



HAL
open science

Simulation d'écoulements triphasiques avec deux phases miscibles

Jean Bussac

► **To cite this version:**

| Jean Bussac. Simulation d'écoulements triphasiques avec deux phases miscibles. 2021. hal-03454958

HAL Id: hal-03454958

<https://hal.science/hal-03454958>

Preprint submitted on 29 Nov 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Simulation d'écoulements triphasiques avec deux phases
miscibles

Jean Bussac

Encadrement :

Hélène Mathis - Université de Nantes

Jean-Marc Hérard - E.D.F

Tuteur : Christophe Berthon

Avril 2020 - Septembre 2020

TABLE DES MATIÈRES

| | |
|--|-----------|
| Introduction | 2 |
| 1 Descriptions thermodynamiques | 3 |
| 1.1 Quelques notions de thermodynamique | 3 |
| 1.2 Description d'une phase | 3 |
| 1.3 Description de deux phases | 6 |
| 2 Modèle diphasique homogène | 10 |
| 2.1 Présentation théorique du modèle | 10 |
| 2.2 Fermeture du système et propriétés | 11 |
| 2.3 Schéma numérique | 13 |
| 2.4 Résultats numériques | 22 |
| 2.5 Conclusion sur le modèle diphasique | 27 |
| 3 Modèle Triphasique homogène | 28 |
| 3.1 Description du système thermodynamique | 28 |
| 3.2 Systèmes homogènes à l'équilibre | 34 |
| 3.3 Systèmes homogènes de relaxation | 38 |
| 3.4 Schéma Numérique | 42 |
| 3.5 Résultats numériques | 47 |
| 3.6 Conclusion sur les modèles triphasiques | 51 |
| Conclusion | 52 |
| A Schéma de Roe avec les variables (Y, τ, u, P) | 53 |
| B Recherche d'une fraction d'équilibre | 55 |
| B.1 Principe de l'algorithme | 55 |
| B.2 Cas diphasique pour des gaz parfaits | 55 |
| B.3 Cas triphasique pour des gaz parfaits | 57 |
| C Dérivations d'équations aux dérivées partielles | 60 |
| C.1 Changement de variable du système (3.14) | 60 |
| C.2 Expressions de la vitesse du son | 62 |

INTRODUCTION

L'objectif de ce travail est d'étudier des modèles d'équations aux dérivées partielles décrivant un fluide à trois phases, dont deux sont miscibles. Nous souhaitons proposer un schéma numérique pour simuler ce type d'écoulement.

Un exemple typique de ce genre de fluide est un mélange d'eau liquide, d'eau vapeur et d'un autre gaz.

Dans un premier temps, il sera nécessaire de se familiariser avec quelques notions de thermodynamique, notamment les premier et deuxième principes qui seront fondamentaux pour construire des modèles ayant un sens physique.

Nous allons travailler avec un type de modèle construit à partir du système d'équations d'Euler compressibles, auquel on adjoint des équations d'advection portant sur les fractions de masse, de volume et d'énergie. Ils ont déjà été étudiés dans [6, 7] par exemple, et nous allons reprendre une partie de la littérature les concernant pour nous familiariser avec.

Dans un premier temps, on traitera un cas plus simple : un modèle diphasique, présenté dans [6]. On s'inspirera de ce travail dans le but de construire un schéma volumes finis pour la partie convective, construire des problèmes de Riemann afin de valider les codes et construire un premier type de termes sources.

Dans un second temps, on s'intéressera au cas triphasique : deux types de modèles présentés dans [11] seront abordés, HEM et HRM, ce dernier étant la version triphasique de modèle étudié dans [6]. On reprendra en grande partie la théorie qui y est présentée, pour ensuite appliquer l'étude numérique vue plus tôt au cas présent.

CHAPITRE 1

DESCRIPTIONS THERMODYNAMIQUES

1.1 QUELQUES NOTIONS DE THERMODYNAMIQUE

Nous devons décrire la thermodynamique d'un système, il nous est donc nécessaire d'introduire les notions de base. On se référera à [1] pour plus de précisions.

L'état thermodynamique d'un fluide peut se décrire à l'aide de sa masse M , son volume V et son énergie interne E . Ce sont des variables thermodynamiques : elles permettent de caractériser un système. On en distingue deux types : celles qui sont proportionnelles à la taille du système sont dites **extensives**, celles qui n'en dépendent pas sont dites **intensives**.

Ainsi, M , V et E sont des variables extensives. Précisons la notion d'énergie interne : elle correspond à l'énergie microscopique, constituée par exemple des interactions entre les particules, de l'énergie d'agitation moléculaire, etc. On considèrera également l'énergie totale du système, somme de l'énergie interne et de l'énergie macroscopique qui, pour nous sera, principalement cinétique (terme en $\frac{u^2}{2}$, où u est une vitesse moyenne des particules).

Remarque. On prendra garde de ne pas confondre les notations concernant les énergies internes ou totales par la suite.

On considèrera un système *isolé*, c'est-à-dire qu'il n'échange ni matière, ni chaleur, ni travail avec l'extérieur. Autrement dit, nous aurons d'une part la *conservation de la masse*, et d'autre part la *conservation de l'énergie* : c'est le premier principe de la thermodynamique.

Nous allons en particulier chercher à caractériser l'équilibre thermodynamique du système (il n'y a plus ni mouvement macroscopique, ni flux d'aucune sorte). Pour cela, énonçons le second principe :

Second principe de la Thermodynamique. Pour tout système, il existe une fonction d'état de paramètres extensifs $S(M, V, E)$ appelée entropie. De plus, tout système tend vers un état d'équilibre, pour lequel S est maximale.

Enfin, l'entropie est additive selon les composants, et elle est extensive (voir les hypothèses dans la partie suivante).

1.2 DESCRIPTION D'UNE PHASE

A. DESCRIPTION EXTENSIVE

On considère un fluide de masse M , de volume V et d'énergie interne E , notons $W = (M, V, E)$ le vecteur d'état de ce fluide.

D'après le second principe de la thermodynamique, il existe une fonction S , dite entropie, déterminée par W , on admet de plus qu'elle décrit entièrement le comportement thermodynamique du système, voir [1].

$$\begin{aligned} S &: (\mathbb{R}^+)^3 \rightarrow \mathbb{R} \\ W &\mapsto S(W) \end{aligned}$$

Afin de faire les hypothèses qui suivent sur S , on étend son domaine de définition à \mathbb{R}^3 en la prolongeant par $S(W) = -\infty$ pour tout W en dehors de $(\mathbb{R}^+)^3$.

Hypothèse 1. *Hypothèses extensives sur l'entropie*

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

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

- (iv) S est semi-continue supérieurement :

$$\forall W_0 \in C, \lim_{W \rightarrow W_0} \sup S(W) \leq S(W_0),$$

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

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

Notons que l'entropie n'est pas strictement concave puisque PH1.

De plus, en définissant la température T , la pression p et le potentiel chimique μ par :

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

on obtient, la relation fondamentale (extensive) de la thermodynamique :

$$T dS = dE + p dV - \mu dM. \quad (1.2)$$

Remarque 1. Ces quantités sont, en tant que dérivées de potentiels extensifs, des potentiels intensifs (ou PH0). De plus, S vérifie grâce à son caractère PH1, la relation d'Euler (1.3) dont on trouve une preuve dans [9], qui donne une caractérisation du potentiel chimique :

$$\nabla_W S \cdot W^T = S, \quad (1.3)$$

$$M\mu = -TS + pV + E. \quad (1.4)$$

B. DESCRIPTION INTENSIVE

Grâce au caractère extensif de l'entropie, on peut définir l'entropie spécifique s qui est l'entropie d'une unité de masse de ce système :

$$s\left(\frac{V}{M}, \frac{E}{M}\right) := \frac{1}{M} S(W) = S\left(\frac{W}{M}\right) = S\left(1, \frac{V}{M}, \frac{E}{M}\right),$$

en utilisant l'homogénéité de S .

