :

La quantité $\rho f = \tilde{\rho}_1 f_1 + \tilde{\rho}_2 f_2$ est exactement la densité volumique d'énergie libre du mélange et correspond au travail des forces de pression. La proposition 3 ci-dessus est donc un résultat attendu pour un modèle isotherme, elle traduit simplement le second principe de la thermodynamique : l'énergie libre totale (incluant l'énergie cinétique) est une (neg-)entropie pour un système en évolution isotherme. Nous reviendrons sur ce point au paragraphe 2.3.

<u>Preuve :</u>

Nous vérifions simplement que, si les fonctions f_1 et f_2 vérifient les conditions ci-dessus, alors le couple (S_*, H_*) est bien un couple entropie-flux de Lax pour le modèle.

Il s'agit donc de vérifier que :

$${}^t\nabla_W S_* \cdot A_1 = \nabla_W H_*$$

Rappelons que la matrice A_1 est donnée par :

$$A_{1} = \begin{pmatrix} \frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho}u & -\frac{\tilde{\rho}_{1}}{\rho}u & \frac{\tilde{\rho}_{1}}{\rho} \\ -\frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho}u & \frac{\tilde{\rho}_{1}}{\rho}u & \frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho} \\ -u^{2} + P_{\tilde{\rho}_{1}} & -u^{2} + P_{\tilde{\rho}_{2}} & 2u \end{pmatrix}$$

puis calculons :

$$\nabla_W S_* = \begin{pmatrix} \frac{\partial S_*}{\partial \tilde{\rho}_1} \\ \frac{\partial S_*}{\partial \tilde{\rho}_2} \\ \frac{\partial S_*}{\partial \rho u} \end{pmatrix} \quad .$$

Plus précisément, en se souvenant que α_* dépend de $\tilde{\rho}_1$ et $\tilde{\rho}_2$, on obtient :

$$\frac{\partial S_*}{\partial \tilde{\rho}_1} = -\frac{1}{2}u^2 + f_1 + \frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha_*}f_1' - \frac{\tilde{\rho}_1^2}{\alpha^2}f_1'\frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1} + \frac{\tilde{\rho}_2^2}{(1-\alpha)^2}f_2'\frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1}$$
$$= -\frac{1}{2}u^2 + f_1 + \frac{\alpha_*}{\tilde{\rho}_1}p_1 + (p_2 - p_1)\frac{\partial \alpha_*}{\partial \tilde{\rho}_1}$$

en injectant les relations $\tilde{\rho}_1^2 f_1' = \alpha_*^2 p_1$ et $\tilde{\rho}_2^2 f_2' = (1 - \alpha_*)^2 p_2$. Or, par définition de α_* , $p_1 = p_2$, donc le dernier terme est nul.

Un calcul similaire vaut pour $\frac{\partial S_*}{\partial \tilde{\rho}_2}$, et on retient :

$$\begin{cases} \frac{\partial S_*}{\partial \tilde{\rho}_1} = -\frac{1}{2}u^2 + f_1 + \frac{\alpha_*}{\tilde{\rho}_1}p_1 \\\\ \frac{\partial S_*}{\partial \tilde{\rho}_2} = -\frac{1}{2}u^2 + f_2 + \frac{1 - \alpha_*}{\tilde{\rho}_2}p_2 \\\\ \frac{\partial S_*}{\partial \rho u} = u \end{cases}$$

Enfin, on a, comme $H_* = u(S_* + P_*)$ et $P_* = \alpha_* p_1 + (1 - \alpha_*) p_2$:

$$\nabla_{W}H = \begin{pmatrix} -\frac{u}{\rho}(S_{*} + P_{*}) + u\left(\frac{\partial S_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{1}} + P_{\tilde{\rho}_{1}}\right) \\ -\frac{u}{\rho}(S_{*} + P_{*}) + u\left(\frac{\partial S_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{2}} + P_{\tilde{\rho}_{2}}\right) \\ \frac{1}{\rho}(S_{*} + P_{*}) + u^{2} \end{pmatrix}$$

,

•

,

Il faut ensuite calculer ${}^{t}\nabla_{W}S_{*} \cdot A_{1}$, et vérifier l'égalité avec $\nabla_{W}H_{*}$. Commençons par la première composante :

$$\begin{pmatrix} {}^{t}\nabla_{W}S_{*} \cdot A_{1} \end{pmatrix}_{1} = \frac{\tilde{\rho}_{2}}{\rho} u \left(\frac{\partial S_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{1}} - \frac{\partial S_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{2}} \right) + u (-u^{2} + P_{\tilde{\rho}_{1}})$$

$$= -\frac{u}{\rho} \underbrace{ \left(\tilde{\rho}_{1} \frac{\partial S_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{1}} + \tilde{\rho}_{2} \frac{\partial S_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{2}} + \rho u^{2} \right)}_{(1)} + u \left(\frac{\partial S_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{1}} + P_{\tilde{\rho}_{1}} \right)$$

Il suffit donc de calculer le terme (1) et de s'assurer qu'il vaut bien $S_* + P_*$, ce qui est immédiat. Les calculs pour la deuxième composante sont les mêmes, et pour finir, on a :

$$\begin{pmatrix} {}^{t}\nabla_{W}S_{*} \cdot A_{1} \end{pmatrix}_{3} = \frac{1}{\rho} \underbrace{\left(\tilde{\rho}_{1} \frac{\partial S_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{1}} + \tilde{\rho}_{2} \frac{\partial S_{*}}{\partial \tilde{\rho}_{2}} \right)}_{=S_{*} + P_{*} - \rho u^{2} \text{ d'après ce qui précède}} + 2u \frac{\partial S_{*}}{\partial \rho u}$$
$$= \frac{1}{\rho} (S_{*} + P_{*}) + u^{2}$$

ce qui achève le calcul.

2.2 Modèle de relaxation

Bien que le modèle dispose de bonnes propriétés pour sa mise en oeuvre numérique (hyperbolicité, existence d'une entropie, dont la convexité est prouvée en Annexe A), celle-ci est malgré tout difficile du fait de la complexité de la relation $\alpha_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2)$. Nous introduisons donc un modèle mieux adapté pour la discrétisation et dont les solutions sont proches de celle du modèle (\mathcal{E}) .

2.2.1 Introduction du modèle de relaxation

Nous avons vu §1.4.2 que la fraction volumique α_* est solution de l'équation (1.29) suivante :

$$\frac{\partial \alpha_*}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \alpha_* = K(\alpha_*, \rho_1, \rho_2) \nabla \cdot \mathbf{V} \,.$$

Dans le modèle (\mathcal{E}), la fraction volumique α_* est complètement déterminée par la loi de fermeture (1.8). Nous avons également vu que le système formé des lois de conservation de $W = {}^t(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho \mathbf{V})$ et de la loi d'équilibre des pressions (1.8) était relié au système formé des mêmes lois de conservation et de l'équation (1.29).

Il est donc naturel de "relaxer" la condition (1.8) en une équation sur la fraction volumique, équation devant contenir un paramètre de vitesse de relaxation destiné à tendre vers l'infini. Le fait que cette vitesse de relaxation soit infinie correspond à l'idée que l'équilibre des pressions doit être instantané pour retrouver le système (2.1) avec la fermeture (1.8).

Connaissant l'équation (1.29), équivalente à la fermeture (1.8) pour des solutions régulières, il paraît naturel de proposer :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \alpha = \frac{p_1 - p_2}{\varepsilon}, \qquad (2.4)$$

où ε est un petit paramètre destiné à tendre vers 0.

Ainsi pour ce modèle, que nous appelons *modèle de relaxation*¹ et notons modèle (\mathcal{R}), la fraction volumique est une inconnue. De plus, la pression de mélange dépend maintenant également de la fraction volumique et est définie par la relation :

$$P(\alpha, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = \alpha p_1 \left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha}\right) + (1 - \alpha) p_2 \left(\frac{\tilde{\rho}_2}{1 - \alpha}\right) .$$
(2.5)

Remarques :

- Pour se convaincre de la relation naturelle qu'il existe entre les modèles (£) et (R), on peut remarquer qu'en multipliant l'équation (2.4) par ε puis en faisant tendre ce paramètre vers 0, on retrouve exactement la relation de définition de la fraction volumique d'équilibre : p₁ = p₂. Remarquons également que ce raisonnement ne dépend pas du signe de ε, indéterminé pour l'instant.
- 2. Du fait de l'équation de conservation de la masse de mélange (1.4), l'équation (2.4) peut également s'écrire :

$$\frac{\partial \rho \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \alpha \mathbf{V}) = \rho \frac{p_1 - p_2}{\varepsilon} . \qquad (2.6)$$

¹Cette appellation provient du terme source $\frac{p_1-p_2}{\varepsilon}$ qui "ressemble" à des termes sources, dits de relaxation et modélisant des effets de retour à l'équilibre. Nous aurions également pu appeler le modèle (\mathcal{R}) "modèle augmenté", puisqu'il contient une équation supplémentaire.

Même si elle a la forme d'une équation de bilan, il est difficile de l'interpréter en tant que telle. En effet, il est difficile de donner un sens précis à la quantité $\rho\alpha$. Par contre, on peut écrire le bilan de volume de fluide 1 suivant :

$$\frac{\partial \boldsymbol{\alpha}}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\alpha} \mathbf{V}) = \frac{p_1 - p_2}{\varepsilon} + \boldsymbol{\alpha} \nabla \cdot \mathbf{V} \,.$$

Nous commentons cette équation de bilan § 2.3.

- 3. L'équation (2.4) a été initialement proposée par R. Saurel et R. Abgrall dans [103]. Elle a également été reprise par S. Dellacherie et N. Rency dans [32].
- 4. Il existe bien-sûr une relation entre les pressions de mélange des modèles (\mathcal{E}) et (\mathcal{R}) :

$$P_*(\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2) = P(\alpha_*(\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2),\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2),$$

relation qui justifie la notation P_* adoptée pour la pression de mélange intervenant dans le modèle (\mathcal{E}) .

Avant d'aller plus avant dans l'étude des liens existant entre les modèles (\mathcal{E}) et (\mathcal{R}) , nous devons étudier les propriétés de ce dernier afin de vérifier qu'il est bien adapté à une discrétisation.

2.2.2 Propriétés mathématiques du modèle (\mathcal{R})

2.2.2.1 Hyperbolicité

Pour ce modèle, nous étudions les éléments propres du système quasi-linéaire correspondant, la "linéarisation" s'effectuant par rapport aux variables dites "naturelles" $V = (\alpha, \rho_1, \rho_2, u)$. Comme pour le modèle (\mathcal{E}), l'étude porte sur le modèle écrit en une seule dimension d'espace. On se propose d'établir le résultat suivant :

Proposition 4 (Hyperbolicité du modèle (\mathcal{R}))

Le modèle (\mathcal{R}) est hyperbolique, les valeurs propres de la jacobienne des flux étant u-c, u, u+c, la valeur propre u étant de multiplicité deux, et la vitesse du son c de mélange étant définie par :

$$\rho c^2 = \alpha \rho_1 c_1^2 + (1 - \alpha) \rho_2 c_2^2 .$$
(2.7)

1

 $p_1 - p_2$

Preuve :

À nouveau, commençons par montrer que le système s'écrit sous la forme quasi-linéaire suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \alpha \\ \rho_1 \\ \rho_2 \\ u \end{pmatrix} + A_2 \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \alpha \\ \rho_1 \\ \rho_2 \\ u \end{pmatrix} = \mathcal{S}_{\varepsilon} \quad ,$$

avec :

$$A_{2} = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & \rho_{1} \\ 0 & 0 & u & \rho_{2} \\ \frac{p_{1} - p_{2}}{\rho} & \frac{\alpha c_{1}^{2}}{\rho} & \frac{(1 - \alpha)c_{2}^{2}}{\rho} & u \end{pmatrix} \text{ et } \mathcal{S}_{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \frac{\rho_{1}}{\varepsilon} \frac{p_{1} - p_{2}}{\varepsilon} \\ -\frac{\rho_{1}}{\alpha} \frac{p_{1} - p_{2}}{\varepsilon} \\ \frac{\rho_{2}}{1 - \alpha} \frac{p_{1} - p_{2}}{\varepsilon} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Cette fois-ci, la linéarisation a été effectuée par rapport aux variables dites naturelles. Il s'agit donc de montrer que les équations :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha}{\partial x} = \frac{\Delta p}{\varepsilon}$$
(2.8a)

$$\frac{\partial \alpha \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha \rho_1 u}{\partial x} = 0$$
 (2.8b)

$$\frac{\partial(1-\alpha)\rho_2}{\partial t} + \frac{\partial(1-\alpha)\rho_2 u}{\partial x} = 0$$
 (2.8c)

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 + \alpha p_1 + (1 - \alpha) p_2}{\partial x} = F_x$$
(2.8d)

s'écrivent, (en tout cas pour des solutions régulières) :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha}{\partial x} = \frac{\Delta p}{\varepsilon}$$
(2.9a)

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + u \frac{\partial \rho_1}{\partial x} + \rho_1 \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\rho_1}{\alpha} \frac{\Delta p}{\varepsilon}$$
(2.9b)

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + u \frac{\partial \rho_2}{\partial x} + \rho_2 \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\rho_2}{1 - \alpha} \frac{\Delta p}{\epsilon}$$
(2.9c)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{p_1 - p_2}{\rho} \frac{\partial \alpha}{\partial x} + \frac{\alpha c_1^2}{\rho} \frac{\partial \rho_1}{\partial x} + \frac{(1 - \alpha)c_2^2}{\rho} \frac{\partial \rho_2}{\partial x} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{F_x}{\rho}$$
(2.9d)

où l'on a posé $\Delta p = p_1 - p_2$. En effet, en développant le premier membre de (2.8b), il vient :

$$\alpha \left(\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 u}{\partial x} \right) + \rho_1 \underbrace{\left(\frac{\partial \alpha}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha}{\partial x} \right)}_{= \frac{\Delta p}{\epsilon} \text{ d'après (2.8a)}} = 0,$$

ce qui donne (2.9b). On obtient (2.9c) de la même manière. En écrivant successivement :

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial \rho_1} \frac{\partial \rho_1}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial \rho_2} \frac{\partial \rho_2}{\partial x} = (p_1 - p_2) \frac{\partial \alpha}{\partial x} + \alpha c_1^2 \frac{\partial \rho_1}{\partial x} + (1 - \alpha) c_2^2 \frac{\partial \rho_2}{\partial x} ,$$

puis en développant le premier membre de (2.8d) :

$$\rho\left(\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x}\right) + u\underbrace{\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x}\right)}_{=0 \text{ d'après (1.4)}} + \frac{\partial P}{\partial x} = F_x ,$$

on obtient bien (2.9d).

On obtient les valeurs propres de A_2 en calculant le déterminant :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{A_2}(\zeta) &= \begin{vmatrix} u - \zeta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u - \zeta & 0 & \rho_1 \\ 0 & 0 & u - \zeta & \rho_2 \\ \frac{p_1 - p_2}{\rho} & \frac{\alpha c_1^2}{\rho} & \frac{(1 - \alpha)c_2^2}{\rho} & u - \zeta \end{vmatrix} \\ &= (u - \zeta) \left[(u - \zeta) \left((u - \zeta)^2 - \rho_2 \frac{(1 - \alpha)c_2^2}{\rho} \right) - \rho_1 (u - \zeta) \frac{\alpha c_1^2}{\rho} \right] \\ &= (u - \zeta)^2 \left((u - \zeta)^2 - \frac{1}{\rho} (\alpha \rho_1 c_1^2 + (1 - \alpha) \rho_2 c_2^2) \right) \end{aligned}$$

et en posant $\rho c^2 = \alpha \rho_1 c_1^2 + (1 - \alpha) \rho_2 c_2^2$, qui est bien un réel positif, on obtient bien les valeurs propres réelles u - c, u, u + c.

Pour conclure, il faut prouver que la matrice A_2 est bien diagonalisable. Pour cela, il faut montrer que les vecteurs propres forment une base. Or les quatre vecteurs :

$$R_{1} = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho_{1} \\ \rho_{2} \\ -c \end{pmatrix}, R_{21} = \begin{pmatrix} 0 \\ -(1-\alpha)c_{2}^{2} \\ \alpha c_{1}^{2} \\ 0 \end{pmatrix}, R_{22} = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{p_{1}-p_{2}}{c_{1}^{2}} \\ -\frac{p_{1}-p_{2}}{c_{2}^{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ et } R_{3} = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho_{1} \\ \rho_{2} \\ c \end{pmatrix},$$

sont vecteurs propres à droite de A_2 pour les valeurs propres $\zeta_1 = u - c$, $\zeta_{21} = \zeta_{22} = u$, et $\zeta_3 = u + c$ respectivement, et la matrice, dont les colonnes sont formées de ces quatre vecteurs, est bien inversible, son déterminant valant $2\rho c^3$.

2.2.2.2 Entropie de Lax et flux associé pour le modèle (\mathcal{R})

Comme pour le modèle (\mathcal{E}) , il faut s'assurer de l'existence d'une entropie.

Proposition 5 (Entropie de Lax pour le modèle (\mathcal{R})) Si le petit paramètre ε est positif, le couple de fonction (S,H):

$$\begin{cases} S(\alpha, \rho_1, \rho_2, u) &= \frac{1}{2}\rho u^2 + \alpha \rho_1 f_1(\rho_1) + (1 - \alpha)\rho_2 f_2(\rho_2) \\ H(\alpha, \rho_1, \rho_2, u) &= u(S + P(\alpha, \rho_1, \rho_2) \end{cases}$$

avec f_1 et f_2 deux fonctions de ρ_1 et ρ_2 respectivement vérifiant :

$$f_1'(\rho_1) = \frac{p_1(\rho_1)}{\rho_1^2}$$
 et $f_2'(\rho_2) = \frac{p_2(\rho_2)}{\rho_2^2}$

est un couple d'entropie de Lax usuel pour le modèle (\mathcal{R}) .

Remarques :

- 1. Le signe du petit paramètre ε est ainsi fixé par un argument de consistance thermodynamique du terme source de relaxation.
- 2. Il s'agit d'un résultat très général sur le modèle (\mathcal{R}) , qui ne dépend pas du choix des lois de pression.
- 3. L'entropie du modèle (\mathcal{E}) est reliée à l'entropie du modèle (\mathcal{R}) par la relation :

$$S_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u) = S\left(\alpha_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2), \frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2)}, \frac{\tilde{\rho}_2}{1 - \alpha_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2)}, \frac{\rho u}{\tilde{\rho}_1 + \tilde{\rho}_2}\right).$$

4. Pour être rigoureux, il faut également vérifier que ces entropies sont convexes. Nous renvoyons le lecteur intéressé à l'Annexe A pour une preuve de la convexité des deux entropies. La démonstration utilise le fait que la fraction volumique d'équilibre α_{*} minimise l'entropie S du modèle (R), donnant un sens plus précis (et plus fort) à la dénomination de *modèle à l'équilibre* pour le modèle (E) : l'équilibre des pressions n'est pas seulement un choix "délibéré" de fermeture mais correspond à la minimisation de l'énergie libre totale.

Preuve :

On cherche une entropie sous la forme donnée dans la proposition, sans se donner *a priori* les fonctions f_1 et f_2 . Il faut alors trouver des conditions sur f_1 et f_2 pour que le gradient du flux d'entropie par rapport aux variables naturelles ² soit relié au gradient de l'entropie par rapport aux mêmes variables naturelles par la relation :

$${}^{t}\nabla_{V}S \cdot A_{2} = \nabla_{V}H$$

car ainsi, pour les solutions régulières, on aura :

$${}^{t}\nabla_{V}S\cdot\left(\frac{\partial V}{\partial t}+A_{2}\frac{\partial V}{\partial x}\right)=\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{\partial H}{\partial x}={}^{t}\nabla_{V}S\cdot\mathcal{S}_{\varepsilon},$$

où \mathcal{S}_{ϵ} est le terme source défini proposition 4 :

$$S_{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \frac{p_1 - p_2}{\varepsilon} \\ -\frac{\rho_1}{\alpha} \frac{p_1 - p_2}{\varepsilon} \\ \frac{\rho_2}{1 - \alpha} \frac{p_1 - p_2}{\varepsilon} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Nous aurons également à prouver que le produit ${}^t\nabla_V S \cdot S_{\varepsilon}$ est négatif pour assurer que le couple (S, H) est bien un couple d'entropie de Lax usuel. On rappelle que :

$$A_{2} = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & \rho_{1} \\ 0 & 0 & u & \rho_{2} \\ \frac{p_{1} - p_{2}}{\rho} & \frac{\alpha c_{1}^{2}}{\rho} & \frac{(1 - \alpha)c_{2}^{2}}{\rho} & u \end{pmatrix}$$

²Par exemple, mais on pourrait également faire le calcul en variables conservatives.

,

On calcule d'autre part :

$$\nabla_{V}S = \begin{pmatrix} \frac{\partial S}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial S}{\partial \rho_{1}} \\ \frac{\partial S}{\partial \rho_{2}} \\ \frac{\partial S}{\partial \rho_{2}} \\ \frac{\partial S}{\partial u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\rho_{1} - \rho_{2})u^{2} + \rho_{1}f_{1} - \rho_{2}f_{2} \\ \frac{1}{2}\alpha u^{2} + \alpha(f_{1} + \rho_{1}f_{1}') \\ \frac{1}{2}(1 - \alpha)u^{2} + (1 - \alpha)(f_{2} + \rho_{2}f_{2}') \\ \rho u \end{pmatrix}$$

puis :

$$\nabla_{V}H = \begin{pmatrix} u\left(\frac{\partial S}{\partial \alpha} + p_{1} - p_{2}\right) \\ u\left(\frac{\partial S}{\partial \rho_{1}} + \alpha c_{1}^{2}\right) \\ u\left(\frac{\partial S}{\partial \rho_{2}} + (1 - \alpha)c_{2}^{2}\right) \\ u\frac{\partial S}{\partial u} + S + \alpha p_{1} + (1 - \alpha)p_{2} \end{pmatrix}$$

Seule l'équation sur la vitesse est porteuse d'information et on trouve la condition :

$$\rho_1 \frac{\partial S}{\partial \rho_1} + \rho_2 \frac{\partial S}{\partial \rho_2} = S + \alpha p_1 + (1 - \alpha) p_2 \quad ,$$

qui s'écrit :

$$\alpha \rho_1^2 f_1' + (1 - \alpha) \rho_2^2 f_2' = \alpha p_1 + (1 - \alpha) p_2$$

Il suffit donc de choisir f_1 et f_2 tels que :

$$f_1' = \frac{p_1}{\rho_1^2}$$
 et $f_2' = \frac{p_2}{\rho_2^2}$

Enfin, il faut vérifier que le terme source de relaxation S_{ϵ} est bien compatible, dans le sens où il contribue à faire décroître l'entropie, c'est à dire qu'il faut :

$${}^{t}\nabla_{V}S\cdot\mathcal{S}_{\varepsilon}\leqslant0$$

Effectuant le calcul, on trouve :

$${}^{t}\nabla_{V}S\cdot\mathcal{S}_{\varepsilon}=\frac{p_{1}-p_{2}}{\varepsilon}\left(\rho_{2}^{2}f_{2}^{\prime}-\rho_{1}^{2}f_{1}^{\prime}\right),$$

soit, puisque $\rho_i^2 f'_i = p_i$ (*i* = 1,2) d'après ce qui précède :

$${}^{t}\nabla_{V}S\cdot\mathcal{S}_{\varepsilon}=-\frac{(p_{1}-p_{2})^{2}}{\varepsilon},$$

qui est bien négatif puisque nous avons supposé ε positif.

Remarque :

En revenant aux variables conservatives, le terme source n'ayant plus qu'une seule composante, voir la définition du modèle (\mathcal{R}), on peut montrer qu'alors :

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = -(p_1 - p_2) \quad ,$$

ce qui donne directement le résultat voulu concernant la compatibilité du terme source.

2.2.3 Développement de type Chapman-Enskog

Nous avons donc prouvé l'hyperbolicité et la "consistance thermodynamique" du modèle (\mathcal{R}) , le rendant propice à une mise en oeuvre numérique. Il faut toutefois s'assurer que les solutions de ce modèle sont proches de celles du modèle (\mathcal{E}) en un sens que nous précisons maintenant.

L'objet de la proposition qui suit est de montrer que le modèle (\mathcal{R}) constitue une approximation correcte, au sens de l'analyse asymptotique, du modèle (\mathcal{E}) . Ce résultat justifie donc l'utilisation du modèle (\mathcal{R}) pour la résolution numérique du modèle (\mathcal{E}) .

Pour faire le lien entre les deux modèles, on s'intéresse au développement asymptotique formel, au premier ordre en ε , du modèle de relaxation, et ce dans l'esprit d'un développement de Chapman-Enskog comme le font F. Coquel et B. Perthame dans [28]. On se donne donc une solution $W^{\varepsilon} = {}^{t}(\alpha^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}, \rho^{\varepsilon} \mathbf{V}^{\varepsilon})$ du modèle de relaxation "proche" d'une solution du modèle à l'équilibre dans le sens où α^{ε} est pris sous la forme :

$$\alpha^{\varepsilon} = \alpha_* + \varepsilon \alpha_1^{\varepsilon} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) ,$$

 α_* étant solution de l'équation de la loi de fermeture (1.8) du modèle (\mathcal{E}). On montre le résultat suivant :

Proposition 6 (Développement de type Chapman-Enskog)

Au premier ordre en ε, le modèle de relaxation est formellement équivalent au système suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon} \\ \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon} \\ \rho^{\varepsilon} \mathbf{V}^{\varepsilon} \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon} \mathbf{V}^{\varepsilon} \\ \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon} \mathbf{V}^{\varepsilon} \\ \rho^{\varepsilon} \mathbf{V}^{\varepsilon} \otimes \mathbf{V}^{\varepsilon} + P_{*}(\tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}) \mathbb{I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \varepsilon \nabla (\eta(\alpha_{*}, \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}) \nabla \cdot \mathbf{V}^{\varepsilon}) \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

avec :

$$\boldsymbol{\alpha}^{\varepsilon} = \boldsymbol{\alpha}_{*} - \varepsilon \left(\frac{\boldsymbol{\alpha}_{*}^{2} (1 - \boldsymbol{\alpha}_{*})^{2} K}{(1 - \boldsymbol{\alpha}_{*})^{2} \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon} c_{1}^{2} + \boldsymbol{\alpha}_{*}^{2} \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon} c_{2}^{2}} \right) \nabla \cdot \mathbf{V}^{\varepsilon} , \qquad (2.11)$$

où α_* est solution de l'équation de fermeture (1.8), K est donné par l'équation (1.30), et où η désigne la fonction suivante :

$$\eta(\alpha,\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2) = \frac{\alpha^2(1-\alpha)^2(\tilde{\rho}_1+\tilde{\rho}_2)}{(1-\alpha)^2\tilde{\rho}_1c_1^2 + \alpha^2\tilde{\rho}_2c_2^2} \left(c^2 - c_*^2\right) \quad .$$

Remarques :

Une condition nécessaire pour que le système obtenu soit bien posé, c'est à dire pour qu'il constitue une *approximation parabolique* du modèle à l'équilibre, est la positivité de la fonction η. On obtient ici la condition :

$$c_*^2 \leqslant c^2$$

On reconnait la condition dite *subcaractéristique*, voir [28] par exemple. Cette relation est bien vérifiée dans notre cas ³. Le lien entre les modèles (\mathcal{E}) et (\mathcal{R}) est donc établi : une solution du modèle (\mathcal{R}) , proche d'une solution du modèle (\mathcal{E}) , est solution au premier ordre en ε d'un système constituant une approximation parabolique du modèle (\mathcal{E}) . Ce résultat est

³En effet, d'après les équations (2.7) et (2.2), il faut vérifier que le produit $(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2)K$ est positif, ce qui est immédiat vu l'expression de *K*, équation (1.30).

capital pour la mise en oeuvre numérique. Il assure en effet (au moins formellement) qu'en résolvant numériquement le modèle (\mathcal{R}) pour des conditions initiales compatibles avec la condition d'équilibre (1.8), la solution obtenue sera bien solution du modèle (\mathcal{E}) à des termes d'ordre ε près.

- 2. Le terme visqueux étant proportionnel à $\alpha(1-\alpha)$, il n'agira qu'à l'interface entre les deux fluides.
- 3. On retrouve également que la fraction volumique α^{ϵ} est découplée du reste du système : une fois le système (2.10) résolu, α^{ϵ} est calculable grâce à (2.11).
- 4. Il est intéressant de remarquer que η est sans dimension, alors que ε à la dimension d'une viscosité dynamique ($[\varepsilon] = Pa.s$).
- 5. En général et pour des modèles plus simples (scalaires unidimensionnels par exemple), la validité d'un tel développement est étroitement lié à l'existence d'une entropie de Lax pour le modèle de relaxation, voir [29] pour plus de détails à ce sujet.

Preuve :

Il s'agit d'abord de trouver l'expression de α_1^{ϵ} . En substituant le développement de α^{ϵ} dans la première équation du modèle (\mathcal{R}), équation (2.4) et en vertu de l'équation (1.29) vérifiée par la fraction volumique d'équilibre, on obtient :

$$\Delta p = p_1 - p_2 = \varepsilon K \nabla \cdot \mathbf{V}^{\varepsilon} \quad .$$

Or, avec les notations de la preuve de la proposition 1, on a :

$$\Delta p = \varphi(\alpha^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}) = \varphi(\alpha_{*}, \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}) + \varepsilon \alpha_{1}^{\varepsilon} \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha}(\alpha_{*}, \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}) + \mathcal{O}(\varepsilon^{2}) .$$

Sachant que $\phi(\alpha_*, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = 0$ par définition de α_* , et en remplaçant $\frac{\partial \phi}{\partial \alpha}$ par sa valeur (voir la preuve de la proposition 1), on obtient pour α_1^{ϵ} :

$$\boldsymbol{\alpha}_{1}^{\varepsilon} = -\frac{\boldsymbol{\alpha}_{*}^{2}(1-\boldsymbol{\alpha}_{*})^{2}K}{(1-\boldsymbol{\alpha}_{*})^{2}\tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}c_{1}^{2} + \boldsymbol{\alpha}_{*}^{2}\tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}c_{2}^{2}}\nabla\cdot\mathbf{V}^{\varepsilon} .$$
(2.12)

On substitue ensuite le développement de α^{ϵ} dans l'expression de la pression de mélange :

$$P(\alpha^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}) = P(\alpha_{*}, \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}) + \varepsilon \alpha_{1}^{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \alpha}(\alpha_{*}, \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}) + O(\varepsilon^{2}) ,$$

et avec :

$$\frac{\partial P}{\partial \alpha}(\alpha, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = \frac{\tilde{\rho}_2}{(1-\alpha)^2} c_2^2 - \frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha^2} c_1^2 ,$$

et :

$$P(\alpha_*, \tilde{\rho}_1^{\epsilon}, \tilde{\rho}_2^{\epsilon}) = P_*(\tilde{\rho}_1^{\epsilon}, \tilde{\rho}_2^{\epsilon}) ,$$

ainsi que l'équation (2.12) de définition de α_1^{ϵ} , on trouve bien le développement de la pression de mélange sous la forme :

$$P(\alpha^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}) = P_{*}(\tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}) - \varepsilon \eta(\alpha_{*}, \tilde{\rho}_{1}^{\varepsilon}, \tilde{\rho}_{2}^{\varepsilon}) \nabla \cdot \mathbf{V}^{\varepsilon} + \mathcal{O}(\varepsilon^{2}) ,$$

où η désigne la fonction suivante :

$$\eta(\alpha,\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2) = \frac{\alpha^2(1-\alpha)^2(\tilde{\rho}_1+\tilde{\rho}_2)}{(1-\alpha)^2\tilde{\rho}_1c_1^2+\alpha^2\tilde{\rho}_2c_2^2} \left(c^2-c_*^2\right)$$

Enfin, en substituant l'expression de la pression de mélange dans l'équation de quantité de mouvement, on trouve bien le terme visqueux annoncé au second membre de (2.10).

2.3 Étude du modèle bifluide isotherme : une dérivation thermodynamiquement consistante du terme source de tension de surface

Au travers de l'existence d'une entropie de Lax pour le modèle présenté au premier chapitre, nous avons montré la consistance thermodynamique du modèle, c'est à dire la compatibilité du modèle avec le second principe de la thermodynamique. L'objectif de ce chapitre est de proposer une façon de retrouver la modélisation des effets capillaires (présentée § 1.2) tout en tenant compte du second principe de la thermodynamique. Nous pensons que la méthodologie proposée est tout aussi importante que le(s) résultat(s) obtenu(s). Ce paragraphe constituera une partie d'un article en cours de rédaction [68] et est issu d'une collaboration avec D. Jamet. Nous nous plaçons ici dans un contexte moins général et prenons comme point de départ les équations générales de bilan écrites pour un mélange de deux fluides en évolution isotherme. Dans [68], les auteurs proposeront une dérivation de ces équations à partir du principe de moindre action.

La méthodologie proposée ici consiste à se donner ces équations de bilan sous la forme la plus générale possible, c'est à dire en se laissant des "degrés de liberté", mais tout en respectant les grands principes de la thermodynamique des milieux continus, notamment le second principe de la thermodynamique. Ce principe nous aide alors à faire des choix de modélisation.

2.3.1 Équations de bilan pour un mélange de deux fluides compressibles soumis à des effets de tension de surface

Supposons que deux fluides compressibles évoluent en situation isotherme et se déplacent à la même vitesse V. La présence de l'un d'entre eux est caractérisée par sa fraction volumique α , qui est également, on l'a vu, la densité volumique de volume qui lui est associée. La contrainte de saturation impose que la fraction volumique de l'autre fluide soit $1 - \alpha$. On dispose donc de deux équations pour chacun des deux fluides, la conservation de la masse et l'équation de bilan de volume associée :

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_k \mathbf{V}) = 0 , \quad k = 1, 2 , \qquad (2.13)$$

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{V}) = S_{\alpha_k} , \quad k = 1, 2 , \qquad (2.14)$$

où les S_{α_k} sont des termes sources à déterminer. La contrainte de saturation $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ permet d'éliminer l'une des deux équations et l'un des deux S_{α_k} , par exemple S_{α_2} :

$$S_{\alpha_2} = \nabla \cdot \mathbf{V} - S_{\alpha_1}$$
.

Cette dernière relation prouve au passage que ces termes sources, en tout cas en situation d'écoulement compressible, ne sont pas nécessairement nuls : le volume de chacun des deux fluides ne se conserve donc pas. Par contre, si l'on envisage les termes sources S_{α_k} comme des "défauts de conservation" du volume α_k , il est rassurant de constater que la somme de ces "défauts" est la variation de volume $\nabla \cdot \mathbf{V}$ associée à l'écoulement. Dans la suite et comme nous l'avons fait jusqu'ici, nous notons $\alpha = \alpha_1$ et $S_{\alpha_1} = S_{\alpha}$.

En vertu du principe fondamental de la dynamique appliqué à un milieu vérifiant l'hypothèse du continu, l'équation bilan de quantité de mouvement, sans préjuger du comportement rhéologique

du "milieu continu de mélange", s'écrit (sous forme non conservative) :

$$\rho \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \nabla \cdot \mathbf{\tau} \,, \tag{2.15}$$

où τ est le tenseur des contraintes. Dans le premier chapitre, nous avions fermé le système ainsi obtenu en nous donnant *a priori* ce tenseur des contraintes, puis nous avions constaté, sans tenir compte des effets capillaires, que ce choix de modélisation était compatible avec le second principe de la thermodynamique. Ici, nous commençons par écrire les deux premiers principes de la thermodynamique dont l'application se traduit par une équation de bilan d'énergie libre totale :

$$\rho \frac{d}{dt} (f + e_c) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot (\mathbf{V} \cdot \mathbf{\tau}) - \Delta_f , \qquad (2.16)$$

où $e_c = ||\mathbf{V}||^2/2$ est la densité massique d'énergie cinétique, f la densité massique d'énergie libre, **q** un flux d'énergie (à déterminer) et Δ_f la dissipation d'énergie, qui doit être positive en vertu du second principe. Ce flux d'énergie est associé, nous le verrons, aux effets capillaires. On obtient le bilan d'énergie cinétique en multipliant scalairement l'équation bilan de quantité de mouvement (2.15) par **V** :

$$\rho \frac{de_c}{dt} = (\nabla \cdot \tau) \cdot \mathbf{V} , \qquad (2.17)$$

que l'on retranche au bilan d'énergie totale pour obtenir finalement le bilan d'énergie libre :

$$\rho \frac{df}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \tau : \nabla \mathbf{V} - \Delta_f . \qquad (2.18)$$

Nous disposons donc d'un système qu'il convient de fermer. Il faut commencer par choisir les variables dont dépend l'énergie libre. Cette dépendance sera explicitée dans un second temps, en fonction des phénomènes physiques que l'on veut modéliser. Mais il faut également connaître le terme de flux **q**, le tenseur des contraintes τ et le terme source S_{α} si l'on veut pouvoir connaître complétement l'état des deux fluides. Le *choix* des fermetures à effectuer va être guidé par la positivité de la dissipation d'énergie libre.

2.3.2 Calcul de la dissipation d'énergie libre

On suppose que l'énergie libre dépend des variables $\tilde{\rho}_k$ (k = 1, 2), de la fraction volumique α mais aussi de son gradient $\nabla \alpha$ afin de tenir compte des effets de tension interfaciale :

$$f = f\left(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \alpha, \nabla \alpha\right). \tag{2.19}$$

Dans le cas de deux fluides, le principe d'indifférence matérielle permet de montrer que la dépendance de l'énergie libre est une fonction de $\|\nabla \alpha\|$, voir [68]. Cependant, en vue d'une extension au cas de plus de deux fluides, il est plus commode de garder une dépendance plus générale en $\nabla \alpha$.

À partir de (2.19) et en supposant l'équilibre thermodynamique local, on peut écrire :

$$\rho \frac{df}{dt} = \rho \left(\frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_1} \frac{d\tilde{\rho}_1}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_2} \frac{d\tilde{\rho}_2}{dt} \right) + \rho \frac{\partial f}{\partial \alpha} \frac{d\alpha}{dt} + \rho \frac{\partial f}{\partial \nabla \alpha} \cdot \frac{d\nabla \alpha}{dt} .$$
(2.20)

Le calcul de la dissipation d'énergie libre totale Δ_f s'effectue alors en remplaçant les dérivées en temps par leurs expressions issues des bilans, sauf pour les deux derniers termes qui demandent un traitement particulier. On peut voir que l'on obtient deux types de termes : des termes conservatifs de la forme $\nabla \cdot (\cdot)$ et des termes tensoriels contractés avec $\nabla \mathbf{V}$. Le terme en $\frac{d\alpha}{dt}$ constitue en fait

un troisième type de terme associé à la dissipation d'énergie due au *transport* de volume par l'écoulement. Afin de pouvoir faire des regroupements, nous allons chercher à écrire le dernier terme au second membre de (2.20) sous la forme d'une somme de termes de l'un de ces trois types. Pour cela, posons :

$$\mathbf{\phi} = \mathbf{\rho} \frac{\partial f}{\partial \nabla \alpha} \,, \tag{2.21}$$

et calculons la quantité $\nabla \cdot \left(\frac{d\alpha}{dt} \cdot \mathbf{\phi}\right)$:

$$\nabla \cdot \left(\frac{d\alpha}{dt} \cdot \mathbf{\phi}\right) = \frac{d\alpha}{dt} \nabla \cdot \mathbf{\phi} + \mathbf{\phi} \cdot \nabla \left(\frac{d\alpha}{dt}\right)$$
$$= \frac{d\alpha}{dt} \nabla \cdot \mathbf{\phi} + \mathbf{\phi} \cdot \left(\frac{\partial \nabla \alpha}{\partial t} + \nabla \mathbf{V}^t \nabla \alpha + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \nabla \alpha\right) ,$$
$$= \frac{d\alpha}{dt} \nabla \cdot \mathbf{\phi} + \mathbf{\phi} \cdot \frac{d \nabla \alpha}{dt} + (\mathbf{\phi} \otimes \nabla \alpha) : \nabla \mathbf{V}$$

et on obtient finalement pour le dernier terme de (2.20) :

$$\boldsymbol{\phi} \cdot \frac{d\nabla \boldsymbol{\alpha}}{dt} = \nabla \cdot \left(\frac{d\boldsymbol{\alpha}}{dt} \cdot \boldsymbol{\phi}\right) - \frac{d\boldsymbol{\alpha}}{dt} \nabla \cdot \boldsymbol{\phi} - (\boldsymbol{\phi} \otimes \nabla \boldsymbol{\alpha}) : \nabla \mathbf{V} , \qquad (2.22)$$

qui est bien la somme de trois termes des différentes formes souhaitées.