Ainsi en introduisant le volume spécifique $\tau := \frac{V}{M}$, l'énergie spécifique $e := \frac{E}{M}$ et en notant $w = (\tau, e)$, on obtient une équation d'état du système :

$$s : (\mathbb{R}^+)^2 \rightarrow \mathbb{R}$$

$$w \mapsto s(w).$$

Notons qu'on a, d'après les définitions (1.1) des expressions de la pression et de la température en version intensive, donc fonctions de $w = (\tau, e)$, qui nous seront utiles par la suite :

$$\frac{1}{T} = \left. \frac{\partial s}{\partial e} \right|_{\tau}, \quad P = T \left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_e. \quad (1.5)$$

On a alors la relation fondamentale de la thermodynamique :

$$Tds = de + Pd\tau. \quad (1.6)$$

On a l'expression suivante pour le potentiel chimique :

$$\mu = -Ts + P\tau + e \quad (1.7)$$

On retrouve les hypothèses sur l'entropie en version intensive :

Hypothèse 2. *Hypothèses intensives*

- (i) L'ensemble des états admissibles : $c = \{w \in (\mathbb{R}^+)^2, s(w) > -\infty\}$ est convexe non vide,
- (ii) s est de classe \mathcal{C}^2 sur c avec

$$T = \left(\left. \frac{\partial s}{\partial e} \right|_{\tau} \right)^{-1} > 0,$$

- (iii) La matrice Hessienne est définie négative, *i.e.*

$$\det(H_s) := \left. \frac{\partial^2 s}{\partial \tau^2} \right|_e \left. \frac{\partial^2 s}{\partial e^2} \right|_{\tau} - \left(\left. \frac{\partial^2 s}{\partial \tau \partial e} \right| \right)^2 > 0, \quad \left. \frac{\partial^2 s}{\partial \tau^2} \right|_e < 0, \quad \left. \frac{\partial^2 s}{\partial e^2} \right|_{\tau} < 0$$

En particulier, l'entropie spécifique d'une phase est strictement concave. Cela jouera un rôle dans la suite, et ne sera plus nécessairement le cas lorsqu'on considèrera deux phases.

C. VITESSE DU SON

On introduit ici une grandeur fondamentale pour la suite : la vitesse du son d'un fluide. C'est la vitesse de propagation des ondes sonores dans le fluide, elle varie par exemple avec la masse volumique.

Ici nous donnons la définition de la vitesse du son $c(\tau, e)$ pour une phase, qui se généralisera naturellement par la suite :

$$c(\tau, e) = -\tau^2 \left(P \frac{\partial P}{\partial e} - \frac{\partial P}{\partial \tau} \right) \quad (1.8)$$

On retrouvera la vitesse du son lorsqu'il sera question d'hyperbolicité d'un système d'équations, dans l'expression de ses valeurs propres, et dans les parties numériques où son calcul est incontournable.

1.3 DESCRIPTION DE DEUX PHASES

Dans cette partie, on présente la description d'un mélange diphasique immiscible et miscible. C'est un prérequis pour le système final triphasique, et nous allons mettre en application les algorithmes en seconde partie sur un modèle diphasique.

A. SYSTÈME DIPHASIQUE

Considérons un système isolé de masse $M > 0$, de volume $V > 0$ et d'énergie interne $E > 0$, constitué de deux phases A et B .

Chaque phase a une masse $M_k > 0$, un volume $V_k > 0$ et une énergie interne $E_k > 0$, $k \in \{A, B\}$, et est décrite par son entropie S_k et vérifie les Hypothèses 1.. Nous noterons par la suite $W_k = (M_k, V_k, E_k)$ et $\tilde{W}_k = (M_k, E_k)$.

Par les conservations de masse et d'énergie, nous avons les relations :

$$M_A + M_B = M,$$

$$E_A + E_B = E.$$

Concernant les volumes, nous distinguons les cas :

- Mélange immiscible, les phases sont donc séparées par une interface :

$$V_A + V_B = V,$$

- Mélange miscible, elles sont confondues et on ne peut distinguer leurs volumes :

$$V_A = V_B = V.$$

Remarque 2. On considère qu'il n'y a pas d'apparition de vide (sinon on devrait considérer $V_A + V_B \leq V$), et pas d'interactions moléculaires entre les composants pouvant mener au cas inverse : $V_A + V_B \geq V$ (qui se produit par exemple avec un mélange d'alcool et d'eau).

B. ENTROPIE DU SYSTÈME, CARACTÉRISATION DE L'ÉQUILIBRE

L'entropie du mélange est la somme des entropies de chaque phase, notons la Σ . On a donc pour un mélange $W = W_A + W_B$:

$$\Sigma(W_A, W_B) = S_A(W_A) + S_B(W_B). \quad (1.9)$$

Notons que Σ est définie pour un couple d'états. On souhaite caractériser l'équilibre thermodynamique, il s'agit de maximiser l'entropie du mélange, définissons les entropies d'équilibre de mélange.

Definition 1. *Entropie d'équilibre d'un mélange immiscible.* Soit $W \in (\mathbb{R}^+)^3$ le vecteur d'état du mélange.

$$S^{immi}(W) := \max_{(W_A, W_B) \in \Omega^{immi}} \Sigma(W_A, W_B),$$

Avec $\Omega^{immi} := \{(W_A, W_B) \in C_A \times C_B \text{ t.q. } W = W_A + W_B\}$.

Definition 2. *Entropie d'équilibre d'un mélange miscible.* Soient $V_0 >$ le volume du mélange et $\tilde{W} \in (\mathbb{R}^+)^2$ le vecteur d'état du mélange.

$$S^{mi}(\tilde{W}) := \max_{(\tilde{W}_A, \tilde{W}_B) \in \Omega^{mi}} \Sigma((V_0, \tilde{W}_A), (V_0, \tilde{W}_B)),$$

Avec $\Omega^{mi} := \{(\tilde{W}_A, \tilde{W}_B) \in \tilde{C}_A \times \tilde{C}_B \text{ t.q. } \tilde{W} = \tilde{W}_A + \tilde{W}_B\}$.

Remarque 3. Notons que l'entropie d'équilibre d'un mélange ne dépend pas directement des états des phases, mais implicitement. Elle se définit en maximisant, à un état donné W , l'entropie du mélange sur les états phasiques sous la contrainte $W = W_A + W_B$.

En fait, ces entropies d'équilibre peuvent se réécrire à l'aide de l'opérateur de sup-convolution (que l'on note \square) :

$$S^{immi}(W) = S_A \square S_B(W) = \sup_{W_A \in C_A} S_A(W_A) + S_B(W - W_B),$$

$$S^{mi}(V_0, \tilde{W}) = S_A \square_{V_0} S_B(V_0, \tilde{W}) = \sup_{\tilde{W}_A \in \tilde{C}_A} S_A(V_0, \tilde{W}_A) + S_B(V_0, \tilde{W} - \tilde{W}_B).$$

Grâce aux propriétés de l'opérateur de sup-convolution, on sait que ces entropies d'équilibre de mélange existent bien et sont concaves. On renvoie à [15] pour les détails.

Afin de donner une caractérisation de l'équilibre, on définit température T , pression p et potentiels chimiques μ à l'équilibre à partir de l'entropie d'équilibre comme en (1.1). On obtient alors la relation fondamentale (avec $i = mi, immi$) :

$$TdS^i = dE + pdV - \mu dM.$$

De la même façon, la vitesse du son d'un fluide à deux phases se définit comme en (1.8).

Proposition 1. *Lorsque le maximum sur $C_A + C_B$ est atteint à l'intérieur du domaine par Σ , il est caractérisé par les relations suivantes :*

$$T = T_A = T_B, \tag{1.10}$$

$$\mu = \mu_A = \mu_B, \tag{1.11}$$

Enfin, on distingue les cas pour la pression selon la miscibilité des phases. Dans le cas immiscible, on a :

$$P = P_A = P_B, \tag{1.12}$$

Dans le cas miscible, le maximum est caractérisé par la loi de Dalton :

$$P = P_A + P_B. \tag{1.13}$$

Remarque 4. L'équilibre peut être atteint sur les bords du domaine. Dans ce cas, le maximum est caractérisé par des inégalités sur les pressions et températures.

Démonstration. (Prop.1) À l'équilibre, l'entropie de mélange atteint son maximum, en particulier ses dérivées partielles sont nulles. Dans le cas immiscible, on a la contrainte $W = W_A + W_B$, d'où :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial E_A}(W) = \frac{\partial S_A}{\partial E_A}(W_A) + \frac{\partial S_B}{\partial E_A}(W - W_A) = \frac{1}{T_A} - \frac{1}{T_B} = 0 \implies T_A = T_B,$$

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial M_A}(W) = \frac{\mu_A}{T_A} - \frac{\mu_B}{T_B} = 0 \implies \mu_A = \mu_B,$$

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial V_A}(W) = \frac{P_A}{T_A} - \frac{P_B}{T_B} = 0 \implies P_A = P_B.$$

Dans le cas miscible, on ne distingue pas les volumes des phases, le volume de l'ensemble est V_0 , et pour la température et le potentiel chimique, le même raisonnement avec $\tilde{W} = \tilde{W}_A + \tilde{W}_B$ s'applique. Pour la pression, on renvoie à [12].

Enfin, le fait que ces égalités caractérisent l'équilibre résulte de la concavité des entropies de mélange (l'annulation des dérivées est équivalente à l'atteinte du maximum, éventuellement en plusieurs points, puisque la concavité n'est pas stricte). □

C. CARACTÉRISATION INTENSIVE

On termine cette partie en présentant la version intensive des caractérisations précédentes.

Le système est entièrement défini par son entropie spécifique, fonction de $\tau = V/M$ et $e = E/M$, dont on suppose qu'elle vérifie les hypothèses intensives. On notera $w_A = (\tau_A, e_A)$ et $w_B = (\tau_B, e_B)$.

On introduit les fractions volumiques, massiques et d'énergie relatives à la phase $i = A, B$ définies par :

$$\alpha_i = \frac{V_i}{V}, \quad y_i = \frac{M_i}{M}, \quad z_i = \frac{E_i}{E}.$$

On peut exprimer les volumes spécifiques et énergies internes spécifiques de chaque phase en utilisant ses fractions :

$$\tau_i = \frac{V_i}{M_i} = \frac{\alpha_i}{y_i} \tau, \quad e_i = \frac{E_i}{M_i} = \frac{z_i}{y_i} e.$$

Enfin, les entropies spécifiques phasiques sont définies comme dans la partie précédente par $s_i(\tau_i, e_i) = S_i(1, \tau_i, e_i)$ et vérifient :

$$T_i ds_i = de_i + p_i d\tau_i \tag{1.14}$$

On traduit les contraintes extensives en contraintes intensives, portant sur les fractions :

$$1 = y_A + y_B,$$

$$1 = z_A + z_B,$$

De plus, la contrainte volumique se traduit dans le cas immiscible par :

$$1 = \alpha_A + \alpha_B.$$

On peut alors finalement décrire les paramètres du système en fonction de ceux des phases :

$$\tau = y_A \tau_A + y_B \tau_B, \tag{1.15}$$

$$e = y_A e_A + y_B e_B. \tag{1.16}$$

Et enfin, l'entropie spécifique du mélange s'écrit, hors équilibre :

$$\sigma(w_A, w_B) := \frac{\Sigma(W_A, W_B)}{M} = y_A s_A(w_A) + y_B s_B(w_B), \quad (1.17)$$

On peut remarquer que σ peut s'écrire comme fonction de τ , e et des fractions :

$$\sigma(\tau, e, (\alpha_i)_i, (y_i)_i, (z_i)_i) = y_A s_A\left(\frac{\alpha_A}{y_A} \tau, \frac{z_A}{y_A} e\right) + y_B s_B\left(\frac{\alpha_B}{y_B} \tau, \frac{z_B}{y_B} e\right). \quad (1.18)$$

Remarque 5. La notation suivante est un abus que l'on se permet sur les variables, en toute rigueur on devrait définir une autre fonction et utiliser un changement de variable.

Remarque 6. L'entropie de mélange étant une combinaison linéaire à coefficients positifs de fonctions strictement convexes, elle est strictement convexe.

Donnons enfin l'entropie spécifique de mélange à l'équilibre pour le cas immiscible.

Proposition 2. Soit $w \in (\mathbb{R}^+)^2$ le vecteur d'état du mélange. Le problème d'optimisation de la Définition 1 s'écrit sous forme intensive :

$$s^{immi}(w) = \max_{\substack{1=y_A+y_B \\ w=y_A w_A+y_B w_B}} \sigma(w_A, w_B).$$

De plus, on peut reformuler cette expression avec l'enveloppe concave des maximums de s_A et s_B :

$$s^{immi}(w) = \text{Conv}(\max(s_A(w), s_B(w))).$$

Remarque 7. Cette caractérisation géométrique permet de remarquer que s^{immi} est concave mais pas strictement concave. Le cas miscible nécessite d'utiliser les variables et entropies volumiques, que l'on n'a pas introduites. Le cas immiscible nous suffira pour la première partie.

CHAPITRE 2

MODÈLE DIPHASIQUE HOMOGENÈ

Avant de traiter le cas triphasique, on va étudier un modèle diphasique eau-vapeur, présenté dans [6]. C'est un modèle d'équations aux dérivées partielles hyperbolique qui décrit l'évolution en espace et en temps d'un écoulement diphasique immiscible compressible. On étudiera d'abord sa loi de pression qui permettra de construire un problème de Riemann. Puis on s'intéressera aux termes sources, et on décrira le schéma numérique proposé dans l'article dans le cas d'un mélange de gaz raides.

Cette étude sera l'occasion de se familiariser avec les notions et calculs similaires au cas triphasique. C'est pourquoi on n'insistera pas sur les éléments théoriques que l'on traitera dans la partie concernée.

2.1 PRÉSENTATION THÉORIQUE DU MODÈLE

A. MODÈLE

Il est basé sur le système d'Euler, auquel on adjoint des équations de transport à vitesse u pour des fractions, et des termes sources sur ces dernières. Le sens du terme "homogène" correspond au fait qu'on considère que la dynamique du mélange entier est u . On notera ρ la masse volumique, E l'énergie totale *spécifique* et u la vitesse. Soit $Y = (\alpha, y, z) = (\alpha_l, y_l, z_l)$ le vecteur des fractions, respectivement volumique, massique et d'énergie de la phase liquide :

$$\alpha = \frac{V_l}{V}, \quad y = \frac{M_l}{M}, \quad z = \frac{E_{int,l}}{E_{int}},$$

où E_{int} désigne l'énergie interne du système et $E_{int,l}$ l'énergie interne de la phase liquide. Dans la suite, e désigne l'énergie interne spécifique du système, on a donc $E = e + \frac{u^2}{2}$, et $e = \frac{E_{int}}{M}$.