Égalant (2.20) avec (2.18) et y introduisant les relations issues de (2.13), (2.14) et (2.22), on obtient la dissipation d'énergie :

$$\Delta_{f} = -\nabla \cdot \left(\mathbf{q} + (S_{\alpha} - \alpha \nabla \cdot \mathbf{V}) \mathbf{\phi} \right) \\ + \left[\tau + \rho \left(\tilde{\rho}_{1} \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_{1}} + \tilde{\rho}_{2} \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_{2}} \right) \mathbb{I} + \mathbf{\phi} \otimes \nabla \alpha \right] : \nabla \mathbf{V} \\ - (S_{\alpha} - \alpha \nabla \cdot \mathbf{V}) \left(\rho \frac{\partial f}{\partial \alpha} - \nabla \cdot \mathbf{\phi} \right)$$
(2.23)

relation qui nous permet de fermer le système. En effet, si nous assurons la positivité de cette dissipation d'énergie en rendant chacun des trois types de termes positifs (ou nuls), nous obtenons des conditions sur les trois inconnues τ , \mathbf{q} et S_{α} en étant assuré de la consistance thermodynamique du système résultant.

À ce stade, il faut noter que nous avons déjà fait des choix dans le regroupement des termes, sans toutefois que ces choix conduisent à fermer complètement le problème. Nous allons également voir que plusieurs choix sont possibles, dont deux ont un intérêt particulier pour nous puisqu'ils vont nous permettre de retrouver à la fois le modèle de relaxation, ou modèle (\mathcal{R}), et un modèle que nous utilisons dans la méthode numérique présentée § 3.

Remarque :

Tel que nous avons effectué les regroupements lors du calcul de Δ_f , nous avons en fait "découplé" le choix du tenseur des contraintes τ de celui des deux autres inconnues \mathbf{q} et S_{α} .

2.3.2.1 Choix du tenseur des contraintes

Pour s'assurer de la positivité du terme faisant intervenir le tenseur des contraintes τ dans (2.23), il suffit de *choisir* celui-ci sous la forme :

$$\boldsymbol{\tau} = -\rho \left(\tilde{\rho}_1 \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_1} + \tilde{\rho}_2 \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_2} \right) \mathbb{I} - \boldsymbol{\phi} \otimes \nabla \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\tau}^D , \qquad (2.24)$$

où τ^D est le tenseur de dissipation de quantité de mouvement devant vérifier :

$$\tau^D: \nabla \mathbf{V} \ge 0$$
,

et qu'il suffit de prendre sous la forme newtonienne classique :

$$\boldsymbol{\tau}^{D} = \boldsymbol{\mu} \left({}^{t} \boldsymbol{\nabla} \mathbf{V} + \boldsymbol{\nabla} \mathbf{V} \right) \,,$$

pour assurer la positivité de la source d'énergie libre.

Une fois la forme de l'énergie libre fixée, nous pourrons calculer le tenseur des contraintes. Il comporte également une partie non sphérique, en partie responsable de l'apparition de la tension interfaciale.

2.3.2.2 Choix du flux d'énergie et du terme source de bilan de volume

Nous retenons deux façons simples de *choisir* le flux d'énergie \mathbf{q} et la source de volume de fluide S_{α} . Le premier consiste à prendre :

$$\begin{cases} S_{\alpha} = \alpha \nabla \cdot \mathbf{V} \\ \mathbf{q} = 0 \end{cases}$$

qui donne une simple équation de conservation pour le volume de chacun des deux fluides. Le modèle associé à ce choix nous servira lors d'une étape, dite de transport, de notre méthode numérique de résolution du modèle (\mathcal{R}).

La seconde possibilité consiste à prendre :

$$\begin{cases} S_{\alpha} = \alpha \nabla \cdot \mathbf{V} - \frac{1}{\varepsilon} \left(\rho \frac{\partial f}{\partial \alpha} - \nabla \cdot \boldsymbol{\phi} \right) \\ \mathbf{q} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\rho \frac{\partial f}{\partial \alpha} - \nabla \cdot \boldsymbol{\phi} \right) \boldsymbol{\phi} \end{cases}, \qquad (2.25)$$

où ε est un réel positif. Le modèle associé à ce choix est le modèle de relaxation introduit § 2.2, avec toutefois la prise en compte de la tension superficielle. La source d'énergie $\nabla \cdot \mathbf{q}$ obtenue dans ce cas est connue dans la littérature sous le nom de *travail intersticiel*, [36, 123, 92, 13]. Cela montre aussi que le premier choix ne conduit pas à un modèle satisfaisant quant à la consistance thermodynamique.

Remarques :

1. On peut remarquer que dans le cas où il n'y a pas de tension de surface, nous venons simplement de retrouver que le terme source de relaxation est compatible avec l'entropie de Lax du modèle (\mathcal{R}) . 2. Isenberg [63] propose une interprétation de l'existence du travail intersticiel. L'auteur se place dans le cas d'un film de savon, tendu entre les quatre côtés d'un cadre rectangulaire, dont un de longueur *L* est mobile. Lorsqu'on augmente la surface du film à *température constante* en déplaçant la partie mobile du cadre de δx , le film doit absorber de la chaleur du milieu extérieur pour maintenir la température du film constante. Donc, en sus du gain d'énergie $\sigma_f L \delta x$ de part l'augmentation de la surface du film, il y a une absorption d'énergie δQ . Dans cette étude, nous avons traduit cette absorption d'énergie par le terme $-\nabla \cdot \mathbf{q}$ aux seconds membres de (2.16) et (2.18).

2.3.3 Fermeture thermodynamique

Il convient maintenant de choisir la dépendance explicite de l'énergie libre. Ce choix, motivé par des considérations simples, va nous permettre d'expliciter les différentes inconnues de notre problème : le tenseur des contraintes τ , le flux d'énergie **q** et la source de volume S_{α} . La relation classique de la thermostatique des interfaces [40, 90] :

$$F = -p \, dV + \sigma \, dA \,, \tag{2.26}$$

où *A* désigne l'aire de l'interface, montre que l'énergie libre doit être la somme de deux termes : un terme correspondant au travail des forces de pression et un autre correspondant à l'énergie portée par l'interface. Nous écrivons donc la densité volumique d'énergie libre sous la forme (avec des notations évidentes) :

$$\rho f\left(\tilde{\rho}_{1},\tilde{\rho}_{2},\alpha,\nabla\alpha\right)=F_{p}\left(\tilde{\rho}_{1},\tilde{\rho}_{2},\alpha\right)+F_{\sigma}\left(\alpha,\nabla\alpha\right),$$

En effet, le travail des forces de pression F_p doit dépendre des masses de chacun des deux fluides, mais aussi de la fraction volumique α puique les pressions des deux fluides en dépendent. Le terme associé à la tension de surface doit dépendre quant à lui du gradient de fraction volumique $\nabla \alpha$, mais aussi de la fraction volumique α . En fait, cette dépendance en α n'intervient pas dans le cas de deux fluides. D'autre part, nous avons déja remarqué que $\|\nabla \alpha\|$ représente la densité volumique d'aire interfaciale.

Le terme d'énergie libre de mélange correspondant au travail des forces de pression n'est autre que l'entropie de Lax associé au modèle (\mathcal{R}) :

$$F_{p}(\tilde{\rho}_{1},\tilde{\rho}_{2},\alpha) = \tilde{\rho}_{1}f_{1}\left(\frac{\tilde{\rho}_{1}}{\alpha}\right) + \tilde{\rho}_{2}f_{2}\left(\frac{\tilde{\rho}_{2}}{1-\alpha}\right), \qquad (2.27)$$

où les f_k sont les fonctions définies par :

$$\frac{df_k}{d\rho_k} = \frac{p_k}{\rho_k^2}, \qquad (2.28)$$

soit encore :

$$df_k = -p_k d\mathcal{V}_k$$

où $V_k = 1/\rho_k$ est le volume massique. L'énergie libre volumique de mélange, grandeur extensive, est donc définie comme la somme des énergies libres volumiques de chacun des deux fluides. À cette énergie de mélange va correspondre une pression de mélange que, cette fois-ci, nous n'aurons pas *choisie* comme nous l'avons fait au précédent chapitre.

L'énergie F_{σ} est une quantité volumique qui, d'après (2.26), doit vérifier :

$$dF_{\sigma} = \sigma dA . \tag{2.29}$$

Si nous supposons que F_{σ} s'écrit $\mathcal{T}(\|\nabla \alpha\|)$ où \mathcal{T} est une fonction *a priori* inconnue, on peut montrer, voir [68], qu'une condition nécessaire pour que la relation de Laplace (1.11) soit indépedante de l'épaisseur de l'interface est : $\mathcal{T}' = \sigma$. On obtient donc la contribution des effets capillaires à l'énergie libre :

$$F_{\sigma}(\alpha, \nabla \alpha) = \sigma \|\nabla \alpha\| , \qquad (2.30)$$

ce qui correspond bien à (2.29) puisque $\|\nabla \alpha\|$ est la densité volumique d'aire interfaciale.

Finalement, la densité volumique d'énergie libre que nous retenons est :

$$\rho f(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \alpha, \nabla \alpha) = \tilde{\rho}_1 f_1\left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha}\right) + \tilde{\rho}_2 f_2\left(\frac{\tilde{\rho}_2}{1-\alpha}\right) + \sigma \|\nabla \alpha\|.$$
(2.31)

2.3.4 Retour aux équations de bilan

Nous pouvons à présent en déduire les équations de bilan résultant de la fermeture effectuée. Il s'agit donc de calculer le tenseur des contraintes donnés par (2.24) ainsi que S_{α} et **q** donnés par (2.25), qui dépendent tous de la quantité **\phi** définie par (2.21). Le terme F_p ne dépendant pas de $\nabla \alpha$, on a donc :

$$\boldsymbol{\phi} = \frac{\partial F_{\sigma}}{\partial \nabla \alpha} = \sigma \frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|} , \qquad (2.32)$$

qui n'est autre que $\sigma \mathbf{n}_I$, où \mathbf{n}_I est la normale à l'interface.

2.3.4.1 Bilan de quantité de mouvement : tenseur des contraintes et pression de mélange

Il s'agit ici de calculer le tenseur des contraintes, en ommettant toutefois le tenseur des contraintes visqueuses τ^D :

$$\boldsymbol{\tau} = -\rho \left(\tilde{\rho}_1 \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_1} + \tilde{\rho}_2 \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_2} \right) \mathbb{I} - \boldsymbol{\phi} \otimes \nabla \boldsymbol{\alpha} \,.$$

Outre le terme de tension de surface $\phi \otimes \nabla \alpha$, il faut calculer le premier terme, sphérique, du tenseur des contraintes :

$$\mathscr{P} = \rho \left(\tilde{\rho}_1 \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_1} + \tilde{\rho}_2 \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_2} \right) \,.$$

On s'attend à ce que ce terme contienne la pression de mélange :

$$P=\alpha p_1+(1-\alpha)p_2,$$

ainsi qu'une correction du terme de tension de surface assurant la bonne relation de saut de pression. Il s'agit donc de calculer le terme \mathcal{P} :

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \rho \left(\tilde{\rho}_1 \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_1} + \tilde{\rho}_2 \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_2} \right) \\ &= \tilde{\rho}_1 \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_1} (\rho f) + \tilde{\rho}_2 \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_2} (\rho f) - \tilde{\rho}_1 f \frac{\partial \rho}{\partial \tilde{\rho}_1} - \tilde{\rho}_2 f \frac{\partial \rho}{\partial \tilde{\rho}_2} \\ &= \tilde{\rho}_1 \left(\tilde{\rho}_1 \frac{1}{\alpha} \frac{\alpha^2 p_1}{\tilde{\rho}_1^2} + f_1 \right) + \tilde{\rho}_2 \left(\tilde{\rho}_2 \frac{1}{1 - \alpha} \frac{(1 - \alpha)^2 p_2}{\tilde{\rho}_2^2} + f_2 \right) - \rho f \\ &= \alpha p_1 + (1 - \alpha) p_2 - F_{\sigma} \end{aligned}$$

On trouve donc bien le résultat attendu : la terme sphérique \mathcal{P} du tenseur des contraintes contient la pression de mélange P. Remarquons qu'il est plus satisfaisant d'avoir choisi l'énergie libre de mélange (qui est nous l'avons dit une grandeur extensive) puis d'en avoir déduit la pression de mélange plutôt que d'avoir fait le choix, difficile à justifier, d'une pression de mélange $P = \alpha p_1 + (1 - \alpha)p_2$. Le terme supplémentaire F_{σ} va compenser une partie du terme $\phi \otimes \nabla \alpha$ de manière à assurer la bonne relation de saut de pression à l'interface (1.11).

Compte tenu de ce que nous avons obtenu pour \mathcal{P} et de (2.32), on aboutit finalement au tenseur des contraintes suivant :

$$\tau = -(\alpha p_1 + (1 - \alpha) p_2) \mathbb{I} + \sigma \left(\|\nabla \alpha\| \mathbb{I} - \frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|} \otimes \nabla \alpha \right), \qquad (2.33)$$

qui est exactement, avec les notations introduites au premier chapitre :

$$\mathbf{\tau} = -P\mathbb{I} + \mathbf{\tau}^C$$
 .

2.3.4.2 Bilans de volume de fluide et d'énergie : termes sources de relaxation

Il s'agit ici de calculer le terme source S_{α} ainsi que le flux d'énergie **q** donnés par (2.25). Pour cela, il suffit de calculer les deux quantités $\rho \frac{\partial f}{\partial \alpha}$ et $\nabla \cdot \phi$. Pour la première, on montre que :

$$\rho \frac{\partial f}{\partial \alpha} = p_2 - p_1$$

et la seconde, compte tenu du fait que $\mathbf{\phi} = \mathbf{\sigma} \mathbf{n}_I$, est :

$$abla \cdot \mathbf{\phi} = \mathbf{\sigma} \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{\| \nabla \alpha \|} \right),$$

qui n'est autre que $\nabla \cdot \mathbf{\phi} = -\sigma \kappa$, l'opposé du saut de pression intervenant dans la loi de Laplace. Rassemblant ces résultats, on obtient finalement pour la source de volume de fluide 1 :

$$S_{\alpha} = \alpha \nabla \cdot \mathbf{V} + \frac{1}{\varepsilon} \left(p_1 - p_2 + \sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|} \right) \right), \qquad (2.34)$$

et le flux d'énergie q :

$$\mathbf{q} = -\frac{\sigma}{\varepsilon} \left(p_1 - p_2 + \sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|} \right) \right) \frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|} .$$
(2.35)

Ce flux d'énergie est donc porté par la normale à l'interface. De ce flux d'énergie résulte un terme supplémentaire au second membre du bilan d'enthalpie (1.21). En pratique et pour les applications visées, c'est à dire dans le cadre de l'approximation de type Boussinesq, nous supposons que les transferts associés à ce travail intersticiel sont négligeables devant les transferts associés à la conduction thermique.

Le bilan de volume de fluide 1 (2.14) devient donc :

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{1}{\varepsilon} \left(p_1 - p_2 + \sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|} \right) \right),\,$$

ce qui donne la façon dont il faut modifier le terme source de relaxation introduit dans le modèle (\mathcal{R}) afin de tenir compte correctement des effets capillaires. Ce terme source modifie également la pression d'équilibre P_* du modèle à l'équilibre. En effet, la nouvelle fraction volumique d'équilibre, que nous notons $\hat{\alpha}$, tenant compte des effets capillaires, est maintenant solution de l'équation :

$$p_1\left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\hat{\alpha}}\right) - p_2\left(\frac{\tilde{\rho}_2}{1-\hat{\alpha}}\right) + \sigma\nabla\cdot\left(\frac{\nabla\hat{\alpha}}{\|\nabla\hat{\alpha}\|}\right) = 0,$$

la pression d'équilibre \hat{P} correspondante étant :

$$\hat{P}(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = \hat{\alpha} p_1 \left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\hat{\alpha}} \right) + (1 - \hat{\alpha}) p_2 \left(\frac{\tilde{\rho}_2}{1 - \hat{\alpha}} \right).$$

La nouvelle équation donnant la fraction volumique d'équilibre est beaucoup plus complexe que dans le cas où il n'y a pas de tension de surface, et ce même dans le cas de deux fluides suivant des lois linéarisées isotherme (1.26) : ce n'est plus une relation locale du type lois d'état, mais une équation elliptique fortement non linéaire. Nous allons voir qu'il n'est pourtant pas nécessaire de la résoudre.

Nous pouvons en effet estimer l'erreur commise en gardant la même fraction volumique d'équilibre α_* et la même pression d'équilibre P_* . Pour cela, nous utilisons la fonction φ , utilisée lors de la démonstration de la proposition 1 :

$$\varphi(\alpha)=p_1-p_2$$

On a :

$$\underbrace{\phi(\hat{\alpha})}_{=\sigma\kappa} = \underbrace{\phi(\alpha_*)}_{=0} + \frac{\partial \phi}{\partial \alpha}(\alpha_*) \left(\hat{\alpha} - \alpha_*\right) + \mathcal{O}\Big((\hat{\alpha} - \alpha_*)^2\Big) \ ,$$

soit :

$$\hat{\alpha} - \alpha_* \simeq \frac{\sigma \kappa}{\frac{\partial \phi}{\partial \alpha}(\alpha_*)} \; .$$

Or $\frac{\partial \varphi}{\partial \alpha}(\alpha_*)$ a déjà été calculé et vérifie :

$$\frac{1}{\frac{\partial \varphi}{\partial \alpha}(\alpha_*)} = -\frac{\alpha_*^2 (1-\alpha_*)^2}{(1-\alpha_*)^2 \tilde{\rho}_1 c_1^2 + \alpha_*^2 \tilde{\rho}_2 c_2^2} \,.$$

Introduisant la compressibilité de mélange, équation (2.3), on aboutit à :

$$rac{1}{\partial \phi} = -rac{lpha_*^2 (1-lpha_*)^2
ho c_*^2}{ ilde{
ho}_1 c_1^2 ilde{
ho}_2 c_2^2} \,,$$

ce qui donne pour $\hat{\alpha} - \alpha_*$:

$$|\hat{\alpha} - \alpha_*| \simeq \frac{\alpha_*^2 (1 - \alpha_*)^2 \rho c_*^2 |\sigma \kappa|}{\tilde{\rho}_1 c_1^2 \tilde{\rho}_2 c_2^2}$$

Remarquons tout d'abord que, sans surprise, la différence entre ces deux fractions volumiques est nulle dans les zones où α_* vaut 0 ou 1, c'est à dire loin de l'interface. Ensuite, lorsque nous avons donné au § 1.4.2 les critères de choix des vitesses du son dans les deux fluides, nous avons conclu qu'il fallait, entre autre :

$$\frac{\sigma\kappa}{\rho c_i^2} \ll 1 \; ,$$

condition qui assurent que les variations de pression dues aux effets capillaires sont d'un ordre de grandeur supérieur à celles dues aux effets de compressibilité, artificielle dans les écoulements qui nous intéressent. Cette condition assure donc également que la différence $|\hat{\alpha} - \alpha_*|$ reste petite. Ainsi, nous gardons la fraction volumique α_* et la pression d'équilibre P_* dans le modèle (\mathcal{E}) , ce qui signifie encore que nous ne changeons pas le modèle de relaxation.

Nous retenons donc la source de bilan de volume de fluide 1 sous la forme :

$$S_{\alpha} = \frac{1}{\varepsilon} \left(p_1 - p_2 \right) \,. \tag{2.36}$$

Remarque :

D'un point de vue énergétique, cela signifie que nous ne minimisons pas exactement l'énergie libre de mélange. Par contre, nous sommes assurés d'être dans un proche voisinage de cet équilibre.

2.3.5 Proposition d'extension de la modélisation de la tension de surface au cas de *n* fluides

Nous proposons ici succintement une extension du modèle au cas plus général où *n* fluides sont en présence. Ce paragraphe est l'occasion pour nous d'illustrer l'application de la méthode de dérivation proposée au-dessus. Reproduire par exemple la remontée d'une goutte d'huile dans de l'eau jusqu'à ce qu'elle parvienne à une surface libre avec de l'air, et ce sur les bases d'une modélisation de la tension de surface de type CSF, n'est pas chose aisée. L'enjeu réside principalement sur la forme du terme source de tension superficielle. La méthodologie proposée, si elle reporte la dificulté sur la forme de l'énergie libre et l'interprétation du modèle obtenu, permet toutefois d'en assurer la consistance thermodynamique.

De la même manière que précédemment, la présence de chacun des fluides est caractérisée par sa fraction volumique α_k , avec la contrainte de saturation :

$$\sum_{k=1}^{n} \alpha_k = 1 .$$
 (2.37)

Cette équation montre que les α_k sont liés, mais aussi que leur gradient le sont selon :

$$\sum_{k=1}^{n} \nabla \alpha_k = 0.$$
 (2.38)

Il y a *n* équations de conservation de la masse :

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_k \mathbf{V}) = 0.$$
(2.39)

Il y a également *n* équations de bilan de volume de fluide :

$$\frac{d\alpha_k}{dt} = S_{\alpha_k} - \alpha_k \nabla \cdot \mathbf{V} , \qquad (2.40)$$

et les S_{α_k} sont donc liés par la relation :

$$\sum_{k=1}^{n} S_{\alpha_k} = \nabla \cdot \mathbf{V} \,. \tag{2.41}$$

Enfin, les équations de bilan de quantité de mouvement et d'énergie libre sont :

$$\rho \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \,, \tag{2.42}$$

$$\rho \frac{df}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \tau : \nabla \mathbf{V} - \Delta_f , \qquad (2.43)$$

Il faut donc déterminer n-1 des S_{α_k} , le dernier étant donné par (2.41), ainsi que τ , q et Δ_f , la dissipation d'énergie qui doit être positive. À cette fin, nous supposons que les variables indépendantes sont les n densités de masse $\tilde{\rho}_k$, les n-1 premières densités de volume α_k ainsi que leur gradient $\nabla \alpha_k$. Procédant comme précédemment, nous calculons la source d'énergie Δ_f et nous obtenons :

$$\Delta_{f} = -\nabla \cdot \left(\mathbf{q} + \sum_{k=1}^{n-1} \left(S_{\alpha_{k}} - \alpha_{k} \nabla \cdot \mathbf{V} \right) \mathbf{\phi}_{k} \right) \\ + \left[\tau + \rho \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{\rho}_{k} \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_{k}} \mathbb{I} + \sum_{k=1}^{n-1} \mathbf{\phi}_{k} \otimes \nabla \alpha_{k} \right] : \nabla \mathbf{V} \quad , \qquad (2.44)$$
$$- \sum_{k=1}^{n-1} \left(S_{\alpha_{k}} - \alpha_{k} \nabla \cdot \mathbf{V} \right) \left(\rho \frac{\partial f}{\partial \alpha_{k}} - \nabla \cdot \mathbf{\phi}_{k} \right)$$

où $\mathbf{\phi}_k$ désigne :

$$\mathbf{\phi}_k = \mathbf{\rho} \frac{\partial f}{\partial \nabla \mathbf{\alpha}_k}$$

 γc

et ρ la masse volumique de mélange :

$$\rho = \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{\rho}_k \ .$$

Le tenseur des contraintes obtenu est donc :

$$au = -
ho \sum_{k=1}^{n-1} ilde{
ho}_k rac{\partial f}{\partial ilde{
ho}_k} \mathbb{I} - \sum_{k=1}^{n-1} oldsymbol{\phi}_k \otimes
abla lpha_k \ ,$$

auquel on peut également ajouter un tenseur des contraintes visqueuses. De la même façon, le flux d'énergie \mathbf{q} est :

$$\mathbf{q} = -\sum_{k=1}^{n-1} \left(S_{\alpha_k} - \alpha_k \nabla \cdot \mathbf{V} \right) \mathbf{\phi}_k ,$$

et ce quel que soit le choix des S_{α_k} . Il existe sans doute beaucoup de façon de rendre positif le dernier groupe de termes de (2.44). Nous retenons une façon simple qui consiste à rendre positif chacun des termes de la somme, en choisissant pour les S_{α_k} :

$$S_{\boldsymbol{lpha}_k} = \boldsymbol{lpha}_k \nabla \cdot \mathbf{V} - \frac{1}{\boldsymbol{\epsilon}_k} \left(\boldsymbol{\rho} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\alpha}_k} - \nabla \cdot \boldsymbol{\phi}_k \right),$$

où les ε_k sont des constantes positives, qui n'ont aucune raison d'être égales.

On constate bien à ce stade que tout repose sur le choix de la densité massique d'énergie libre f. Nous choisissons toujours de l'écrire sous la forme :

$$\rho f(\tilde{\rho}_k, \alpha_k, \nabla \alpha_k) = F_p(\tilde{\rho}_k, \alpha_k) + F_{\sigma}(\alpha_k, \nabla \alpha_k) ,$$

avec le terme correspondant au travail des forces de pression sous la forme :

$$F_p = \sum_{k=1}^n \tilde{\rho}_k f_k \left(\frac{\tilde{\rho}_k}{\alpha_k} \right) ,$$

où les f_k sont des fonctions de ρ_k vérifiant :

$$\frac{df_k}{d\rho_k}(\rho_k) = \frac{p_k}{\rho_k^2}.$$

À partir de ce terme de pression, on obtient le premier groupe de terme du tenseur des contraintes :

$$\rho \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{\rho}_k \frac{\partial f}{\partial \tilde{\rho}_k} = \sum_{k=1}^{n-1} \alpha_k p_k - F_{\sigma} ,$$

et ce quel que soit le choix de F_{σ} . Étant donné que nous avons choisi que seul le terme capillaire d'énergie libre dépende des $\nabla \alpha_k$, le tenseur des contraintes capillaires τ^C est donc :

$$\tau^{C} = F_{\sigma} \mathbb{I} - \sum_{k=1}^{n-1} \frac{\partial F_{\sigma}}{\partial \nabla \alpha_{k}} \otimes \nabla \alpha_{k} .$$
(2.45)

À nouveau, on voit ici la généralité de la méthodologie présentée : quel que soit le choix de F_{σ} que l'on fasse, nous disposons de la forme du terme source capillaire pour que le modèle complet soit thermodynamiquement consistant. Il faut bien sur que la densité volumique F_{σ} soit représentative des effets que l'on cherche à reproduire. Outre le tenseur des contraintes capillaires, le terme source du bilan de volume de fluide S_{α_k} donne la fermeture en fraction volumique α_* pour le modèle à l'équilibre, ou, ce qui revient au même, la façon dont il faut modifier le retour à l'équilibre dans le modèle de relaxation. Nous nous contentons ici de proposer une façon de choisir F_{σ} qui nous semble satisfaisante.

La forme de l'équation (2.45) nous pousse à choisir :

$$F_{\mathbf{\sigma}} = \sum_{k=1}^{n-1} \overline{\mathbf{\sigma}}_k \| \nabla \mathbf{\alpha}_k \| ,$$

où $\overline{\sigma}_k$ est le "coefficient de tension de surface de mélange" associé aux interfaces que partage le fluide *k* avec les autres fluides. Nous supposons simplement qu'il dépend des différents α_i . De cette manière, on trouve le tenseur des contraintes capillaires sous la forme de la somme des opérateurs de projection sur les tangentes aux différentes interfaces :

$$\tau^{C} = \sum_{k=1}^{n-1} \overline{\sigma}_{k} \left(\|\nabla \alpha_{k}\| \mathbb{I} - \frac{\nabla \alpha_{k}}{\|\nabla \alpha_{k}\|} \otimes \nabla \alpha_{k} \right),$$

puisqu'avec la forme choisie, on a :

$$\frac{\partial F_{\sigma}}{\partial \nabla \alpha_k} = \overline{\sigma}_k \frac{\nabla \alpha_k}{\|\nabla \alpha_k\|} \ .$$

Il faudrait alors montrer que la forme obtenue pour τ^{C} suffit à assurer la relation dite *de Neumann* [31] qui stipule qu'à l'intersection d'interfaces entre plusieurs fluides, on a :

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1,j$$

où \mathbf{t}_{ij} désigne la tangente à l'interface entre les fluides *i* et *j*. Il reste à préciser le coefficient de tension de surface de mélange, que nous choisissons sous la forme :

$$\overline{\sigma}_k = \sum_{i=1}^n \alpha_i \sigma_{ik} ,$$

où les σ_{ik} sont les coefficient de tension de surface entre les fluides *i* et *k*. On a donc $\sigma_{ik} = \sigma_{ki}$ et on peut toujours choisir comme convention $\sigma_{ii} = 0$.

Remarque :

Le choix pour $\overline{\sigma}_k$ fait apparaître dans F_{σ} des produits $\alpha_i \nabla \alpha_k$. Ces produits de distribution de Dirac et d'Heaviside sont bien définis du fait que l'intersection des surfaces de discontinuités associées est de codimension égale à 2 dans l'espace où l'on se situe. Par exemple, en deux dimensions d'espace et pour trois fluides, l'intersection de deux (ou trois) interfaces est un point.

Deuxième partie Méthode numérique

Chapitre 3

Schéma numérique pour la partie hyperbolique des équations

3.1 Schéma de relaxation pour le modèle bifluide

Comme proposé par Saurel et Abgrall [103], le modèle de relaxation est résolu selon le schéma de relaxation qui consiste à figer le terme source de relaxation à zéro dans un premier temps (étape de transport), puis à faire relaxer la solution obtenue vers l'équilibre des pressions (étape de relaxation).

3.1.1 Étape de transport

Lors de cette étape, on intègre le système d'équations aux dérivées partielles associé au modèle (\mathcal{R}) , avec toutefois les termes sources associés aux forces de volume ainsi que les termes capillaires et visqueux, le terme source de relaxation n'étant pas pris en compte durant cette étape. Le système à intégrer se présente donc comme un système d'équations bilans de la forme (en deux dimensions d'espace) :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial y} = \mathcal{S} ,$$

le vecteur *W* des variables conservatives étant $W = {}^{t} (\rho \alpha, \tilde{\rho}_{1}, \tilde{\rho}_{2}, \rho u, \rho v)$, \mathcal{F} le flux suivant *x*, \mathcal{G} le flux suivant *y* et \mathcal{S} le terme source, qui n'a de composante que sur les équations de bilan de quantité de mouvement :

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}^{\text{visc}} + \mathcal{S}^{\text{ts}} + \mathcal{S}^{\text{ext}} = \nabla \cdot \left(\tau^{D} + \tau^{C}\right) + \rho \left(\mathbf{g} - \boldsymbol{\gamma}_{e}\right).$$

Nous sommes donc ramenés à la résolution d'un système de lois de conservation des variables *W* par la méthode des volumes finis sur un maillage cartésien formé des cellules :

$$C_{i,j} = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [y_{j-1/2}, y_{j+1/2}]$$

Nos inconnues sont donc les $w_{i,j}$ définis par :

$$w_{i,j} = \frac{1}{|C_{i,j}|} \int_{C_{i,j}} W d\mathcal{V} \, .$$

Nous notons $S_{i,j}$ la quantité :

$$S_{i,j} = \frac{1}{|C_{i,j}|} \int_{C_{i,j}} \mathcal{S}d\mathcal{V}.$$
Intégrant le système de lois de conservations à résoudre, nous obtenons le schéma semi-discret :

$$\frac{\partial w_{i,j}}{\partial t} = S_{i,j} - \sum_{\text{faces}} \frac{1}{|C_{i,j}|} \int_F (\mathcal{F} \mathbf{e}_x + \mathcal{G} \mathbf{e}_y) \cdot \mathbf{n}_F d\mathcal{S} ,$$

où la somme \sum_{faces} porte sur les facettes *F* de la cellule $C_{i,j}$ et où l'intégrale porte sur chacune de ces facettes. Généralement, on suppose que ces flux sont constants le long de la facette, et on obtient :

$$\int_F (\mathcal{F}\mathbf{e}_x + \mathcal{G}\mathbf{e}_y)\mathbf{n}_F d\mathcal{S} = |F|(f\mathbf{e}_x + g\mathbf{e}_y)\cdot\mathbf{n} ,$$

où *f* et *g* sont les fonctions flux numériques dépendant des inconnues $w_{i,j}$ dans les cellules de part et d'autre de la face considérée. Dans le cas d'un maillage structuré, on obtient donc :

$$\frac{\partial w_{i,j}}{\partial t} = S_{i,j} - \left(\frac{f_{i+1/2,j} - f_{i-1/2,j}}{\Delta x_i} + \frac{g_{i,j+1/2} - g_{i,j-1/2}}{\Delta y_j}\right),\,$$

où Δx_i et Δy_j sont les pas d'espace locaux (non constant) et où $f_{p,j}$ désigne le flux à travers la face "d'abscisse" x_p sur "la jème ligne" du maillage, et $g_{i,q}$ le flux à travers la face "d'ordonnée" y_q sur "la jème colonne" du maillage. Les flux $f_{i+1/2,j}$ et $g_{i,j+1/2}$ sont approchés numériquement par les fonctions flux numérique $f(w_{i,j}, w_{i+1,j})$ et $g(w_{i,j}, w_{i,j+1})$ des états des cellules voisines des interfaces "i + 1/2" et "j + 1/2" respectivement. Nous précisons ces fonctions flux plus bas.

3.1.1.1 Schéma en temps

Le schéma en temps retenu est le schéma de Runge-Kutta à deux étapes :

$$\begin{cases} w_{i,j}^{n+1/2} = w_{i,j}^{n} - \frac{\Delta t^{n}}{2} \left(\frac{f_{i+1/2,j}^{n} - f_{i-1/2,j}^{n}}{\Delta x_{i}} + \frac{g_{i,j+1/2}^{n} - g_{i,j-1/2}^{n}}{\Delta y_{j}} \right) + \frac{\Delta t^{n}}{2} S_{i,j}^{n} \\ w_{i,j}^{n+1} = w_{i,j}^{n} - \Delta t^{n} \left(\frac{f_{i+1/2,j}^{n+1/2} - f_{i-1/2,j}^{n+1/2}}{\Delta x_{i}} + \frac{g_{i,j+1/2}^{n+1/2} - g_{i,j-1/2}^{n+1/2}}{\Delta y_{j}} \right) + \Delta t^{n} S_{i,j}^{n+1/2} \end{cases}$$

,

où $\Delta t^n = t_{n+1} - t_n$ est le pas de temps calculé à chaque itération par la condition CFL suivante :

$$\Delta t^n = \operatorname{CFL}\min_{i,j} \left(\frac{\Delta x_i}{|u_{i,j}| + c_{i,j}}, \frac{\Delta y_j}{|v_{i,j}| + c_{i,j}} \right),$$

avec $u_{i,j}$ (resp. $v_{i,j}$) la vitesse suivant x (resp. y) dans la cellule C_{ij} , $c_{i,j}$ la vitesse locale du son, et CFL une constante. Par exemple, pour le schéma de Godunov la stabilité et la positivité du schéma sont assurées sous la condition :

$$CFL \leq \frac{1}{2}$$
 en 2 dimensions, et $CFL \leq 1$ en 1 dimension.

Remarque :

Les termes sources sont traités de manière explicite.

3.1.1.2 Schéma en espace

Nous avons remarqué § 1.4.2 qu'il était important de disposer d'un schéma qui respecte la positivité des masses. D'autre part, Saurel et Abgrall [103] ont prouvé que les schémas laissant invariantes les solutions à pression et vitesse constantes sont de bons candidats lorsqu'on veut plus particulièrement s'intéresser aux interfaces. Or un schéma exact sur les discontinuités de contact stationnaires alignées avec une ligne maillage vérifie en particulier cette propriété. Parmi les schémas exacts sur les discontinuités de contact stationnaires, il en est un pour lequel la diffusion numérique est minimale : le schéma de Godunov.

Le schéma en espace retenu est donc le schéma de Godunov qui consiste à prendre comme fonction flux numérique, le flux correspondant à la solution exacte du problème de Riemann associé au modèle (\mathcal{R}), avec comme condition initiale les états dans les cellules de part et d'autre de l'interface. Plus précisément :

$$f_{i+1/2,j} = f(w_{i,j}, w_{i+1,j}) = \mathcal{F}\left(w^{\mathsf{R}}(0; w_{i,j}, w_{i+1,j})\right),$$

 $w^{\mathbb{R}}$ étant la solution du problème de Riemann associé au modèle (\mathcal{R}), voir § 3.2, avec comme condition initiale $W_g = w_{i,j}$ et $W_d = w_{i+1,j}$, et prise en x/t = 0. Le flux numérique $g_{i,j+1/2}$ est construit de la même manière.

L'ordre deux en espace est obtenu grâce à la méthode MUSCL [120], avec le limiteur de pentes appelé *monotonized central*. En pratique, au lieu de calculer $f_{i+1/2} = f(w_{i,j}, w_{i+1,j})$ et $g_{j+1/2} = g(w_{i,j}, w_{i,j+1})$, la méthode MUSCL consiste à calculer :

$$f_{i+1/2} = f(w_{i,j} + \frac{1}{2}s_i, w_{i+1,j} - \frac{1}{2}s_{i+1}),$$

et :

$$g_{j+1/2} = g(w_{i,j} + \frac{1}{2}s_j, w_{i,j+1} - \frac{1}{2}s_{j+1}),$$

où s_i et s_j sont les pentes limitées définies par :

$$\begin{cases} s_i = \operatorname{moncen}(\Delta_{+,x}(w_{i,j}), \Delta_{-,x}(w_{i,j})) \\ s_j = \operatorname{moncen}(\Delta_{+,y}(w_{i,j}), \Delta_{-,y}(w_{i,j})) \end{cases}$$

avec :

$$\operatorname{moncen}(a,b) = \max\left(\operatorname{sign}(ab), 0\right) \min(m|a|, \frac{|a+b|}{2}, m|b|\right),$$

le paramètre *m* étant compris entre 1 et 2. Ce paramètre règle la "raideur" du limiteur et en pratique, nous prenons m = 1.8.

À ce stade et à partir de la donnée des valeurs des variables au temps t_n , nous avons calculé les valeurs des variables conservatives au temps $t_{n+1} : W^{n+1} = {}^t(\rho\alpha, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u, \rho v)$, ces valeurs dépendant toutes des variables "naturelles" $V^n = {}^t(\alpha, \rho_1, \rho_2, u, v)$ au temps t_n . La fraction volumique obtenue est donc : $\alpha^{n+1} = \frac{(\rho\alpha)^{n+1}}{\tilde{\rho}_1^{n+1} + \tilde{\rho}_2^{n+1}}$. Mais cette valeur ne correspond pas à l'équilibre des pressions. Il est nécessaire de la mettre à jour lors de l'étape de relaxation.