Notons que les conservations de la masse et de l'énergie ainsi que l'immiscibilité des phases permettent d'écrire les fractions de la phase gazeuse ainsi :

$$\alpha_v = 1 - \alpha, \quad y_v = 1 - y, \quad z_v = 1 - z.$$

On a enfin les relations suivantes concernant les fractions (l'indice i étant relatif à la phase) :

$$y_i = \alpha_i \frac{\rho_i}{\rho}, \tag{2.1}$$

$$z_i = y_i \frac{e_i}{e}. \tag{2.2}$$

De plus, on a :

$$\rho = \alpha\rho_l + (1 - \alpha)\rho_v, \quad (2.3)$$

$$e = ye_l + (1 - y)e_v. \quad (2.4)$$

La dynamique compressible du mélange est décrite par les équations de conservations de masse, moment et énergie. Désormais, (ρ, e, u, Y) sont des fonctions du temps t et de l'espace x . Les équations d'advection pour les fractions ont une vitesse de transport u , et un terme source $\Gamma_Y = (\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3)$. On obtient alors le système suivant :

$$\begin{cases} \partial_t Y + u\partial_x Y = \Gamma_Y \\ \partial_t \rho + \partial_x \rho u = 0 \\ \partial_t \rho u + \partial_x (\rho u^2 + P) = 0 \\ \partial_t \rho + \partial_x ((\rho E + P)u) = 0 \end{cases}, \quad (2.5)$$

que l'on peut détailler et écrire sous forme conservative :

$$\begin{cases} \partial_t(\rho\alpha) + \partial_x(\rho u\alpha) = \Gamma_1 \\ \partial_t(\rho y) + \partial_x(\rho u y) = \Gamma_2 \\ \partial_t(\rho z) + \partial_x(\rho u z) = \Gamma_3 \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0 \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + P) = 0 \\ \partial_t(\rho E) + \partial_x((\rho E + P)u) = 0 \end{cases}. \quad (2.6)$$

Le système n'est pas fermé tant que l'on ne connaît pas les termes sources $(\Gamma_i)_i$, qui doivent avoir un sens physique, et la loi de pression $P = P(\rho, e, Y)$ reste à préciser. C'est l'objet de la partie suivante.

2.2 FERMETURE DU SYSTÈME ET PROPRIÉTÉS

Comme nous l'avons vu, une loi de pression et la connaissance des termes sources sont nécessaires à la fermeture du système. On va ici expliciter la pression du mélange en fonction des pressions et températures partielles. Pour déterminer les termes sources, on utilisera le second principe. On illustrera la démarche par un exemple sur un mélange de gaz dits raides.

2.2.1 PRESSION DU MÉLANGE

On rappelle que l'entropie extensive du mélange S est la somme des entropies phasiques. L'entropie qui nous intéresse ici, puisque nous travaillons sur le cas immiscible, est l'entropie spécifique $\sigma(\tau, e, Y)$. On remarquera la dépendance en les fractions. D'après (1.18), on a :

$$\sigma(\tau, e, Y) = y_l s_l \left(\frac{\alpha}{y} \tau, \frac{z}{y} e \right) + y_v s_v \left(\frac{(1 - \alpha)}{(1 - y)} \tau, \frac{(1 - z)}{(1 - y)} e \right). \quad (2.7)$$

On utilisera aussi les notations introduites précédemment $\tau_k = \frac{\alpha_k}{y_k} \tau$ et $e_k = \frac{z_k}{y_k} e$. Ainsi, en définissant les entropies phasiques, l'entropie et par conséquent la pression du système sont définies. En effet la pression s'écrit :

$$P = T \frac{\partial \sigma}{\partial \tau} = T \left(\frac{\partial s_l}{\partial \tau} + \frac{\partial s_v}{\partial \tau} \right), \text{ avec } \frac{1}{T} = \frac{\partial \sigma}{\partial e}.$$

De plus, en définissant les températures phasiques (ou partielles) de façon similaire à (1.5) pour une phase k donnée :

$$\frac{1}{T_k} = \frac{\partial s_k}{\partial e_k}, \quad P_k = T_k \frac{\partial s_k}{\partial \tau_k},$$

on obtient alors par des règles de dérivation :

$$P = T \left(\frac{\alpha}{y} \frac{P_l}{T_l} + \frac{(1-\alpha)}{(1-y)} \frac{P_v}{T_v} \right).$$

Enfin, en explicitant T de la même manière :

$$P(\tau, e, Y) = \frac{\frac{\alpha}{T_l} P_l + \frac{(1-\alpha)}{T_v} P_v}{\frac{z}{T_l} + \frac{(1-z)}{T_v}}. \quad (2.8)$$

Les expressions des pressions et températures partielles étant données dès lors qu'on connaît celles des entropies phasiques.

2.2.2 TERMES SOURCES

Afin de conserver une cohérence physique, on va trouver une condition suffisante pour définir des termes sources $(\Gamma_i)_i$ admissibles. Pour cela, on utilise le deuxième principe de la thermodynamique.

Proposition 3. *Pour des solutions régulières, l'entropie $\sigma = \sigma(\tau, e, \alpha, y, z) = \sigma(\tau, e, Y_1, Y_2, Y_3)$ vérifie l'équation de transport suivante :*

$$\partial_t \sigma + u \partial_x \sigma = \sum_i \Gamma_i \partial_{Y_i} \sigma. \quad (2.9)$$

Démonstration. On a, pour des solutions régulières, et en utilisant des règles de dérivation :

$$\begin{aligned} \partial_t \sigma &= \frac{\partial \sigma}{\partial \tau} \partial_t \tau + \frac{\partial \sigma}{\partial e} \partial_t e + \sum_i \frac{\partial \sigma}{\partial Y_i} \partial_t Y_i \\ &= \frac{P}{T} \partial_t \tau + \frac{1}{T} \partial_t e + \sum_i \frac{\partial \sigma}{\partial Y_i} \partial_t Y_i \\ &= \frac{P}{T} (\tau \partial_x u - u \partial_x \tau) + \frac{1}{T} (-\tau \partial_x u - u \partial_x e) + \sum_i \frac{\partial \sigma}{\partial Y_i} (\Gamma_i - u \partial_x Y_i) \\ &= -u \left(\frac{P}{T} \partial_x \tau + \frac{1}{T} \partial_x e - \sum_i \partial_{Y_i} \sigma \partial_x Y_i \right) + \sum_i \partial_{Y_i} \Gamma_i \\ &= -u \partial_x \sigma + \sum_i \partial_{Y_i} \Gamma_i. \end{aligned}$$

□

L'entropie σ doit satisfaire un principe de croissance, et pour cela, on peut imposer la positivité du terme source de l'équation de transport (2.9), *i.e.* $\forall(Y, \tau, e)$,

$$\sum_i \partial_{Y_i} \Gamma_i \geq 0. \quad (2.10)$$

On définit alors les termes sources de la manière suivante : soient $(\theta_i)_{i=1,2,3} > 0$ des temps caractéristiques pour chaque Γ_i , et $(Y_{\text{éq},i})_{i=1,2,3}$ les valeurs des fractions correspondant à l'équilibre. On choisit :

$$\Gamma_i(\tau, e, Y_i) = \frac{Y_{\text{éq},i}(\tau, e) - Y_i}{\theta_i}. \quad (2.11)$$

Ce type de termes sources est standard pour les modèles homogènes de relaxation. Grâce à la concavité de l'entropie, on obtient à partir de la définition précédente :

$$\sum_i \partial_{Y_i} \Gamma_i(\tau, e, Y_i) \geq \frac{s(\tau, e, Y_{\text{éq},i}(\tau, e)) - s(\tau, e, Y)}{\theta_i}.$$

Ainsi, en imposant :

$$\forall(\tau, e), \forall Y, s(\tau, e, Y_{\text{éq}}(\tau, e)) \geq s(\tau, e, Y),$$

les termes sources définis en (2.11) vérifient la condition de positivité (2.10).