3.1.2 Étape de relaxation

À ε non nul fixé, il s'agit de résoudre le système d'équations entre chaque étape de la méthode Runge-Kutta :

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \begin{pmatrix} \alpha \\ \tilde{p}_1 \\ \tilde{p}_2 \\ \rho u \\ \rho v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p_1 - p_2}{\epsilon} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Il apparaît donc clairement que pendant cette étape, seule la fraction volumique varie. Or on sait que lorsque ε tend vers 0, la fraction volumique solution de ce système tend vers *la* fraction volumique d'équilibre définie par l'équation (1.8). On sait également que dans le cas particulier de lois d'état du type (1.26), cette fraction volumique d'équilibre se calcule explicitement et s'écrit, voir § 1.4.2 :

$$\alpha^*(\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2)=\frac{\gamma^+(\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2)}{1+\gamma^+(\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2)}\,,$$

avec :

$$\gamma^{+}(\tilde{\rho}_{1},\tilde{\rho}_{2}) = \frac{q - \tilde{q}(\tilde{\rho}_{1},\tilde{\rho}_{2}) + \sqrt{(q - \tilde{q}(\tilde{\rho}_{1},\tilde{\rho}_{2}))^{2} + 4\tilde{\rho}_{1}c_{1}^{2}\tilde{\rho}_{2}c_{2}^{2}}}{2\tilde{\rho}_{2}c_{2}^{2}}$$

et :

$$\begin{cases} q = \rho_{20}c_2^2 - \rho_{10}c_1^2 \\ \tilde{q}(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = \tilde{\rho}_2 c_2^2 - \tilde{\rho}_1 c_1^2 \end{cases}$$

Ainsi, l'étape de relaxation consiste simplement, dans le cas des lois d'état choisies, à mettre à jour dans chaque cellule la fraction volumique par la relation :

$$\alpha_{i,j}^{n+1} \,=\, \alpha^*(\tilde{\rho}_{1;i,j}^{n+1}, \tilde{\rho}_{2;i,j}^{n+1}) \;.$$

Il n'y a donc pas à proprement parler de schéma "explicitement écrit" sur la fraction volumique.

3.2 Résolution du problème de Riemann

Il s'agit ici de résoudre le problème de Riemann unidimensionnel¹ suivant, associé au modèle (\mathcal{R}) :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{F}(W)}{\partial x} = 0,$$
où $W = {}^{t}(\rho\alpha, \tilde{\rho}_{1}, \tilde{\rho}_{2}, \rho u)$ et $\mathcal{F}(W) = {}^{t}(\rho\alpha u, \tilde{\rho}_{1}u, \tilde{\rho}_{2}u, \rho u^{2} + \alpha p_{1} + (1 - \alpha)p_{2}),$
avec la condition initiale :
$$W(x, 0) = \begin{cases} W_{g}, & \text{si } x < 0 \\ W_{d}, & \text{si } x > 0 \end{cases}$$
(3.1)

Le calcul des invariants de Riemann nous permet de caractériser les ondes de détente, alors que les relations de Rankine-Hugoniot (associées aux inégalités de Lax) permettent de caractériser les ondes de choc. Enfin, nous montrons l'existence et l'unicité de la solution du problème de Riemann, et donnons les éléments nécessaires à sa résolution pratique.

¹ une seule dimension d'espace suffit pour construire le schéma.

3.2.1 Éléments propres et champs associés

Dans les zones où la solution est régulière, nous avons vu que nous pouvions réécrire le système sous forme quasi-linéaire :

$$\frac{\partial V}{\partial t} + A_2 \frac{\partial V}{\partial x} = 0 \quad , \tag{3.2}$$

où $V = {}^{t}(\alpha, \rho_1, \rho_2, u)$. Nous allons maintenant déterminer la nature des champs caractéristiques associés aux valeurs propres $\zeta_1 = u - c$, $\zeta_2 = u$ et $\zeta_3 = u + c$. Pour cela, nous aurons besoin de la définition suivante :

Définition :

On dit que le k-ième champ caractéristique est :

- vraiment non linéaire (VNL) si $\nabla_V \zeta_k \cdot R_k \neq 0$
- linéairement dégénéré (LD) si $\nabla_V \zeta_k \cdot R_k = 0$

3.2.1.1 Champ associé à $\zeta_1 = u - c$

Rappelons qu'un vecteur propre associé à ζ_1 est :

$$R_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho_1 \\ \rho_2 \\ -c \end{pmatrix}$$

On montre que :

le champ associé à $\zeta_1 = u - c$ est vraiment non linéaire et correspond donc à une détente ou à un choc.

En effet :

$$\nabla_V \zeta_1 \cdot R_1 = -\left(\rho_1 \frac{\partial c}{\partial \rho_1} + \rho_2 \frac{\partial c}{\partial \rho_2} + c\right)$$
$$= -\left(\frac{\alpha \rho_1^2 p_1'' + (1-\alpha)\rho_2^2 p_2''}{2\rho c} + c\right)$$

 $\nabla_V \zeta_1 \cdot R_1 < 0$ du fait de la convexité des lois de pression.

3.2.1.2 Champ associé à $\zeta_2 = u$

Rappelons que la valeur propre u est de multiplicité 2, et que deux vecteurs propres associés sont :

$$R_{21} = \begin{pmatrix} 0 \\ -(1-\alpha)c_2^2 \\ \alpha c_1^2 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ et } R_{22} = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{p_1 - p_2}{c_1^2} \\ -\frac{p_1 - p_2}{c_2^2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

On en déduit que :

le champ associé à $\zeta_2 = u$ est linéairement dégénéré, et correspond donc à une discontinuité de contact.

En effet :

$$\nabla_V \zeta_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

donc :

$$\nabla_V \zeta_2 \cdot R_{2i} = 0, \quad i = 1, 2.$$

3.2.1.3 Champ associé à $\zeta_3 = u + c$

Nous avons vu qu'un vecteur propre associés à ζ_3 est :

$$R_3 = \begin{pmatrix} 0\\ \rho_1\\ \rho_2\\ c \end{pmatrix}$$

Comme pour ζ_1 , on montre que :

le champ associé à $\zeta_3 = u + c$ est vraiment non linéaire et correspond donc à un choc ou à une détente.

En effet, le calcul est identique à celui pour le champ associé à ζ_1 , avec cette fois ci :

$$\nabla_V \zeta_3 \cdot R_3 > 0$$

3.2.2 Invariants de Riemann

Le calcul des invariants de Riemann est important, car on peut montrer qu'ils sont constants dans la détente associés : ils vont nous permettre de calculer les courbes de détente. Rappelons leur définition :

Définition :

On appelle *k*-invariant de Riemann (*k*-IR) associé à la valeur propre ζ_k toute fonction ω_k solution de l'équation :

$$\nabla_V \omega_k \cdot R_k = 0$$
 .

3.2.2.1 Invariants de Riemann associés à u

Comme il s'agit d'un champ linéairement dégénéré, on voit par définition que $\zeta_2 = u$ est 2-IR. On montre aussi que $P = \alpha p_1 + (1 - \alpha)p_2$ est 2-IR. On retient donc :

$$\omega_2 = u, P.$$

Remarque :

Comme en dynamique des gaz, on retrouve ici le fait qu'à travers une discontinuité de contact, vitesse et pression (de mélange) se conservent.

3.2.2.2 Invariants de Riemann associés à $u + \varepsilon c$, $\varepsilon = \pm 1$

On peut regrouper les calculs pour les deux champs vraiment non linéaires et l'équation à résoudre est :

$$\rho_1 \frac{\partial \omega}{\partial \rho_1} + \rho_2 \frac{\partial \omega}{\partial \rho_2} + \varepsilon c \frac{\partial \omega}{\partial u} = 0$$

Pour cela, on cherche un changement de variables $(X, Y) = \psi(\rho_1, \rho_2)$ tel que :

$$\rho_1 \frac{\partial}{\partial \rho_1} + \rho_2 \frac{\partial}{\partial \rho_2} = \frac{\partial}{\partial X}.$$

Dès lors, on aura deux invariants de Riemann : *Y* et $u - \varepsilon \ell$, avec ℓ tel que $\frac{\partial \ell}{\partial X} = c$. On vérifie que le changement de variables suivant convient :

$$\begin{cases} X = \frac{1}{2} \log \left(\frac{\rho_1 \rho_2}{\rho_{10} \rho_{20}} \right) \\ Y = \frac{\rho_1}{\rho_2} \end{cases}$$

,

 ρ_{10} et ρ_{20} étant deux valeurs de référence des densités des deux fluides. Enfin, il est aisé de voir que α est invariant de Riemann pour les deux champs 1 et 3. On retient donc :

$$\begin{cases} \omega_1 = \alpha, \quad u + \ell, \quad \frac{\rho_1}{\rho_2} \\ \omega_3 = \alpha, \quad u - \ell, \quad \frac{\rho_1}{\rho_2} \end{cases}, \text{ avec } \ell = \int c \, dX, \, X = \frac{1}{2} \log \left(\frac{\rho_1 \rho_2}{\rho_{10} \rho_{20}} \right) \end{cases}$$

Remarques :

- 1. Dans le cas de lois d'état du type (1.26), on peut montrer que $\frac{\partial c}{\partial X} = 0$ (voir le calcul de $\nabla_V \zeta_1 \cdot R_1$), et donc $\ell = cX$. De plus, *c* n'est fonction que de *Y*, donc *c* est 1 et 3-IR.
- 2. On peut aussi remarquer que α reste constant dans les détentes. On verra que cette propriété reste aussi vraie dans le cas des chocs.

3.2.2.3 Récapitulatif

Le TABLEAU 3.1 résume les résultats obtenus ci-dessus.

3.2.3 Lois d'état particulières

On se place désormais sous l'hypothèse que les deux lois d'état sont du type (1.26) :

$$p_1(\rho_1) = p_0 + c_1^2(\rho_1 - \rho_{10})$$
 et $p_2(\rho_2) = p_0 + c_2^2(\rho_2 - \rho_{20})$.

On rappelle qu'alors $\ell = cX$ et que la vitesse du son de mélange c est 1 et 3-IR.

Pour ce choix de lois d'état, la pression de mélange :

$$P(\alpha, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = \alpha p_1 \left(\frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha}\right) + (1 - \alpha) p_2 \left(\frac{\tilde{\rho}_2}{1 - \alpha}\right)$$

	$\zeta_1 = u - c$	$\zeta_2 = u$	$\zeta_3 = u + c$
	choc	discontinuité	choc
Nature	ou	de	ou
	détente	contact	détente
Vecteurs propres de A ₂	$R_1 = {}^t(0,\rho_1,\rho_2,-c)$	$R_{21} = {}^{t}(0, -(1-\alpha)c_{2}^{2}, -\alpha c_{1}^{2}, 0)$ et $R_{22} = {}^{t}(1, -\frac{p_{1}-p_{2}}{c_{1}^{2}}, -\frac{p_{1}-p_{2}}{c_{2}^{2}}, 0)$	$R_3 = {}^t(0,\rho_1,\rho_2,c)$
Invariants de Riemann	$\omega_1 = \alpha, u + \ell, \frac{\rho_1}{\rho_2}$	$\omega_2 = u, P$	$\omega_3 = \alpha, u - \ell, \frac{\rho_1}{\rho_2}$

TAB. 3.1 – Vecteurs	propres et	t invariants	de	Riemann
---------------------	------------	--------------	----	---------

s'écrit aussi :

$$P(\alpha, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = (\tilde{\rho}_1 + \tilde{\rho}_2)c^2 + \tilde{P}_0(\alpha), \qquad (3.3)$$

où $\tilde{P}_0(\alpha) = p_0 - \alpha \rho_{10} c_1^2 - (1 - \alpha) \rho_{20} c_2^2$. Cette pression $\tilde{P}_0(\alpha)$ représente la valeur minimale de la pression de mélange pour une fraction volumique α fixée.

Remarque :

Il est important de noter que $\tilde{P}_0(\alpha)$ peut très bien être négative avec α appartenant à [0,1]. Ainsi, la pression de mélange pourra également être négative. Si tel est le cas, cela signifie qu'il y a *cavitation*. En pratique, nous choisirons les constantes de telle sorte que cela n'arrive pas. D'autre part, si l'on devait introduire un modèle de cavitation dans le modèle, il faudrait réfléchir à cette pression seuil $\tilde{P}_0(\alpha)$.

3.2.4 Ondes de choc et discontinuités de contact

3.2.4.1 Rappel : définitions

On rappelle ici une définition d'une k-onde de choc et d'une k-discontinuité de contact.

Définition :

 \overline{W} est une k-onde de choc ou une k-discontinuité de contact associée à la valeur propre ζ_k , si elle relie les états W_g et W_d de la manière suivante :

$$W(x,t) = \begin{cases} W_g , \text{ si } x < st \\ \\ W_d , \text{ si } x > st \end{cases},$$

où *s* est la vitesse de propagation de la discontinuité, vérifiant la relation de Rankine-Hugoniot, c'est à dire :

$$s(W_d - W_g) = \mathcal{F}(W_d) - \mathcal{F}(W_g) .$$

Deux cas sont alors possibles :

- Si $s = \zeta_k(W_g) = \zeta_k(W_d)$, on a une discontinuité de contact.

- Si
$$\zeta_{k-1}(W_g) < s < \zeta_k(W_g)$$
 et $\zeta_k(W_d) < s < \zeta_{k+1}(W_d)$, on a un choc entropique.

Remarque :

Ces inégalités sont appelées inégalités de Lax.

3.2.4.2 Relations de Rankine-Hugoniot

Étant donné deux états droite et gauche, notés (g) et (d), on cherche à les connecter par une onde de choc ou une discontinuité de contact. Pour se faire, on a d'abord besoin des relations de Rankine-Hugoniot (RH) associées à (3.1).

Ces relations, introduisant l'inconnue supplémentaire s, s'écrivent pour le modèle (\mathcal{R}) :

$$s[\alpha \rho] = [\alpha \rho u] \tag{3.4a}$$

$$s[\alpha \rho_1] = [\alpha \rho_1 u] \tag{3.4b}$$

$$s[(1-\alpha)\rho_2] = [(1-\alpha)\rho_2 u]$$
 (3.4c)

$$s[\rho u] = [\rho u^2 + P] \tag{3.4d}$$

En sommant (3.4b) et (3.4c), on obtient $s[\rho] = [\rho u]$, puis en posant $v_g = u_g - s$ et $v_d = u_d - s$, on obtient :

$$\left[\rho v\right] = 0$$

En posant $M = \rho_g v_g = \rho_d v_d$, on voit que la relation précédente exprime simplement le fait que le saut de la quantité M est nul, M représentant le débit au travers de la discontinuité, dans le référentiel se déplaçant à la vitesse *s* de celle-ci. Notons que l'équation (3.4a) devient alors :

$$M[\alpha] = 0$$
.

On distingue alors deux cas : M = 0 ou $M \neq 0$.

3.2.4.3 Discontinuité de contact

Supposons M = 0.

Dès lors, $u_g = u_d = s$ et (3.4d) donne $P_g = P_d$: d'après la définition rappelée plus haut, il s'agit donc d'une discontinuité de contact. On retrouve au passage que vitesse et pression sont constantes au travers d'une discontinuité de contact.

Remarques :

- 1. Notons que $[\alpha]$, $[\rho_1]$ et $[\rho_2]$ sont quelconques à travers une discontinuité de contact.
- 2. En dimension d'espace supérieure ou égale à 2, la quantité constante sera la vitesse normale, le saut de vitesse tangentielle étant quelconque.

3.2.4.4 Onde de choc

Traitons maintenant le cas $M \neq 0$. D'ores et déja, on a vu que $M[\alpha] = 0$, donc ici $[\alpha] = 0$, d'où la propriété :

α reste constant à travers les chocs.

Pour un 1-choc entropique (ou admissible), les inégalités de Lax donnent en particulier :

 $s < u_g$, donc $v_g > 0$ et donc M > 0.

De la même façon, pour un 3-choc *entropique*, on a M < 0.

Premier cas M > 0 : 1-choc

On suppose l'état gauche (g) $V_g = {}^t(\alpha_g, \rho_{1g}, \rho_{2g}, u_g)$ connu, et on cherche à paramétrer l'état $V = {}^t(\alpha, \rho_1, \rho_2, u)$ de l'autre côté de la discontinuité.

On sait déjà que $\alpha = \alpha_g$ et $[\rho(u - s)] = 0$, ce dont on se sert pour réécrire (RH) sous la forme :

$$\rho_1(u-s) = \rho_{1g}(u_g-s)$$
 (3.5a)

$$\rho_2(u-s) = \rho_{2g}(u_g-s)$$
 (3.5b)

$$\rho_g(u_g - s)(u_g - u) = -(P_g - P)$$
(3.5c)

Si l'on exprime, à partir de (3.5a) et (3.5b), ρ_1 et ρ_2 , en fonction de l'état (g), de *u* et de *s*, qu'on les injecte dans la définition de P^2 , on obtient une relation de liaison entre *s*, *u* et *P*. Nous aurons donc éliminé ρ_1, ρ_2 et *s*, tous exprimés (ou exprimables) en fonction de *u* et *P*. Tous calculs faits, on obtient les relations :

$$\rho_{1} = \rho_{1g} \frac{u_{g} - s}{u - s}$$

$$\rho_{2} = \rho_{2g} \frac{u_{g} - s}{u - s}$$

$$s = u + \rho_{g} c_{g}^{2} \frac{u - u_{g}}{P - P_{g}}$$
(3.6)

On injecte alors la dernière relation dans (3.5c) pour obtenir :

$$(u-u_g)^2 = \frac{(Pg-P)^2}{\rho_g \left(P-\tilde{P}_{0g}\right)},$$

où $\tilde{P}_{0g} = \tilde{P}_0(\alpha_g)$. En réécrivant (3.5c) sous la forme $M = -\frac{[P]}{[U]} > 0$, on voit que *u* et *P* doivent varier en sens contraire au travers d'un 1-choc. On obtient donc finalement la 1-courbe de choc :

$$u = u_g - \frac{P - P_g}{\sqrt{\rho_g (P - \tilde{P}_{0g})}}$$

La partie *admissible* de cette 1-courbe de choc, est la partie pour laquelle $P > P_g$ (et donc $u < u_g$).

 $^{^{2}}$ C'est à ce niveau du raisonnement que l'on introduit les lois d'état particulières (1.26).

Remarques :

- 1. Il faut bien sûr vérifier que $P > \tilde{P}_{0g}$, ce qui est vrai puisque, comme $\alpha = \alpha_g$, on a $\tilde{P}_0(\alpha) = \tilde{P}_0(\alpha_g)$, et donc, en vertu de (3.3) : $P \tilde{P}_{0g} = \rho c^2 > 0$.
- 2. En pratique, lors de la résolution pratique du problème de Riemann, lorsque nous aurons besoin de la vitesse de propagation du choc *s*, nous remplaçons la troisième relation de (3.6) par la relation :

$$s = u - \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho}} \frac{c_g^2}{c}$$

En effet, la dernière relation de (3.6) peut poser problème lors de la mise en oeuvre numérique dans le cas des discontinuités de contact ($u = u_g$ et $P = P_g$).

Second cas M < 0: 3-choc

Ici, on suppose connu l'état droite (d) $V_d = {}^t(\alpha_d, \rho_{1d}, \rho_{2d}, u_d)$, et on veut paramétrer l'état $V = {}^t(\alpha, \rho_1, \rho_2, u)$ de l'autre côté de la discontinuité. En raisonnant comme précédemment, on obtient successivement :

$$\rho_{1} = \rho_{1d} \frac{u_{d} - s}{u - s}$$

$$\rho_{2} = \rho_{2d} \frac{u_{d} - s}{u - s}$$

$$s = u + \rho_{d} c_{d}^{2} \frac{u - u_{d}}{P - P_{d}}$$

$$(3.7)$$

et :

$$(u - u_d)^2 = \frac{(P_d - P)^2}{\rho_d (P - \tilde{P}_{0d})}$$

À nouveau, le signe de M permet de conclure quant au sens de variation relatif de u et P, et on obtient la 3-courbe de choc :

$$u = u_d + \frac{P - P_d}{\sqrt{\rho_d (P - \tilde{P}_{0d})}}$$

Encore, la partie *admissible* de cette 3-courbe de choc, est la partie pour laquelle $P > P_d$ (et donc $u > u_d$).

Remarque :

On peut faire les mêmes remarques que dans le cas du 1-choc : on a bien $P - \tilde{P}_{0d} > 0$ et la relation donnant la vitesse de propagation du choc s'écrit également :

$$s = u + \sqrt{\frac{\rho_d}{\rho}} \frac{c_d^2}{c}$$
.

3.2.5 Détentes

D'après la définition d'une *k*-onde de détente, on sait qu'il faut $\zeta_k(W_g) \leq \zeta_k(W_d)$, ce qui, compte tenu du fait que la vitesse du son *c* est un invariant de Riemann pour les lois d'état choisies, se traduit par :

− Dans le cas d'une 1-détente : $u_g \leq u$

− Dans le cas d'une 3-détente : $u \leq u_d$

3.2.5.1 État gauche connu : 1-détente

On écrit les invariants de Riemann, en se rappelant que c est IR :

$$\begin{cases} u + \frac{c_g}{2} \log\left(\frac{\rho_1 \rho_2}{\rho_{10} \rho_{20}}\right) &= u_g + \frac{c_g}{2} \log\left(\frac{\rho_{1g} \rho_{2g}}{\rho_{10} \rho_{20}}\right) \\ \frac{\rho_1}{\rho_2} &= \frac{\rho_{1g}}{\rho_{2g}} \end{cases}$$

Il suffit donc de substituer dans la première relation ρ_2 par sa valeur donnée par la deuxième équation pour obtenir ρ_1 , puis ρ_2 :

$$\rho_{1} = \rho_{1g} \exp\left(\frac{u_{g} - u}{c_{g}}\right)$$

$$\rho_{2} = \rho_{2g} \exp\left(\frac{u_{g} - u}{c_{g}}\right)$$
(3.8)

En substituant ces relations dans la définition de la pression de mélange, on obtient bien une relation entre u, P et l'état gauche. Tous calculs faits, on obtient la 1-courbe de détente sous la forme :

$$u = u_g + c_g \log\left(\frac{P_g - \tilde{P}_{0g}}{P - \tilde{P}_{0g}}\right)$$

La partie *admissible* de cette 1-courbe de détente est la partie pour laquelle $u \ge u_g$, et donc $P \le P_g$.

Remarque :

L'argument du logarithme est bien positif, puisque $P_g - \tilde{P}_{0g} = \rho_g c_g^2 > 0$ et $P > \tilde{P}_{0g}$ pour des raisons déjà évoquées plus haut.

3.2.5.2 État droite connu : 3-détente

En procédant de la même manière, on trouve pour les densités :

$$\rho_{1} = \rho_{1d} \exp\left(-\frac{u_{d} - u}{c_{d}}\right)$$

$$\rho_{2} = \rho_{2d} \exp\left(-\frac{u_{d} - u}{c_{d}}\right)$$
(3.9)

et on obtient la 3-courbe de détente :

$$u = u_d - c_d \log\left(\frac{P_d - \tilde{P}_{0d}}{P - \tilde{P}_{0d}}\right)$$

Lorsque $u \leq u_d$ (partie *admissible*), on trouve que $P \leq P_d$.

3.2.6 Récapitulatif et résolution pratique du problème de Riemann

3.2.6.1 Récapitulatif

1-onde On peut écrire les 1-courbes de choc et de détente sous la forme :

$$u_{1} = u_{g} + \Theta_{g}(P) , \text{ avec} : \Theta_{g}(P) = \begin{cases} c_{g} \log\left(\frac{P_{g} - \tilde{P}_{0g}}{P - \tilde{P}_{0g}}\right) & \text{si } P \leq P_{g} \\ -\frac{P - P_{g}}{\sqrt{\rho_{g}(P - \tilde{P}_{0g})}} & \text{si } P > P_{g} \end{cases}$$
(3.10)

3-onde De la même manière, on peut écrire les 3-courbes de choc et de détente sous la forme :

$$u_{3} = u_{d} + \Theta_{d}(P) , \text{ avec} : \Theta_{d}(P) = \begin{cases} -c_{d} \log\left(\frac{P_{d} - \tilde{P}_{0d}}{P - \tilde{P}_{0d}}\right) & \text{si } P \leq P_{d} \\ \frac{P - P_{d}}{\sqrt{\rho_{d}(P - \tilde{P}_{0d})}} & \text{si } P > P_{d} \end{cases}$$
(3.11)

3.2.6.2 Résolution pratique du problème de Riemann

Étant donnés deux états W_g et W_d , résoudre le problème de Riemann (3.1), consiste à calculer les deux états intermédiaires W_g^* et W_d^* respectivement reliés à W_g par une 1-onde (choc ou détente) et à W_d par une 3-onde (choc ou détente). De plus, ces deux états W_g^* et W_d^* sont reliés entre eux par une 2-discontinuité de contact, c'est à dire qu'ils vérifient :

- égalité des vitesses : $u_g^* = u_d^* = u^*$,

- égalité des pressions :
$$P_g^* = P_d^* = P^*$$

Rappelons que nous disposons de deux fonctions de P :

1-onde: $u_1(P) = u_g + \Theta_g(P)$, définie si $P > \tilde{P}_{0g}$,

3-onde :
$$u_3(P) = u_d + \Theta_d(P)$$
, définie si $P > P_{0d}$

où u_1 et u_3 sont données respectivement par (3.10) et (3.11).

Soit alors $\delta \mathcal{U} = u_1 - u_3$, définie si $P > \max(\tilde{P}_{0g}, \tilde{P}_{0d})$. Dire que les deux états W_g^* et W_d^* sont reliés entre eux par une 2-discontinuité de contact, est équivalent à $\delta \mathcal{U}(P^*) = 0$; la résolution du problème de Riemann (3.1) est donc ramenée à la résolution de l'équation (3.12) suivante :

$$\delta \mathcal{U}(P^*) = u_g - u_d + \Theta_g(P^*) - \Theta_d(P^*) = 0$$
(3.12)

Étude de δU

Tout d'abord, $\delta \mathcal{U}$ est définie si $P > \tilde{P}_0 = \max(\tilde{P}_{0g}, \tilde{P}_{0d})$. Ceci revient à dire que, si solution P^* il y a, on aura nécessairement $P^* > \tilde{P}_0$. D'autre part cette fonction est C^1 sur le même domaine $I =]\tilde{P}_0, +\infty[.$

Plus précisément, on montre que (voir Annexe B) :

- $\delta \mathcal{U}$ est C^1 sur *I* avec $\delta \mathcal{U}' < 0$, donc $\delta \mathcal{U}$ est strictement décroissante,

$$-\lim_{P \to \tilde{P}_0} \delta \mathcal{U} = +\infty$$
$$-\lim_{P \to +\infty} \delta \mathcal{U} = -\infty$$

Ainsi, il existe une unique solution P^* à l'équation (3.12) sur l'intervalle $I =]\tilde{P}_0, +\infty[$.

Ce résultat entraîne que :

Proposition 7 (Existence et unicité de la solution au problème de Riemann)

Quels que soient les deux états W_g et W_d, il existe une unique solution au problème de Riemann (3.1) associé au modèle (\mathcal{R}) . On la note :

$$w^{\mathbf{R}}(\frac{x}{t}; W_g, W_d)$$

Remarques :

- 1. Dans l'optique de la résolution numérique du modèle (\mathcal{R}) avec le schéma de Godunov, ce résultat capital confère une grande robustesse au schéma de discrétisation spatiale.
- 2. Il est intéressant de remarquer que nous n'avons aucune condition de "proximité" entre les deux états W_g et W_d sur l'existence d'une solution au problème de Riemann³. Si tel n'était pas le cas, il aurait fallu traiter le cas de l'apparition du vide, comme le fait S. Rouy (par exemple) dans l'étude du problème de Riemann associé à un modèle compressible diphasique monofluide [102].
- 3. On peut également montrer que $\delta \mathcal{U}$ est deux fois dérivable sur I^4 , avec $\delta \mathcal{U}^{"} > 0$, donc $\delta \mathcal{U}$ est convexe. Si on adopte une méthode de Newton pour la résolution de l'équation (3.12), on est assuré de la convergence de la méthode pour peu que la pression P_t choisie pour initialiser la méthode vérifie $\delta \mathcal{U}(P_i) \ge 0$.

Application à la résolution du problème de Riemann La résolution de (3.1) se résume aux quatre étapes suivantes :

- 1. On commence par résoudre l'équation (3.12) : on obtient P^* .
- 2. On calcule $u^* = u_1(P^*) = u_3(P^*)$, u_1 et u_3 étant respectivement donnés par (3.10) et (3.11).
- 3. 1-onde : calcul de l'état W_g^* : - Si $P^* ≤ P_g$, il s'agit d'une 1-détente, on a $\alpha_g^* = \alpha_g$ et ρ_{1g}^* et ρ_{2g}^* sont données par (3.8). - Si $P^* > P_g$, il s'agit d'un 1-choc, $\alpha_g^* = \alpha_g$ et ρ_{1g}^* et ρ_{2g}^* sont données par (3.6).
- 4. 3-onde : calcul de l'état W_d^* :
 - Si $P^* \leq P_d$, il s'agit d'une 3-détente, on a $\alpha_d^* = \alpha_d$ et ρ_{1d}^* et ρ_{2d}^* sont données par (3.9). Si $P^* > P_d$, il s'agit d'un 3-choc, $\alpha_d^* = \alpha_d$ et ρ_{1d}^* et ρ_{2d}^* sont données par (3.7).

³ On peut rapprocher cette remarque de celle sur la cavitation, voir paragraphe 3.2.3.

⁴ δU est même C^2 sur I, sauf en P_g et P_d , mais admet toutefois des limites finies à droite et à gauche en ces deux points, voir Annexe B.

3.3 Validation 1D de l'étape hyperbolique

Il s'agit ici de valider le schéma de Godunov appliqué au modèle (\mathcal{R}). Pour cela, nous effectuons deux calculs de problème de Riemann, en les comparant à leur solution exacte, le domaine de calcul étant le segment [0,1] discrétisé sur 50 points. Ces cas tests sont définis par la donnée des états droite et gauche initiaux de la forme $U = {}^t (\alpha, \rho_1, \rho_2, u)$:

• Discontinuité de contact instationnaire :

$$U_{\rm g} = \begin{pmatrix} 1 - \lambda_0 \\ 1 \\ 1000 \\ 0.15 \end{pmatrix}, \quad \text{et} \quad U_{\rm d} = \begin{pmatrix} \lambda_0 \\ 1 \\ 1000 \\ 0.15 \end{pmatrix}$$

La discontinuité est initialement placée en $x_d = 0.25$; le temps final est de telle sorte que la discontinuité de contact parcoure 0.5 m ($t_f = 3.333$ s).

• Tube à choc :

$$U_{\rm g} = \begin{pmatrix} 1 - \lambda_0 \\ 100 \\ 10^4 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{et} \quad U_{\rm d} = \begin{pmatrix} \lambda_0 \\ 1 \\ 1000 \\ 0 \end{pmatrix}$$

La discontinuité est initialement placée en $x_d = 0.3$; le temps final est $t_f = 0.03$ s.

Les fractions volumiques initiales sont définies avec $\lambda_0 = 10^{-7}$. Les deux fluides suivent des lois d'état de type (1.26), avec les paramètres :

 $-\rho_{10} = 1$ kg.m⁻³, $c_1 = 3$ m.s⁻¹ pour le fluide 1,

 $-\rho_{20} = 1000 \text{ kg.m}^{-3}, c_1 = 15 \text{ m.s}^{-1}$ pour le fluide 2,

la pression de référence pour les deux fluides étant $p_0 = 10^5$ Pa. Pour les deux cas, nous comparons les résultats obtenus à l'ordre 1 et à l'ordre 2. Les résultats sont rassemblés FIGURE 3.1.

Le premier cas test nous permet de vérifier la diffusion du schéma sur les discontinuités de contact. Remarquons qu'il s'agit d'une discontinuité se déplaçant à $M = 10^{-2}$ dans le liquide. À l'instant final la discontinuité de contact s'est bien déplacée de 0.5 m.

Le deuxième cas test est un cas 1-détente 3-choc. La discontinuité de contact se déplace très peu et reste en $x = x_d = 0.3$, c'est pourquoi on n'observe qu'une très faible diffusion, le schéma étant exact sur les discontinuités de contact stationnaires. Rappelons que le maillage ne comporte que 50 points. On constate également que la position du choc est correcte ($x \simeq 0.75$) que ce soit à l'ordre 1 ou à l'ordre 2.



FIG. 3.1 – Validation 1D. En haut : discontinuité de contact instationnaire, en bas : tube à choc : ordre 1 (\bullet); ordre 2 (+); solution exacte (–). Maillage comportant 50 points.

3.4 Cas simple de ballottement

3.4.1 Présentation du problème et solution analytique

Il s'agit de trouver une solution exacte à l'écoulement de deux fluides non visqueux de densité ρ_1 et $\rho_2 > \rho_1$ dans un bassin (2D) limité par quatre parois, et dont la géométrie est décrite FIGURE 3.2. Les deux fluides sont soumis à la gravité *g*, dirigé suivant -y, le fluide le plus lourd étant placé en dessous. À l'état initial, les deux fluides sont au repos. À *t* = 0, on soumet le bassin à une



FIG. 3.2 – Definition du problème de ballottement

accélération suivant x, notée -a. Cette accélération dépend du temps.

Remarque :

Le fluide va donc subir une acélération $+a\mathbf{e}_x$ dans le repère se déplaçant avec le bassin.

3.4.1.1 Hypothèses et mise en équation

On suppose que l'accélération transverse *a* est suffisamment faible pour que les oscillations créées restent dans un régime linéaire. On suppose également les deux fluides incompressibles, et on néglige les termes d'inertie devant les termes instationnaires, ce qui revient à supposer que l'amplitude des oscillations est petite devant la longueur d'onde de l'onde se propageant suivant *x*. L'écoulement de chacun des deux fluides est alors potentiel. Soient φ_1 et φ_2 les potentiels des deux fluides. Dans ce cadre, les équations d'Euler s'intègrent en :

$$\begin{cases} p_1 = -\rho_1 gy + \rho_1 a(t)x - \rho_1 \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} \\ p_2 = -\rho_2 gy + \rho_2 a(t)x - \rho_2 \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} \end{cases}$$

L'équation de conservation de la masse pour chacun des fluides devient :

$$\left\{ \begin{array}{rrrr} \Delta \phi_1 &=& 0 \\ \Delta \phi_2 &=& 0 \end{array} \right.$$

Les fluides étant non visqueux, à la paroi, seule la composante normale de la vitesse doit être nulle. Les conditions aux limites aux parois sont donc :

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x}\right)_{x=0,L} = 0 \\ \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial y}\right)_{y=-h_2,h_1} = 0 \end{cases}$$

Il ne reste plus qu'à traduire les conditions à l'interface.

Condition aux limites à l'interface Pour cela, on suppose que les effets de tension de surface sont négligeables devant les effets de gravité. Les pressions des deux fluides doivent donc être égales à l'interface. Les fluides étant supposés non visqueux, il y a également égalité des vitesses normales et de leurs dérivées (normale). On note ξ la coordonnée y des points de l'interface entre les deux fluides. Dans la limites des petites oscillations, on a en y = 0 (en linéarisant autour de y = 0, en confondant les dérivées en y = 0 et en $y = \xi(x)$) :

$$g\xi - ax + \frac{\rho_2}{\rho_2 - \rho_1} \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} - \frac{\rho_1}{\rho_2 - \rho_1} \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} = 0$$
(3.13)

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial y} = \frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{\partial \varphi_2}{\partial y}$$
(3.14)

Les équations (3.13) et (3.14) traduisent respectivement l'égalité des pressions et des vitesses à l'interface. En dérivant (3.13) par rapport à t, on obtient l'équation suivante :

$$\left|g\frac{\partial\xi}{\partial t} - a'x + \frac{\rho_2}{\rho_2 - \rho_1}\frac{\partial^2\varphi_2}{\partial t^2} - \frac{\rho_1}{\rho_2 - \rho_1}\frac{\partial^2\varphi_1}{\partial t^2} = 0\right|$$
(3.15)

Forme des solutions : séparation des variables Dans le cas d'un bassin 3D, φ_1 et φ_2 vérifient à l'intérieur du domaine $\Delta \varphi_i = 0$. Mais la hauteur du bassin (l'épaisseur de chacune des deux couches de fluides h_1 et h_2) ne dépend ni de x, ni de z. Il est alors intéressant de réécrire le laplacien sous la forme :

$$\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial v^2} + \Delta_{x,z} \varphi_i = 0. \tag{3.16}$$

Or on sait (voir [96]) que les fonctions propres du laplacien 2D $\Delta_{x,z}$ (et vérifiant des conditions de paroi, *ie* de Neumann homogène) forment une base de l'espace L^2 , donc on peut décomposer les φ_i sur cette base. Soient les $(e_{np})_{n,p}$ les vecteurs de cette base, définis par :

$$\Delta_{x,z} e_{np}(x,z) = \lambda_{np} e_{np}(x,z)$$
$$\frac{\partial e_{np}}{\partial x} = 0 \text{ en } x = 0 \text{ et } x = L$$
$$\frac{\partial e_{np}}{\partial z} = 0 \text{ en } z = 0 \text{ et } z = \ell$$

Ces fonctions propres sont connues, ce sont les $\cos(k_n x)\cos(q_p z)$, avec $k_n = \frac{n\pi}{L}$, et $q_p = \frac{p\pi}{\ell}$. Les valeurs propres associées sont les $\lambda_{np} = -(k_n^2 + q_p^2)$.

En faisant tendre ℓ vers l'infini, on retrouve le cas 2D, il suffit alors de prendre $q_p = 0$ dans les fonctions et valeurs propres. On peut maintenant décomposer les φ_i sur la nouvelle base :

$$\varphi_i = \sum_n \alpha_n^i(y,t) e_n(x),$$

que l'on injecte dans (3.16) pour obtenir :

$$\frac{\partial^2 \alpha_n^i}{\partial y^2} - k_n^2 \alpha_n^i = 0,$$

dont les solutions sont des combinaisons d'exponentielles. Les conditions de paroi en $y = -h_2, h_1$ permettent ensuite d'obtenir la forme des α_n^i à une constante (fonction du temps) multiplicative près, et d'avoir finalement pour les φ_i :

$$\varphi_{1} = \sum_{n} \phi_{n}^{1}(t) \cosh(k_{n}(y - h_{1})) \cos(k_{n}x)$$

$$\varphi_{2} = \sum_{n} \phi_{n}^{2}(t) \cosh(k_{n}(y + h_{2})) \cos(k_{n}x)$$
(3.17)

Les conditions aux limites à l'interface (3.14) et (3.15) vont nous permettre de calculer les ϕ_n^i .

Obtention des équations sur les ϕ_n^i En remplaçant $\frac{\partial \xi}{\partial t}$ dans (3.15) par $\left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial y}\right)_{y=0}$ puis par $\left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial y}\right)_{y=0}$, on obtient deux EDP couplées pour φ_1 et φ_2 en y = 0. En projetant sur les e_n , on obtient alors deux EDO couplées sur les ϕ_n^i :

$$\begin{cases} g\phi_n^1 k_n \sinh(-k_n h_1) + \frac{\rho_2}{\Delta \rho} \ddot{\phi}_n^2 \cosh k_n h_2 - \frac{\rho_1}{\Delta \rho} \ddot{\phi}_n^1 \cosh k_n h_1 &= a' X_n \\ g\phi_n^2 k_n \sinh(k_n h_2) + \frac{\rho_2}{\Delta \rho} \ddot{\phi}_n^2 \cosh k_n h_2 - \frac{\rho_1}{\Delta \rho} \ddot{\phi}_n^1 \cosh k_n h_1 &= a' X_n \end{cases}$$

où $\Delta \rho = \rho_2 - \rho_1$ et $X_n = \langle x, e_n \rangle$ désigne la projection de l'identité de [0, L] sur la base des (e_n) . L'égalité des vitesses en y = 0 donne :

$$\phi_n^1(t)\sinh k_n h_1 + \phi_n^2(t)\sinh k_n h_2 = 0.$$
(3.18)

En substituant, on obtient finalement :

$$\begin{cases} \ddot{\varphi}_n^1 + \omega_n^2 \phi_n^1 = -\frac{a' X_n \omega_n^2}{g k_n \sinh k_n h_1} \\ \ddot{\varphi}_n^2 + \omega_n^2 \phi_n^2 = +\frac{a' X_n \omega_n^2}{g k_n \sinh k_n h_2} \end{cases},$$

$$\omega_n^2 = \frac{g k_n \Delta \rho}{\rho_1 \coth k_n h_1 + \rho_2 \coth k_n h_2} \qquad (3.19)$$

où :

Cette dernière relation est la relation de dispersion des ondes étudiées.

Pour pouvoir résoudre ces équations, nous devons avoir des conditions initiales sur les ϕ_i . Les deux potentiels étant définis à une constante près, on peut toujours choisir : $\phi_n^1(0) = \phi_n^2(0) = 0$. On obtient les conditions initiales sur les dérivées en dérivant (3.18) par rapport au temps, et en écrivant (3.13) à t = 0, sachant que $\xi(x, 0) = 0$. Tous calculs faits, on a :

$$\phi_n^1(0) = 0 \qquad \phi_n^2(0) = 0$$

$$\dot{\phi}_n^1(0) = -\frac{a(0)X_n\omega_n^2}{gk_n\sinh k_nh_1} \dot{\phi}_n^2(0) = +\frac{a(0)X_n\omega_n^2}{gk_n\sinh k_nh_2}$$

Remarque :

Dans l'équation (3.19), lorsque h_1 tend vers l'infini, et $\rho_1 \ll \rho_2$, on retrouve la relation de dispersion des ondes gravitationnelles à la surface d'un liquide de profondeur $h : \omega^2 = gk \tanh kh$, voir [79] par exemple.

3.4.1.2 Résolution : calcul des $\dot{\phi}_n^i$

Le but étant d'avoir la forme de la surface libre, d'après (3.13), il faut obtenir les $\dot{\phi}_n^i$. Pour cela, on remarque tout d'abord que les deux EDO sur les ϕ_n^i sont de la forme :

$$\begin{cases} \ddot{\varphi} + \omega^2 \phi &= A(t) \\ \phi(0) &= 0 \\ \dot{\phi}(0) &= \phi'_0 \end{cases}$$

Résolution de l'équation Pour résoudre cette équation scalaire d'ordre 2, on se ramène à un système à deux équations d'ordre 1, en posant $\psi = \dot{\phi}$. La matrice associée à ce système est :

$$M = \left(\begin{array}{cc} 0 & -1 \\ \omega^2 & 0 \end{array}\right) \ ,$$

et les solutions sont :

$$\begin{pmatrix} \phi \\ \dot{\phi} \end{pmatrix} = e^{-tM} \begin{pmatrix} 0 \\ \phi'_0 \end{pmatrix} + \int_0^t e^{-(t-\tau)M} \begin{pmatrix} 0 \\ A(\tau) \end{pmatrix} d\tau.$$

On obtient donc pour $\dot{\phi}$:

$$\dot{\phi}(t) = \phi'_0 \cos \omega t + \int_0^t A(\tau) \cos \omega (t-\tau) d\tau.$$

À partir de là, on peut reconstruire les $\dot{\phi}_n^i$; tous calculs faits, on obtient :

$$\dot{\phi}_n^1 = -\frac{X_n \omega_n^2}{g k_n \sinh k_n h_1} \left(a(t) - \int_0^t a(\tau) \omega_n \sin \omega_n (t - \tau) d\tau \right)$$

$$\dot{\phi}_n^2 = +\frac{X_n \omega_n^2}{g k_n \sinh k_n h_2} \left(a(t) - \int_0^t a(\tau) \omega_n \sin \omega_n (t - \tau) d\tau \right)$$
(3.20)

Ainsi, les solutions dépendront de la forme choisie pour l'excitation a(t).

Remarque :

Le calcul des ϕ_n^i n'est pas nécessaire puisqu'en vertu de (3.13), il suffit de connaître les $\frac{\partial \phi_i}{\partial t}$ pour calculer le profil de l'interface $\xi(x,t)$.

Expression des X_n Les solutions dépendent également des X_n , qu'il faut donc calculer. La projection de *x* sur les e_n coïncide sur [0,L] avec le développement en série de Fourier de la fonction qui vaut |x| sur [-L,L] et prolongée par 2*L*-périodicité sur \mathbb{R} . Ce développement est connu et s'écrit sur [0,L] :

$$\forall x \in [0,L], x = \frac{L}{2} - \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{4L}{(2n+1)^2 \pi^2} \cos \frac{(2n+1)\pi x}{L}.$$

Ainsi, les X_n s'écrivent :

$$X_{0} = \frac{L}{2}$$

$$X_{n} = \frac{2L}{n^{2}\pi^{2}} ((-1)^{n} - 1), n \ge 1$$

3.4.1.3 Reconstruction de ξ pour une excitation *a* en échelon

Lorsque *a* est un échelon d'amplitude a_0 , on trouve pour les $\dot{\phi}_n^i$:

$$\dot{\phi}_n^1 = -\frac{a_0 X_n \omega_n^2}{g k_n \sinh k_n h_1} \cos \omega_n t , \qquad (3.21)$$

$$\dot{\phi}_n^2 = +\frac{a_0 X_n \omega_n^2}{g k_n \sinh k_n h_2} \cos \omega_n t$$

et avec (3.13), on a finalement :

$$\xi = \frac{a_0}{g} \left(x - \sum_n X_n \, \cos \omega_n t \, \cos k_n x \right),$$

soit, en remplaçant les X_n par leurs valeurs :

$$\xi = \frac{a_0}{g} \left(x - \frac{L}{2} + \sum_{n \ge 0} \frac{4}{Lk_{2n+1}^2} \cos \omega_{2n+1} t \, \cos k_{2n+1} x \right)$$
(3.22)

Remarque :

L'ordre de grandeur de l'amplitude du premier mode (le plus "énergétique") est donc a_0L/g . Nos hypothèses de régime linéaire seront donc satisfaites si cette amplitude reste petite devant la largeur L du bassin ainsi que devant les hauteurs h_1 et h_2 , c'est à dire si :

$$\frac{a_0}{g} \ll 1 \quad \text{et} \quad \frac{a_0 L}{g h_i} \ll 1 \; ,$$

la deuxième condition étant une conséquence de la première pour peu que L, h_1 et h_2 soient du même ordre de grandeur.



FIG. 3.3 – Définition du cas test de ballottement

3.4.2 Résultats numériques

On se place dans les conditions décrites FIGURE 3.3. Les limites du domaine sont traitées comme des parois. Les paramètres des deux lois d'état sont :

- **Fluide 1 :** le fluide 1 est de l'air, de densité $\rho_{10} = 1 \text{ kg.m}^{-3}$ à la pression $p_0 = 10^5$ Pa. La vitesse du son est fixée à $c_1 = 285 \text{ m.s}^{-1}$.
- **Fluide 2 :** le fluide 2 est de l'eau, de densité $\rho_{20} = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ à la pression $p_0 = 10^5 \text{ Pa. La}$ vitesse du son est fixée à $c_2 = 300 \text{ m.s}^{-1}$.

Rappelons qu'initialement le bassin n'est soumis qu'à la gravité, dirigée suivant l'axe des -y, et de norme $g = 9.81 \text{ m.s}^{-2}$. À l'instant initial, on soumet le fluide à un échelon d'accélération transverse *a*, dirigée suivant les *x* positifs ⁵, et de norme $\frac{a_0}{a} = 10^{-2}$.

Nous donnons les signaux temporels des deux points de la surface libre en x = 0 et x = L, que nous comparons à leur valeur analytique respective :

$$\begin{cases} \xi_0 = \frac{a_0}{g} \left(-\frac{L}{2} + \sum_{n \ge 0} \frac{4}{Lk_{2n+1}^2} \cos \omega_{2n+1} t \right) \\ \xi_L = \frac{a_0}{g} \left(\frac{L}{2} - \sum_{n \ge 0} \frac{4}{Lk_{2n+1}^2} \cos \omega_{2n+1} t \right) \end{cases}$$

et ce pour deux maillages, l'un comprenant 40×100 cellules (40 points dans le premier mode), l'autre 80×150 cellules (80 points dans le premier mode).

⁵Tout se passe donc comme si on tirait brutalement le réservoir vers la gauche (suivant x < 0).



FIG. 3.4 – Résultats du cas simple de ballottement. En haut : maillage 40×100 , en bas : maillage 80×150 .

Chapitre 4

Schéma numérique pour les termes de diffusion

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons, en suivant une démarche constructive, les schémas retenus pour discrétiser les termes de diffusion de quantité de mouvement (forces visqueuses) et de diffusion thermique (flux de conduction). Nous imposons à ces schémas de laisser invariantes certaines solutions stationnaires du modèle continu, avec saut à l'interface, ce qui dans de nombreuses situations pratiques est plus important, du point de vue de la précision à pas de maillage fixé, que la simple consistance du schéma au sens usuel. Ce problème est bien connu en dynamique des gaz compressibles pour le traitement des discontinuités de contact. Ce point de vue a également été adopté dans plusieurs travaux récents pour l'élaboration de schémas dits "équilibres" pour le traitement des forces visqueuses, la solution exacte privilégiée est celle de l'écoulement de Couette plan, pour lequel le profil de vitesse est linéaire dans chaque fluide. On applique la même approche en ce qui concerne les phénomènes de conduction thermique. Nous concluons le chapitre par des cas de validation sur des configurations académiques permettant d'illustrer la précision des schémas retenus.

4.2 Traitement des forces de viscosité

4.2.1 Discrétisation

Nous exposons ici le schéma numérique choisi pour discrétiser le terme source de viscosité au second membre de l'équation bilan de quantité de mouvement (1.5). Il s'agit donc de discrétier la divergence du tenseur des contraintes visqueuses donné par (1.9) :

$$\mathcal{S}^{\text{visc}} = \nabla \cdot \tau^{D} = \nabla \cdot \left(\mu \left(\nabla \mathbf{V} + {}^{t} \nabla \mathbf{V} \right) \right)$$

Cependant, en situation d'écoulements quasi-incompressibles, étant donné l'identité :

$$abla \cdot ({}^t \nabla \mathbf{V}) =
abla (\underbrace{
abla}_{\simeq 0} \cdot \underbrace{\mathbf{V}}_{\simeq 0}),$$

nous négligeons le terme $\nabla \cdot (\mu^t \nabla \mathbf{V})$ devant $\nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{V})$ et ne discrétisons donc que ce dernier terme.

Intégrant la divergence sur la cellule C_{ij} , on obtient le schéma de discrétisation suivant :

$$S_{i,j}^{\text{visc}} = \frac{1}{\Delta x_i} \Big[\Big(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \Big)_{i+1/2,j} - \Big(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \Big)_{i-1/2,j} + \Big(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \Big)_{i,j+1/2} - \Big(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \Big)_{i,j-1/2} \Big] \mathbf{e}_x + \frac{1}{\Delta y_j} \Big[\Big(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \Big)_{i+1/2,j} - \Big(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \Big)_{i-1/2,j} + \Big(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \Big)_{i,j+1/2} - \Big(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \Big)_{i,j-1/2} \Big] \mathbf{e}_y$$

$$(4.1)$$

où les composantes de la vitesses V dans le repère $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y)$ sont notées (u, v). On peut remarquer que seules des dérivées normales à chaque face interviennent dans le schéma. Il faut ensuite se donner une façon de discrétiser les termes du type :

$$\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1/2,j}$$

Dans le cas d'un maillage régulier (ici Δx constant), nous choisissons de les écrire sous la forme :

$$\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1/2,j} = \mu_{i+1/2,j} \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} ,$$

nous donnant ainsi la liberté sur $\mu_{i+1/2,j}$, la viscosité reconstruite à la face de la cellule. Cette viscosité reconstruite doit dépendre des viscosités dans les deux cellules voisines, c'est à dire :

$$\mu_{i+1/2,j} = \bar{\mu}(\mu_{i,j};\mu_{i+1,j})$$

D'autre part, la fonction $\bar{\mu}$ doit vérifier $\bar{\mu}(\mu;\mu) = \mu$, ce qui correspond au fait que dans une zone où α est constant, la viscosité à la face doit être celle du fluide présent dans les deux cellules voisines afin d'obtenir la consistance avec les équations de Navier-Stokes monophasiques.

Le choix des viscosités reconstruites aux faces est effectué de manière à ce que le schéma préserve exactement les champs de vitesses linéaires par morceaux, c'est à dire les écoulements de type Couette plan. Plus précisément, considérons l'écoulement diphasique défini par le champ de vitesse suivant :

$$\mathbf{V}_{\text{exact}} = u_{\text{exact}} \mathbf{e}_x = \left(u_0 + \frac{\tau_0}{\mu(y)}(y - y_0)\right) \mathbf{e}_x ,$$

avec :

$$\mu(y) = \begin{cases} \mu_1 & \text{si } y \ge y_0 \\ \mu_2 & \text{si } y \le y_0 \end{cases}$$

et où τ_0 est le cisaillement à l'interface, située en $y = y_0$:

$$\tau_0 = \mu_1 \frac{\partial u}{\partial y} (y = y_0^+) = \mu_2 \frac{\partial u}{\partial y} (y = y_0^-) .$$

Cette dernière relation traduit l'égalité des contraintes à l'interface. Nous supposons de plus que l'interface, la ligne $y = y_0$, est exactement située sur une ligne de maillage, que l'on suppose régulier (Δy constant). Ecrivons les deux termes sources correspondant aux deux cellules $C_{i,j}$ et $C_{i,j+1}$ situées de part et d'autre de l'interface :

$$\Delta y^2 S_{j+1}^{\text{visc}} \cdot \mathbf{e}_x = \mu_{j+3/2} (u_{j+2} - u_{j+1}) - \mu_{j+1/2} (u_{j+1} - u_j) , \qquad (4.2)$$

$$\Delta y^2 S_j^{\text{visc}} \cdot \mathbf{e}_x = \mu_{j+1/2} (u_{j+1} - u_j) - \mu_{j-1/2} (u_j - u_{j-1})$$

où l'on a omis les indices *i* de colonne, tout étant invariant en *x*. Dire que le schéma respecte exactement l'écoulement envisagé revient à dire que ces deux termes sources doivent être nuls. Le profil de vitesse étant linéaire par morceau, on a :

$$u_j = \frac{1}{\mathcal{V}(C_{i,j})} \int_{C_{i,j}} u_{\text{exact}} d\mathcal{V} = u_{\text{exact}} \left(y_0 - \frac{\Delta y}{2} \right),$$

et de la même manière :

$$u_{j-1} = u_{\text{exact}} \left(y_0 - \frac{3\Delta y}{2} \right),$$
$$u_{j+1} = u_{\text{exact}} \left(y_0 + \frac{\Delta y}{2} \right),$$
$$u_{j+2} = u_{\text{exact}} \left(y_0 + \frac{3\Delta y}{2} \right),$$

ce qui donne, en remplaçant u_{exact} par sa valeur, les différences de vitesses :

$$u_{j+2} - u_{j+1} = \frac{\tau_0}{\mu_1} \Delta y ,$$
$$u_j - u_{j-1} = \frac{\tau_0}{\mu_2} \Delta y ,$$
$$u_{j+1} - u_j = \tau_0 \left(\frac{1}{\mu_{j+1}} + \frac{1}{\mu_j}\right) \frac{\Delta y}{2}$$

Nous avons tenu compte de ce que les cellules $C_{i,j+1}$ et $C_{i,j+2}$ sont toutes deux situées au dessus de l'interface et qu'ainsi $\mu_{j+2} = \mu_{j+1} (= \mu_1)$. On obtient de la même façon $\mu_{j-1} = \mu_j (= \mu_2)$. Cette remarque permet également d'écrire les deux viscosités au faces j + 3/2 et j - 1/2:

$$\mu_{j+3/2} = \bar{\mu}(\mu_{j+1}, \mu_{j+2}) = \mu_{j+1} = \mu_1 ,$$

$$\mu_{j-1/2} = \bar{\mu}(\mu_j, \mu_{j-1}) = \mu_j = \mu_2 .$$

Revenant au bilan discret (4.2), on obtient :

$$\mu_1 \frac{\tau_0}{\mu_1} \Delta y - \mu_{j+1/2} \tau_0 \frac{\Delta y}{2} \left(\frac{1}{\mu_j} + \frac{1}{\mu_{j+1}} \right) = 0 ,$$

$$\mu_{j+1/2} \tau_0 \frac{\Delta y}{2} \left(\frac{1}{\mu_j} + \frac{1}{\mu_{j+1}} \right) - \mu_2 \frac{\tau_0}{\mu_2} \Delta y = 0 ,$$

ce qui donne dans les deux cas la viscosité à la face :

$$\mu_{j+1/2} = \frac{2\mu_j \mu_{j+1}}{\mu_j + \mu_{j+1}}, \qquad (4.3)$$

c'est à dire la moyenne harmonique des viscosités dans les cellules adjacentes à la face considérée. On peut généraliser ce raisonnement au cas de maillages non réguliers. On retient donc le schéma numérique des flux visqueux suivant (par exemple sur $\mu \partial_x u$) :

$$\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1/2,j} = \frac{\mu_{i+1,j}\mu_{i,j}\left(\Delta x_{i+1} + \Delta x_i\right)}{\Delta x_{i+1}\mu_i + \Delta x_i\mu_{i+1}} \frac{2\left(u_{i+1,j} - u_{i,j}\right)}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i}\right].$$
(4.4)

Remarques :

- Nous montrons § 4.4.1 l'effet de cette viscosité moyenne à la face, en particulier l'importance que cela peut avoir dans le cas de l'écoulement de Poiseuille diphasique, comme suggéré dans [7].
- 2. Dans le cas d'un maillage régulier, il est intéressant de remarquer que le schéma (4.4) s'écrit également :

$$\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1/2} = \frac{\mu_{i+1}u_{i+1} - \mu_i u_i}{\Delta x} - \bar{U}\frac{\mu_{i+1} - \mu_i}{\Delta x} ,$$

en ommettant l'indice j et avec :

$$\bar{U} = \frac{\mu_i u_i + \mu_{i+1} u_{i+1}}{\mu_{i+1} + \mu_i} , \qquad (4.5)$$

c'est à dire une discrétisation de $\partial_x (\mu u) - u \partial_x \mu$. Ainsi, si nous avions choisi au départ de se donner comme degré de liberté sur le schéma la vitesse reconstruite à la face plutôt que la viscosité, puis de chercher quelle vitesse reconstruite donnait un schéma respectant les profils de vitesse de type Couette, nous aurions obtenu la vitesse ci-dessus et du même coup un schéma identique.

- 3. Dans le cas de l'écoulement de Couette, la vitesse \overline{U} vaut exactement u_0 . On peut même montrer que si l'on cherche la vitesse \overline{U} de la forme $\gamma_i u_i + \gamma_{i+1} u_{i+1}$, la seule solution conduisant à $\overline{U} = u_0$ est celle donnée par (4.5).
- 4. La viscosité reconstruite à la face dépend entièrement du choix fait pour discrétiser les gradients de vitesse. Pour s'en convaincre, sur le même exemple, supposons que l'on ait choisi de discrétiser les gradients de vitesse avec le schéma :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{j+1/2} = \frac{1}{2} \left(\frac{u_{j+2} - u_j}{2\Delta y} + \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta y}\right),\,$$

ce qui donne en remplaçant les vitesses par leur valeur :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{j+1/2} = \frac{\tau_0}{2} \left(\frac{1}{\mu_j} + \frac{1}{\mu_{j+1}}\right) \,.$$

On obtient alors pour le terme source dans la cellule $C_{i,j+1}$:

$$S_{j+1}^{\text{visc}} \cdot \mathbf{e}_x = \left(\mu_{j+3/2} - \mu_{j+1/2}\right) \frac{\tau_0}{2} \left(\frac{1}{\mu_j} + \frac{1}{\mu_{j+1}}\right),$$

qui n'est pas nul si $\mu_{j+1/2}$ et $\mu_{j+3/2}$ sont les moyennes harmoniques des viscosités dans les cellles voisines. Un moyen d'assurer que le terme source soit nul serait d'évaluer les viscosités de face au centre de la cellule pour laquelle on calcule le terme source, c'est à dire $\mu_{j+1/2} = \mu_{j+3/2} = \mu_{j+1}$ lorsqu'on calcule le terme source visqueux dans la cellule $C_{i,j+1}$. Le problème d'une telle formulation est qu'elle n'est pas conservative, dans le sens où le flux visqueux à la face j + 1/2 serait différent selon qu'il est évalué dans la cellule $C_{i,j}$ ou $C_{i,j+1}$.

4.2.2 Stabilité du schéma numérique

Les termes sources sont traités de manière explicite dans la méthode numérique. Il y a donc une condition de stabilité du schéma associée au terme source visqueux. La stabilité de cette discrétisation n'a pas été rigoureusement étudiée. Le principe général de notre méthode numérique repose en outre sur l'idée que, puisque les fluides sont supposés faiblement compressibles, la plus petite échelle de temps discrète doit être le pas de temps acoustique Δt_{ac} :

$$\Delta t_{\rm ac} \simeq \frac{\Delta x}{c}$$

puisque la méthode est complètement explicite. Pour que le calcul d'écoulements incompressibles sous l'hypothèse faite de fluides faiblement compressibles ait un sens, l'échelle de temps discrète associé à la viscosité, notée Δt_{visc} , doit être très supérieure au pas de temps acoustique : intuitivement, il faut donc que la vitesse du son soit suffisamment grande. Dès lors, le terme source visqueux sera stable et avec :

$$\Delta t_{
m visc} \sim \frac{\Delta x^2}{2 \nu}$$

nous retenons la condition de stabilité sous la forme :

$$\Delta x \gg \frac{v}{c} , \qquad (4.6)$$

où v est la viscosité cinématique.

Remarque :

La condition de stabilité obtenue peut également se retrouver en comparant une variation de pression due au terme source visqueux, à la compressibilité isotherme du milieu, comme expliqué § 1.4. Considérons donc une perturbation acoustique se propageant à la vitesse *c* sur une distance Δx . La variation de pression due aux forces visqueuses subit par cette perturbation est de l'ordre de :

$$\Delta P = \frac{\mu c}{\Delta x}$$

Écrire la condition (1.27) : $\chi_T \Delta P \ll 1$, revient exactement à la condition (4.6).

4.3 Traitement de la conduction thermique

4.3.1 Discrétisation et stabilité

Nous donnons ici le schéma de discrétisation adoptée pour le terme source de conduction thermique du second membre de l'équation bilan d'énergie (1.21) :

$$\mathcal{S}^{\text{cond}} = -\nabla \cdot q^T = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) ,$$

où λ est le coefficient de conduction thermique de mélange défini par la relation (1.23). Intégrant sur la cellule de calcul $C_{i,j}$ et appliquant le théorème de la divergence, on obtient le schéma de discrétisation suivant :

$$S_{i,j}^{\text{cond}} = \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{i+1/2,j} - \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{i-1/2,j} \right] + \frac{1}{\Delta y} \left[\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right)_{i,j+1/2} - \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right)_{i,j-1/2} \right].$$
(4.7)

De même que dans le cas de la viscosité nous choisissons comme évaluation des quantités aux faces, par exemple pour le terme $\lambda \partial_x T$, le schéma suivant :

$$\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right)_{i+1/2,j} = \lambda_{i+1/2,j} \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{\Delta x},$$

où le coefficient de conduction thermique reconstruit à la face $\lambda_{i+1/2,j}$, fonction des deux coefficients de conduction thermique dans les deux cellules adjacentes à la face $C_{i+1,j}$ et $C_{i,j}$, est tel que les profils de température linéaires par fluide soient exactement préservés. De la même manière que précédemment, nous obtenons :

$$\lambda_{i+1/2,j} = \frac{2\lambda_{i,j}\lambda_{i+1,j}}{\lambda_{i,j} + \lambda_{i+1,j}}, \qquad (4.8)$$

c'est à dire la moyenne harmonique des coefficients de conduction thermique dans les cellules adjacentes.

Le raisonnement se généralise au cas d'un maillage non régulier, et on retient le schéma (par exemple sur $\lambda \partial_x T$):

$$\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right)_{i+1/2,j} = \frac{\lambda_{i+1,j}\lambda_{i,j}\left(\Delta x_{i+1} + \Delta x_i\right)}{\Delta x_{i+1}\lambda_i + \Delta x_i\lambda_{i+1}} \frac{2\left(T_{i+1,j} - T_{i,j}\right)}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i}\right).$$
(4.9)

La stabilité de la méthode numérique est assurée sous une condition du même type que pour le terme source visqueux (4.6), mais la viscosité cinématique v est remplacée par la diffusivité thermique, notée κ^T :

$$\Delta x \gg \frac{\kappa^T}{c} , \qquad (4.10)$$
$$\kappa^T = \frac{\lambda}{\rho C_p} .$$

avec :

Remarques :

- Le fait que le schéma numérique de discrétisation de la conduction thermique respecte exactement les profils de température "linéaire par phase" revet un caractère particulier pour les applications visées de comportement des fluides dans les réservoirs de véhicules spatiaux. En effet, les phénomènes de stratification thermique interviennent dans de nombreux cas ayant trait à ces applications.
- 2. On peut également écrire le schéma de discrétisation du terme de conduction thermique sous la forme (par exemple sur $\lambda \partial_x T$, en omettant l'indice *j* et pour un maillage régulier) :

$$\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right)_{i+1/2} = \frac{\lambda_{i+1}T_{i+1} - \lambda_i T_i}{\Delta x} - \overline{T} \frac{\lambda_{i+1} - \lambda_i}{\Delta x},$$

avec la température évaluée à la face :

$$\bar{T} = \frac{\lambda_{i+1}T_{i+1} + \lambda_i T_i}{\lambda_{i+1} + \lambda_i} , \qquad (4.11)$$

température reconstruite à la face dont l'analogie avec la vitesse équivalente reconstruite à la face pour le schéma du terme source de viscosité (4.5) est évidente.

4.3.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites sur l'équation de bilan d'énergie que nous envisageons par la suite sont de deux types, les conditions de Dirichlet (température imposée à la paroi) et de Neumann (flux thermique imposé à la paroi). Numériquement, il faut donc imposer *sur la face* des cellules limites des quantités exprimées en fonction de la valeur de la seule cellule de calcul adjacente à cette paroi. Pour cela, nous avons recours à des cellules fictives. La question est donc de déterminer les valeurs qu'il faut donner aux variables dans ces cellules fictives, et en particulier ici, à la température.

Dans ce qui suit, nous écrivons les variables dans une cellule fictive avec un f en exposant, alors que les variables de la cellule de calcul correspondante seront écrites sans indice. Nous supposons en outre que la cellule fictive est de même dimension que la cellule de calcul lui correspondant (le maillage est "localement" régulier). Tout d'abord, nous supposons que le fluide fictif occupant la cellule fictive est "le même" que celui occupant la cellule de calcul correspondante, c'est à dire :

$$\alpha^f=\alpha\,,\quad \rho_1^f=\rho_1\,,\quad \rho_2^f=\rho_2\,,$$

et donc en particulier $\lambda^f = \lambda$. En vertu de (4.9) et (4.8), le flux calculé à la face frontière qui nous préoccupe, et entrant dans la cellule, s'écrit donc :

$$-q_{\rm paroi}^T = \lambda \frac{T - T^f}{\Delta n}$$
,

où Δn est donné par :

$$\Delta n = (\Delta x \mathbf{e}_x + \Delta y \mathbf{e}_y) \cdot \mathbf{n}_{\text{paroi}}$$
.

Si l'on veut imposer un flux thermique Φ_{imp}^T à travers cette paroi, il suffit donc de prendre comme température dans la cellule fictive :

$$T^f = T - \Delta n \Phi_{\text{imp}}^T$$
.

Si par contre, le but est d'imposer la température T_{imp} à la face, un moyen d'obtenir la température dans la cellule fictive est de supposer que le flux est "localement constant", c'est à dire qu'il s'écrit :

$$-q_{\text{paroi}}^{T} = \lambda \frac{T - T^{f}}{\Delta n} = \lambda \frac{2(T - T_{\text{imp}})}{\Delta n} ,$$

qui correspond au rapport de la variation de température entre le centre de la cellule de calcul et celui de la face, à la distance entre le centre de la cellule et celui de la paroi, $\Delta n/2$. On obtient donc la température dans la cellule fictive :

$$T^f = 2T_{\rm imp} - T$$
 . (4.12)

Remarques :

1. Une autre façon de voir les choses et de dire que la température de face "consistante" avec le schéma est celle donnée par (4.11). Avec $\lambda_f = \lambda$, cette température de face est simplement la demi-somme des températures dans les cellules adjacentes. Imposer cette température de face à T_{imp} :

$$\frac{T+T^f}{2}=T_{\rm imp}\;,$$

revient exactement à (4.12).

2. Lors de la validation de la discrétisation des effets visqueux § 4.4.1, il sera nécessaire d'imposer le vitesse tangentielle à la paroi mettant en mouvement les deux fluides, à la valeur, notée V_{imp} . De la même manière que pour imposer la température à la face frontière d'une cellule en contact avec la paroi, nous prenons la vitesse \mathbf{V}^f dans la cellule fictive adjacente :

$$\begin{cases} \mathbf{V}^{f} \cdot \mathbf{t}_{\text{paroi}} = 2V_{\text{imp}} \mathbf{t}_{\text{paroi}} - \mathbf{V} \cdot \mathbf{t}_{\text{paroi}} \\ \mathbf{V}^{f} \cdot \mathbf{n}_{\text{paroi}} = -V \cdot \mathbf{n}_{\text{paroi}} \end{cases},$$
(4.13)

puisque la vitesse normale à la paroi, imperméable, doit être nulle.

4.4 Validation des schémas

4.4.1 Viscosité

L'objectif de ce paragraphe est dans un premier temps, de vérifier que le schéma de discrétisation du terme source de viscosité donné par les schéma (4.1) et (4.4) est bien exact dans le cas d'un écoulement diphasique de Couette plan. Nous comparons les résultats obtenus par ce schéma à ceux obtenus pour un schéma de viscosité reconstruite à la face des cellules donné par :

$$\mu_{i+1/2,j} = \frac{1}{2} \left(\mu_{i+1} + \mu_i \right), \qquad (4.14)$$

c'est à dire la moyenne arithmétique des viscosités dans les cellules adjacentes. Dans un second temps, nous comparons à nouveau ces deux schémas de viscosité à la face dans le cas d'un écoulement diphasique de type Poiseuille plan, pour lequel le profil de vitesse est parabolique par morceau. Dans les deux cas, il s'agit d'écoulements parallèles pour lesquels le champ de vitesse est de la forme :

$$\mathbf{V} = u(y)\mathbf{e}_x$$
,

le champ de pression étant uniforme à la pression $p_0 = 10^5$ Pa. L'échelle de vitesse pour les deux écoulements est de l'ordre de $V \sim 1 \text{ m.s}^{-1}$. Cette échelle de vitesse est importante car elle conditionne le choix des vitesses du son des deux fluides. En effet, la pression étant constante, le critère à retenir est le nombre de Mach, qui doit rester inférieur à 0,3, limite classique de validité de l'approximation pour les écoulements incompressibles. Les vitesses du son dans les deux fluides devront donc vérifier :

$$c_i \geq 3 \text{ m.s}^{-1}$$
,

et ce indépendamment des autres propriétés (masse volumique, viscosité) des deux fluides. Ces propriétés sont rassemblées dans le TABLEAU 4.1.

Le domaine de calcul envisagé est un rectangle dont la dimension suivant l'axe des ordonnées est H (= 1 m). Les frontières limitant le domaine suivant l'axe des abcisses sont traitées comme des conditions aux limites périodiques, de sorte que le domaine est discrétisé sur 3 rangées de cellules suivant l'axe des x. En effet, les écoulements considérés étant parallèles, nous nous attendons à ce que le schéma numérique préserve cette propriété et, les conditions périodiques aidant, trois rangées de cellules suffisent.

Le maillage choisi pour ces cas test est régulier dans les deux directions, le pas d'espace étant $\Delta x = \Delta y = 5.10^{-2}$ m. La condition de stabilité pour le terme source visqueux, donnée par la relation

	Masse [kg.m ⁻³]	Viscosité [Pa.s]
Fluide 1	$\rho_{10} = 100$	$\mu_1 = 5.10^{-2}$
Fluide 2	$\rho_{20} = 1000$	$\mu_2 = 5$

TAB. 4.1 – Propriétés des fluides utilisés pour les deux cas tests de validation du terme source visqueux.

(4.6), impose donc aux vitesses du son des fluides 1 et 2 de vérifier :

$$\begin{cases} c_1 \gg \frac{\mu_1}{\rho_{10}\Delta x} = 10^{-2} \text{ m.s}^{-1} \\ c_2 \gg \frac{\mu_2}{\rho_{20}\Delta x} = 10^{-1} \text{ m.s}^{-1} \end{cases}$$

Compte tenu des contraintes obtenues sur les vitesses du son, nous choisissons donc pour les deux fluides :

$$c_i = 5 \text{ m.s}^{-1}$$

Pour les deux cas tests, l'interface est placé en $y = y_0 = \frac{H}{2}$ (= 0,5 m). Enfin, la viscosité $\mu(y)$ et la masse volumique de mélange $\rho(y)$ sont constantes de part et d'autre de l'interface, c'est à dire :

$$\mu(y) = \begin{cases} \mu_1 & \text{si } y \ge y_0 \\ \mu_2 & \text{si } y \le y_0 \end{cases},$$
(4.15)

et :

$$\rho(y) = \begin{cases} \rho_1 & \text{si } y \ge y_0 \\ \rho_2 & \text{si } y \le y_0 \end{cases}$$
(4.16)

4.4.1.1 Écoulement diphasique de type Couette plan

Pour ce premier cas de validation de la discrétisation des termes visqueux, le profil de vitesse u(y) est linéaire par morceau :

$$u_{\text{Couette}}(y) = u_0 + \frac{\tau_0}{\mu(y)}(y - y_0)$$

où la viscosité $\mu(y)$ est donnée par (4.15), où $\tau_0 (= 10^{-1} \text{ Pa})$ est le cisaillement à l'interface, et $u_0 (= 0, 5 \text{ m.s}^{-1})$ la vitesse à l'interface. Les frontières y = 0 et y = H sont des parois mobiles entrainant les deux fluides. Le cisaillement τ_0 étant fixé, nous en déduisons donc les vitesses des deux parois :

$$u(0) = u_{\min} = u_0 - \frac{\tau_0}{\mu_2} y_0 = 0.49 \text{ m.s}^{-1}$$

 $u(H) = u_{\max} = u_0 + \frac{\tau_0}{\mu_1} (H - y_0) = 1.5 \text{ m.s}^{-1}$

qui sont des conditions de Dirichlet sur la vitesse u, vitesse tangente à ces frontières. Les deux conditions aux limites correspondantes sont traitées par l'intermédiaire d'une cellule fictive dans laquelle la vitesse est donnée par (4.13), avec $V_{imp} = u_{min}$ en y = 0 et $V_{imp} = u_{max}$ en y = H. Rappelons que pour cette écoulement la pression est constante, ce qui signifie pour notre modèle que les masses volumiques sont constantes (et doivent le rester), égales à leur valeur de référence, $\rho_i = \rho_{i0}$: la masse volumique de mélange vérifie bien (4.16).

Après calcul pour les deux schémas de viscosité, il s'avère que la différence obtenue sur le champ de vitesse est faible. Par contre, on peut mesurer cette différence sur le débit à travers une section. Le débit moyen exact à travers une surface unité vaut :

$$Q = \int_0^H \rho(y)u(y)dy = (\rho_{20}y_0 + \rho_{10}(H - y_0))u_0 + \left(\frac{y_0^2}{v_2} + \frac{(H - y_0)^2}{v_1}\right)\frac{\tau_0}{2},$$

soit tous calculs faits, un débit de $Q = 297,5 \text{ kg.s}^{-1}$ à travers l'unité de surface. Nous représentons FIGURE 4.1 l'évolution au cours du temps de ce débit moyen. L'erreur relative finale commise par le calcul où la viscosité de face est donnée par le schéma (4.14), est de :

$$\frac{\Delta Q}{Q} = 0.4\%$$

L'erreur commise reste donc faible, mais nous allons voir au paragraphe suivant que cette erreur de débit peut devenir plus importante.



FIG. 4.1 – Écoulement diphasique de Couette plan, évolution du débit moyen au cours du temps.

4.4.1.2 Écoulement diphasique de type Poiseuille plan

Cet écoulement a été proposé comme cas test de validation de la discrétisation du terme source visqueux dans [7]. Pour cet écoulement parallèle stationnaire, le bilan de quantité de mouvement se réduit à sa projection sur l'axe \mathbf{e}_x :

$$\frac{\partial P}{\partial x} = 0 = \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu(y) \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \rho(y)g , \qquad (4.17)$$

où, comme précédemment, $\mu(y)$ et $\rho(y)$ sont repectivement donnés par (4.15) et(4.16), et où *g* désigne l'intensité de l'accélération de la gravité dirigé suivant \mathbf{e}_x . La gravité est ici ajoutée de manière à créer un gradient de pression équivalent, nécessaire à l'écoulement des deux fluides. Nous préférons en effet vérifier le comportement du terme source de viscosité dans un champ de pression uniforme, de manière à éviter tout couplage éventuel avec le solveur de Riemann.

Les parois, situées en y = 0 et y = H, sont cette fois-ci des parois fixes où la vitesse doit être nulle. Ces conditions aux limites permettent d'intégrer l'équation (4.17) et d'obtenir le profil de vitesse :

$$u_{\text{Poiseuille}}(y) = -\frac{\rho(y)}{\mu(y)}g\frac{(y-y_0)^2}{2} + \frac{\tau_0}{\mu(y)}(y-y_0) + u_0 ,$$

où τ_0 désigne le cisaillement à l'interface :

$$\tau_0 = \frac{gy_0}{2} \frac{\rho_{10}\mu_2 - \rho_{20}\mu_1}{\mu_1 + \mu_2}$$

et où u_0 est la vitesse à l'interface :

$$u_0 = \frac{\rho_{20}g}{\mu_2}\frac{y_0^2}{2} + \frac{\tau_0}{\mu_2}y_0 = \frac{\rho_{10}g}{\mu_1}\frac{y_0^2}{2} - \frac{\tau_0}{\mu_1}y_0 \,.$$

Avec $g = 10^{-2} \text{ m.s}^{-2}$, on obtient $\tau_0 \simeq 0,22$ Pa et $u_0 \simeq 0,27 \text{ m.s}^{-1}$. Il faut également vérifier que la vitesse reste bien de l'ordre de 1 m.s⁻¹ de façon à ce que le choix des vitesses du son reste correct. On peut calculer la vitesse maximale, atteinte dans le fluide $1 : u_{\text{max}} \simeq 0,77 \text{ m.s}^{-1}$ et nous gardons donc $c_i = 5 \text{ m.s}^{-1}$ pour les vitesses du son des deux fluides.