Attardons-nous enfin sur les fractions d'équilibre $Y^{\text{éq}} = (Y_{\text{éq},1}, Y_{\text{éq},2}, Y_{\text{éq},3})$. Elles sont définies en suivant [17], comme les fractions qui, à un volume spécifique τ et à une énergie interne e donnés (τ, e) , maximisent l'entropie du mélange :

$$s(Y_{\text{éq}}(\tau, e), \tau, e) = \max_{\{0 \leq Y \leq 1\}} s(Y, \tau, e). \quad (2.12)$$

Cette définition est bien en adéquation avec le second principe, et pour calculer ces fractions, on utilise le fait qu'à l'équilibre, les égalités suivantes sont vérifiées (*Prop.1*) :

$$\begin{cases} T_l(\tau, e, Y_{\text{éq}}) = T_v(\tau, e, Y_{\text{éq}}), \\ P_l(\tau, e, Y_{\text{éq}}) = P_v(\tau, e, Y_{\text{éq}}), \\ \mu_l(\tau, e, Y_{\text{éq}}) = \mu_v(\tau, e, Y_{\text{éq}}). \end{cases} \quad (2.13)$$

Or, cette traduction de l'état d'équilibre n'est valable que lorsqu'il est atteint à l'intérieur du domaine des contraintes. Dans ce cas, la résolution du système (2.10) doit mener à $Y_{\text{éq}}$. Lorsque le maximum de l'entropie est atteint aux bords du domaine, les égalités ci-dessus sont des inégalités, on se ramènera alors à la définition de $Y_{\text{éq}}$:

$$\begin{cases} \text{si } s(0, \tau, e) > s(1, \tau, e), Y_{\text{éq}} = 0, \\ \text{si } s(0, \tau, e) < s(1, \tau, e), Y_{\text{éq}} = 1. \end{cases} \quad (2.14)$$

Nous reviendrons sur ce point dans la partie numérique concernant les termes sources.

2.3 SCHÉMA NUMÉRIQUE

Le schéma proposé repose sur deux étapes : la résolution de la partie convective de (2.5) (*i.e.* sans terme source), que l'on résout par des méthodes standard volumes finis, puis la discrétisation des termes sources sur les fractions qui consistera à déterminer les fractions à l'équilibre $Y_{\text{éq}}$ pour résoudre des EDO. On parle de méthode à pas fractionnaire.

2.3.1 LOI DE FERMETURE POUR UN MÉLANGE DE GAZ RAIDES

A. PRÉSENTATION

Cette équation se comporte de façon satisfaisante pour une phase liquide et évolue naturellement vers une équation d'état de gaz parfait pour la vapeur. Voici la définition des entropies phasiques pour la phase k :

$$s_k(\tau_k, e_k) = C_k \ln \left((e_k - \Pi_k \tau_k) \tau_k^{\gamma_k - 1} \right) + s_k^0. \quad (2.15)$$

On rappelle les significations des variables et définissons certaines constantes :

- τ_k et e_k sont le volume spécifique et l'énergie spécifique de la phase k ,
- C_k désigne la capacité thermique,
- $-\Pi_k$ est la pression minimale pour la phase k , telle que $\Pi_k \geq 0$.
- γ_k est le coefficient adiabatique
- s_k^0 est l'entropie phasique de référence.

Remarque 8. Notons que le produit $\gamma_k \Pi_k$ traduit les effets d'attraction moléculaire, qui garantissent la cohésion de la matière à l'état liquide, c'est pourquoi dans le cas d'un cas parfait on choisit $\Pi_k = 0$, voir [4].

L'entropie d'un phase étant définie, on peut calculer ses dérivées partielles et en déduire pression et température :

$$P_k(\tau_k, e_k) = \frac{e_k}{\tau_k} (\gamma_k - 1) - \Pi_k \gamma_k, \text{ soit } P_k(\tau, e, Y) = \frac{z_k}{\alpha_k} \frac{e}{\tau} (\gamma_k - 1) - \Pi_k \gamma_k. \quad (2.16)$$

$$T_k(\tau_k, e_k) = \frac{e_k - \Pi_k \tau_k}{C_k}, \text{ soit } T_k(\tau, e, Y) = \frac{z_k}{y_k} \frac{e - \Pi_k \frac{\alpha_k}{y_k} \tau}{C_k}. \quad (2.17)$$

B. CHANGEMENT DE VARIABLE P/e

Il est difficile de travailler avec un telle loi d'état. En effet, nous avons besoin, particulièrement pour la partie convective, de passer de la pression P à l'énergie interne spécifique e et inversement. Par exemple, dès l'initialisation, les conditions initiales portant sur la pression et non l'énergie, il faut pouvoir passer de l'une à l'autre pour calculer le vecteur d'état initial.

Connaissant e , un calcul direct permet d'avoir P , en utilisant les expressions vues précédemment, que l'on rappelle ici :

$$P = \frac{\frac{\alpha}{T_l} P_l + \frac{(1-\alpha)}{T_v} P_v}{\frac{z}{T_l} + \frac{(1-z)}{T_v}}, \quad (2.18)$$

avec :

$$T_k(\tau, e, Y) = \frac{z_k}{y_k} \frac{e - \Pi_k \frac{\alpha_k}{y_k} \tau}{C_k}, \quad P_k(\tau, e, Y) = \frac{z_k}{\alpha_k} \frac{e}{\tau} (\gamma_k - 1) - \Pi_k \gamma_k.$$

Pour trouver l'énergie interne d'un état donné, connaissant la pression, on a la proposition suivante :

Proposition 4. *L'énergie interne du système e vérifie l'équation polynômiale du second degré :*

$$A(Y, \tau, P)e^2 + B(Y, \tau, P)e + C(Y, \tau, P) = 0, \quad (2.19)$$

avec :

$$\begin{aligned} A(Y, \tau, P) &= z(1-z)\frac{1}{\tau}(yC_l(\gamma_l - 1) + (1-y)C_v(\gamma_v - 1)), \\ B(Y, \tau, P) &= -Pz(1-z)(yC_l + (1-y)C_v) \\ &\quad - yC_l(\alpha(1-z)\gamma_l\Pi_l - (1-\alpha)z(\gamma_l - 1)\Pi_v) \\ &\quad - (1-y)C_v((1-\alpha)z\gamma_v\Pi_v - \alpha(1-z)(\gamma_v - 1)\Pi_l), \\ C(Y, \tau, P) &= \alpha(1-\alpha)\Pi_l\Pi_v\tau(yC_l\gamma_l + (1-y)C_v\gamma_v) \\ &\quad + P\tau((1-\alpha)yzC_l\Pi_v + \alpha(1-y)(1-z)C_v\Pi_l). \end{aligned}$$

Démonstration. Connaissant P , on peut, en réinjectant les expressions des pressions et températures partielles dans (2.18), obtenir ce polynôme en e . \square

Dès que $P > 0$, l'équation admet deux solutions positives (la plus petite vaut zéro dans le cas d'un gaz parfait, *i.e.* $\Pi_k = 0$), on conserve la plus grande des deux comme l'unique solution physique.