Les profils de vitesse obtenus avec les deux schémas de viscosité à la face sont présentés FIGURE 4.2 en haut. Nous avons également effectué un calcul sur un maillage 4 fois plus fin dans le cas de la viscosité de face donnée par (4.14). On peut constater que l'erreur sur le débit moyen, obtenue dans le cas de ce maillage fin, est toujours supérieure à celle obtenue sur le maillage grossier avec la moyenne harmonique (respectivement $\Delta Q/Q \sim 1,8\%$ et $\Delta Q/Q \sim 1\%$).

Au vue des profils de différence à la vitesse exacte, il est clair que l'erreur "se propage" depuis le premier point situé côté fluide 1 de l'interface. En effet, en ce point, il est visible que le schéma (4.14) conduit à une vitesse sous-évaluée. L'écoulement ayant lieu dans le fluide 1, entièrement déterminé par cette vitesse à l'interface et par la gravité (le gradient de pression moteur), s'adapte alors, aboutissant à une perte de débit.



FIG. 4.2 – Écoulement diphasique de Poiseuille plan. En haut : comparaison au profil exact des profils de vitesse obtenus avec les deux schémas de viscosité (4.3) (moyenne harmonique) et (4.14) (moyenne arithmétique). En bas : différence relative à la vitesse exacte et erreur sur le débit moyen.

4.4.2 Conduction thermique

Les deux cas tests qui suivent visent à valider la discrétisation du terme de conduction thermique. Nous ne comparerons pas ici les résultats obtenus par deux schémas de coefficient de conduction thermique reconstruit à la face : celui donné par la relation (4.8), et celui correspondant à la moyenne arithmétique des coefficients de conduction thermique comme nous venons de le faire pour la viscosité. Il s'agit ici de vérifier que le schéma (4.8) laisse invariant les profils de température linéaires par morceau du type :

$$T(y) = T_0 + \frac{q_0}{\lambda} (y - y_0) , \qquad (4.18)$$

où q_0 est le flux thermique à l'interface (située en $y = y_0$), T_0 la température à l'interface, et λ le coefficient de conduction thermique de mélange, constant par fluide (λ_k dans le fluide k). Il s'agit également de tester les deux types de conditions aux limites proposés plus haut, les conditions de type Dirichlet en situation stationnaire et celle de type Neumann en situation instationnaire.

Le domaine de calcul est le réservoir rectangulaire $[0,L] \times [0,H]$, avec L = H = 1 m, délimité en outre par quatre parois. Les deux parois x = 0 et x = L sont supposées adiabatiques, c'est à dire que nous y imposons un flux nul. La nature des deux autres parois est précisée plus loin, en fonction du cas considéré. L'interface est placée en $y_0 = 0.6$ m, le flux thermique à l'interface étant $q_0 = 0.1$ W.m⁻². Les propriétés des deux fluides utilisés pour ces deux cas test sont rassemblées dans le TABLEAU 4.2. Le domaine est discrétisé par un maillage régulier, les pas d'espace dans les deux directions vérifiant $\Delta x = \Delta y = 25$ mm pour le cas des conditions aux limites de type Dirichlet, et $\Delta x = \Delta y = 50$ mm dans l'autre cas. Il y a donc 40×40 cellules (respectivement 20×20).

	Masse [kg.m ⁻³]	Conduction [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	Capacité calorifique [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
Fluide 1	$ ho_{10} = 0, 5$	$\lambda_1 = 10^{-2}$	$C_{p1} = 2$
Fluide 2	$\rho_{20} = 50$	$\lambda_2=2.10^{-3}$	$C_{p2} = 10^{-2}$

TAB. 4.2 – Propriétés des fluides utilisés pour les deux cas tests de validation de la discrétisation de la conduction thermique.

Les vitesses du son sont fixées par la condition de stabilité du terme source de conduction thermique dans les deux fluides :

$$\frac{\mathbf{\kappa}_i^T}{\Delta x} \ll c_i \; ,$$

ce qui donne $c_1 \gg 0.4 \text{ m.s}^{-1}$ et $c_2 \gg 0, 16 \text{ m.s}^{-1}$. Nous choisissons $c_1 = c_2 = 15 \text{ m.s}^{-1}$.
Remarques :

- 1. Beaucoup d'autre cas de validation sont possibles. On peut par exemple envisager l'existence d'un terme source de chauffage volumique, constant par fluide, qui donnerait un profil de température parabolique par fluide. Un tel cas test, pour lequel le parallèle avec l'écoulement de Poiseuille diphasique étudié plus haut est évident, aurait fournit les mêmes conclusions que celles obtenues dans le cas de la viscosité quant à la comparaison des deux discrétisations des coefficients de conduction thermique reconstruits à la face (équivalents à celles étudiées dans le cas de la viscosité). On obtient également de nouveaux cas tests en se donnant des termes de chauffage volumique dépendant de la seule coordonnée *y*, une intégration donnant alors le profil de température.
- 2. Nous avons seulement envisagé jusqu'ici des situations où le champ de vitesse est nul. Cependant, la solution exacte de l'équation bilan d'énergie reste la même s'il existe un champ de vitesse stationnaire vérifiant :

$$\mathbf{V}\cdot\nabla T=0,$$

ce qui est le cas, par exemple, si $\mathbf{V} = u(y)\mathbf{e}_x$, c'est à dire si l'écoulement est parallèle. La vitesse *u*, transverse au gradient de température, est solution de l'équation bilan de quantité de mouvement, qui se réduit à :

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right) = 0 \; ,$$

puisque les termes provenant de $(\mathbf{V} \cdot \nabla)\mathbf{V}$ sont nuls. On obtient donc encore une nouvelle classe d'écoulements. Ceux-ci restent très particuliers, puisqu'il n'y a aucun couplage *convectif* entre équations d'énergie et de quantité de mouvement. Nous étudions § 4.4.3 le cas où il existe un couplage entre ces deux équations par l'intermédiaire d'un terme source de poussée d'Archimède due à la dilatation thermique des fluides en présence : on parle alors de *convection naturelle*, bien que ces termes convectifs soient toujours nuls.

4.4.2.1 Réservoir stratifié

Pour ce cas test, les conditions aux limites en y = 0 et y = H sont de type Dirichlet sur la température, soit d'après (4.18) :

$$\begin{cases} T(y=0) = T_0 - \frac{q_0}{\lambda_2} y_0 = 270 \text{ K} \\ T(y=H) = T_0 + \frac{q_0}{\lambda_1} (H - y_0) = 304 \text{ K} \end{cases}$$

Nous présentons FIGURE 4.3 le profil de température obtenu superposé au profil exact, ainsi que l'évolution au cours du calcul de la variation de l'enthalpie moyennée sur le domaine. On constate que la solution initiale n'est pas exactement la solution stationnaire obtenue.

4.4.2.2 Stratification par chauffage aux parois

Ici, les conditions aux limites sont de type Neumann pour les parois situées en y = 0 et y = H, c'est à dire que l'on y impose un flux. On sait que pour qu'il y ait une solution stationnaire à ce problème, il faut que les flux imposés en ces deux parois s'opposent, de façon à ce qu'il n'y ait aucune accumulation d'énergie dans le domaine. Une condition nécessaire pour que le profil stationnaire de température obtenu soit celui donné par la définition (4.18), est que ces flux aux parois valent $\pm q_0$. Mais ce n'est pas suffisant. En effet, s'agissant d'un problème de Neumann,

la solution stationnaire, puisqu'elle existe, dépend de la condition initiale. Cependant, l'intégrale de l'enthalpie $\rho C_p(T - T_0)$ sur la totalité du domaine est conservée au cours du temps. Égalant enthalpie finale et enthalpie initiale, on peut voir que la condition initiale suivante convient :

$$T_{i} = T_{0} + \frac{q_{0}}{2\overline{\rho}C_{p}} \left[\frac{(H - y_{0})^{2}}{\kappa_{1}^{T}} - \frac{y_{0}^{2}}{\kappa_{2}^{T}} \right],$$

où $\overline{\rho C_p} = y_0 \rho_2 C_{p_2} + (H - y_0) \rho_1 C_{p_1}$. Il faut de plus imposer les conditions aux limites :

$$\begin{cases} -q^{T}(y=0) = \lambda_{2} \frac{\partial u}{\partial y}(y=0)(-\mathbf{e}_{y}) = -q_{0} \\ -q^{T}(y=H) = \lambda_{1} \frac{\partial u}{\partial y}(y=H)(+\mathbf{e}_{y}) = q_{0} \end{cases},$$

ce qui correspond bien au fait que, partant de $T = T_i$, il faille refroidir la paroi en contact avec le fluide 2 dans lequel la température est inférieure à T_i à l'état stationnaire, et chauffer la paroi en contact avec le fluide 1 dans lequel la température est supérieure à T_i à l'état stationnaire.

Nous présentons FIGURE 4.4 le profil de température obtenue après un temps de calcul de $t_f = 300$ s. Nous y avons également représenté quelques profils de température à des instants intermédiaires. Nous vérifions de plus que l'enthalpie est bien conservée au cours de la mise en température du réservoir.



FIG. 4.3 – Réservoir stratifié : en haut : profil de température ; en bas : évolution de la variation de l'enthalpie moyenne au cours du temps.



FIG. 4.4 – Stratification d'un réservoir par chauffage aux parois : en haut : profils de température à différents instants, profil de température final et exact ; en bas évolution de la variation d'enthalpie moyenne au cours du temps.

4.4.3 Phénomènes de convection naturelle

Il s'agit ici de valider les effets de convection naturelle associés aux phénomènes de dilatation thermique des deux fluides et modélisés par le terme source :

$$-\rho\beta g(T-T_0) ,$$

ajouté au second membre de l'équation bilan de quantité de mouvement (1.5). Nous commençons par un cas test de validation simple, celui de l'écoulement parallèle de deux fluides soumis à un gradient transverse de température. Dans un deuxième temps, nous nous plaçons dans la situation (monophasique) de l'instabilité de Rayleigh-Bénard qui est un cas test répandu de validation de la convection naturelle.

Ces deux cas test ont en outre l'intérêt de bien illustrer les phénomènes de convection naturelle et d'aider à la compréhension de leurs deux mécanismes fondamentaux : la création de quantité de mouvement dûe à l'existence d'une composante du gradient de température normale à la gravité, et l'existence d'un seuil de gradient de température de même direction (mais de sens opposé) que la gravité, au-delà duquel toute pertubation du champ de vitesse ou de température est exponentiellement amplifiée (dans les limites habituelles de la théorie linéaire).

4.4.3.1 Création de quantité de mouvement par un gradient de température normal à la gravité

Ce cas test vise à vérifier que deux fluides soumis à un gradient de température $\nabla T = \partial_y T \mathbf{e}_y$ ne peuvent pas être en équilibre s'il existe une accélération de la gravité \mathbf{g} ayant une composante non nulle dans la direction normale à ce gradient de température. Afin de valider uniquement la partie "couplage faible" des équations de bilan de quantité de mouvement et d'enthalpie (*via* le terme source de dilatation thermique) nous voulons que les termes de convection associés au transport de la température par l'écoulement soient nuls : ceci impose que \mathbf{g} soit suivant \mathbf{e}_x et il s'agit bien de l'écoulement parallèle de deux fluides soumis à un gradient transverse de température. Il est alors possible d'obtenir une solution stationnaire, extension au cas de deux fluides de celle, classique, obtenue en monophasique, voir [57] par exemple.

Deux fluides sont placés entre deux plaques parallèles d'extension infinie suivant l'axe des x. Notons H la distance qui sépare les deux plaques. L'interface entre les deux fluides est située en $y_0 = H/2$. Les champs des quantités de mélange $\phi = \rho$, μ , λ et β sont donc du type :

$$\phi = \begin{cases} \phi_1 & \text{si } y \geqslant y_0 \\ \phi_2 & \text{sinon} \end{cases}$$

,

qui sont ainsi des quantités connues une fois les différentes propriétés des deux fluides fixées.

La plaque confondue avec le plan y = 0 est maintenue à la température T_2 , inférieure à la température T_1 à laquelle est maintenue la plaque placée en y = H. À l'état stationnaire, les champs de vitesse et de température, en plus de vérifier les conditions aux limites imposées par les deux plaques, doivent être solution du système d'équations suivant :

$$\begin{cases} 0 = \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \rho \beta g(T - T_0) \\ 0 = \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) \end{cases}$$

La deuxième équation donne le profil de température, linéaire par fluide :

$$T = T_0 + \frac{q_0}{\lambda(y)} \left(y - y_0 \right) \,,$$

et après intégration de la première on obtient alors le champ de vitesse, cubique par fluide, que nous prenons sous la forme :

$$u = u_0 + \frac{\tau_0}{\mu(y)} (y - y_0) + \frac{q_0}{6E(y)} (y - y_0)^3 ,$$

où E(y) est la quantité, constante par fluide et homogène à une énergie, définie par la relation :

$$E=\frac{\lambda\mu}{\rho\beta g}\,.$$

Supposant T_0 , T_1 , T_2 et g (donc E_1 et E_2) connues, nous obtenons avec les conditions aux limites les relations de compatibilité suivantes :

$$\begin{cases} q_0 = \frac{2\lambda_1\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} \frac{T_1 - T_2}{y_0} \\ \tau_0 = -\frac{q_0y_0^2}{6} \frac{\mu_1\mu_2(E_1 + E_2)}{E_1E_2(\mu_1 + \mu_2)} \\ u_0 = y_0 \left(\frac{\tau_0}{\mu_2} + \frac{q_0y_0^2}{6E_2}\right) \end{cases}$$

,

ce qui permet de calculer complètement la solution. Les propriétés des deux fluides choisies pour la simulation numérique ainsi que les valeurs des autres constantes sont rassemblées dans le TABLEAU 4.3.

Le domaine de calcul (d'extension finie en *x*) est le rectangle $[0,L] \times [0,H]$. Les conditions aux limites en x = 0 et x = H sont périodiques. Le maillage se compose de 3×20 cellules, soit pour H = 1 m et $L = 3\Delta x$ des pas d'espace tels que $\Delta x = \Delta y = 0, 1$ m. Rassemblant les différentes conditions sur les vitesses du son dans les deux fluides, nous choisissons :

$$c_i = 5 \text{ m.s}^{-1}$$
,

assurant ainsi à la fois, rappelons le, la stabilité numérique des différents termes sources intervenant dans ce calcul et la cohérence du calcul vis-à-vis des effets de compressibilité issus de la modélisation effectuée.

À l'instant initial nous supposons que le profil de température est établi et que les deux fluides sont au repos. Avec cette condition initiale, la moyenne sur le domaine de calcul de la densité volumique d'enthalpie doit être constante. Les profils de vitesse et de température finaux obtenus sont présentés FIGURE 4.5. Nous obtenons bien la solution attendue. On peut estimer le temps au bout duquel la solution stationnaire est atteinte, grâce à la courbe d'évolution de la moyenne de la densité volumique d'énergie cinétique au cours du temps, représentée sur la FIGURE 4.6. Ce temps est de l'ordre de grandeur des échelles de temps associé à la diffusion de quantité de mouvement dans les deux fluides ($t_1^{visc} = 2500$ s et $t_2^{visc} = 5000$ s). Nous avons également représenté les évolutions au cours du temps des valeurs moyennes de la vitesse sur tout le domaine, dans le gaz et dans le

	Masse [kg.m ⁻³]	Viscosité [Pa.s]		Dilatation thermique [K ⁻¹]	Vitesse $[m.s^{-1}]$	Température [K]
Fluide 1	$\rho_{10} = 10^2$	$\mu_1 = 10^{-2}$	$\lambda_1 = 5.10^{-2}$ $C_{p1} = 5.10^{-2}$	$\beta_1 = 5.10^{-4}$	$u_{\min} \simeq -1,66$	$T_1 = 302, 5$
Fluide 2	$\rho_{20} = 10^3$	$\mu_2 = 5.10^{-2}$	$\lambda_2 = 5$ $C_{p2} = 5.10^{-1}$	$\beta_2 = 10^{-2}$	$u_{\rm max} \simeq 1,23$	$T_2 = 299,975$
Interface	_	$ au_0\simeq -0, 12$ Pa	$q_0 = 0,25$ w.m ⁻²	$g = 10_{m.s^{-2}}$	$u_0 \simeq 0,87$	$T_0 = 300$

TAB. 4.3 – Propriétés	des deux fluides e	t valeurs des c	constantes utilise	ées pour le cas te	est de convec-
tion naturelle.					

liquide. Ces courbes montrent les différences d'évolution de la vitesse dans les deux fluides, dues à la différence des ordres de grandeur des phénomènes physiques y entrant en jeu.

Remarque :

Le quotient de l'échelle de grandeur de variation de l'enthalpie dans le fluide $i : y_0^3 \rho C_p |T_i - T_0|$ à l'énergie E_i (apparaissant dans la définition du profil de vitesse) est exactement le nombre de Rayleigh associé à la couche de fluide i:

$$Ra_i = \frac{g\beta_i |T_i - T_O| y_0^3}{\nu_i \kappa_i^T} ,$$

qui joue un rôle important dans l'étude de l'instabilité de Rayleigh-Bénard. Avec les valeurs choisies, les nombres de Rayleigh pour les deux couches de fluides sont $Ra_1 = 1562, 5$ et $Ra_2 = 625$. Ces deux nombres sont bien inférieurs à la valeur seuil $Ra_c \simeq 1708$, ce qui assure qu'aucune des perturbations de vitesse v ne seront amplifiées. En particulier, si toutefois des erreurs numériques apparaissaient dans le schéma de discrétisation des termes convectifs (schéma de Godunov), ces erreurs ne seraient pas amplifiées.



FIG. 4.5 – Mise en vitesse de deux fluides du fait de l'existence d'un gradient de température transverse à la direction de la gravité : en haut : profil de vitesse (•) calculé, (–) exact ; en bas : profil de température (•) calculé, (–) exact.



FIG. 4.6 – Mise en vitesse de deux fluides du fait de l'existence d'un gradient de température transverse à la direction de la gravité : en haut : évolution de l'énergie cinétique en fonction du temps ; en bas : évolution au cours du temps de la vitesse moyennée (-) sur tout le domaine, ($-\cdot$ -) dans le fluide 1, (--) dans le fluide 2.

4.4.3.2 Instabilité de Rayleigh-Bénard

Le but de ce paragraphe est d'exposer des résultats numériques relatifs au problème de l'instabilité de Rayleigh-Bénard qui est un cas test classique pour la validation du phénomène de convection thermique. Ce cas test est également l'occasion de vérifier qu'il est possible d'utiliser le modèle dans une situation monophasique. Pour cela, nous effectuons les calculs avec deux fluides ayant exactement les mêmes propriétés. Nous nous proposons de vérifier que la méthode développée permet de retrouver le nombre de Rayleigh critique, seuil de l'instabilité. Nous nous plaçons dans le domaine rectangle $[0, \pi] \times [0, \pi/2]$, discrétisé par un maillage 40×20 celulles. Les conditions aux limites y = 0 et $y = \pi$ sont des parois isothermes (respectivement $T = T_0 \pm \Delta T/2$) non glissantes. Nous fixons $\Delta T = 1$ K et nous faisons varier l'accélération de la gravité pour faire varier le nombre de Rayleigh. Les propriétés physiques du fluide utilisé pour le calcul sont rassemblées dans le TABLEAU 4.4. Le nombre de Rayleigh est donc :

$$Ra = g \frac{\beta \Delta T H^3}{\nu \kappa}$$

ce qui donne avec les valeurs choisies :

$$Ra \simeq 43,06g$$

Le nombre de Rayleigh critique étant généralement pris égal à Ra $_c^{exp} \simeq 1708$, on obtient ainsi $g_c \simeq 39,66 \text{ m.s}^{-2}$. Les conditions initiales sont les suivantes :

$$\mathbf{V} = (u_0 \sin 2x \cos y) \, \mathbf{e}_x - (u_0 \cos 2x \sin y) \, \mathbf{e}_y \,,$$

pour la vitesse, et :

$$T = T_0 + \Delta T \left(1 - \frac{2y}{\pi} + \theta_0 \cos 2x \right) \,,$$

pour la température et avec $u_0 = 10^{-3} \text{ m.s}^{-1}$ et $\theta_0 = 2,5\%$.

Masse [kg.m ⁻³]	Viscosité [Pa.s]	Conduction $\left[W.m^{-1}.K^{-1} \right]$	Dilatation $\begin{bmatrix} K^{-1} \end{bmatrix}$
ρ = 1	$\mu = 3.10^{-2}$	$\lambda = 3.10^{-2}$	$\beta = 10^{-2}$

TAB. 4.4 – Propriétés du fluide pour le cas test de l'instabilité de Rayleigh-Bénard. La capacité calorifique à pression constante est telle que le nombre de Prandtl Pr = 1.

Nous commençons par effectuer deux calculs corespondant à des nombres de Rayleigh respectifs de $Ra \simeq 990$ ($g = 23 \text{ m.s}^{-2}$), et $Ra \simeq 3000$ ($g = 69.7 \text{ m.s}^{-2}$). Nous nous attendons à obtenir deux états stationnaires correspondant respectivement à une situation stable et instable. Les champs de température finaux ainsi que l'évolution de la moyenne sur le domaine de la norme du rotationnel sont représentés FIGURE 4.7 et FIGURE 4.8 : les résultats sont bien ceux attendus, en particulier on obtient bien la décroissance de la norme du rotationnel dans le cas stable.

Nous avons ensuite effectué des calculs autour du nombre de Rayleigh critique supposé et nous retenons deux calculs correspondant à des gravités de $g = 39,764 \text{ m.s}^{-2}$ et $g = 39,765 \text{ m.s}^{-2}$, dont le premier aboutit à une décroissance de l'énergie cinétique, FIGURE 4.9 en haut, et l'autre à une croissance de l'énergie cinétique FIGURE 4.9 en bas. Nous en déduisons l'estimation du nombre de Rayleigh critique :

$$Ra_c\simeq 1712$$
,

ce qui donne une erreur de l'ordre de 0,25% par rapport à la valeur expérimentale classique Ra $_c^{exp} \simeq 1708$. La suite à donner à ce problème serait d'abord d'effectuer le même type de recherche de nombre de Rayleigh critique sur un maillage plus fin, puis d'étudier le même problème en situation diphasique, en tenant compte des effets Marangoni. Cette situation présente une grande diversité de comportements [121, 70] et en faire une étude approfondie permettrait de valider complètement la méthode développée quant aux différents phénomènes de convection.



Température

FIG. 4.7 – Instabilité de Rayleigh-Bénard, cas stable ($Ra \sim 10^3$) : en haut : champ de température final, isothermes espacées de 0,1°, (--) : T < 300, (-) : T > 300; en bas : évolution de la moyenne sur le domaine de la norme du rotationnel.



Température

FIG. 4.8 – Instabilité de Rayleigh-Bénard, cas instable ($Ra \sim 3.10^3$) : en haut : champ de température final, isothermes espacées de 0,1°, (--) : T < 300, (-) : T > 300; en bas : évolution de la moyenne sur le domaine de la norme du rotationnel.



FIG. 4.9 – Instabilité de Rayleigh-Bénard, évolution de la moyenne de l'énergie cinétique sur le domaine au cours du temps : en haut : $g = 39.764 \text{ m.s}^{-2}$; en bas : $g = 39.765 \text{ m.s}^{-2}$.

Chapitre 5

Schéma numérique pour les termes capillaires

5.1 Introduction

L'objet de ce chapitre est de présenter, à nouveau en suivant une démarche constructive, la discrétisation retenue des effets capillaires. Du fait de la forme conservative adoptée pour rendre compte de ces effets, il s'agit de discrétiser un terme de la forme $\tau_{face}^C = \tau^C \cdot \mathbf{n}_{face}$ sur chaque facette et représentant la contrainte capillaire locale. Sachant que d'un point de vue physique, les forces de tension superficielles sont tangentielles à l'interface, nous avons choisi de discrétiser les différents termes intervenants dans l'expression de τ_{face}^C de sorte que, sur chaque face du maillage, τ_{face}^C soit un vecteur orthogonal au gradient local de fraction volumique, qui par définition est aligné avec la direction normale à l'interface. Dans le cas où la dépendance de la tension de surface par rapport à la température est prise en compte, une discontinuité des contraintes visqueuses peut apparaître à l'interface. Ceci nous a amené à introduire une correction dans le schéma présenté au chapitre précédent pour la discrétisation du flux de diffusion de quantité de mouvement. Pour fixer cette modification, nous imposons que le schéma numérique global (effets capillaires et diffusion) résolve de manière exacte un écoulement de Couette plan diphasique, en présence d'un gradient de température parallèle à l'interface, supposée alignée avec le maillage. Nous terminons ce chapitre par des études numériques de validation permettant de juger de la pertinence des schémas retenus.

5.2 Traitement du tenseur des forces superficielles

5.2.1 Choix du schéma de discrétisation dans le cas isotherme

Il s'agit ici de donner la discrétisation retenue pour prendre en compte le terme source de tension de surface $S^{ts} = \nabla \cdot \tau^C$ au second membre de l'équation de bilan de quantité de mouvement (1.5). Dans un premier temps, nous nous plaçons en situation isotherme. Afin d'alléger les notations, nous notons dans ce chapitre α (au lieu de α_*) la fraction volumique d'équilibre.

On intègre la relation (1.15) sur la cellule de calcul $C_{i,j}$ pour obtenir le schéma de discrétisation du terme source capillaire :

$$S_{i,j}^{\text{ts}} = \frac{1}{\Delta x} \left(\tau_{i+1/2,j}^{C} - \tau_{i-1/2,j}^{C} \right) \cdot \mathbf{e}_{x} + \frac{1}{\Delta y} \left(\tau_{i,j+1/2}^{C} - \tau_{i,j-1/2}^{C} \right) \cdot \mathbf{e}_{y} ,$$

où $\tau_{i\pm 1/2, j\pm 1/2}^C$ sont les tenseurs des contraintes superficielles évalués au centre des faces correspondantes. Plus précisément, on choisit de discrétiser ces différents termes par le schéma (par

exemple pour $\tau_{i+1/2, i}^C$):

$$\frac{1}{\sigma} \tau_{i+1/2,j}^C \cdot \mathbf{e}_x = \|\nabla \alpha\|_{i+1/2,j} \mathbf{e}_x - \eta_{i+1/2,j} \nabla \alpha_{i+1/2,j} , \qquad (5.1)$$

où $\eta_{i+1/2,j}$ est une discrétisation de $\mathbf{n}_I \cdot \mathbf{e}_x$, que nous nous donnons comme degré de liberté. De la même manière, nous ne nous donnons pas pour l'instant la façon de calculer le terme $\|\nabla \alpha\|_{i+1/2,j}$, c'est à dire la façon de calculer la norme d'un vecteur au centre d'une face.

D'après l'équation (1.18) et en tout point, le vecteur $\tau^C \cdot \mathbf{e}_x$ doit être tangent à l'interface. Nous choisissons donc d'imposer que cette condition soit respectée au niveau discret, c'est à dire :

$$\left(\boldsymbol{\tau}_{i+1/2,j}^{C} \cdot \mathbf{e}_{x} \right) \cdot \nabla \boldsymbol{\alpha}_{i+1/2,j} = 0 ,$$

ce qui donne la relation :

$$\|\nabla\boldsymbol{\alpha}\|_{i+1/2,j} (\nabla\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{e}_x)_{i+1/2,j} - \eta_{i+1/2,j} (\nabla\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla\boldsymbol{\alpha})_{i+1/2,j} = 0.$$
(5.2)

Cette relation donne $\eta_{i+1/2,j}$ en fonction de la discrétisation choisie pour $\nabla \alpha$ au centre de la face (i + 1/2, j), mais aussi en fonction du choix fait pour calculer un produit scalaire ainsi que la norme d'un vecteur au centre d'une face. Dans [67], les auteurs montrent que ces choix de discrétisation ne sont pas anodins et peuvent conduire à l'élimination des courants parasites s'ils sont faits suivant certaines règles (dont celle de la consistance bien sûr). Nous n'avons pas pu adapter la méthodologie proposée à notre modélisation, bien que nous soyons convaincu que celle-ci puisse effectivement s'y appliquer. Nous nous contentons donc de faire les choix les plus simples, la contre-partie étant d'ailleurs la présence de courants parasites dans le cas de validation concernant l'équilibre d'une bulle, voir § 5.3.1.

Ainsi, pour deux vecteurs quelconques $\mathbf{A} = A^x \mathbf{e}_x + A^y \mathbf{e}_y$ et $\mathbf{B} = B^x \mathbf{e}_x + B^y \mathbf{e}_y$, nous *choisissons* comme *définitions* du "produit scalaire discret" et de "la norme discrète" les schémas suivants :

$$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})_{i+1/2,j} = A_{i+1/2,j}^{x} B_{i+1/2,j}^{x} + A_{i+1/2,j}^{y} B_{i+1/2,j}^{y},$$
$$\|\mathbf{A}\|_{i+1/2,j} = \sqrt{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{A})_{i+1/2,j}}.$$

Ces choix ainsi faits, la condition (5.2) que nous voulons imposer à notre schéma devient :

$$\eta_{i+1/2,j} = \frac{(\partial_x \alpha)_{i+1/2,j}}{\|\nabla \alpha\|_{i+1/2,j}},$$
(5.3)

avec :

$$\|\nabla \alpha\|_{i+1/2,j} = \sqrt{\left(\frac{\partial \alpha}{\partial x}\right)^2_{i+1/2,j} + \left(\frac{\partial \alpha}{\partial y}\right)^2_{i+1/2,j}},$$
(5.4)

seule la discrétisation des gradients au centre des faces devant être précisée. Nous pouvons constater que la discrétisation obtenue pour $\eta = \mathbf{n}_I \cdot \mathbf{e}_x$ est la plus naturelle sachant qu'au niveau continu, nous approchons la normale à l'interface \mathbf{n}_I par $\frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|}$.

Pour choisir les discrétisations des gradients au centre des faces, nous nous plaçons dans la situation d'une interface plane alignée avec une ligne de maillage. Nous voulons que notre schéma numérique respecte exactement cette situation, même dans le cas d'un maillage non régulier. La discrétisation retenue des gradients de la fraction volumique au centre des faces est (par exemple pour $\nabla \alpha_{i+1/2,j}$) :

$$\left(\frac{\partial \alpha}{\partial x}\right)_{i+1/2,j} = \frac{2\left(\alpha_{i+1,j} - \alpha_{i,j}\right)}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i}$$
(5.5a)

$$\left(\frac{\partial \alpha}{\partial y}\right)_{i+1/2,j} = \frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial y}\right)_{i,j} + \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial y}\right)_{i+1,j}$$
(5.5b)

avec :

$$\left(\frac{\partial \alpha}{\partial y}\right)_{i,j} = \frac{2\left(\alpha_{i,j+1} - \alpha_{i,j-1}\right)}{\Delta y_{j+1} + 2\Delta y_j + \Delta y_{j-1}} \,.$$
(5.6)

5.2.2 Condition aux limites et angle de contact

Dans le cas d'une face située au bord du domaine, on peut imposer l'angle de contact statique θ_s , avec :

$$\eta_{\text{face paroi}} = \frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|} \cdot \mathbf{n}_{\text{face paroi}} = -\cos \theta_s ,$$

où $\mathbf{n}_{\text{face paroi}}$ est la normale *sortante* au domaine en la face paroi considérée. Du point de vue du schéma numérique, cela signifie que seuls les $\eta_{i\pm 1/2, i\pm 1/2}$ sont imposés à la paroi.

La prise en compte d'une éventuelle loi d'angle de contact dynamique θ_d est réalisée en remplaçant θ_s par θ_d donné par l'un des modèles d'angle dynamique présentés § 1.2.3. Ces modèles font intervenir la vitesse de déplacement de la ligne triple V_{lt} par l'intermédiaire du nombre Capillaire. Dans l'établissement de la loi de Tanner, la vitesse de la ligne triple est exactement :

$$V_{\rm lt} = \frac{1}{e(x)} \int_0^{e(x)} u(z) dz \,,$$

où e(x) est l'épaisseur de la couche de liquide et u la composante de la vitesse parallèle à la paroi. Pour une mise en oeuvre numérique de ces modèles d'angle dynamique, il y a donc deux possibilités :

- ou bien on calcule effectivement une vitesse moyenne sur plusieurs cellules dans la direction normale à la paroi, auquel cas il faut être capable de déterminer l'échelle de longueur associée à cette moyenne;
- ou bien ces modèles sont vus comme des *lois de paroi*, auquel cas on peut prendre :

$$V_{\rm lt} = V$$
,

où V désigne la vitesse au centre de la cellule immédiatement en contact avec la facette limite. Cette vitesse est aussi une vitesse moyenne. Par contre, dans ce cas, il faut être capable de déterminer la plage de taille de maille pour laquelle la modélisation est justifiée.

Pour une question de simplicité de mise en oeuvre, nous optons pour la deuxième solution mais réservons à la suite donnée à notre étude l'analyse qui permettra la détermination des paramètres numériques (pas d'espace) en fonction des paramètres physiques (paramètre ℓ de la loi de Tanner, etc..).

5.2.3 Modification des schémas numériques lorsque la tension superficielle dépend de la température

5.2.3.1 Position du problème

Il est difficile de trouver dans la littérature des méthodes numériques de simulation directe où les effets Marangoni sont pris en compte à la fois dans le gaz et dans le liquide [118]. Généralement, s'agissant d'écoulements liquide-gaz, seules les équations pour la phase liquide sont résolues, une condition aux limites d'interface permettant alors de prendre en compte la contrainte tangentielle due à la dépendance du coefficient de tension de surface avec la température [21, 26]. La prise en compte de tels effets dans une méthode de simulation directe représente donc un enjeu d'autant plus intéressant qu'il permettra dans la suite éventuelle donnée à cette étude d'étudier les phénomènes d'instabilité de type Rayleigh-Bénard et Bénard-Marangoni dans le cas de deux couches de fluide de masse volumique, viscosité et coefficient de conduction thermique différents. Ces phénomènes font d'ailleurs l'objet de nombreuses études théoriques récentes [70, 76, 80, 84, 85, 121] et pourraient être d'un intéret particulier quant à l'étude du comportement des fluides contenus dans les réservoirs de véhicules spatiaux [54, 107]. Pour une revue détaillée, le lecteur intéressé peut consulter Andereck *et al* [3] et Juel *et al* [70].

Nous avons vu § 1.3.3 que, du point de vue de la modélisation effectuée, l'introduction des effets Marangoni est réalisé en incluant le coefficient de tension de surface sous la divergence, donnant une formulation totalement conservative du terme source de tension superficielle. Ainsi, dans le cas où le coefficient de tension de surface dépend de la température, par exemple selon la relation (1.25), le schéma numérique donnant le tenseur des contraintes superficielles évalué au centre d'une face, relation (5.1), devient (ici sur la face (i + 1/2, j)) :

$$\tau_{i+1/2,j}^{C} \cdot \mathbf{e}_{x} = \sigma_{i+1/2,j} \| \nabla \alpha \|_{i+1/2,j} \mathbf{e}_{x} - \sigma_{i+1/2,j} \eta_{i+1/2,j} \nabla \alpha_{i+1/2,j} , \qquad (5.7)$$

où $\sigma_{i+1/2,j}$ est une valeur moyenne du coefficient de tension de surface évaluée au centre de la face, que nous choisissons de la forme, conformément à (1.25) :

$$\sigma_{i+1/2,j} = \sigma_0 + \sigma_T (T_{i+1/2,j} - T_0)$$
,

où la température de face $T_{i+1/2,j}$ est la température reconstruite à la face consistante avec le schéma de discrétisation du flux de conduction thermique à la face :

$$T_{i+1/2,j} = \frac{\lambda_{i+1}T_{i+1} + \lambda_i T_i}{\lambda_{i+1} + \lambda_i}$$

Nous avons également vu § 1.2 que les effets Marangoni étaient étroitement liés à la viscosité. D'autre part, le saut de cisaillement à l'interface, modifié en présence d'un gradient surfacique de température, crée un champ de vitesse. Ce champ de vitesse, suffisamment proche de l'interface, est linéaire dans chaque fluide. Nous allons donc chercher des conditions pour que, dans cette situation, la somme des schémas de discrétisation des termes sources de tension de surface et de viscosité soit exactement nulle.

On se place donc dans la situation d'un écoulement de Couette plan pour lequel le champ de vitesse est donné par :

$$\mathbf{V} = u(y)\mathbf{e}_x = u_0\mathbf{e}_x + \frac{\tau}{\mu}(y - y_0)\mathbf{e}_x , \qquad (5.8)$$

où y_0 est la coordonnée de l'interface, horizontale et exactement située sur une ligne de maillage, μ est le champ de viscosité de mélange donné par (4.15) et τ le champ de cisaillement "de mélange" suivant, dépendant de y:

$$\tau(y) = \begin{cases} \tau_1 & \text{si } y \ge y_0 \\ \tau_2 & \text{sinon} \end{cases},$$

avec τ_1 et τ_2 qui vérifient :

$$\tau_2 - \tau_1 = \sigma_T \frac{\Delta T}{L} , \qquad (5.9)$$

où *L* désigne la longueur suivant l'axe des abcisses sur laquelle la température varie de ΔT . Le champ de température est donc du type :

$$T(x) = T_0 + \frac{\Delta T}{L}x.$$
(5.10)

L'écoulement ainsi défini est une solution stationnaire d'équilibre du système d'équations que nous cherchons à résoudre, pour peu que nous supposions que les échelles de temps convectives dans les deux fluides soient longues devant les échelles de temps de diffusion thermique (C_{pi} infinies). L'introduction de la dépendance de σ avec la température change simplement le bilan discret associé à la discrétisation du terme de tension superficielle, projeté sur l'axe des abcisses. Ce bilan discret doit se compenser avec le bilan associé aux forces de viscosité.

Remarques :

1. Afin d'assurer l'absence de convection, nous pourrions également supposer la présence d'un terme source de chauffage volumique non homogène égal à :

$$\rho C_p \left(u_0 + \frac{\tau(y)}{\mu(y)} (y - y_0) \right) \frac{\Delta T}{L}$$

L'hypothèse de la présence d'un tel terme source, en comparaison de l'hypothèse de capacités calorifiques à pression constante infinies dans les deux fluides, change seulement l'évolution en temps de la vitesse et de la température si l'on choisit comme condition initiale au problème u = 0, $T = T_0$.

2. Pour connaître complètement l'écoulement de Couette-Marangoni défini ci-dessus, il suffit de se donner une condition au limite sur la vitesse u(y) sur une ligne y = cte (autre que y_0), par exemple en y = 0.

5.2.3.2 Conditions d'invariance de l'écoulement de Couette-Marangoni

Comme nous l'avons fait § 4.2.1, nous nous plaçons dans la cellule $C_{i,j}$, immédiatement située en dessous de l'interface confondue avec la face (i, j + 1/2). Le terme source de tension de surface, calculé dans cette cellule avec (5.7), n'a qu'une composante suivant \mathbf{e}_x :

$$S_{i,j}^{\mathrm{ts}} \cdot \mathbf{e}_x = \frac{1}{\Delta y} \left(\frac{\mathbf{\sigma}_{i+1/2,j} - \mathbf{\sigma}_{i-1/2,j}}{\Delta x_i} \right) ,$$

soit, en remplaçant les $\sigma_{i\pm 1/2, i}$ par leur valeur et les températures par leur valeur exacte :

$$\Delta y_j S_{i,j}^{\mathrm{ts}} \cdot \mathbf{e}_x = \frac{1}{2} \mathbf{\sigma}_T \frac{\Delta T}{L} = \frac{1}{2} (\tau_2 - \tau_1) \ .$$

De la même manière, dans la cellule $C_{i,j+1}$, située immédiatement au dessus de l'interface, nous obtenons :

$$\Delta y S_{i,j+1}^{\mathrm{ts}} \cdot \mathbf{e}_x = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_T \frac{\Delta T}{L} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\tau}_2 - \boldsymbol{\tau}_1) \ .$$

Ces deux relations montrent que ce terme source n'interviendra que dans les deux cellules $C_{i,j}$ et $C_{i,j+1}$.

Nous avons remarqué § 4.2.1 que la vitesse reconstruite à la face (4.5), consistante avec le choix de moyenne harmonique des viscosités, valait alors exactement la vitesse à l'interface u_0 dans le cas isotherme. Il est facile de constater que dans la situation qui nous intéresse ici, la vitesse moyenne donnée par (4.5) ne vérifie pas $\overline{U} = u_0$, ce qui signifie que la viscosité reconstruite à la face obtenue dans le cas isotherme ne convient plus. D'autre part, une spécificité de la situation non isotherme dans laquelle nous nous sommes placés ici est la non continuité de la contrainte à l'interface. Il faut donc revenir sur la discrétisation même du terme visqueux. Pour cela, nous l'écrivons :

$$\Delta y S_{i,j}^{v_{1SC}} \cdot \mathbf{e}_x = \tau_{i,j+1/2} - \tau_{i,j-1/2}$$

Comme la face (i, j - 1/2) est "loin" de l'interface, on a nécessairement $\tau_{i,j-1/2} = \tau_2$. Sommant les termes source de viscosité et de tension de surface ainsi obtenus, on aboutit à la condition :

$$\tau_{i,j+1/2} = \frac{1}{2} (\tau_1 + \tau_2) .$$

Cette relation donne la façon dont il faut définir la grandeur $\tau_{i,j+1/2}$, qui est une certaine moyenne de la contrainte autour du point de coordonnées $(x_i, y_{j+1/2})$ en lequel la contrainte n'est pas définie au niveau continu. De plus, dans cette situation particulière, les contraintes sont constantes par morceaux, donc τ_1 et τ_2 doivent être vues comme les valeurs limites que prend la contrainte de part et d'autre de l'interface. C'est pourquoi, nous introduisons de nouvelles variables au centre des cellules :

$$\tau_j = \mu_j \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_j,$$

qui sont, elles, définies. La condition à retenir pour la suite est donc :

$$\tau_{i,j+1/2} = \frac{1}{2} \left(\tau_j + \tau_{j+1} \right) \,.$$

Remarque :

Nous aurions obtenu la même condition à partir de l'étude effectuée dans la cellule $C_{i,j+1}$. Par ailleurs, nous avons vu que le terme source capillaire n'était non nul que dans ces deux cellules $C_{i,j}$ et $C_{i,j+1}$. Nous pouvons écrire le bilan obtenu sur les deux cellules :

$$\tau_{i,j+3/2} - \tau_{i,j-1/2} = \sigma_T \frac{\Delta T}{L} ,$$

qui est bien la relation de saut attendue, projetée¹ sur le domaine sur lequel nous avons rendu volumique les forces capillaires.

¹au sens des volumes finis.

5.2.3.3 Modification du schéma de discrétisation des contraintes visqueuses

Nous nous plaçons désormais dans un contexte un peu plus général que celui de l'écoulement particulier du paragraphe précédent. Nous supposons toujours que l'interface est plane, exactement située sur la ligne de maillage $y_{j+1/2}$, de sorte que seules les composantes suivant \mathbf{e}_x des termes sources de viscosité et de tension superficielle apparaissent dans les bilans. Enfin, nous supposons que les dérivées d'ordre supérieur où égal à deux du champ de vitesse restent partout bornées, hypothèse raisonnable dans les situations qui nous intéressent. Plus précisément, appelons (\mathcal{H}) l'hypothèse :

$$(\mathcal{H})$$
: $\left(n \ge 2 \Rightarrow \frac{\partial^n u}{\partial y^n} = \mathcal{O}(1)\right)$.

Cette hypothèse nous permet d'écrire les développements limités suivant :

$$u_j = u_{j+1/2} - \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{j+1/2}^{-} \frac{\Delta y}{2} + O(\Delta y)$$
(5.11a)

$$u_{j+1} = u_{j+1/2} + \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{j+1/2}^{+} \frac{\Delta y}{2} + O(\Delta y)$$
(5.11b)

où $(\partial_y u)_{j+1/2}^{\pm}$ sont les valeurs limites que prend la dérivée de la vitesse de part et d'autre de l'interface, et $u_{j+1/2}$ est la vitesse à l'interface, quantité bien définie, mais inconnue pour l'instant. Le terme de reste n'est un $O(\Delta y)$ qu'à la condition que (\mathcal{H}) soit vraie. On peut alors donner un sens à la définition de la dérivée de la vitesse en j + 1/2 en la définissant comme la demi somme des valeurs limites de part et d'autre de l'interface et obtenir :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{j+1/2} = \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta y} + \mathcal{O}(\Delta y) \; .$$

Comme nous l'avons dit, nous devons nous intéresser aux quantités τ_j , définies au centre des cellules, et qui dans le cas de la présence des effets Marangoni ne sont pas définies en j + 1/2. Par contre, lorsque le pas de maillage tend vers 0, ces quantités vont bien tendre vers la valeur limite correpondante de la contrainte. Sous l'hypothèse (\mathcal{H}), nous pouvons légitimement écrire :

$$\frac{\tau_j}{\mu_j} = \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_j = \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{j+1/2}^- + O(\Delta y)$$
(5.12a)

$$\frac{\tau_{j+1}}{\mu_{j+1}} = \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{j+1} = \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{j+1/2}^+ + \mathcal{O}(\Delta y)$$
(5.12b)

Ces relations permettent d'obtenir une autre estimation de la dérivée de la vitesse en j + 1/2: la demi somme des τ/μ de part et d'autre de l'interface. Nous retenons donc la relation :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{j+1/2} = \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta y} + \mathcal{O}(\Delta y) = \frac{1}{2} \left(\frac{\tau_j}{\mu_j} + \frac{\tau_{j+1}}{\mu_{j+1}}\right) + \mathcal{O}(\Delta y) ,$$

qui donne deux façons possibles de calculer $(\partial_y u)_{j+1/2}$. Cette relation montre également que l'on sait estimer à $O(\Delta y)$ près la demi somme des τ/μ par :

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\tau_j}{\mu_j} + \frac{\tau_{j+1}}{\mu_{j+1}} \right) = \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta y} + O(\Delta y) .$$
 (5.13)

Le but étant de calculer la quantité $(\tau_j + \tau_{j+1})/2$, combinant les relations (5.11) et (5.12), on obtient :

$$\tau_j = 2\mu_j \frac{u_{j+1/2} - u_j}{\Delta y} + O(\Delta y)$$
 (5.14a)

$$\tau_{j+1} = 2\mu_{j+1} \frac{u_{j+1} - u_{j+1/2}}{\Delta y} + O(\Delta y)$$
(5.14b)

donnant donc les τ_j de part et d'autre de l'interface en fonction de la vitesse reconstruite à la face. On peut alors en déduire :

$$\frac{1}{2}\left(\tau_{j+1} + \tau_{j}\right) = \frac{1}{\Delta y}\left[\mu_{j+1}u_{j+1} - \mu_{j}u_{j} - u_{j+1/2}(\mu_{j+1} - \mu_{j})\right] + O(\Delta y), \quad (5.15)$$

ainsi que le saut de contrainte à l'interface :

$$\tau_{j+1} - \tau_j = \frac{2}{\Delta y} \left[\mu_{j+1} u_{j+1} + \mu_j u_j - u_{j+1/2} (\mu_{j+1} + \mu_j) \right] + \mathcal{O}(\Delta y) .$$
 (5.16)

Retour au cas isotherme

Afin de comprendre, plaçons-nous à nouveau dans le cas isotherme où, au niveau continu, la contrainte visqueuse est continue à l'interface. Pour que notre approximation soit consistante avec cette condition, il suffit d'assurer, moyennant que l'hypothèse (\mathcal{H}) soit vraie :

$$\tau_{j+1} - \tau_j = O(\Delta y) \; ,$$

car ainsi, le pas de maillage tendant vers 0, le saut de contrainte tend bien vers 0. D'après la relation (5.16), une façon simple d'y arriver est de *choisir* :

$$u_{j+1/2} = \frac{\mu_{j+1}u_{j+1} + \mu_j u_j}{\mu_{j+1} + \mu_j} ,$$

de reporter cette expression dans (5.15) pour obtenir le schéma pour la contrainte à la face (i, j + 1/2):

$$\tau_{j+1/2} = \mu_{j+1/2} \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta y}$$

où $\mu_{j+1/2}$ est la viscosité recontruite à la face précédemment utilisée, relation (4.3) § 4.2.1. La vitesse à l'interface joue donc un rôle particulier, mais *en pratique* on voit qu'il n'est pas nécessaire de la calculer explicitement, seule l'expression finale de la contrainte étant utilisée.

Remarque :

La relation donnant la vitesse reconstruite à la face $u_{j+1/2}$ n'est autre que la relation (4.5). Nous donnons donc ici un sens au qualificatif "consistante" employé jusqu'ici à propos de cette vitesse.

Cas Marangoni

En situation non isotherme et dans la configuration d'interface dans laquelle nous nous sommes placés, le saut des contraintes est la valeur du gradient local de tension superficielle. Afin de ne pas compliquer le propos, appelons \mathcal{K} la valeur de ce saut de la contrainte. La condition de consistance que doivent vérifier les τ_i est donc, toujours sous l'hypothèse (\mathcal{H}) :

$$\tau_{j+1} - \tau_j = \mathcal{K} + \mathcal{O}(\Delta y) , \qquad (5.17)$$

condition que l'on peut réaliser simplement si, d'après (5.16), l'on *choisit* la vitesse reconstruite à la face suivante, que nous notons $u_{i+1/2}^T$ pour la différencier de celle obtenue dans le cas isotherme :

$$u_{j+1/2}^{T} = \frac{\mu_{j+1}u_{j+1} + \mu_{j}u_{j}}{\mu_{j+1} + \mu_{j}} - \frac{1}{\mu_{j} + \mu_{j+1}} \frac{\mathcal{K}\Delta y}{2} .$$
(5.18)

En reportant dans (5.15), on en déduit alors aisément un schéma pour la contrainte à la face :

$$\tau_{j+1/2} = \mu_{j+1/2} \left[\frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta y} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu_{j+1}} - \frac{1}{\mu_j} \right) \frac{\mathcal{K}}{2} \right].$$

À nouveau, il n'est pas nécessaire *en pratique* de calculer la vitesse reconstruite à la face.

Il faut maintenant préciser la façon d'évaluer le saut de la contrainte \mathcal{K} . Pour cela, il faut remarquer que nous cherchons en fait *la projection* sur l'axe des *x* du "saut de contrainte suivant la normale à l'interface", qui est un vecteur. Or, au niveau continu, le vecteur en question doit être l'opposé du gradient de tension superficielle suivant la tangente à l'interface. Le saut cherché doit donc valoir :

$$\mathcal{K} = -\nabla \sigma_t \cdot \mathbf{e}_x$$
.

S'agissant du saut à la face (i, j+1/2), le saut de contrainte \mathcal{K} doit donc vérifier :

$$\mathcal{K} = -\left(\nabla \mathbf{\sigma}_t\right)_{j+1/2} \cdot \mathbf{e}_x + \mathcal{O}(\Delta y)$$

Finalement, le schéma de discrétisation de la contrainte visqueuse reconstruite à la face s'écrit :

$$\tau_{j+1/2} = \mu_{j+1/2} \left[\frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta y} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu_{j+1}} - \frac{1}{\mu_j} \right) \frac{1}{2} \left(\nabla \sigma_t \right)_{j+1/2} \cdot \mathbf{e}_x \right].$$
(5.19)

Il reste maintenant à donner la façon de discrétiser le terme de gradient tangentiel de tension superficielle. Ce gradient, dans le cadre de notre modélisation, est approché par la projection sur le plan tangent à l'interface du gradient de tension superficielle, puisque nous avons rendu ce dernier volumique. Introduisant l'opérateur Π_{It} utilisé § 1.2.2, le terme cherché est :

$$abla \sigma_t = \Pi_{It} \cdot
abla \sigma$$
 .

Pour évaluer ce terme au centre de la face, nous choisissons le schéma :

$$\left(\nabla \mathbf{\sigma}_{t}\right)_{j+1/2} = \left(\Pi_{It}\right)_{j+1/2} \cdot \left(\nabla \mathbf{\sigma}\right)_{j+1/2}$$

c'est à dire :

$$\left(\nabla \sigma_{t}\right)_{j+1/2} = \nabla \sigma_{j+1/2} - \left(\nabla \sigma \cdot \frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|}\right)_{j+1/2} \frac{\nabla \alpha_{j+1/2}}{\|\nabla \alpha\|_{j+1/2}}, \qquad (5.20)$$

où $\nabla \sigma_{j+1/2}$ est calculé de la même manière que $\nabla \alpha_{i+1/2}$, c'est à dire (dans le cas d'un maillage régulier) :

$$\nabla \boldsymbol{\sigma}_{j+1/2} = \frac{1}{2} \left(\nabla \boldsymbol{\sigma}_{j+1} + \nabla \boldsymbol{\sigma}_j \right) \cdot \mathbf{e}_x + \frac{\boldsymbol{\sigma}_{j+1} - \boldsymbol{\sigma}_j}{\Delta y} \mathbf{e}_y ,$$

avec :

$$\nabla \sigma_{i,j} = \frac{\sigma_{i+1,j} - \sigma_{i-1,j}}{2\Delta x} \mathbf{e}_x + \frac{\sigma_{i,j+1} - \sigma_{i,j-1}}{2\Delta y} \mathbf{e}_y$$

et :

$$\sigma_{i,j} = \sigma_0 + \sigma_T \left(T_{i,j} - T 0 \right) \, .$$

5.2.3.4 Remarques finales

La vitesse reconstruite à la face

L'expression (5.18) donnant la vitesse reconstruite à la face appelle un commentaire. En effet, le terme correctif par rapport à la vitesse obtenu dans le cas isotherme (4.5) est proportionnel à Δy . Or la minoration :

$$\mu_{j+1} + \mu_j \geqslant 2\max(\mu_1, \mu_2)$$

montre que :

$$u_{j+1/2}^T = u_{j+1/2} + O(\Delta y)$$

pour peu que l'approximation de \mathcal{K} soit à un $O(\Delta y)$ près². Ceci prouve que le schéma de discrétisation des contraintes visqueuses correspondant à la vitesse $u_{j+1/2}$ reconstruite à la face obtenue dans le cas isotherme est consistant. Cela prouve également que le terme correctif permet d'obtenir un schéma d'un ordre plus grand d'une unité que le schéma sans le terme correctif. Cependant, la minoration précédente montre que la constante intervenant dans le $O(\Delta y)$ est en $1/\mu$, ce qui peut conduire à une grande erreur sur la vitesse au voisinage de l'interface comme nous le montrons § 5.3.5.

Un autre point de vue

Il existe une façon plus simple d'obtenir le résultat final (5.19). Posons le problème de la manière suivante :

Calculer
$$\frac{1}{2}(\tau_{j+1} + \tau_j)$$
 connaissant :
$$\begin{cases} \frac{1}{2}\left(\frac{\tau_{j+1}}{\mu_{j+1}} + \frac{\tau_j}{\mu_j}\right) \\ \tau_{j+1} - \tau_j \end{cases}$$

ce qui est bien ce qui nous intéresse puisque d'une part, d'après (5.13), nous savons calculer simplement la première quantité et d'autre part, d'après (5.17) nous cherchons à imposer la deuxième. La réponse est alors acquise si l'on connait la relation **algébrique** suivante, valable quels que soient les quatre réels a^+, a^-, b^+ et b^- :

$$\overline{a} = \hat{b} \left[\overline{\left(\frac{a}{b}\right)} - \frac{1}{2} \left[\left[\frac{1}{b} \right] \right] \frac{\left[\left[a \right] \right]}{2} \right], \qquad (5.21)$$

,

² ce qu'il est raisonnable de supposer.

avec les notations usuelles :

$$\begin{cases} \overline{\cdot} = \frac{(\cdot)^{+} + (\cdot)^{-}}{2} \\ \\ \llbracket \cdot \rrbracket = (\cdot)^{+} - (\cdot)^{-} \\ \\ \hat{\cdot} = \frac{2(\cdot)^{+}(\cdot)^{-}}{(\cdot)^{+} + (\cdot)^{-}} \end{cases}$$

En effet, appliquant cette relation aux quatre nombres $\tau_{j+1}, \tau_j, \mu_{j+1}$ et μ_j , on obtient :

$$\frac{1}{2}(\tau_{j+1} - \tau_j) = \mu_{j+1/2} \left[\underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{\tau_{j+1}}{\mu_{j+1}} + \frac{\tau_j}{\mu_j} \right)}_{= \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta y} + O(\Delta y), (5.13)} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu_{j+1}} - \frac{1}{\mu_j} \right) \underbrace{\frac{\tau_{j+1} - \tau_j}{2}}_{= \frac{\mathcal{K}}{2} + O(\Delta y), (5.17)} \right],$$

qui donne bien le schéma obtenu (5.19).

Remarque :

La relation (5.21) se démontre par applications successives de la relation :

$$\llbracket ab \rrbracket = \overline{a}\llbracket b \rrbracket + \overline{b}\llbracket a \rrbracket$$

5.3 Validation des effets introduits

5.3.1 Bulle statique et courants parasites

On considère une bulle de gaz bidimensionnelle, de masse volumique $\rho_g = 1 \text{ kg.m}^{-3}$, de rayon R = 0.25 m, entouré d'un liquide de masse volumique $\rho_\ell = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$ dans un domaine carré de coté 1 m discrétisé sur 80 cellules. Le coefficient de tension de surface entre les deux fluides est fixé à $\sigma = 1.25 \text{ N.m}^{-1}$, de sorte que le saut de presion est $\sigma/R_0 = 5$ Pa. Les vitesses du son sont choisies selon le critère expliqué § 1.4. Trois jeux de vitesses du son sont choisies, de sorte que les coefficients de compressibilité vérifient :

Premier calcul : $(\chi_T)_{gaz} = (\chi_T)_{liquide} = 1000 \text{ Pa}^{-1}$, Deuxième calcul : $(\chi_T)_{gaz} = 1000 \text{ Pa}^{-1}$, $(\chi_T)_{gaz} = 10(\chi_T)_{liquide}$, Troisième calcul : $(\chi_T)_{gaz} = 1000 \text{ Pa}^{-1}$, $(\chi_T)_{gaz} = 100(\chi_T)_{liquide}$.

Les résultats correspondant au premier jeu de vitesses du son sont présentés FIGURE 5.1. La bulle garde bien sa forme cylindrique, le saut de pression étant bien de 5 Pa entre l'intérieur et l'extérieur de la bulle. Cependant, des courants parasites apparaissent, le champ de vitesse n'étant plus nul. Les deux fluides étant non visqueux, nous adimensionnalisons la norme de la vitesse sur le domaine selon le critère exposé dans [7]. La masse volumique de référence choisie est la masse volumique du liquide.

Une étude de sensibilité des courants parasites en fonction du rapport des compressibilités isothermes des deux fluides est présentée FIGURE 5.2. On constate que l'intensité des courants parasites est une fonction croissante du rapport $(\chi_T)_{gaz}/(\chi_T)_{liquide}$. Toutefois l'ordre de grandeur est toujours le même. À titre de comparaison et pour un calcul similaire (rapport de masse volumique, nombre de cellules de discrétisation et saut de pression identiques), l'auteur obtient dans [7] :

$$\max(|u|,|v|)\left(\frac{\rho\Delta x}{\sigma}\right)^{1/2}=0.48.$$

Nous obtenons donc une intensité de courants parasites du même ordre de grandeur que la méthode VOF sans reconstruction d'interface présentée dans [7]. Cependant, la forme de ces courants parasites est différente dans notre méthode, l'intensité des courants parasites dans le liquide étant d'un ordre de grandeur inférieur à ceux dans le gaz :

Premier calcul : Pour $(\chi_T)_{gaz} = (\chi_T)_{liquide}$, l'intensité est $\left(\frac{\rho\Delta x}{\sigma}\right)^{1/2} \max(||(1-\alpha)V||) = 0.029$, **Deuxième calcul :** Pour $(\chi_T)_{gaz} = 10(\chi_T)_{liquide}$,

Deuxième calcul : Pour $(\chi_T)_{\text{gaz}} = 10(\chi_T)_{\text{liquide}}$, l'intensité est $\left(\frac{\rho\Delta x}{\sigma}\right)^{1/2} \max(||(1-\alpha)V||) = 0.021$,

Troisième calcul : Pour $(\chi_T)_{gaz} = 100(\chi_T)_{liquide}$, l'intensité est $\left(\frac{\rho\Delta x}{\sigma}\right)^{1/2} \max(||(1-\alpha)V||) = 0.012$.

Ainsi, plus la vitesse du son dans le liquide augmente (donc plus son coefficient de compressibilité diminue), plus l'intensité des courants parasites dans le liquide diminue.



FIG. 5.1 – Résultats bulle statique : en haut, courants parasites ; en bas, champ de pression



FIG. 5.2 – Résultats bulle statique. Courants parasites en fonction du rapport des compressibilités gaz et liquide : en haut, rapport 10; en bas, rapport 100

5.3.2 Ménisques et microgravité

Afin de valider la prise en compte d'un angle de contact à la paroi, nous avons effectué deux cas tests d'établissement d'un ménisque en microgravité, le premier en configuration bidimensionnelle et le second en configuration axisymétrique. Rappelons que les détails concernant le modèle et la méthode numérique en situation d'écoulement axisymétrique sont exposés en annexe C. Le domaine de calcul est un carré de coté d = 3 cm, discrétisé par un maillage régulier de 60×60 cellules. La forme de l'interface solution (stationnaire) du problème envisagé est dans les deux cas un arc de cercle, de rayon $R = d/\cos \theta_s$, où θ_s est l'angle de contact statique, imposé à la paroi.

Les deux fluides considérés ont les caractéristiques suivantes :

Gaz: La masse volumique est $\rho_g = 1$ kg.m⁻³, la vitesse du son est $c_g = 10$ m.s⁻¹.

Liquide : La masse volumique est $\rho_{\ell} = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$, la vitesse du son est $c_{\ell} = 1 \text{ m.s}^{-1}$.

Le coefficient de tension de surface est tel que $\sigma/R = 1$ Pa, l'angle de contact étant $\theta_s = 55^{\circ}$. Les vitesses du son choisies vérifient le critère expliqué § 1.4. Afin d'accélérer la convergence (en temps) vers la solution stationnaire, les deux fluides sont très visqueux.

La condition initiale est une interface plane, décrite FIGURE 5.3. La condition d'angle de contact est imposée sur la paroi gauche du domaine pour la configuration bidimensionnelle et sur la paroi droite pour la configuration axisymétrique (l'axe étant à gauche). Une condition d'angle statique égal à 90 $^{\circ}$ est imposée sur la paroi opposée.



FIG. 5.3 – Configuration initiale pour les cas de ménisques en microgravité.

Les solutions finales sont représentées FIGURE 5.4, la ligne rouge étant la solution théorique. On constate donc un bon accord avec la solution théorique, ce qui valide la prise en compte de la condition d'angle statique à une paroi.







FIG. 5.4 – Cas de ménisques en microgravité, solution stationnaire : en haut configuration bidimensionnelle, en bas configuration axisymétrique. La ligne rouge est la solution théorique correspondante.

5.3.3 Oscillations de forme d'une bulle et transferts d'énergie

Ce cas test vise à valider les effets de capillarité en situation dynamique. Plus précisément, il s'agit de vérifier que le couplage entre les effets d'inertie et de capillarité est correct. Il existe de plus une solution théorique pour ce cas test, due à Lamb [78]. La pulsation des oscillations d'une bulle non visqueuse (dans un fluide non visqueux) est donné par la relation :

$$\omega_n^2 = \frac{n(n-1)(n+1)(n+2)\sigma}{[(n+1)\rho_i + n\rho_e]R_0^3},$$
(5.22)

où *n* est le "numéro du mode", ρ_i la masse volumique du fluide intérieur à la bulle, ρ_e la masse volumique du fluide extérieur, R_0 le rayon de la bulle et σ le coefficient de tension de surface entre le fluide intérieur et le fluide extérieur. Les modes sont définis par la forme de l'interface, donnée par la position radiale de l'interface :

$$R(\theta,t) = R_0 + \varepsilon P_n(\cos\theta)\sin(\omega_n t) , \ 0 \le \theta \le 2\pi ,$$

où P_n est le polynome de Legendre d'ordre n, et ε la déformation maximale de la bulle.

La forme initiale de la bulle choisie pour notre calcul est une ellipse, de rayon équivalent $R_0 = 0.25$ m. Le fluide intérieur est un gaz de masse volumique $\rho_g = 1$ kg.m⁻³, le fluide extérieur étant un liquide de masse volumique $\rho_\ell = 1000$ kg.m⁻³. Le coefficient de tension de surface entre les deux fluides est fixé à $\sigma = 0.125$ N.m⁻¹, de sorte que le saut de pression initial est $2\sigma/R_0 = 1$ Pa. Les vitesses du son choisies pour le calcul sont $c_g = 15$ m.s⁻¹ et $c_\ell = 3$ m.s⁻¹.

La période obtenue pour le mode n = 2 (excité par la forme initiale ellipsoïdale de la bulle) avec ces valeurs est $T_2 = 20.27$ s. On doit retrouver cette période par exemple sur le signal en temps de l'un des diamètres de la bulle. Cependant nous nous intéressons à des grandeurs plus globales, les différentes énergies intervenant dans ce problème et en particulier les énergies cinétique et capillaire sur l'ensemble du domaine de calcul. Les fréquences théoriques que l'on doit observer sur ces quantités sont deux fois plus grandes que celles données par la relation (5.22).

D'autre part, ce cas test sera l'occasion pour nous de vérifier certains aspects théoriques de la méthode développée :

- l'énergie libre totale doit rester constante, la décroissance (éventuelle) n'étant due qu'à l'étape de relaxation.
- Le volume total de la bulle doit rester constant, l'amplitude de ses variations devant rester faible devant le volume total³.

Ainsi, d'un point de vue global, la bulle et le liquide environnant contenu dans le domaine de calcul doivent se comporter comme un ressort oscillant sous l'action de son poids où l'énergie mécanique totale reste constante, alors que les énergies cinétique et potentielle (associée à la gravité) oscillent à la même fréquence et en opposition de phase.

Il s'agit en outre d'un calcul axisymétrique, le domaine de calcul étant le rectangle $[0, 2R_0] \times [-2R_0, 2R_0]$. Le maillage est régulier dans les deux directions et comporte 40×80 cellules, soit des pas d'espace tels que $\Delta x = \Delta y = 0.0125$ m.

³ Ceci correspond au fait que l'écoulement est isovolume.

Les résultats sont rassemblés FIGURE 5.5.

Énergie totale : L'énergie totale sur tout le domaine est bien décroissante, mais les variations relatives sont faibles. D'autre part, l'évolution de la quantité :

$$\frac{\delta F}{F} = \frac{\max_{\Omega}(F) - \min_{\Omega}(F)}{F} ,$$

montre que l'énergie totale varie très peu sur le domaine.

- **Énergies capillaire et cinétique :** Ces deux énergies oscillent bien à la même fréquence, le pic principal de la transformée de Fourier discrète correspondant bien à la fréquence théorique attendue (première raie rouge).
- Variation relative de volume : la variation relative du volume de la bulle oscille à une fréquence de l'ordre de 1.8 Hz, l'amplitude étant de l'ordre de 0.03 % : le volume de la bulle est bien constant, aux effets acoustiques près (effets dus au modèle). Ces effets acoustiques n'interfèrent d'ailleurs pas avec les phénomènes qui nous intéressent. On retrouve d'ailleurs ce pic fréquentiel sur le diagramme de la DFT de la variation de l'énergie totale sur le domaine.
- **Diamètre vertical de la bulle :** ce diamètre oscille à une fréquence deux fois plus faible que les énergies capillare et cinétique, ce que l'on attendait.



FIG. 5.5 – Oscillation d'une bulle dans un fluide non visqueux. En haut à gauche : énergie totale en fonction du temps. En haut à droite : variation de l'énergie totale sur le domaine Ω au cours du temps et sa transformée de Fourier discrète (DFT). Au milieu, à gauche : énergie capillaire et sa DFT. Au milieu, à droite : énergie cinétique et sa DFT. En bas à gauche : variation relative du volume de la bulle et sa DFT. En bas à droite : diamètre vertical (selon l'axe) de la bulle et sa DFT. Les raies rouges dans les diagrammes de Fourier correspondent aux fréquences théoriques des modes n = 2 et n = 4.

5.3.4 Écoulement de Couette en présence d'un gradient de température : effet Marangoni

Nous présentons ici des résultats numériques associés au cas test de Couette en présence d'un gradient transverse de température qui nous a servi à établir les modifications à apporter à la discrétisation du terme source de dissipation visqueuse pour prendre en compte les effets Marangoni. Rappelons que les champs de vitesse et de température, linéaires par fluide, sont respectivement donnés par (5.8) et (5.10).

Le domaine de calcul est du type de celui utilisé § 4.4.1, c'est à dire le rectangle $[0,L] \times [0,H]$, les conditions aux limites pour les parois x = 0 et x = L étant périodiques sur les variables de masse et de quantité de mouvement. Par contre, la température y est imposée, respectivement à T_0 et $T_0 + \Delta T$. Nous supposons également que les conditions aux limites y = 0 et y = H sont des parois adiabatiques respectivement fixe et animée d'une vitesse $\mathbf{V}_{\text{paroi}} = u_{\text{max}} \mathbf{e}_x$. Les valeurs numériques des constantes définissant cet écoulement sont rassemblées dans le TABLEAU 5.1. D'autre part, les temps caractéristiques de diffusion obtenus avec ces valeurs sont :

$$\begin{cases} t_1^{\text{visc}} = 18 \text{ s} \\ t_1^{\text{cond}} = 16 \text{ s} \\ t_2^{\text{visc}} = 160 \text{ s} \\ t_2^{\text{cond}} = 200 \text{ s} \end{cases}$$

	Masse [kg.m ⁻³]	Viscosité [Pa.s]	Conduction $[W.m^{-1}.K^{-1}]$	Cisaillement [Pa]	Vitesse [m.s ⁻¹]
Fluide 1	$\rho_{10} = 0,5$	$\mu_1 = 10^{-2}$	$\lambda_1 = 10^{-2}$	$\tau_1 = 1, 6.10^{-2}$	$u_{\rm max} = 1$
Fluide 2	$\rho_{20} = 50$	$\mu_2 = 5.10^{-2}$	$\lambda_2=2.10^{-3}$	$\tau_2 = 5.10^{-3}$	$u_0 = 4.10^{-2}$

TAB. 5.1 – Grandeurs caractéristiques définissant le cas test de Couette-Marangoni.

La hauteur *H* du domaine est fixée à H = 1 m, la largeur *L* valant L = 0.4 m. Le domaine est discrétisé par un maillage régulier de 4×10 cellules, soit des pas d'espace tels que $\Delta x = \Delta y = 10$ mm. L'interface est placée en $y_0 = 0.4$ m, la vitesse u_0 vérifiant $u_0 = y_0\tau_2/\mu_2$. De la même manière, on peut relier la vitesse u_{max} au cisaillement τ_1 par la relation $u_{max} = (H - y_0)\tau_1/\mu_1$. Enfin, le coefficient de variation de la tension de surface avec la température σ_T est fixé à $\sigma_T = -2, 5.10^{-3}$ N.m⁻¹.K⁻¹, l'élévation de température résultante étant $\Delta T = L(\tau_2 - \tau_1)/\sigma_T = 1,76$ K.

Même si nous cherchons une solution stationnaire, nous résolvons des équations contenant des termes instationnaires, en particulier dans l'équation bilan d'enthalpie (1.21). Dans cette même équation nous avons négligé les termes convectifs, supposant par exemple qu'ils sont compensés par un terme source de chauffage volumique. Il faut donc choisir des capacités calorifiques à pression constante, qui vont fixer les échelles de temps de dissipation de chaleur dans chacun des deux fluides. Ces coefficients interviennent également dans le choix des vitesses du son, plus

précisément dans la condition de stabilité associée au terme source de conduction thermique. Les capacités calorifiques que nous choisissons sont telles que $\rho_{i0}C_{pi} = 1 \text{ J.m}^{-3}.\text{K}^{-1}$. Les vitesses du son assurant la stabilité des termes sources de diffusion et de tension de surface doivent alors vérifier :

$$c_1 \gg 0.2 \text{ m.s}^{-1}$$
, et $c_2 \gg 0.02 \text{ m.s}^{-1}$

Les conditions pour s'assurer de la quasi-incompressibilité de l'écoulement s'écrivent :

$$c_1 \ge 3 \text{ m.s}^{-1}$$
, et $c_2 \ge 0, 12 \text{ m.s}^{-1}$,

celles-ci résultant de la condition sur le nombre de Mach dans les deux fluides. Nous choisissons donc les vitesses du son suivantes :

$$c_1 = 15 \text{ m.s}^{-1}$$
, et $c_2 = 1,5 \text{ m.s}^{-1}$

À l'instant initial, la vitesse est nulle et la température est fixée à $T_0 = 300$ K. Nous présentons FIGURE 5.6 les profils stationnaires de vitesse et de température obtenus, comparés aux profils exacts correspondants : nous obtenons bien la bonne solution. Nous avons représenté FIGURE 5.7 les évolutions au cours du temps des températures moyennes dans les deux fluides. On constate que l'état stationnaire est atteint beaucoup plus vite dans le fluide 1 que dans le fluide 2, ce qui est en accord avec les valeurs des temps caractéristiques donnés plus haut.

Remarques :

- Nous avons également superposé aux profils de vitesse numérique et exact, le profil de vitesse correspondant aux mêmes conditions aux limites en vitesse mais en situation isotherme. On peut ainsi voir l'influence de l'effet Marangoni : la gradient de température provoque un ralentissement de l'écoulement par l'intermédiaire de la tension de surface.
- 2. Nous avons également effectué le même calcul en utilisant le schéma de contrainte visqueuse reconstruite à la face sans le terme correcteur par rapport au cas isotherme. De la même manière que lors de la comparaison entre viscosité reconstruite à la face du type moyenne harmonique et arithmétique, l'écoulement de type Couette ne permet pas de conclure.


FIG. 5.6 – Écoulement de Couette-Marangoni : en haut : profil de température calculé (•) et exact(-); en bas : profil de vitesse calculé (•), exact (-) et profil isotherme correspondant aux mêmes conditions aux limites sur la vitesse (--).



FIG. 5.7 – Écoulement de Couette-Marangoni : en haut : évolution au cours du temps des températures moyennes dans les deux fluides ; en bas : évolution au cours du temps des vitesses moyennes dans les deux fluides.

5.3.5 Écoulement de Poiseuille en présence d'un gradient de température

Nous effectuons ici une comparaison des deux schémas, avec et sans correction, sur un écoulement de Poiseuille en présence d'un gradient de température, c'est à dire d'effets Marangoni. De la même manière que dans le cas isotherme étudiée § 4.4.1.2, l'écoulement en question est défini par les champs de vitesse et de pression suivant :

$$\begin{cases} P = p_0 = 10^5 \text{ Pa} \\ u = u_0 + \frac{\tau}{\mu} (y - y_0) - \frac{\rho g}{2\mu} (y - y_0)^2 \end{cases},$$

où ici τ n'est plus une constante mais vérifie :

$$\tau(y) = \begin{cases} \tau_1 & \text{si } y \ge y_0 \\ \tau_2 & \text{si } y \le y_0 \end{cases}$$

avec la relation :

$$\tau_2 - \tau_1 = \sigma_T \frac{\Delta T}{L} ,$$

traduisant le saut de cisaillement à l'interface dû à la présence d'un gradient constant de température, le champ de température étant donné par (5.10). Enfin, masse volumique et viscosité de mélange sont respectivement définies par (4.16) et (4.15).

L'intensité de l'accélération de la gravité est $g = 10^{-2} \text{ m.s}^{-2}$. Le coefficient de variation de la tension superficielle avec la température est fixé à $\sigma_T = -2, 5.10^{-3} \text{ N.m}^{-1} \text{.K}^{-1}$, la variation de température étant fixée à $\Delta T = 5$ K. Les autres constantes intervenant dans le problème sont rassemblées TABLEAU 5.2. On notera que la contrainte change de signe à l'interface.

	Masse [kg.m ⁻³]	Viscosité [Pa.s]	Conduction [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	Cisaillement [Pa]	Vitesse [m.s ⁻¹]
Fluide 1	$ ho_{10} = 0, 5$	$\mu_1 = 5.10^{-4}$	$\lambda_1 = 10^{-2}$	$\tau_1\simeq 10^{-3}$	$u_{\rm max} \sim 0, 8$
Fluide 2	$\rho_{20} = 50$	$\mu_2 = 5.10^{-2}$	$\lambda_2 = 2.10^{-3}$	$\tau_2\simeq -3.10^{-2}$	$u_0 \simeq 0,558$

TAB. 5.2 – Grandeurs caractéristiques définissant le cas test de Poiseuille-Marangoni.

Le domaine de calcul est le même que celui utilisé au paragraphe précédent. Les conditions au limites en y = 0, x = 0 et x = L restent inchangées, la condition au limite en y = H devenant une condition d'adhérence. Nous effectuons les calculs pour quatre maillages différents, comprenant resepctivement 4×10 , 8×20 , 16×40 et 32×80 cellules. Nous présentons FIGURE 5.8 les profils stationnaires de vitesse, obtenus après 600 s environ, pour le premier et le dernier de ces maillages. L'apport de la correction proposée est donc claire. Nous avons représenté FIGURE 5.9 l'erreur relative moyenne par rapport à la vitesse exacte pour les différents maillages et pour les deux schémas comparés. Ces résultat sont en accord avec l'analyse faite lors de la présentation du schéma : le schéma sans correction est consistant et d'ordre 1, le schéma avec correction est (donc) d'ordre 2.



FIG. 5.8 – Écoulement de Poiseuille-Marangoni : profil de vitesse obtenu pour les deux schémas avec (•) et sans correction (\bigstar), en haut : 10 points ; en bas : 80 points. La ligne en trait plein est le profil exact, la ligne en pointillés le profil de vitesse en l'absence d'effets Marangoni.



FIG. 5.9 – Écoulement de Poiseuille-Marangoni : convergence en maillage des schémas avec (•) et sans correction (\bigstar).

Troisième partie

Application au comportement des fluides dans les réservoirs de véhicules spatiaux

Chapitre 6

Ballottement et grandes déformations d'une interface

6.1 Ballottement dans un dièdre

Ce cas test est issu du benchmark COMPERE qui avait pour objectif de comparer divers codes de calcul industriels. Il concerne l'écoulement d'un liquide soumis à une accélération externe (gravité g et accélération transverse a_x), sans effet de tension de surface (grand nombre de Bond¹), ni effet visqueux (grand nombre de Galileo²). Ce cas test a donc été choisi pour comparer la capacité des codes à reproduire des déformations et des oscillations de l'interface. Pour se faire, nous disposons de résultats expérimentaux fournis par le ZARM.