Au final, on retiendra que $(Y, \tau, e) \mapsto (Y, \tau, P)$ se fait par un calcul direct, tandis que $(Y, \tau, P) \mapsto (Y, \tau, e)$ demande la résolution d'un polynôme du second degré.

C. CALCUL DES FRACTIONS D'ÉQUILIBRE

L'étape clé de la résolution des termes sources est le calcul des fractions à l'équilibre $Y_{\acute{e}q}$, nous en donnons une méthode ici, proposée dans [6].

On a vu une caractérisation de l'équilibre par le système (2.13) à l'intérieur du domaine des contraintes, (2.14) permettant de conclure sinon. En explicitant (2.13), on se ramène à la résolution d'une équation non linéaire en $\alpha_{\acute{e}q}$.

Pour un vecteur d'état donné $W = (\rho Y, \rho, \rho u, \rho E)$, on peut calculer le couple (τ, e) associé à cet état. Il nous suffira à déterminer $Y_{\acute{e}q}$:

La première équation de (2.13) donne une expression de $z_{\acute{e}q}$ en fonction de τ, e et $\alpha_{\acute{e}q}$:

$$z_{\acute{e}q}(\tau, e, \alpha_{\acute{e}q}) = \frac{\alpha_{\acute{e}q}(\gamma_v - 1) - \alpha_{\acute{e}q}(1 - \alpha_{\acute{e}q})(\Pi_v\gamma_v - \Pi_l\gamma_l)\tau/e}{\alpha_{\acute{e}q}(\gamma_v - 1) + (1 - \alpha_{\acute{e}q})(\gamma_l - 1)}. \quad (2.20)$$

La deuxième équation de (2.13) donne une expression de $y_{\acute{e}q}$ en fonction de $\tau, e, \alpha_{\acute{e}q}$ et $z_{\acute{e}q}$:

$$y_{\acute{e}q}(\tau, e, \alpha_{\acute{e}q}, z_{\acute{e}q}) = \frac{(ez_{\acute{e}q} - \Pi_l\alpha_{\acute{e}q}\tau)/C_l}{(ez_{\acute{e}q} - \Pi_l\alpha_{\acute{e}q}\tau)/C_l + (e(1 - z_{\acute{e}q}) - \Pi_v(1 - \alpha_{\acute{e}q})\tau)/C_v} \quad (2.21)$$

Enfin, la troisième équation nous permet, à l'aide des deux précédentes, d'obtenir l'équation non linéaire en $\alpha_{\acute{e}q}$:

$$\mu_l(\tau, e, \alpha_{\acute{e}q}, y_{\acute{e}q}(\alpha_{\acute{e}q}, z_{\acute{e}q}), z_{\acute{e}q}(\alpha_{\acute{e}q})) = \mu_v(\tau, e, \alpha_{\acute{e}q}, y_{\acute{e}q}(\alpha_{\acute{e}q}, z_{\acute{e}q}), z_{\acute{e}q}(\alpha_{\acute{e}q})) \quad (2.22)$$

Donc, à (τ, e) donnés, on résout :

$$\mu_l(\tau, e, \alpha_{\acute{e}q}) - \mu_v(\tau, e, \alpha_{\acute{e}q}) = 0 \quad (2.23)$$

En pratique, on la résout par dichotomie.

Cette équation n'admet pas toujours de solution sur $]0; 1[$, auquel cas on utilise (2.14) : si $s(\tau, e, 0) > s(\tau, e, 1)$, alors $Y_{\acute{e}q} = 0$ et si $s(\tau, e, 0) < s(\tau, e, 1)$, alors $Y_{\acute{e}q} = 1$.

Notons qu'il est difficile d'estimer la probabilité d'une existence d'une fraction non triviale permettant la coïncidence des deux phases à τ et e donnés. Les auteurs dans [14] mentionnent que pour des gaz parfaits, on a généralement qu'une phase.

On renvoie à l'Annexe B pour le cas des gaz parfaits et une méthode de vérification de cette méthode dans ce cas précis.

2.3.2 ÉTAPE DE CONVECTION

On utilise un schéma Volumes Finis classique, avec différentes possibilités pour le flux :

- Rusanov, dans [6],
- VFRoe-ncv, dans [18].

Notons $W = (\rho Y, \rho, \rho u, \rho E)$ et $\mathcal{F}(W) = (\rho u Y, \rho u, \rho u^2 + P, (\rho E + P)u)$. On considère un maillage en espace uniforme de longueur de cellule Δx avec conditions aux bords de Neumann homogènes, sur le domaine $[0; 1]$. Le maillage en temps est construit sous contrainte CFL, avec un pas de temps noté $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$. W_i^n désigne l'approximation de W à l'instant t^n sur la i -ème cellule, et la mise à jour en temps est calculée par la relation suivante :

$$W_i^{n+1} = W_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F(W_i^n, W_{i+1}^n) - F(W_{i-1}^n, W_i^n)), \quad (2.24)$$

où $F(\cdot, \cdot)$ est le flux numérique défini par le schéma choisi, que nous détaillons ci-dessous.

A. SCHÉMA DE RUSANOV

On utilise ce schéma pour sa simplicité d'implémentation : il permet de travailler un premier code sans rajouter de difficulté à ce niveau. Le flux est défini par :

$$F(W_L, W_R) = \frac{1}{2} (\mathcal{F}(W_L) + \mathcal{F}(W_R)) - \frac{\max(\Lambda_R, \Lambda_L)}{2} (W_R - W_L),$$

où $\Lambda_k = \Lambda_k(W_k)$ désigne le rayon spectral de la matrice de convection $\nabla_W \mathcal{F}(W_k)$. Connaissant le spectre de cette matrice, on a en fait :

$$\max(\theta_R, \theta_L) = \max_{k=L,R} (|u_k \pm c|)$$

Enfin, on prendra comme CFL : $\Delta t^n = C \frac{\Delta x}{\max(\Lambda_R, \Lambda_L)}$ avec C le coefficient positif tel que $C < \frac{1}{2}$. (On privilégie cette notation plutôt qu'une inégalité sans coefficient qui peut laisser un doute).

B. SCHÉMA DE VFRoe-NCV

Rappelons ici le principe de ce schéma. Quelques détails sont fournis en Annexe A. Comme pour le schéma de Roe, on linéarise le système, et on considère un changement de variable pour des solutions régulières :

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

avec Ψ un C^1 -difféomorphisme. On obtient le système non-conservatif suivant :

$$\partial_t V + A(V)\partial_x V = 0, \quad (2.25)$$

avec $A(V) = (\nabla_V \Psi)^{-1} \nabla_W \mathcal{F}(\nabla_V \Psi)$ la nouvelle matrice de convection. On linéarise en fixant un $V = (V_L, V_R)$, et on prend la moyenne des deux états, notée $\bar{V} = \frac{V_L + V_R}{2}$.