Deux sous cas tests ont été définis suivant la valeur de l'accélération transverse a_x . Le premier correspond à une accélération transverse dix fois plus faible que la gravité : il s'agit d'un cas à faible nombre de Froude pour lequel les oscillations sont dans un régime linéaire. Le second correspond à une accélération transverse égale en norme à la gravité : il s'agit cette fois d'un cas à grand nombre de Froude, avec des effets non-linéaires conduisant au déferlement. Dans les deux cas, l'accélération transverse n'est appliquée que pendant une durée $\tau = 0.1$ s.

6.1.1 Cas linéaire

Les détails concernant ce cas test sont rappelés FIGURE 6.1. Nous effectuons le calcul pour deux maillages différents, correspondant à $L/\Delta x = 25$ et 40 points, soit un maillage respectivement associé de 50 × 25 et 80 × 40 cellules dans le dièdre. On effectue le calcul jusqu'au temps final $t_f = 10$ s. Pour chacun des deux maillages, nous traçons l'évolution de la hauteur de liquide au niveau de la paroi inclinée (z_a), et au niveau de la paroi verticale (z_b), ainsi que leur transformée de Fourier respective.

Sur les courbes représentant l'évolution de z_a et de z_b en fonction du temps, on constate une légère dispersion (une demi période sur environ une trentaine) en fin de calcul, que ce soit sur le premier maillage (FIGURE 6.2) ou sur le second (FIGURE 6.4). La difference entre les résultats sur les deux maillages est claire : l'amplitude des oscillations est beaucoup plus amortie pour $L/\Delta x = 25$ que pour $L/\Delta x = 40$. Les transformées de Fourier (FIGURE 6.3 et FIGURE 6.5), montrent que le premier mode est bien capturé avec les deux maillages, mais qu'il faut plus de points pour capturer le

¹Rappelons que Bo = $\frac{\rho g h^2}{\sigma}$.

²Ici, le nombre de Galileo Ga = $\frac{gh^3}{v^2}$ quantifie l'amortissement visqueux d'oscillations dues à la gravité.



FIG. 6.1 – Définition du cas test 2 du benchmark Compere : cas linéaire

deuxième mode. On constate également que l'amplitude du premier mode est plus importante pour le maillage le plus fin, allant même jusqu'à être supérieure à l'amplitude expérimentale du premier mode.



FIG. 6.2 – Résultats du cas test 2 du benchmark Compere : cas linéaire, $L/\Delta x = 25$; en haut : z_a , en bas : z_b .



FIG. 6.3 – Résultats du cas test 2 du benchmark Compere : cas linéaire, $L/\Delta x = 25$; module de la transformée de Fourier en haut : z_a ; en bas : z_b .



FIG. 6.4 – Résultats du cas test 2 du benchmark Compere : cas linéaire, $L/\Delta x = 40$; en haut : z_a , en bas : z_b .



FIG. 6.5 – Résultats du cas test 2 du benchmark Compere : cas linéaire, $L/\Delta x = 40$; module de la transformée de Fourier en haut : z_a ; en bas : z_b .

6.1.2 Cas non-linéaire



FIG. 6.6 – Définition du cas test 2 du benchmark Compere : cas non-linéaire

Pour ce cas, nous choisissons un maillage suffisamment fin et nous étudions l'influence du choix des vitesses du son dans les deux fluides. Les autres paramètres sont donnés FIGURE 6.6, le maillage correspondant étant constitué de 150×75 cellules dans le dièdre. Les vitesses du son ont bien sûr une influence sur la diffusion numérique de l'interface, mais nous allons voir qu'elles ont également une influence sur le déferlement. Les différentes vitesses du son ont été choisies de la manière suivante :

- le rapport c_1/c_2 est toujours le même, égal à celui du rapport des vitesses du son air-eau, avec $c_{air} = 340 \text{ m.s}^{-1}$ et $c_{eau} = 1800 \text{ m.s}^{-1}$. En fait, ce rapport doit être vu comme le rapport des compressibilités isothermes des deux fluides (voir paragraphe 1.4).
- l'échelle de vitesse u_{ref} pertinente pour ce cas test est celle basée sur l'accélération transverse $a_x : u_{ref} = a_x \tau \sim 1 \text{ m.s}^{-1}$. Ainsi, au vu des commentaires de la fin du paragraphe 1.4, et sachant qu'il s'agit d'un cas à grand nombre de Froude, pour que l'hypothèse de pseudo-compressibilité soit satisfaite, il faut que la vitesse du son dans le gaz (la plus faible) soit de l'ordre de 3 m.s⁻¹, garantissant un nombre de Mach inférieur à 0, 3.

Nous choisissons donc comme premier jeu de paramètres :

$$c_1 = \frac{c_{\text{air}}}{100} = 3.4 \text{ m.s}^{-1} \text{ et } c_2 = \frac{c_{\text{eau}}}{100} = 18 \text{ m.s}^{-1},$$

les vitesses du son des deuxième et troisième couples étant respectivement trois fois plus petites $(c_1 = 1.13 \text{ m.s}^{-1}, c_2 = 6 \text{ m.s}^{-1})$ et trois fois plus grandes $(c_1 = 10.2 \text{ m.s}^{-1}, c_2 = 54 \text{ m.s}^{-1})$. Nous effectuons le calcul jusqu'au temps final $t_f = 1.5$ s, et nous comparons les grandeurs z_a et z_b (en fonction du temps) à leur valeur expérimentale. La FIGURE 6.7 rassemble les résultats pour le premier couple de vitesses du son, les FIGURES 6.8 et 6.9 rassemblant ceux pour les deux autres couples.

L'expérience se déroule en quatre temps :

Première étape : tant que l'accélération transverse continue d'agir ($t < \tau = 0.1$ s), le liquide remonte le long de la paroi inclinée, et descend le long de la paroi verticale.

- **Deuxième étape :** l'accélération transverse cesse d'agir, le liquide continue de remonter le long de la paroi inclinée jusqu'au temps $t_{\text{max}} \simeq 0.2$ s, alors qu'il remonte le long de la paroi verticale : l'interface "se creuse".
- **Troisième étape :** le long de la paroi inclinée, le fluide retombe jusqu'à provoquer un déferlement, le liquide déferlant de la paroi verticale vers la paroi inclinée. Côté paroi verticale, le fluide oscille autour de sa hauteur d'équilibre, alors qu'une bulle est capturée par le déferlement.

Quatrième étape : à partir du temps $t \sim 0.4$ s le fluide ballotte autour de sa position d'équilibre.

Lors du benchmark COMPERE, un des points de discrimination entre les codes a été la hauteur maximale de remontée le long de la paroi inclinée (maximum de z_a), ainsi que le temps où cette remontée maximale est atteinte (t_{max}). D'autre part, la hauteur minimale atteinte le long de la paroi verticale (minimum de z_b) n'a par contre pas été discriminante et on remarque que, vis à vis de cette hauteur minimale, nos résultats ne sont pas sensibles au choix des vitesses du son. Par contre, on peut constater que le maximum de z_a y est légèrement sensible; c'est dû à l'augmentation de la diffusion numérique avec la vitesse du son qui entraîne une remontée moins importante du liquide sur la paroi inclinée, voir TABLEAU 6.1. Concernant les première et deuxième étapes de l'expérience, on peut donc dire que nos résultats sont bons. Concernant la fin du calcul, on peut également constater que le fluide finit toujours par ballotter dans le dièdre, le début de la quatrième étape n'ayant pas toujours lieu au même moment. Il apparaît donc clairement que les vitesses du son ont de l'influence sur la troisième étape, c'est à dire le déferlement.

	$c_1 = 1.13 \text{ m.s}^{-1}$ $c_2 = 6 \text{ m s}^{-1}$	$c_1 = 3.4 \text{ m.s}^{-1}$ $c_2 = 18 \text{ m s}^{-1}$	$c_1 = 10.2 \text{ m.s}^{-1}$ $c_2 = 54 \text{ m s}^{-1}$	Résultats expérimentaux
				experimentation
Za max	0.0956 m	0.0947 m	0.0925 m	0.102 m
t _{max}	0.181 s	0.187 s	0.197 s	0.2 s

TAB. 6.1 – Hauteur de remontée maximale le long de la paroi inclinée

En comparant les courbes de z_b pour les différents couples de vitesses du son, on se rend compte que dans le cas $c_1 = 1.13 \text{ m.s}^{-1}$, $c_2 = 6 \text{ m.s}^{-1}$, FIGURE 6.8, il y a une remontée anormale du liquide à partir du temps $t \sim 0.5$ s. Cette anomalie s'explique par le fait que les vitesses du son sont trop faibles. En effet, la bulle capturée par le déferlement n'est "pas assez incompressible", et change de volume en descendant dans le liquide. Quand elle remonte, elle se détend beaucoup trop, et provoque une remontée du fluide côté paroi verticale, voir FIGURE 6.10. De la même façon, si les courbes $z_a(t)$ et $z_b(t)$ correspondant à $c_1 = 10.2 \text{ m.s}^{-1}$ et $c_2 = 54 \text{ m.s}^{-1}$ sont correctes vis à vis des résultats expérimentaux (voir FIGURE 6.9), le tracé des isolignes de fraction volumique à différents instants, FIGURE 6.12, prouve que les vitesses du son sont trop importantes, aboutissant à une interface largement diffusée en fin de calcul. Enfin, les mêmes tracés correspondant au couple $c_1 = 3.4 \text{ m.s}^{-1}$ et $c_2 = 18 \text{ m.s}^{-1}$, FIGURE 6.7, prouvent un bon comportement du code pour ces valeurs.

Nous pouvons donc dire que lorsqu'on souhaite simuler un écoulement incompressible, il y a un intervalle optimal pour le choix des "pseudo-vitesses du son" : des vitesses du son trop faibles conduisent à des effets (attendus !) de compressibilité, alors que de trop fortes vitesses du son conduisent à des résultats trop soumis à la diffusion numérique.



FIG. 6.7 – Résultats du cas test 2 du benchmark Compere : cas non-linéaire, $c_1 = 3.4 \text{ m.s}^{-1}$, $c_2 = 18 \text{ m.s}^{-1}$; en haut : z_a ; en bas : z_b .



FIG. 6.8 – Résultats du cas test 2 du benchmark Compere : cas non-linéaire, $c_1 = 1.13 \text{ m.s}^{-1}$, $c_2 = 6 \text{ m.s}^{-1}$; en haut : z_a ; en bas : z_b .



FIG. 6.9 – Résultats du cas test 2 du benchmark Compere : cas non-linéaire, $c_1 = 10.2 \text{ m.s}^{-1}$, $c_2 = 54 \text{ m.s}^{-1}$; en haut : z_a ; en bas : z_b .



FIG. 6.10 – Evolution du liquide dans le domaine pour $c_1 = 1.13 \text{ m.s}^{-1}$, $c_2 = 6 \text{ m.s}^{-1}$.



FIG. 6.11 – Evolution du liquide dans le domaine pour $c_1 = 3.4 \text{ m.s}^{-1}$, $c_2 = 18 \text{ m.s}^{-1}$.



FIG. 6.12 – Evolution du liquide dans le domaine pour $c_1 = 10.2 \text{ m.s}^{-1}$, $c_2 = 54 \text{ m.s}^{-1}$.

6.2 Réorientation d'une interface par reprise de poussée : formation de geysers

Suite aux résultats du premier benchmark COMPERE, un deuxième benchmark devrait être organisé. Dans cette optique, les partenaires universitaires du CNES ont proposé des cas tests. Suite à une étude expérimentale [47], le LEGI a notamment proposé d'étudier la formation de geysers qui peut se produire en fin de phase balistique lorsque l'on réoriente le dernier étage d'un lanceur. L'étude de ce phénomène a un intérêt double pour le CNES :

- quelle que soit la forme du geyser, il est important de pouvoir évaluer sa hauteur en fonction de paramètres sans dimension. En effet, si le geyser formé est trop haut, il peut venir au contact d'une paroi chaude, provoquant une vaporisation du liquide et par suite une augmentation de la pression du gaz dans le réservoir. Rappelons que cette pression du gaz est importante pour la tenue mécanique du réservoir.
- Lorsque le geyser se rétracte, suivant sa forme à sa hauteur maximale, du gaz peut être piégé dans le liquide. Il est alors important d'être capable de caractériser la taille des bulles capturées et le taux de gaz dissous, et ce dans les instants suivant la retombée du geyser. Le but serait alors d'obtenir une échelle de temps de dégazage du liquide. Rappelons qu'un trop fort taux de gaz dissous dans le carburant liquide est préjudiciable au moteur principal du dernier étage du lanceur.

La géométrie des cas test proposés est présentée FIGURE 6.13. Le couple de fluide utilisé pour les expériences est le couple air-eau, avec :

$$\frac{\sigma}{\rho_{\text{eau}}} = 7,3.10^{-5} \text{ N.m}^2 \text{.kg}^{-1}, \qquad \text{et } \mu_{\text{eau}} = 1,02.10^{-3} \text{ Pa.s}$$

Nous avons effectué des calculs pour deux des sous cas tests proposés, notre but étant d'évaluer l'influence de l'accélération de la paroi sur la forme de l'interface, c'est à dire du geyser. Nous n'étudierons donc pas ce qui se passe après la retombée du geyser. En effet, cette paroi n'est qu'un moyen expérimental pour initier la formation du geyser et son influence doit être négligeable si l'on veut que cette étude soit exploitable pour des applications de formation de geyser dans les réservoirs de véhicules spatiaux. Exploitant les photographies issues des expériences, FIGURE 6.14, on estime grossièrement l'accélération *a* de la paroi pour obtenir : $a \sim 0.7g \simeq 7 \text{ m.s}^{-2}$. Nous avons donc effectué des calculs pour différentes accélérations de la paroi, $\mathbf{a} = 7$, 14, 28, 58 m.s⁻², suivant le cas A4 ou A6. Les figures pages suivantes rassemblent les résultats pour un maillage régulier du domaine $[0, R] \times [0, H]$ comprenant 30×120 cellules. Nous avons également réalisé un calcul sur un maillage deux fois plus fin (60×240 cellules) et pour une accélération de paroi $\mathbf{a} = 0.9g$ dans le cas A4. Les résultats obtenus pour ce maillage, voir FIGURE 6.19 sont en bon accord avec les réultats expérimentaux, FIGURE 6.14 en haut.

Dans les deux cas, l'échelle de temps caractéristique de la convergence du fluide à l'axe du réservoir est :

$$t_0 = \frac{R - e}{\sqrt{gh_0}}$$

correspondant au temps de parcours de la distance R - e à la vitesse caractéristique du laché d'une colonne de fluide de hauteur h_0 soumise à la gravité. Ce temps caractéristique est de l'ordre du dizième de seconde. D'après notre étude, l'élément important au cours de l'expérience est la position de la paroi à l'instant où le fluide converge à la paroi. En effet, à cet instant, le fait que la paroi soit encore ou non en contact avec le fluide influence la forme du geyser à sa hauteur maximale. Sur le cas A4 et pour des accélérations de 7 m.s⁻² et 14 m.s⁻², respectivement FIGURE 6.15 et FIGURE



FIG. 6.13 – Définition des cas tests de formation de geyser.

6.16, la paroi est encore en contact au moment de la convergence. Dans ces deux cas, le geyser prend une forme de champignon plus ou moins prononcée. Par contre, pour le même cas A4 mais pour des accélérations de la paroi plus importantes, FIGURE 6.17 et FIGURE 6.18, la paroi n'est plus en contact au moment de la convergence et les geysers n'ont pas la forme de champignon. Cette observation est également confirmée dans le cas A6, voir FIGURES 6.20,6.21 et 6.22, où le moment de la convergence du fluide à l'axe est toujours postérieure au moment où la paroi n'est plus en contact avec le fluide : le geyser n'a jamais la forme d'un champignon.

L'explication qui nous semble raisonnable est la suivante. Lorsque la paroi retient encore du fluide au moment de la convergence du fluide, le fluide retenu va alors rester proche de l'interface avec le gaz et "glisser" sur le geyser en cours de formation comme sur un toboggan, conduisant à un geyser en forme de champignon.

Remarques :

- 1. Pour confirmer notre analyse, il faudrait effectuer un calcul sur le cas A6 avec une très faible accélération de la paroi et, bien sur, que des résultats expérimentaux viennent confirmer l'hypothèse émise.
- 2. La même étude, effectuée par J.P. Vila avec la méthode numérique lagrangienne SPH [14], a donné des résultats très similaires.



FIG. 6.14 – Aperçu des résultats expérimentaux (E. Hopfinger, LEGI) : en haut : cas A4 ; en bas : cas A6.



FIG. 6.15 – Formation de geysers : influence de la paroi. En haut à gauche : état initial ; en haut à droite : $t \simeq t_0/2$; au milieu à gauche : $t = t_0$; au milieu à droite : initiation du geyser ; en bas à gauche : la paroi n'est plus en contact ; en bas à droite : hauteur maximale du geyser.



FIG. 6.16 – Formation de geysers : influence de la paroi. En haut à gauche : état initial ; en haut à droite : $t \simeq t_0/2$; au milieu à gauche : $t = t_0$; au milieu à droite : la paroi n'est plus en contact ; en bas à gauche : initiation du geyser ; en bas à droite : hauteur maximale du geyser.



FIG. 6.17 – Formation de geysers : influence de la paroi. En haut à gauche : état initial ; en haut à droite : $t \simeq t_0/2$; au milieu à gauche : la paroi n'est plus en contact ; en bas à gauche : initiation du geyser ; en bas à droite : hauteur maximale du geyser.



FIG. 6.18 – Formation de geysers : influence de la paroi. En haut à gauche : état initial ; en haut à droite : $t \simeq t_0/2$; au milieu à gauche : la paroi n'est plus en contact ; au milieu à droite : $t = t_0$; en bas à gauche : initiation du geyser ; en bas à droite : hauteur maximale du geyser.



FIG. 6.19 – Formation de geysers : influence de la paroi, maillage fin. En haut à gauche : état initial ; en haut à droite : $t \simeq t_0/2$; au milieu à gauche : $t = t_0$; au milieu à droite : la paroi n'est plus en contact ; en bas à gauche : hauteur maximale du geyser ; en bas à droite : descente du geyser.



FIG. 6.20 – Formation de geysers : influence de la paroi. En haut à gauche : état initial ; en haut à droite : $t \simeq t_0/2$; au milieu à gauche : la paroi n'est plus en contact ; au milieu à droite : $t = t_0$; en bas à gauche : initiation du geyser ; en bas à droite : hauteur maximale du geyser.



FIG. 6.21 – Formation de geysers : influence de la paroi. En haut à gauche : état initial ; en haut à droite : $t \simeq t_0/2$; au milieu à gauche : la paroi n'est plus en contact ; au milieu à droite : $t = t_0$; en bas à gauche : initiation du geyser ; en bas à droite : hauteur maximale du geyser.



FIG. 6.22 – Formation de geysers : influence de la paroi. En haut à gauche : état initial ; en haut à droite : $t \simeq t_0/2$; au milieu à gauche : la paroi n'est plus en contact ; au milieu à droite : $t = t_0$; en bas à gauche : initiation du geyser ; en bas à droite : hauteur maximale du geyser.

Chapitre 7

Réorientation d'une interface après réduction de gravité

7.1 Introduction

Ce cas test est également issu du benchmark COMPERE. Il a été choisi pour comparer la capacité des codes à reproduire une réorientation de l'interface après réduction brutale de la gravité. Pour se faire, nous disposons de résultats expérimentaux fournis par le ZARM, par ailleurs décrits dans [87, 52]. L'expérience consiste à placer un réservoir cylindrique de petite dimension (rayon *R* de l'ordre de la dizaine de centimètre) en haut d'une tour de chute libre, l'axe du réservoir étant aligné avec la direction de la gravité. Les propriétés du fluide, et plus particulièrement le paramètre σ/ρ , sont choisies de telle sorte que le ménisque se formant soit visible. Un quasi-vide est alors créé dans la tour (~ 10 Pa) de façon à réduire la trainée du réservoir lors de sa chute. Le réservoir est alors laché. La durée de la chute, et donc de microgravité pour le liquide contenu dans le réservoir, est d'environ 4,7 s. Au cours de la chute, une caméra filme l'interface à travers une paroi transparente. Traitées numériquement, ces images fournissent alors la forme de l'interface tout au long de la chute. On en déduit ensuite le signal temporel de la position de l'interface sur la paroi et sur l'axe du cylindre.

Nous comparons les résultats obtenus avec notre méthode à ces résultats expérimentaux, ainsi qu'aux résultats obtenus par Fluent lors du benchmark. Il faut souligner que les résultats de Fluent que nous présentons ont été obtenus avec une condition d'angle statique.

Deux sous cas tests ont été définis suivant la valeur de l'angle statique à la paroi θ_s . Le premier correspond à un petit angle statique, $\theta_s = 5,5^\circ$, le second correspondant à un grand angle statique, $\theta_s = 55^\circ$. Les autres paramètres des fluides utilisés lors des expériences sont rassemblés dans le TABLEAU 7.1.

Dans le cas du grand angle de contact, les résultats expérimentaux prouvent qu'après un cours transitoire, l'interface est "accrochée" à la paroi alors que la position de l'interface sur l'axe présente un comportement oscillant. Afin de reproduire ces résultats, nous testerons les modèles d'angle de contact proposés § 1.2.3. Cet accrochage de la ligne triple à la paroi est en effet un élément révélateur des phénomènes d'hysteresis. Dans le cas du petit angle de contact, les phénomènes d'hysteresis sont absents et l'interface tend lentement vers sa position d'équilibre finale (un arc de cercle de rayon $R/\cos\theta_s$).

Il s'agit de calculs dans un cylindre, en configuration axisymétrique. Pour chacun des deux cas tests, il faut commencer par obtenir la solution initiale pour laquelle la forme de l'interface est un ménisque résultant de l'équilibre entre la gravité et la condition d'angle de contact statique à la

	Masse [kg.m ⁻³]	Viscosité [Pa.s]	Tension de surface [N.m ⁻¹]
Cas 1	$\rho_\ell=902,8$	$\mu_{\ell} = 2,27.10^{-3}$	$\sigma_{\ell/air} = 2,681.10^{-2}$
Cas 2	$\rho_\ell=878,7$	$\mu_{\ell} = 2,57.10^{-3}$	$\sigma_{\ell/air} = 1,807.10^{-2}$
Air	$\rho_g = 1,205$	$\mu_g = 1,818.10^{-5}$	-

TAB. 7.1 – Propriétés des fluides utilisés pour les deux cas tests de réorientation d'interface après réduction de gravité.

paroi du cylindre. Pour cela, nous effectuons les calculs avec des fluides dont les viscosités sont augmentées de façon à accélérer la convergence vers l'état stationnaire. À partir de la solution obtenue, nous relançons le calcul avec les viscosités réelles. Le nouvel état stationnaire obtenu correspond à la solution initiale pour le cas test considéré.

7.2 Cas d'un angle de contact faible

Pour ce cas test, le rayon du réservoir cylindrique utilisé lors des expériences est R = 15 mm. Le maillage le plus fin utilisé pour ce calcul est donné FIGURE 7.1. Il comporte 60 cellules régulièrement espacées dans la direction horizontale ($\Delta x = 0.25$ mm) et 124 cellules *irrégulièrement* espacées dans la direction verticale. Dans la zone où le maillage est le plus fin, le pas d'espace Δy est $\Delta y = 0.25$ mm. Les résultats de comparaison entre modèle d'angle statique, modèle d'angle dynamique, Fluent et résultats expérimentaux, FIGURE 7.3, ont été obtenus sur un maillage deux fois plus grossiers (30×62 cellules).

La forme initiale de la surface libre (ménisque sous gravité) est représentée FIGURE 7.2. On constate un bon accord avec les résultats expérimentaux. La FIGURE 7.3 rassemble les évolutions de la hauteur de la surface libre le long de l'axe et de la paroi pour le maillage grossier. Pour ce maillage, deux calculs ont été fait. Le premier correspond à une condition d'angle statique et le second correspond à la loi de Tanner, le paramètre du modèle étant $\ell = 50$. On constate deux effets du modèle d'angle dynamique :

- sur l'axe, la fréquence d'oscillation obtenue est plus proche de la fréquence expérimentale.

À la paroi, la remontée de la surface libre est plus proche de celle observée expérimentalement.
 La FIGURE 7.4 présente les résultats obtenus sur le maillage fin. L'effet de ce raffinement de maillage est surtout perceptible sur l'évolution de la hauteur de remontée à la paroi.



FIG. 7.1 – Maillage fin pour le cas COMPERE 3.1 (petit angle de contact).



FIG. 7.2 – Résultats du cas COMPERE 3.1 (petit angle de contact). Forme initiale de la surface libre, maillage grossier.


FIG. 7.3 – Résultats du cas COMPERE 3.1 (petit angle de contact). En haut : évolution de la position de la surface libre sur la paroi, maillage grossier. En bas : évolution de la position de la surface libre sur l'axe, maillage grossier.



FIG. 7.4 – Résultats du cas COMPERE 3.1 (petit angle de contact). En haut : évolution de la position de l'interface sur l'axe et la paroi, maillage fin. En bas : forme finale de la surface libre, maillage fin.

7.3 Cas d'un angle de contact élevé

Ici le rayon du réservoir est R = 10 mm. Le maillage du domaine de calcul est présenté FIGURE 7.5. Ce maillage comporte 20 cellules régulièrement espacées dans la direction horizontale ($\Delta x = 0.5$ mm) et 60 cellules *irrégulièrement* espacées dans la direction verticale. Le pas d'espace vertical dans la zone où le maillage est le plus fin est $\Delta y = 0.25$ mm.



FIG. 7.5 – Maillage pour le cas COMPERE 3.2 (grand angle de contact).

La forme initiale de la surface libre est présentée FIGURE 7.6. À nouveau, on constate un bon accord avec les données expérimentales. Trois calculs ont été effectués, le premier avec une condition d'angle statique à la paroi, le deuxième avec la loi de Tanner, le paramètre ℓ étant fixé à 20, et enfin un troisième calul avec le modèle du ZARM, les paramètres, θ_s et $\Delta\theta$, choisis étant ceux proposés et utilisés dans [35] : $\theta_s = 55^\circ$, $\Delta\theta = 2,5^\circ$. L'effet de la loi de Tanner sur ce cas test est moins clair que pour le cas précédent, voir FIGURE 7.7. Seul l'amortissement des oscillations de la surface libre à la paroi est réduit. Par contre, le deuxième modèle, qui prend en compte l'hysteresis permet d'obtenir l'accrochage de la ligne triple à la paroi, voir FIGURE 7.8.

7.4 Conclusion sur le cas test

L'ajout d'un modèle d'angle dynamique permet d'améliorer significativement les résultats, dans le cas à petit angle de contact à l'aide de la loi de Tanner et dans le cas d'un grand angle de contact avec un modèle prenant en compte l'hysteresis de la ligne triple. Cependant, on peut remarquer que les résultats obtenus avec le modèle d'angle statique sont corrects en comparaison de ceux obtenus par Fluent lors du Benchmark.

Nous pensons que pour traiter des phénomènes de réorientation d'interface en microgravité, il est crucial de disposer d'un modèle d'angle dynamique. Nos résultats prouvent au moins que les phénomènes pariétaux méritent une modélisation qui tiennent compte d'échelles plus petites que les échelles de discrétisation, c'est à dire de disposer de telles lois de parois. Il serait donc intéressant de poursuivre cette étude et de déterminer les conditions d'utilisation précises de ces modèles.



FIG. 7.6 – Résultats du cas COMPERE 3.2 (grand angle de contact). Forme initiale de la surface libre.



FIG. 7.7 – Résultats du cas COMPERE 3.2 (grand angle de contact). En haut : évolution de la position de la surface libre sur la paroi. En bas : évolution de la position de la surface libre sur l'axe.



FIG. 7.8 – Résultats du cas COMPERE 3.2 (grand angle de contact). Évolution de la position de l'interface sur l'axe et la paroi, modèle avec hysteresis.

Conclusion

Es travaux présentés portent sur la modélisation et la simulation numérique des écoulements diphasiques à interface libre, dans le contexte de l'étude du comportement des fluides dans les réservoirs de véhicules spatiaux. Dans ce cadre, bien que s'agissant d'écoulements incompressibles, la modélisation proposée est basée sur l'utilisation d'un modèle à deux fluides compressibles. Les conditions de validité de ce modèle en situation d'écoulements quasiincompressibles sont donc précisées. Par ailleurs, une attention particulière a été portée à la modélisation des phénomènes de tension interfaciale. Les effets capillaires sont en effet pris en compte sous forme conservative, permettant d'intégrer de façon naturelle les effets Marangoni ainsi que l'angle de contact à la paroi, qu'il soit statique ou dynamique. Le modèle obtenu pour ces effets constitue un aspect original de notre travail. Les aspects thermiques sont traités par une approche de type Boussinesq, généralement bien adaptée au couplage entre convection naturelle et convection Marangoni.

L'étude mathématique du modèle justifie nos choix de lois de fermeture de mélange. Rappelons qu'il est nécessaire de disposer de telles lois lorsqu'il s'agit de modèles à deux fluides. Puis, l'introduction d'un modèle de relaxation, dont les solutions sont proches de celle du modèle à l'équilibre, permet de préciser les propriétés thermodynamique du modèle isotherme, et plus particulièrement la dissipation d'énergie associée aux effets de tension superficielle. D'autre part, l'étude détaillée des propriétés mathématiques du modèle de relaxation, utilisé dans la méthode numérique, permet d'obtenir un schéma numérique robuste.

La méthode numérique, basée sur une approche de type volumes finis, est d'ordre deux en temps (schéma Runge-Kutta à deux étapes) et en espace (Godunov-MUSCL). Les termes de capillarité, de viscosité et de conduction thermique, traités de manière explicite, sont discrétisés en suivant une démarche constructive. En imposant aux schémas correspondants l'invariance de certaines solutions stationnaires du modèle continu, nous montrons qu'il est possible, par le biais de choix de discrétisation, d'améliorer la précision des résultats pour des écoulements diphasiques cisaillés (Couette plan et Poiseuille plan). En suivant la même démarche, nous obtenons un moyen simple de modifier le schéma de discrétisation des forces de viscosité pour prendre en compte correctement la dépendance de la tension de surface avec la température. Ce résultat original est justifié par une étude de consistance. Il est également confirmé par les résultats numériques obtenus pour un écoulement diphasique de Poiseuille plan en présence d'un gradient longitudinal de température.

La méthode développée est validée pour des situations de ballottement et de grandes déformations d'une interface. Nous pensons qu'il serait souhaitable de continuer l'effort de validation dans des situations de microgravité, sur la base, par exemple, des travaux récents de Billingham [8]. Les résultats numériques obtenus, concernant le comportement d'une interface après réduction de la gravité prouvent que la prise en compte de modèles d'angle dynamique, sous la forme de lois de paroi, diminue l'erreur commise vis à vis des données expérimentales. Ces résultats, originaux dans le cas où l'angle de contact statique avec la paroi est faible, sont encourageants quant à l'utilisation de modèles d'angle dynamique dans les codes de calcul. La détermination plus précise

des paramètres de ces modèles, en particulier les liens entre la vitesse de la ligne triple et la vitesse numérique locale, ainsi que l'influence du pas de maillage, devrait améliorer encore les résultats. La simulation des instabilités diphasiques de Rayleigh-Bénard-Marangoni, rendue possible par la prise en compte des effets Marangoni, devrait être un premier cas intéressant de validation si l'on veut poursuivre l'étude des aspects thermiques des problèmes posés dans le cadre du programme COMPERE.

Sur le plan de la modélisation, nous pensons qu'il faudrait continuer les efforts d'analyse thermodynamique du modèle, en particulier concernant les aspects thermiques. D'autre part, les fermetures pour la viscosité et le coefficient de conduction thermique de mélange doivent également être étudiées plus en détail. En ce qui concerne la discrétisation des effets capillaires, nous sommes convaincus qu'il est possible de réduire l'amplitude des courants parasites en analysant de façon détaillée les échanges énergétiques au niveau discret.

Quatrième partie

Annexes

Annexe A

Convexité de l'entropie

Il s'agit ici de montrer la convexité des entropies des modèles (\mathcal{E}) et (\mathcal{R}) . Pour cela, il suffit de montrer :

- la convexité de l'entropie S du modèle (\mathcal{R})

– que α_* est l'unique solution du problème de minimisation :

$$\min_{\alpha\in[0,1]} \left\{ S(\alpha,\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2,\rho u)/\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2,\rho u \text{ fixes } \right\}$$

A.1 Convexité de l'entropie du modèle (\mathcal{E})

Pour le second point, tous les calculs ont été faits, il suffit de remarquer que $\frac{\partial S}{\partial \alpha} = -\phi$, ϕ ayant été utilisée dans la définition de la fraction volumique d'équilibre α_* , et dont on sait qu'elle s'annule en α_* . La dérivée seconde $\frac{\partial^2 S}{\partial \alpha^2} = -\frac{\partial \phi}{\partial \alpha}$ a également été calculée et est positive, ce qui prouve que α_* réalise bien le minimum de *S*.

Dès lors, la fonction S_* , définie par $S_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u) = S(\alpha_*(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2), \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u))$ sera une entropie convexe pour le modèle (\mathcal{E}). En effet, la caractérisation de la convexité de l'entropie *S* par les gradients s'écrit :

$$\left[\nabla_{w}S(w) - \nabla_{w}S(\hat{w})\right] \cdot (w - \hat{w}) \ge 0, \qquad (A.1)$$

cette relation étant valable pour tous les couples de vecteur (w, \hat{w}) . D'autre part, par définition de S_* , on a :

$$\nabla_{(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u)} S_* = \underbrace{\frac{\partial S}{\partial \alpha}}_{=0 \text{ puisque } \alpha_* \text{ est un minimum}} \nabla_{(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u)} \alpha_* + \nabla_{(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \rho u)} S ,$$

relation qui, injectée dans (A.1) écrite pour $\alpha = \alpha_*$, donne directement la convexité de l'entropie S_* .

A.2 Convexité de l'entropie du modèle (\mathcal{R})

On s'intéresse donc à la convexité de :

$$S(\alpha,\tilde{\rho}_1,\tilde{\rho}_2,\rho u) = \frac{1}{2} \frac{(\rho u)^2}{\tilde{\rho}_1 + \tilde{\rho}_2} + \tilde{\rho}_1 f_1(\tilde{\rho}_1/\alpha) + \tilde{\rho}_2 f_2(\tilde{\rho}_2/(1-\alpha))$$

On rappelle que, d'une part : $\tilde{\rho}_i^2 f'_i = \alpha_i^2 p_i$, et d'autre part :

$$\nabla_{w}S = \begin{pmatrix} p_{2} - p_{1} \\ -\frac{1}{2} \frac{(\rho u)^{2}}{(\tilde{\rho}_{1} + \tilde{\rho}_{2})^{2}} + f_{1} + \frac{p_{1}}{\rho_{1}} \\ -\frac{1}{2} \frac{(\rho u)^{2}}{(\tilde{\rho}_{1} + \tilde{\rho}_{2})^{2}} + f_{2} + \frac{p_{2}}{\rho_{2}} \\ \frac{q}{\tilde{\rho}_{1} + \tilde{\rho}_{2}} \end{pmatrix}$$

On veut montrer que :

$$I(w,\hat{w}) = [\nabla_w S(w) - \nabla_w S(\hat{w})] \cdot (w - \hat{w}) \ge 0$$

Pour cela, on écrit $I = I_{ec} + I_p$, où I_{ec} contient les termes provenant de l'énergie cinétique, et I_p les autres. En revenant algébriquement (sans changement de variable) aux variables naturelles, on écrit :

$$I_{ec} = -\frac{1}{2}(u^2 - \hat{u}^2)(\rho - \hat{\rho}) + (u - \hat{u})(\rho u - \hat{\rho}\hat{u})$$

en se souvenant que $\rho = \tilde{\rho}_1 + \tilde{\rho}_2$. On met $(u - \hat{u})$ en facteur, et avec l'identité $[ab] = \bar{a}[b] + \bar{b}[a]$, on obtient :

$$I_{ec} = \frac{\rho + \hat{\rho}}{2} (u - \hat{u})^2 \ge 0$$

Pour conclure, il suffit donc de prouver que I_p est positif, ou ce qui revient au même, de montrer la convexité de la fonction S_p définie par $S_p(\alpha, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2) = S(\alpha, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, 0)$.

On calcule le hessien de S_p , on obtient :

$$H = \nabla^2 S_p = \begin{pmatrix} \frac{\tilde{\rho}_1}{\alpha^2} c_1^2 + \frac{\tilde{\rho}_2}{(1-\alpha)^2} c_2^2 & -\frac{c_1^2}{\alpha} & \frac{c_2^2}{1-\alpha} \\ & -\frac{c_1^2}{\alpha} & \frac{c_1^2}{\tilde{\rho}_1} & 0 \\ & \frac{c_2^2}{1-\alpha} & 0 & \frac{c_2^2}{\tilde{\rho}_2} \end{pmatrix}$$

Calculant le polynôme caractéristique de S_p , on montre aisément qu'il se met sous la forme :

$$\det(H - \zeta I) = -\zeta P_H(\zeta)$$

où P_H est un polynôme de degré deux de la forme :

$$P_H(\zeta) = \zeta^2 - \Sigma \zeta + \Pi$$

avec $\Pi \ge 0$ et $\Sigma \ge 0$, ce qui prouve que ses deux racines réelles (*H* est symétrique réelle) sont positives, et achève la preuve.

Le fait que 0 soit valeur propre du hessien de S_p montre également que S n'est pas strictement convexe.

Annexe B

Propriétés de la fonction δU

On démontre dans cette annexe les propriétés de la fonction $\delta \mathcal{U}$, utile lors de la résolution du problème de Riemann associé au modèle (\mathcal{R}). Cette étude simple mais un peu fastidieuse prend tout son intérêt dans la mise en oeuvre, la bonne convergence de la méthode itérative étant essentielle dans un schéma de Godunov exact.

On rappelle que les 1-courbes de choc et de détente s'écrivent sous la forme :

$$u_1 = u_g + \Theta_g(P) , \text{ avec} : \Theta_g(P) = \begin{cases} c_g \log\left(\frac{P_g - \tilde{P}_{0g}}{P - \tilde{P}_{0g}}\right) & \text{si } P \leq P_g \\ -\frac{P - P_g}{\sqrt{\rho_g(P - \tilde{P}_{0g})}} & \text{si } P > P_g \end{cases}$$

,

alors que les 3-courbes de choc et de détente s'écrivent :

$$u_{3} = u_{d} + \Theta_{d}(P) , \text{ avec} : \Theta_{d}(P) = \begin{cases} -c_{d} \log\left(\frac{P_{d} - \tilde{P}_{0d}}{P - \tilde{P}_{0d}}\right) & \text{si } P \leq P_{d} \\ \\ \frac{P - P_{d}}{\sqrt{\rho_{d}(P - \tilde{P}_{0d})}} & \text{si } P > P_{d} \end{cases}$$

On définit alors la fonction $\delta \mathcal{U} = u_1 - u_3$. Il s'agit de prouver :

 $\begin{array}{l} - \ \delta \mathcal{U} \ \text{est} \ C^1 \ \text{sur} \ I, \ \text{avec} \ \delta \mathcal{U}' < 0, \ \text{donc} \ \delta \mathcal{U} \ \text{est strictement} \ \text{décroissante,} \\ - \ \lim_{P \to \tilde{P}_0} \delta \mathcal{U} = +\infty \\ - \ \lim_{P \to +\infty} \delta \mathcal{U} = -\infty \end{array} \end{array}$

Ainsi, sur l'intervalle *I*, il existe une unique solution P^* à l'équation (3.12) : $\delta U(P^*) = 0$.