Le flux numérique est alors défini à partir de la solution exacte du problème de Riemann associé au système linéaire suivant :

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

En notant cette solution $\mathcal{V}(\frac{x}{t} = 0; V_L, V_R)$, on a le flux numérique suivant :

$$F(W_L, W_R) = \mathcal{F}(\Psi(\mathcal{V}(x/t = 0, V_L; V_R))),$$

la solution du problème linéaire étant donnée par :

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

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

Enfin, on doit apporter un terme de correction au schéma sinon il peut converger vers une solution non physique. C'est un terme diffusif, voir [13]. Le flux numérique final est alors :

$$F(W_L, W_R) = \mathcal{F}(\Psi(\mathcal{V}(x/t = 0, V_L; V_R))) - \frac{\delta}{2}(W_R - W_L), \quad (2.26)$$

$$\text{où } \delta = \begin{cases} \min(-(u+c)_L, (u+c)_R) & \text{si } (u+c)_L < 0 \text{ et } (u+c)_R > 0, \\ \min(-(u-c)_L, (u-c)_R) & \text{si } (u-c)_L < 0 \text{ et } (u-c)_R > 0, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.27)$$

2.3.3 ÉTAPE DE RÉOLUTION DES TERMES SOURCE

Une fois l'étape de convection réalisée, on obtient un état dit "intermédiaire" que l'on note $W_i^{n+1,*}$, à partir duquel on travaille à présent. Notons que l'on suppose que les $(\theta_i)_{i=1,2,3}$ ne dépendent pas du temps, mais seulement de l'itération. Enfin on note $Y_{\acute{e}q} = (\alpha_{\acute{e}q}, y_{\acute{e}q}, z_{\acute{e}q})$.

La prise en compte des termes sources se fait par la résolution de ce système d'EDO :

$$\begin{cases} \partial_t \alpha = \frac{\alpha_{\acute{e}q}(\tau, e) - \alpha}{\theta_1} \\ \partial_t y = \frac{y_{\acute{e}q}(\tau, e) - y}{\theta_2} \\ \partial_t z = \frac{z_{\acute{e}q}(\tau, e) - z}{\theta_3} \\ \partial_t \rho = 0 \\ \partial_t \rho u = 0 \\ \partial_t \rho E = 0 \end{cases}, \quad (2.28)$$

avec $Y^{\acute{e}q}(\tau, e)$ la fraction d'équilibre (voir partie suivante) correspondant au couple (τ, e) du vecteur d'état, qui dépend *a priori* du temps. Le système se réécrit de façon équivalente :

$$\begin{cases} \partial_t \alpha = \frac{\alpha_{\acute{e}q}(\tau, e) - \alpha}{\theta_1} \\ \partial_t y = \frac{y_{\acute{e}q}(\tau, e) - y}{\theta_2} \\ \partial_t z = \frac{z_{\acute{e}q}(\tau, e) - z}{\theta_3} \\ \partial_t \tau = 0 \\ \partial_t u = 0 \\ \partial_t e = 0 \end{cases} . \quad (2.29)$$

D'après la seconde moitié du système, τ et e ne dépendent en fait pas du temps, on peut donc calculer $Y_{\acute{e}q}$ à l'instant initial, c'est-à-dire pour le couple (τ, e) issu de $W_i^{n+1,*}$. Notons $Y_{\acute{e}q}^{n+1,*} = (\alpha_{\acute{e}q}^{n+1,*}, y_{\acute{e}q}^{n+1,*}, z_{\acute{e}q}^{n+1,*})$ les fractions obtenues. On peut donc intégrer exactement le système suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \alpha = \frac{\alpha_{\acute{e}q}^{n+1,*} - \alpha}{\theta_1} \\ \partial_t y = \frac{y_{\acute{e}q}^{n+1,*} - y}{\theta_2} \\ \partial_t z = \frac{z_{\acute{e}q}^{n+1,*} - z}{\theta_3} \end{cases} , \quad (2.30)$$

et obtenir le système complet :

$$\begin{cases} \alpha(t) = e^{-t/\theta_1} \alpha^{n+1,*} + (1 - e^{-t/\theta_1}) \alpha_{\acute{e}q}^{n+1,*} \\ y(t) = e^{-t/\theta_2} y^{n+1,*} + (1 - e^{-t/\theta_2}) y_{\acute{e}q}^{n+1,*} \\ z(t) = e^{-t/\theta_3} z^{n+1,*} + (1 - e^{-t/\theta_3}) z_{\acute{e}q}^{n+1,*} \\ \rho(t) = \rho^{n+1,*} \\ u(t) = u^{n+1,*} \\ e(t) = e^{n+1,*} \end{cases} . \quad (2.31)$$

On obtient donc en résolvant en $t = \Delta t$, avec W_i^{n+1} l'approximation finale :

$$\begin{cases} \alpha^{n+1} = e^{-\Delta t/\theta_1} \alpha^{n+1,*} + (1 - e^{-\Delta t/\theta_1}) \alpha_{\acute{e}q}^{n+1,*} \\ y^{n+1} = e^{-\Delta t/\theta_2} y^{n+1,*} + (1 - e^{-\Delta t/\theta_2}) y_{\acute{e}q}^{n+1,*} \\ z^{n+1} = e^{-\Delta t/\theta_3} z^{n+1,*} + (1 - e^{-\Delta t/\theta_3}) z_{\acute{e}q}^{n+1,*} \\ \rho^{n+1} = \rho^{n+1,*} \\ u^{n+1} = u^{n+1,*} \\ e^{n+1} = e^{n+1,*} \end{cases} . \quad (2.32)$$

Remarque 9. Il est primordial que les $(\theta_i)_{i=1,2,3}$ ne dépendent pas du temps pour que les systèmes (2.23) et (2.26) soient équivalents. Ce sont des quantités homogènes à un temps. La valeur de ces paramètres détermine la vitesse à laquelle le système est ramené à l'équilibre, nous y reviendrons dans la partie triphasique.

2.3.4 CONSTRUCTION D'UN PROBLÈME DE RIEMANN POUR LE PROBLÈME CONVECTIF

Nous allons construire un problème de Riemann dont on connaît la solution analytique afin de vérifier le schéma qui concerne la partie convective. Pour cela, on fixe un état gauche, puis on définit progressivement les trois autres états en respectant les conditions imposées. Ici, on considère une onde de gauche qui conserve l'état (dite "ghost-wave", voir [6]), un contact et un choc à droite, les conditions seront donc les relations de Rankine-Hugoniot entre l'état central et l'état de droite.

On considèrera dans cette partie le vecteur des variables primitives $Z = (Y, \rho, u, P)$. On considère donc la situation suivante :

$$Z_L \mid Z_1 \mid Z_2 \mid Z_R$$

Calcul de Z_1 : puisqu'on considère une onde fantôme, on a donc $Z_L = Z_1$.

Calcul de Z_2 : considérons le contact. Les invariants de Riemann y sont préservés, ils sont u et P . Ainsi on a $u_1 = u_2$ et $P_1 = P_2$. Reste à définir Y_2 et ρ_2 .

· Z_R : Pour déterminer cet état on étudie les relations de Rankine-Hugoniot. On note σ la vitesse du choc, et $[x] = x_R - x_L$:

$$\begin{cases} -\sigma[\rho Y] + [\rho u Y] = 0 \\ -\sigma[\rho] + [\rho Y] = 0 \\ -\sigma[\rho U] + [\rho U^2 + P] = 0 \\ -\sigma[\rho E] + [\rho u E + u P] = 0 \end{cases} \quad (2.33)$$

Proposition 5. Soit $J = \rho(u - \sigma)$. On a $[J] = 0$ et les relations de Rankine-Hugoniot impliquent que :

- Dans le cas d'un contact, la pression et la vitesse sont conservés.
- Dans le cas d'un choc, on a les relations suivantes :

$$\begin{cases} [Y] = 0 \\ J = -\frac{[P]}{[u]} \\ J^2 = -\frac{[P]}{[\tau]} \\ [e] + [\tau] \frac{P_2 + P_R}{2} = 0 \end{cases} \quad (2.34)$$

Démonstration. Établissons des relations dans le cas général d'une discontinuité, puis distinguons les cas.