B.1 Décroissance

Il suffit en fait de prouver que Θ_g est décroissante ($\Theta_g C^1$ et $\Theta'_g < 0$) puis que Θ_d est croissante ($\Theta_d C^1$ et $\Theta'_d > 0$).

B.1.1 1-onde

La fonction Θ_g est dérivable sur $]\tilde{P}_{0g}, +\infty[$, avec :

$$\Theta_g'(P) = \begin{cases} -\frac{c_g}{P - \tilde{P}_{0g}} & \text{si } P \leq P_g \\ \\ \frac{\rho_g \left(\tilde{P}_{0g} - \frac{P + P_g}{2}\right)}{\left(\rho_g (P - \tilde{P}_{0g})\right)^{3/2}} & \text{si } P > P_g \end{cases}$$

De plus Θ_g est même C^1 puisque :

$$\lim_{P\to P_g+0}\Theta'_g=-\frac{1}{\rho_g c_g}=\lim_{P\to P_g-0}\Theta'_g.$$

Enfin, puisque $P > \tilde{P}_{0g}$ et $P_g > \tilde{P}_{0g}$, on a bien $\tilde{P}_{0g} < \frac{P + P_g}{2}$ et par suite : $\Theta'_g < 0$.

B.1.2 3-onde

De la même manière, la fonction Θ_d est dérivable sur $]\tilde{P}_{0d}, +\infty[$, avec :

$$\Theta_{d}'(P) = \begin{cases} \frac{c_{d}}{P - \tilde{P}_{0d}} & \text{si } P \leq P_{d} \\ \\ -\frac{\rho_{d} \left(\tilde{P}_{0d} - \frac{P + P_{d}}{2}\right)}{\left(\rho_{d} (P - \tilde{P}_{0d})\right)^{3/2}} & \text{si } P > P_{d} \end{cases}$$

De plus Θ_d est même C^1 puisque :

$$\lim_{P\to P_d+0}\Theta'_d=\frac{1}{\rho_d c_d}=\lim_{P\to P_d-0}\Theta'_d.$$

Enfin, puisque $P > \tilde{P}_{0d}$ et $P_d > \tilde{P}_{0d}$, on a bien $\tilde{P}_{0d} < \frac{P + P_d}{2}$ et par suite :

$$\Theta_d' > 0$$

B.1.3 Bilan

En rassemblant les résultats, on a bien :

 $\delta \mathcal{U}$ est C^1 sur *I*, avec $\delta \mathcal{U}' < 0$, donc $\delta \mathcal{U}$ est décroissante.

B.2 Limites aux bornes

B.2.1 Pression de mélange infinie

Lorsque *P* est supérieur à $\max(P_g, P_d)$, on a :

$$\delta \mathcal{U}(P) = u_g - u_d - \left(\frac{P - P_g}{\sqrt{\rho_g(P - \tilde{P}_{0g})}} + \frac{P - P_d}{\sqrt{\rho_d(P - \tilde{P}_{0d})}}\right)$$

donc :

$$\delta \mathcal{U}(P) \sim_{+\infty} - rac{\sqrt{
ho_d} + \sqrt{
ho_g}}{\sqrt{
ho_g
ho_d}} \sqrt{P} \, ,$$

et par suite :

$$\lim_{P\to+\infty}\delta \mathcal{U}=-\infty.$$

B.2.2 Pression de mélange critique \tilde{P}_0

On rappelle que $\tilde{P}_0 = \max(\tilde{P}_{0g}, \tilde{P}_{0d})$. Il faut alors distinguer deux cas : soit $\tilde{P}_0 < \min(P_g, P_d)$, soit P_g ou P_d est inférieur ou égal à \tilde{P}_0 .

B.2.2.1 Premier cas : $\tilde{P}_0 < \min(P_g, P_d)$

Dans ce cas, la pression P tendant vers \tilde{P}_0 , on peut toujours supposer $P < \min(P_g, P_d)$, donc :

$$\delta \mathcal{U}(P) = u_g - u_d + \underbrace{c_g \log\left(\frac{P_g - \tilde{P}_{0g}}{P - \tilde{P}_{0g}}\right)}_{(g)} + \underbrace{c_d \log\left(\frac{P_d - \tilde{P}_{0d}}{P - \tilde{P}_{0d}}\right)}_{(d)}$$

Comme \tilde{P}_0 vaut soit \tilde{P}_{0g} , soit \tilde{P}_{0d} , l'un des deux termes (g) ou (d) tend vers $+\infty$, l'autre étant borné, et on a bien $\lim_{P \to \tilde{P}_0} \delta \mathcal{U}(P) = +\infty$.

B.2.2.2 Second cas : $P_g \leq \tilde{P}_0$ ou $P_d \leq \tilde{P}_0$

Si $P_g \leq \tilde{P}_0$, pour $P > \tilde{P}_0$, on a nécessairement, $P > P_g$, et donc pour $\tilde{P}_0 = \tilde{P}_{0d} < P \leq P_d$, $\delta \mathcal{U}$ s'écrit :

$$\delta \mathcal{U}(P) = u_g - u_d - \underbrace{\frac{P - P_g}{\sqrt{\rho_g(P - \tilde{P}_{0g})}}}_{\text{borné}} + \underbrace{c_d \log\left(\frac{P_d - \tilde{P}_{0d}}{P - \tilde{P}_{0d}}\right)}_{\rightarrow +\infty} \quad ,$$

ce qui prouve bien que $\lim_{P \to \tilde{P}_0} \delta \mathcal{U}(P) = +\infty$. De la même manière, si $P_d \leq \tilde{P}_0$, le terme provenant de u_3 reste borné, alors que le terme provenant de u_1 tend vers $+\infty$.

B.2.2.3 Bilan

Dans tous les cas, on a bien :

$$\lim_{P\to \tilde{P}_0} \delta \mathcal{U} = +\infty.$$

,

B.3 Convexité

Ici, on montre que $\delta \mathcal{U}$ est deux fois dérivable sur *I*, avec $\delta \mathcal{U}'' > 0$, donc que $\delta \mathcal{U}$ est convexe. Rappelons que cette propriété est utile lors de la résolution par une méthode de Newton de l'équation (3.12). À cette fin, il suffit de montrer que $\Theta_g'' > 0$, et $\Theta_d'' < 0$.

B.3.1 1-onde

On calcule la dérivée seconde de Θ_g , et on obtient :

$$\Theta_{g}^{\prime\prime}(P) = \begin{cases} \frac{c_{g}^{2}}{(P - \tilde{P}_{0g})^{2}} & \text{si } P \leq P_{g} \\ \\ -\frac{2\rho_{g}^{2}\left(\tilde{P}_{0g} - \frac{5P + 3P_{g}}{8}\right)}{\left(\rho_{g}(P - \tilde{P}_{0g})\right)^{5/2}} & \text{si } P > P_{g} \end{cases}$$

ce qui prouve bien que :

$$\Theta_g''>0$$
 ,

puisque *P* et P_g sont supérieurs à \tilde{P}_{0g} , donc $\tilde{P}_{0g} < \frac{5P + 3P_g}{8}$.

B.3.2 3-onde

De la même manière, on calcule la dérivée seconde de Θ_d :

$$\Theta_d''(P) = \begin{cases} -\frac{c_d^2}{(P - \tilde{P}_{0d})^2} & \text{si } P \leq P_d \\ \\ \frac{2\rho_d^2 \left(\tilde{P}_{0d} - \frac{5P + 3P_d}{8}\right)}{\left(\rho_d (P - \tilde{P}_{0d})\right)^{5/2}} & \text{si } P > P_d \end{cases}$$

ce qui prouve bien que :

$$\Theta_d'' < 0,$$

puisque *P* et P_d sont supérieurs à \tilde{P}_{0d} , donc $\tilde{P}_{0d} < \frac{5P + 3P_d}{8}$.

B.3.3 Remarque

Les fonctions Θ_g'' et Θ_d'' ne sont respectivement pas continues en P_g et P_d , puisque d'une part :

$$\lim_{P \to P_g + 0} \Theta_g''(P) = \frac{2}{\rho_g^2 c_g^3} \neq \frac{1}{\rho_g^2 c_g^3} = \lim_{P \to P_g - 0} \Theta_g''(P) ,$$

et d'autre part :

$$\lim_{P \to P_d + 0} \Theta_d''(P) = -\frac{2}{\rho_d^2 c_d^3} \neq -\frac{1}{\rho_d^2 c_d^3} = \lim_{P \to P_d - 0} \Theta_d''(P) \; .$$

Annexe C

Version axisymétrique du code de calcul

Nous présentons ici succintement les modifications apportées au modèle de relaxation (puisque nous intégrons numériquement les équations associées à ce modèle) et à la méthode numérique afin de pouvoir traiter les situations où à la fois la géométrie et l'écoulement sont axisymétriques. Nous nous plaçons également sous l'hypothèse que la vitesse orthoradiale est nulle et qu'elle le reste.

Les coordonnées cylindriques étant particulièrement bien adaptées aux géométries axisymétriques, nous projetons les différentes équations du modèle sur les vecteurs de base associés, que nous notons encore ($\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$). Nous notons donc *x* la coordonnée radiale, *y* la cordonnée axiale et (*u*, *v*) les composantes de la vitesse dans cette base. On peut écrire les équations sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} (x\rho\alpha) + \tilde{\nabla} \cdot (x\rho\alpha\mathbf{V}) &= \frac{1}{\epsilon} \left[p_1 \left(\frac{x\tilde{\rho}_1}{x\alpha} \right) - p_2 \left(\frac{x\tilde{\rho}_2}{x(1-\alpha)} \right) \right] \\ \frac{\partial}{\partial t} (x\tilde{\rho}_1) + \tilde{\nabla} \cdot (x\tilde{\rho}_1\mathbf{V}) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (x\tilde{\rho}_2) + \tilde{\nabla} \cdot (x\tilde{\rho}_2\mathbf{V}) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (x\rho\mathbf{V}) + \tilde{\nabla} \cdot [x(\rho\mathbf{V}\tilde{\otimes}\mathbf{V} + P\mathbb{I})] &= S_{axi} + \tilde{\nabla} \cdot \left[x \left(\tilde{\tau}^C + \tilde{\tau}^D \right) \right] \end{cases}$$
(C.1)

où l'opérateur $\tilde{\nabla}$ désigne :

$$\tilde{\nabla} \cdot (\cdot) = \frac{\partial}{\partial x} (\cdot) \, \mathbf{e}_x + \frac{\partial}{\partial y} (\cdot) \, \mathbf{e}_y \, ,$$

et le tenseur $\tilde{\tau}^C + \tilde{\tau}^D$ est la restriction du tenseur $\tau^C + \tau^D$ à ses quatre composantes suivant $\mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_x$ et $\mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_y$. De la même manière, l'opérateur $\tilde{\otimes}$ est la restriction de l'opérateur \otimes à ses quatre composantes suivant les mêmes tenseurs, de sorte que dans la base $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y)$, le tenseur $\mathbf{V} \tilde{\otimes} \mathbf{V}$ est représenté par la matrice :

$$\mathbf{V}\tilde{\otimes}\mathbf{V} = \left(\begin{array}{cc} u^2 & uv\\ uv & v^2 \end{array}\right)$$

Enfin le terme source S_{axi} vaut :

$$\mathcal{S}_{\mathrm{axi}} = \left(P - \sigma \| \nabla \alpha \| - \mu \frac{u}{x} \right) \mathbf{e}_x \,.$$

Ce terme source provient de la relation :

$$x \nabla \cdot T = \tilde{\nabla} \cdot (x \tilde{T}) - T_{\Theta \Theta} \mathbf{e}_x ,$$

valable pour un tenseur symétrique qui, dans la base $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_{\theta}, \mathbf{e}_y)$, est représenté par la matrice :

$$T = \left(egin{array}{ccc} T_{xx} & 0 & T_{xy} \ 0 & T_{ heta heta} & 0 \ T_{xy} & 0 & T_{yy} \end{array}
ight) \, ,$$

ce qui est bien le cas pour les tenseurs des contraintes $\tau = -P\mathbb{I} + \tau^D$ ainsi que pour le tenseur des contraintes capillaires τ^C . Attention, les termes en $T_{\theta\theta}$ ne sont pas tous nuls dans le cas des tenseurs nous préoccupant.

Ainsi, les modifications à apporter à la méthode numérique sont minimes :

1. les termes du type $\tilde{\nabla} \cdot \mathbf{A}$ sont discétisés par :

$$\left(\tilde{\nabla} \cdot \mathbf{A}\right)_{i,j} = \frac{x_{i+1/2}\mathbf{A}_{i+1/2,j} - x_{i-1/2}\mathbf{A}_{i-1/2,j}}{\Delta x} + x_i \frac{\mathbf{A}_{i,j+1/2} - \mathbf{A}_{i,j-1/2}}{\Delta y} .$$
(C.2)

- 2. Pour la partie "schéma de relaxation" de la méthode, il suffit de remarquer que les masses $\tilde{\rho}_k$ ont été changées en $x\tilde{\rho}_k$. Cette remarque vaut tout aussi bien pour l'étape hyperbolique (puisque le problème de Riemann a été résolu en variables naturelles) que pour l'étape de relaxation où il suffit, lors de la résolution de l'équation (1.28) voir § 1.4.2, de changer \tilde{q} en \tilde{q}/x_i .
- 3. Enfin, les termes sources spécifiques à la géométrie axisymétrique apparaissant sur la composante radiale du bilan de quantité de mouvement sont calculés au centre des cellules et traités de manière explicite.

Remarques :

- 1. La prise en compte des effets capillaires sous forme conservative facilite grandement la transposition en coordonnées cylindriques.
- 2. Du point de vue de la programmation, on peut disposer d'un programme unique pour les situations d'écoulement plan et axisymétrique. Pour cela, il suffit :
 - de disposer d'un booléen a_{ξ} (un réel en pratique) valant 1 dans le cas axisymétrique et 0 dans le cas plan : le terme source S_{axi} est alors remplacé par $a_{\xi}S_{axi}$;
 - de définir deux routines correspondant à l'application (bijective) de passage des variables conservatives aux variables naturelles et à son inverse. Ces routines doivent dépendre du réel $r_i = (r_{i+1/2} + r_{i-1/2})/2$ stocké dans chaque cellule. Les $r_{i\pm 1/2}$, stockés sur chaque face, doivent valoir $x_{i+1/2}$ dans le cas axisymétrique et 1 dans le cas plan. Ceci est réalisable très simplement en remarquant que dans les deux cas :

$$r_{i+1/2} = 1 - a_{\xi} (1 - x_{i+1/2})$$

de sorte que les r_i valent 1 dans le cas plan et x_i dans le cas axisymétrique. Dès lors, les masses $(\tilde{\rho}_k)_{i,j}$ sont bien $r_i(\tilde{\rho}_k)_{i,j}$ dans les deux cas. La discrétisation des termes de divergence est également acquise en changeant les $x_{i\pm 1/2}$ dans (C.2) par les $r_{i\pm 1/2}$ correspondants. De la même manière, lors de l'étape de relaxation, le changement de \tilde{q} et \tilde{q}/r_i est valable dans le cas plan comme dans le cas axisymétrique.

Bibliographie

- [1] R. ABGRALL. « How to Prevent Oscillations in Multicomponent Flow-Calculations : a Quasi Conservative Approach ». *Journal of Computational Physics*, **125** :150–160, (1996).
- [2] R. ABGRALL, B. NKONGA et R. SAUREL. « Efficient Numerical approximation of Compressible Multi-Material flow for unstructured meshes ». *Computers and Fluids*, 32(4):571– 605, (2003).
- [3] C.D. ANDERECK, P.W. COLOVAS, M.M. DEGEN et Y.Y. RENARDY. « Instabilities in two layer Rayleigh-Bénard convection : overview and outlook ». *International Journal of Engineering Science*, 36 :1451–1470, (1998).
- [4] P. ANGOT, J.P. CALTAGIRONE et K. KHADRA. « Une méthode adaptative de raffinement local : la correction de flux à l'interface ». *C. R. Acad. Sci. Paris, série I*, **315** :739–745, (1992).
- [5] P. BAGNERINI, F. COQUEL, C. MARMIGNON et S. ROUY. « Un principe de relaxation sur le taux de vide dans les modèles diphasiques moyennés ». *Préprint de l'école d'été du CEMRACS*, (2000).
- [6] N. BEDJAOUI. « Analyse mathématique de modèles d'écoulements diphasiques stratifiés ». Thèse de doctorat, École Polytechnique, (1996).
- [7] A. BENKENIDA. « Développement et validation d'une méthode de simulation d'écoulements diphasiques sans reconstruction d'interface. Application à la dynamique des bulles de Taylor ». Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, (1999).
- [8] J. BILLINGHAM. « Nonlinear sloshing in zero gravity ». *Journal of Fluid Mechanics*, **464**:365–391, (2002).
- [9] T.D. BLAKE, M. BRACKE et Y.D. SHIKHMURZAEV. « Experimental evidence of nonlocal hydrodynamic influence on the dynamic contact angle ». *Physic of Fluids*, **11**(6) :1995–2007, (1999).
- [10] J. BOURÉ. « Dynamique des écoulements diphasiques : propagation de petites perturbations ». Rapport Technique CEA-R-4456, Commissariat à l'Énergie Atomique, (1973).
- [11] J.U. BRACKBILL, D.B. KOTHE et C. ZEMACH. « A continuum method for modeling surface tension ». Journal of Computational Physics, 100 :335–354, (1992).
- [12] R. CAIDEN, R.P. FEDKIW et C. ANDERSON. « A Numerical Method for Two Phase Flow Consisting of Separate Compressible and Incompressible Regions ». *Journal of Computational Physics*, **166** :1–27, (2001).
- [13] P. CASAL et H. GOUIN. « Sur les interfaces liquide-vapeur non isothermes ». Journal de Mécanique théorique et appliquée, 7(6):689–718, (1988).
- [14] C. CAULLET. « Étude des méthodes sans maillage d'intégration d'équations aux dérivées partielles ». Mémoire de DEA, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse et Université Paul-sabatier, Toulouse III, (2002).

- [15] H.D. CENICEROS et T.Y. HOU. « Convergence of a non-stiff boundary integral method for interfacial flows with surface tension ». *Mathematics of Computation*, **67**(221) :137–182, (1998).
- [16] H.D. CENICEROS et T.Y. HOU. « Numerical Study of Interfacial Problems with Small Surface Tension ». Dans Proceedings of the International Congress of Chinese Mathematicians, pages 59–88, (2000).
- [17] Y.C. CHAN, T.Y. HOU, B. MERRIMAN et S. OSHER. « A Level Set Formulation of Eulerian Interface Capturing Methods for Incompressible Fluid Flows ». *Journal of Computational Physics*, **124** :449–464, (1996).
- [18] G. CHANTEPERDRIX, F. ROGIER, J.P. VILA et P. VILLEDIEU. « Synthesis and analysis of the COMPERE benchmark ». Rapport Technique 2/05067/DTIM, Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales, (2001).
- [19] G. CHANTEPERDRIX, P. VILLEDIEU et J.P. VILA. « Un modèle bifluide compressible pour la simulation numérique d'écoulements diphasiques à phases séparées ». Rapport Technique, Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales, (2001).
- [20] G. CHANTEPERDRIX, P. VILLEDIEU et J.P. VILA. « A Compressible Model for Separated Two-Phase Flows Computations ». Dans Proceedings of the 2002 ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, Montréal, Quebec, Canada, July 14-18, numéro FEDSM2002-31141, (2002).
- [21] C. CHEN et J.M. FLORYAN. « Numerical Simulation of Nonisothermal Capillary Interfaces ». *Journal of Computational Physics*, **111** :183–193, (1994).
- [22] B.L. CHENG, J. GLIMM, D. SALTZ et D.H. SHARP. « Boudary conditions for a two pressure two-phase flow model ». *Physica D*, 133 :84–105, (1999).
- [23] B.L. CHENG, J. GLIMM, D. SALTZ et D.H. SHARP. « Two-phase modelling of a fluid mixing layer ». *Journal of Fluid Mechanics*, 378 :119–143, (1999).
- [24] M.S. CHUNG, K.S. CHANG et S.J. LEE. « Wave propagation in two-phase flow based on a new hyperbolic two-fluid model ». *Numerical Heat Transfer, Part A*, **38**:169–191, (2000).
- [25] S. CLERC. « Numerical Simulation of the Homogeneous Equilibrium Model for Two-Phase Flows ». *Journal of Computational Physics*, **161** :354–375, (2000).
- [26] K.A. CLIFFE et S.J. TAVENER. « Marangoni-Bénard Convection with a Deformable Free Surface ». Journal of Computational Physics, 145 :193–227, (1998).
- [27] F. COQUEL, T. GALLOUËT, J.M. HÉRARD et N. SEGUIN. « Closure laws for a two-fluid two-pressure model ». C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I, **334** :927–932, (2002).
- [28] F. COQUEL et B. PERTHAME. « Relaxation of energy and approximate Riemann solvers for general pressure laws in fluid dynamics ». SIAM Journal of Numerical Analysis, 35(6):2223–2249, (1998).
- [29] J. CORTES. « Étude des régimes transitoires d'écoulements diphasiques à faible rapport de densité ». Thèse de doctorat, Université Paris XI, Orsay, (1999).
- [30] F. COUDERC et J.L. ESTIVALEZES. « Modélisation de la fragmentation de jet de carburant liquide ». Rapport Technique RT-2/06123-DMAE, Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales, (2003).
- [31] P.G. de GENNES, F. BROCHART-WYART et D. QUÉRÉ. Gouttes, bulles perles et ondes. Belin, (2002).

- [32] S. DELLACHERIE et N. RENCY. « Relations de fermetures pour le système d'Euler multi-espèces. Construction et étude des schémas de relaxation en multi-espèces et multiconstituants ». *Préprint*, (2001).
- [33] R. DOUROT et G.A. MAUGIN. « Application of diffuse internal variables in complex fluids ». *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **96** :31–43, (2001).
- [34] D.A. DREW. « Mathematical modeling of Two-Phase Flow ». Annual Review of Fluid Mechanics, 15 :261–291, (1983).
- [35] M.E. DREYER, J. GERSTMANN, M. MICHAELIS et U. SCHMID. « Capillary Effects under Compensated Gravity Conditions ». Rapport Technique COMPERE RT-NT-22R2200-0201-ZARM-01, ZARM, Center of Applied Space Technology and Microgravity, (2002).
- [36] J.E. DUNN et J. SERRIN. « On the Thermomechanics of Interstitial Working ». Archive for Rational Mechanics and Analysis, **88**:95–133, (1985).
- [37] C. DUQUENNOY. « Développement d'une approche de simulation numérique directe de l'ébullition en paroi ». Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, (2000).
- [38] S. EVJE et K.K. FJELDE. « Relaxation Schemes for the Calculation of Two-Phase Flows in Pipes ». *Mathematical and Computer Modelling*, **36**:535–567, (2002).
- [39] S. EVJE et K.K. FJELDE. « On a rough AUSM scheme for a one dimensional two-phase model ». *Computers and Fluids*, **32**:1497–1530, (2003).
- [40] J. FABRE. « *Thermodynamique* ». polycopié de l'École Nationale Supérieure d'Électronique, d'Électrotechnique, d'Informatique et d'Hydraulique de Toulouse, (1985).
- [41] R.P. FEDKIW. The Ghost Fluid Method for Discontinuities and Interfaces. Dans E.F. TORO, éditeur, *Godunov Methods*, pages 309–317. Kluwer, New-York, (2001).
- [42] R.P. FEDKIW. « Coupling an Eulerian fluid calculation to a Lagrangian solid calculation with the Ghost Fluid Method ». *Journal of Computational Physics*, **175** :200–224, (2002).
- [43] R.P. FEDKIW, T. ASLAM, B. MERRIMAN et S. OSHER. « A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method) ». *Journal of Computational Physics*, 152 :457–492, (1999).
- [44] R.P. FEDKIW et X.D. LIU. The Ghost Fluid Method for Viscous Flow. Dans M. HAFEZ et J.J. CHATTOT, éditeurs, *Innovative Methods for Numerical Solutions of Partial Differential Equations*, pages 111–143. World Scientific Publishing, New Jersey, (2002).
- [45] R.P. FEDKIW, X.D. LIU et S. OSHER. « A General Technique for Eliminating Spurious Oscillations in Conservative Schemes for Multiphase and Multispecies Euler Equations ». *Nonlinear Sci. and Numer. Sim.*, **3**:99–106, (2002).
- [46] K. FUJIMURA et Y.Y. RENARDY. « The 2 :1 steady/Hopf mode interaction in the two-layer Bénard problem ». *Physica D*, **85** :25–65, (1995).
- [47] E. GAUDIN, E.J. HOPFINGER et A. CARTELLIER. « Liquid Reorientation : Geyser Formation and Gas Entrainment ». Rapport Technique COMPERE RT-NT-22R2200-0201-LEGI-01, Laboratoire des Écoulements Géophysiques et Industriels, (2001).
- [48] S. GAVRIKYUK et R. SAUREL. « Mathematical and Numerical Modeling of Two-Phase Compressible Flows with Micro-Inertia ». *Journal of Computational Physics*, **175** :326–360, (2002).
- [49] S. GAVRILYUK et H. GOUIN. « A new form of governing equations of fluids arising from Hamilton's principle ». *International Journal of Engineering Science*, **37**:1495–1520, (1999).

- [50] A.Y. GELFGAT. « Different Modes of Rayleigh-Bénard Instability in Two- and Three-Dimensional Rectangular Enclosure ». *Journal of Computational Physics*, **156**:300–324, (1999).
- [51] P. GERMAIN et P. MULLER. Introduction à la mécanique des milieux continus. Masson, deuxième édition, (1995).
- [52] J. GERTSMANN, M. DREYER et H.J. RATH. « Numerical Investigation of the Damped Oscillations of a Liquid/Gas Surface upon Step Reduction in Gravity ». Z. Angew. Math. Mech., 80:717-718, (2000).
- [53] I. GINZBURG et G. WITTUM. « Two-Phase Flows on Interface Refined Grids Modeled with VOF, Staggered Finite Volumes, and Spline Interpolants ». *Journal of Computational Physics*, **166** :302–335, (2001).
- [54] A.A. GOLOVIN et A.A. NEPOMNYASCHCHY. « Nonlinear evolution and secondary instabilities of Marangoni convection in a liquid-gas system with deformable interface ». *Journal of Fluid Mechanics*, **341** :317–341, (1997).
- [55] I. GRILLO. « Small-angle neutron scattering study of a world-wide known emulsion : Le Pastis ». *Colloids and Surfaces A : Physcochem. Eng. Aspects*, **225** :153–160, (2003).
- [56] D. GUEYFFIER, J. LI, A. NADIM, R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI. « Volume-of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three Dimensional Flows ». *Journal of Computational Physics*, **152** :423–456, (1999).
- [57] E. GUYON, J.P. HULIN et L. PETIT. Hydrodynamique Physique. Éditions du CNRS, deuxième édition, (1991).
- [58] F.H. HARLOW et J.E. WELCH. « Numerical Calculation of time-dependant viscous incompressible flow of fluid with free interface ». *Physics of Fluid*, **8** :2182–2189, (1965).
- [59] A. HARTEN. « High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Law ». *Journal of Computational Physics*, **49**:357–393, (1983).
- [60] A HARTEN, P. LAX, D. LEVERMORE et W. MOROKOFF. «Convex entropies and hyperbolicity for general euler equations ». SIAM Journal of Numerical Analysis, 35(6):2117–2127, (1998).
- [61] A HARTEN, P. LAX et B. van LEER. « On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws ». SIAM Journal on Numerical Analysis, 25(1):33–61, (1983).
- [62] C.W. HIRT et B.D. NICHOLS. « Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boudaries ». *Journal of Computational Physics*, **39** :201–225, (1981).
- [63] C. ISENBERG. The Science of Soap Films and Soap Bubbles. Dover, New-York, (1992).
- [64] D. JACQMIN. « Calculation of Two-Phase Navier-Stokes Flows Using Phase-Field Modeling ». Journal of Computational Physics, 155 :96–127, (1999).
- [65] D. JAMET. « Étude des potentialités de la théorie du second gradient pour la simulation numérique directe des écoulements liquide-vapeur avec changement de phase ». Thèse de doctorat, École Centrale Paris, (1998).
- [66] D. JAMET, O. LEBAIGUE, N. COUTRIS et J.M. DELHAYE. « The Second Gradient Method for the Direct Numerical Simulation of Liquid-Vapor Flows with Phase Change ». *Journal of Computational Physics*, **169** :624–651, (2001).
- [67] D. JAMET, D. TORRES et J.U. BRACKBILL. « On the Theory and Computation of Surface Tension : The Elimination of Parasitic Currents through Energy Conservation in the Second-Gradient Method ». *Journal of Computational Physics*, **182** :262–276, (2002).

- [68] D. JAMET, J.P. VILA, P. VILLEDIEU et G. CHANTEPERDRIX. « Équations de bilan pour un modèle compressible avec prise en compte de la tension interfaciale ». *en préparation*, (2003).
- [69] R.J.J. JONGSCHAAP et H.C. OTTINGER. « Nonequilibrium thermodynamics and complex fluids ». *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **96** :1–3, (2001).
- [70] A. JUEL, J.M. BURGESS, W.D. MCCORMICK, J.B. SWIFT et H.L. SWINNEY. « Surface tension-driven convection patterns in two liquid layers ». *Physica D*, 143 :169–186, (2000).
- [71] M. KANG, R.P. FEDKIW et X.D. LIU. « A Boundary Condition Capturing Method for Multiphase Incompressible Flow ». *Journal of Scientific Computing*, **15**:322–360, (2000).
- [72] S. KARNI. « Hybrid Multifluid Algorithms ». *SIAM Journal of Scientific Computing*, **17**(5):1019–1039, (1996).
- [73] S. KARNI. « Multi-Component Flow Calculations by a Consistent Primitive Algorithm ». *Journal of Computational Physics*, **112** :31–43, (1996).
- [74] D.B. KOTHE et W.J. RIDER. « Comments on Modeling Interfacial Flows with Volume-of-Fluid Methods ». Rapport Technique LA-UR-94-3384, Los Alamos National Laboratory, (1994).
- [75] D.B. KOTHE et W.J. RIDER. « Practical Considerations for Interface Tracking Methods ». Rapport Technique LA-UR-95-1741, Los Alamos National Laboratory, (1995).
- [76] H.C. KUHLMANN et Ch. NIENHÜSER. « Dynamic free-surface deformations in thermocapillary bridges ». *Fluid Dynamics Research*, **31** :103–127, (2002).
- [77] B. LAFAURIE, C. NARDONE, R. SCARDOVELLI, S. ZALESKI et G. ZANETTI. « Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER ». *Journal of Computational Physics*, **113**:134–147, (1994).
- [78] H. LAMB. Hydrodynamics. Dover, New-York, (1932).
- [79] L. LANDAU et E. LIFSCHITZ. **Mécanique des fluides**, tome **6** de *Physique théorique*. Éditions Mir, deuxième édition, (1989).
- [80] G. LEBON, P.C. DAUBY et V.C. REGNIER. « Role of Interface Deformations in Benard-Marangoni Instability ». Astra Astronautica, 48(5-12):617–627, (2001).
- [81] O. LEMETAYER, B. NKONGA, R. ABGRALL, E. DANIEL, R. SAUREL et J. MASSONI. « Modélisation des phénomènes de transfert masse associés au remplissage de réservoirs cryogéniques ». Préprint de l'école d'été du CEMRACS, (2000).
- [82] J. LI. « Calcul d'interface affine par morceaux (Piecewise Linear Interface Calculation) ». C. R. Acad. Sci. Paris, série IIb, 320 :391–396, (1995).
- [83] S. LUBIN, S. VINCENT, J.P. CALTAGIRONE et S. ABADIE. « Simulation numérique directe tridimensionnelle du déferlement plongeant ». C. R. Mécanique, 331(7):495–501, (2003).
- [84] D.V. LYUBIMOV, T.P. LYUBIMOVA, J.I.D. ALEXANDER et N.I. LOBOV. « On the Boussinesq Approximation for Fluid Systems with Deformable Interfaces ». Adv. Space Res., 22(8) :1159–1168, (1998).
- [85] T.R. MARCHANT et N.F. SMYTH. « Pulse Evolution for Marangoni-Bénard Convection ». *Mathematical and Computer Modelling*, **28**(10) :45–58, (1998).
- [86] J. MASSONI, R. SAUREL, B. NKONGA et R. ABGRALL. « Proposition de méthodes et modèles eulériens pour les problèmes à interfaces entre fluides compressibles en présence de transfert de chaleur ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(6) :1287– 1307, (2002).

- [87] M. MICHAELIS, M.E. DREYER et H.J. RATH. « Experimental Investigation of the Liquid Interface Reorientation upon Step Reduction in Gravity ». *Ann. N.Y. Acad. Sci.*, **974** :246–260, (2002).
- [88] J. MONNIER et P. WITOMSKI. « Wetting Hydrodynamics with a Self-Induced Marangoni effect. Part I : Mathematical Modeling and Analysis ». *Préprint*, (2003).
- [89] W. MUSCHIK, C. PAPENFUSS et H. EHRENTRAUT. « A sketch of continuum thermodynamics ». Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 96 :255–290, (2001).
- [90] Notes du cours de J. FABRE et D. LEGENDRE, École Nationale Supérieure d'Électronique, d'Électrotechnique, d'Informatique et d'Hydraulique de Toulouse. « Écoulements Diphasiques », (2000).
- [91] N.A. PELEKASIS, J.A. TSAMOPOULOS et G.D. MANOLIS. « Nonlinear oscillations of liquid shells in zero gravity ». *Journal of Fluid Mechanics*, **230** :541–582, (1991).
- [92] O. PENROSE et P.C. FIFE. « On the relation between the standard phase-field model and a "thermodynamically consistent" phase-field model ». *Physica D*, **69** :107–113, (1993).
- [93] S. POPINET et S. ZALESKI. « Bubble collapse near a solid boundary : a numerical study of influence of viscosity ». *Journal of Fluid Mechanics*, **464** :137–163, (2002).
- [94] E.G. PUCKET, A.S. ALMGREN, J.B. BELL, D.L. MARCUS et W.J. RIDER. « A High-Order Projection Method for Tracking Fluid Interfaces in Variable Density Incompressible Flows ». Journal of Computational Physics, 130 :269–287, (1997).
- [95] V. RANSOM et D.L. HICKS. « Hyperbolic Two-Pressure Models for Two-Phase Flow ». *Journal of Computational Physics*, **53**:124–151, (1984).
- [96] P.A. RAVIART et J.M. THOMAS. Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles. Dunod, deuxième édition, (1998).
- [97] W.J. RIDER et D.B. KOTHE. « A Marker Particle Method for Interface Tracking ». Rapport Technique LA-UR-95-1740, Los Alamos National Laboratory, (1995).
- [98] W.J. RIDER et D.B. KOTHE. « Stretching and Tearing Interface Tracking Methods ». Rapport Technique LA-UR-95-1145, Los Alamos National Laboratory, (1995).
- [99] W.J. RIDER et D.B. KOTHE. « Reconstructing Volume Tracking ». Journal of Computational Physics, 141 :112–152, (1998).
- [100] W.J. RIDER, D.B. KOTHE, S.J. MOSSO, J.H. CERUTTI et J.I. HOCHSTEIN. « Accurate Solution Algorithms for Incompressible Multiphase Flows ». *Préprint*, (1995).
- [101] P. ROE. « Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors and difference schemes ». *Journal of Computational Physics*, **43**:357–372, (1981).
- [102] S. ROUY. « Modélisation mathématique et numérique d'écoulements diphasiques compressibles. Application au cas industriel d'un générateur de gaz ». Thèse de doctorat, Université de Toulon et du Var, (2000).
- [103] R. SAUREL et R. ABGRALL. « A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows ». *Journal of Computational Physics*, **150** :425–467, (1997).
- [104] R. SAUREL et R. ABGRALL. « A Simple Method for Compressible multifluid flows ». SIAM Journal of Scientific Computing, 21(3):1115–1145, (1999).
- [105] R. SAUREL et O. LEMETAYER. « A Multiphase model for compressible flows with interfaces, shocks, detonation waves and cavitation ». *Journal of Fluid Mechanics*, 431 :239– 271, (2001).

- [106] R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI. « Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow ». *Annual Review of Fluid Mechanics*, **31** :567, (1999).
- [107] D. SCHWABE. « The Bénard-Marangoni-Instability in small circular containers under microgravity : experimental results ». Adv. Space Res., 24(10) :1347–1356, (1999).
- [108] D. SERRE. « Sur le principe variationnel des équations de la mécanique des fluides parfaits ». *Modélisation Mathématique et Analyse Numérique*, **27**(6) :739–758, (1993).
- [109] J. SETHIAN. Level Set Methods. Cambridge University Press, (1996).
- [110] Y.D. SHIKHMURZAEV. « Mathematical modeling of wetting hydrodynamics ». *Fluid Dynamics Research*, **13**:45–64, (1994).
- [111] Y.D. SHIKHMURZAEV. « Dynamic Contact Angles and Flow in Vicinity of Moving Contact Line ». *Am. Inst. Chem. Engrs.*, **42**(3):601–612, (1996).
- [112] Y.D. SHIKHMURZAEV. « Moving contact lines in liquid/liquid/solid systems ». Journal of Fluid Mechanics, 334 :211–249, (1997).
- [113] Y.D. SHIKHMURZAEV. « Spreading of drops on solid surfaces in a quasi-static regime ». *Physic of Fluids*, **9**(2) :266–275, (1997).
- [114] K.M. SHYUE. « A Fluid-Mixture Type Algorithm for Compressible Multicomponent Flow with van der Waals Equation of State ». *Journal of Computational Physics*, **156** :43–88, (1999).
- [115] H.A. SNYDER. « Sloshing in microgravity ». Cryogenics, 39 :1047-1055, (1999).
- [116] H.B. STEWART et B. WENDROFF. « Two-Phase Flow : Models and Methods ». *Journal of Computational Physics*, **56** :363–409, (1984).
- [117] S. SUSSMAN, P. SMEREKA et S. OSHER. « A level-set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow ». *Journal of Computational Physics*, **114**:146–159, (1994).
- [118] S.J. TAVENER et K.A. CLIFFE. « Two-Fluid Marangoni-Bénard Convection with a Deformable Interface ». *Journal of Computational Physics*, 182 :277–300, (2002).
- [119] S.O. UNVERDI et G. TRYGGVASON. « A Front-Tracking Method for Viscous, Incompressible, Multi-Fluid Flows ». *Journal of Computational Physics*, **100** :25–37, (1992).
- [120] B. VAN LEER. « Towards the Ultimate Conservative Difference Schemes V. a Second Order Sequel to Godunov's Method ». *Journal of Computational Physics*, **32**:101–136, (1979).
- [121] S.J. VANHOOK, M.F. SCHATZ, J.B. SWIFT, W.D. MCCORMICK et H.L. SWINNEY. «Longwavelength surface-tension-driven Bénard convection : experiment and theory ». *Journal of Fluid Mechanics*, 345 :45–78, (1997).
- [122] S. VINCENT et J.P. CALTAGIRONE. « A One-Cell Local Multigrid Method for Solving Unsteady Incompressible Multiphase Flows ». *Journal of Computational Physics*, 163:172– 215, (2000).
- [123] S.L. WANG, R.F. SEKERKA, A.A. WHEELER, B.T. MURRAY, S.R. CORIELLI, R.J. BRAUN et G.B. MCFADDEN. « Thermodynamically-consistent phase field models for solidification ». *Physica D*, **69** :189–200, (1993).
- [124] K. XU. « A Kinetic Method for Hyperbolic-Elliptic Equations and Its Application in Two-Phase Flow ». *Journal of Computational Physics*, **166** :383–399, (2001).