- La conservation de la masse implique que $[J] = 0$. En effet :

$$-\sigma[\rho] + [\rho Y] = [-\sigma\rho + \rho Y] = [J] = 0.$$

Ainsi J est préservé, ce dont on va se servir plusieurs fois dans la suite.

- La première relation sur les fractions se traduit par :

$$-\sigma[\rho Y] + [\rho u Y] = -[\sigma\rho Y + \rho u Y] = [JY] = J[Y] = 0.$$

- La conservation du moment donne :

$$-\sigma[\rho u] + [\rho u^2 + P] = [-\sigma\rho u + \rho u^2] + [P] = J[u] + [P] = 0.$$

- On établit la dernière relation nécessaire en utilisant les troisième et quatrième relations de Rankine-Hugoniot. En partant de la troisième et en multipliant par $\bar{u} = \frac{u_R + u_L}{2}$, on a :

$$\begin{aligned}
[-\sigma \rho u + \rho u^2 + P] &= 0, \\
\bar{u}[-\sigma \rho u + \rho u^2] + \bar{u}[P] &= 0, \\
\bar{u}[\rho v u] + \bar{u}[P] &= 0, \\
\rho v \frac{[u^2]}{2} + \bar{u}[P] &= 0, \\
J \frac{[u^2]}{2} + \bar{u}[P] &= 0.
\end{aligned}$$

par identité remarquable et car $J = \rho v$ est préservé à travers une discontinuité. Explicitons à présent la quatrième relation de Rankine-Hugoniot :

$$\begin{aligned}
[-\rho \sigma E + \rho u E + u P] &= 0, \\
[\rho v E] + [u P] &= 0, \\
J[E] + [u P] &= 0, \\
J[e] + J \frac{[u^2]}{2} + [u P] &= 0,
\end{aligned}$$

et donc en utilisant le fait que $[u P] = \bar{u}[P] + \bar{P}[u]$, et que $[u] = [v] = [\rho \tau v]$:

$$\begin{aligned}
J[e] + \underbrace{J \frac{[u^2]}{2} + \bar{u}[P] + \bar{P}[u]}_{=0} &= 0, \\
J[e] + \bar{P}[u] &= 0, \\
J[e] + \bar{P}[\rho v \tau] &= 0, \\
J([e] + \bar{P}[\tau]) &= 0.
\end{aligned}$$

On a donc les relations suivantes :

$$\begin{cases} J[Y] = 0 \\ J[u] + [P] = 0 \\ J([e] + \bar{P}[\tau]) = 0 \end{cases} . \quad (2.35)$$

- Dans le cas d'un contact, $J = u - \sigma = 0$. D'une part la pression P est conservée par la deuxième relation ci-dessus. D'autre part, $u = J\tau + \sigma$ donc $[u] = J[\tau]$, ainsi la vitesse u est également conservée.
- Dans le cas d'un choc, $J \neq 0$. On en déduit directement de (2.35) 3 des 4 relations recherchées. La dernière s'obtient avec $[u] = J[\tau]$ et une relation déjà démontrée :

$$J = -\frac{[P]}{[u]} = -\frac{[P]}{J[\tau]} \implies J^2 = -\frac{[P]}{[\tau]}$$

Ainsi on a démontré l'ensemble des relations dans le cas d'un contact et d'un choc. \square

Calcul de Z_R .

- on fixe les fractions et la densité de l'état 2 (la vitesse et la pression son conservées dans le contact),
- on fixe la densité dans l'état de droite,
- la dernière relation du système de la proposition permet de calculer P_R , la deuxième relation donne J , et la troisième u_R puis σ .

L'équation permettant de trouver P_R est non linéaire puisqu'on exprime e en fonction de P , voir Proposition 5.

Problème de Riemann proposé

On fixe les paramètres thermodynamiques suivants :

$$C_v = 2.0, \gamma_v = 1.5, \Pi_v = 1500, C_l = 1.0, \gamma_l = 1.4, \Pi_l = 1000$$

Les valeurs calculées sont écrites en gras, les autres sont celles que l'on a fixé. Le choc est de vitesse $\sigma = 52.334661535806909 \text{ m.s}^{-1}$.

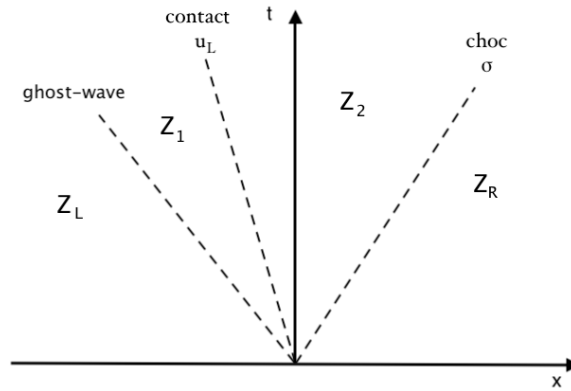


FIGURE 2.1 – Structure du problème de Riemann

| | $Z_L = Z_1$ | Z_2 | Z_R |
|----------|-------------|--------|----------------------------|
| α | 0.1 | 0.8 | 0.8 |
| y | 0.1 | 0.7 | 0.7 |
| z | 0.1 | 0.6 | 0.6 |
| τ | 1.0 | 0.05 | 0.1 |
| u | -5.0 | -5.0 | -62.334661535806895 |
| P | 10^5 | 10^5 | 34254.731731489301 |

2.4 RÉSULTATS NUMÉRIQUES

On présente enfin quelques résultats numériques obtenus. L'objectif ici est de s'assurer du bon fonctionnement des méthodes présentées précédemment, de leurs implémentations, avant de les adapter au cas triphasique.

2.4.1 PROBLÈME DE RIEMANN

Ce problème modélise une situation avec des fractions de l'ordre d'un dixième, donc deux phases présentes de façon consécutives. La solution analytique est constituée d'un contact de vitesse négative et d'un choc de vitesse positive.

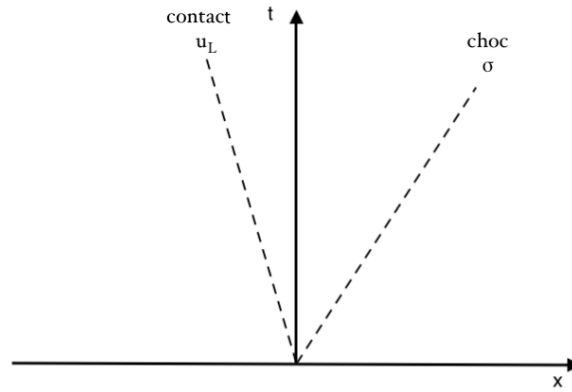


FIGURE 2.2 – Structure du problème de Riemann

Dans toute cette partie, on présente des résultats numériques à CFL fixée : elle vaut 0.45, hormis sur $[0; \frac{T}{4}]$ où elle croît linéairement de 0.045 en 0 à 0.45 en $T/4$.

Les tracés d'approximation de solutions ont été faits avec 500 points sur $[0; 1]$.

Le temps final est, sauf cas particulier, $T=0.001$, y compris pour les études de convergence des schémas (temps final permettant d'observer toutes les ondes, dépendant donc de leurs vitesses). On effectuera un tracé à $T=0.008$ pour mettre en évidence les vitesses d'ondes.

On utilisera l'erreur L^1 définie par :

$$\text{err}(\phi, T) = \frac{\sum_{i=1}^N |\phi_{\text{approx}}(x_i, T) - \phi_{\text{exacte}}(x_i, T)|}{\sum_{i=1}^N |\phi_{\text{exacte}}(x_i, T)|}.$$

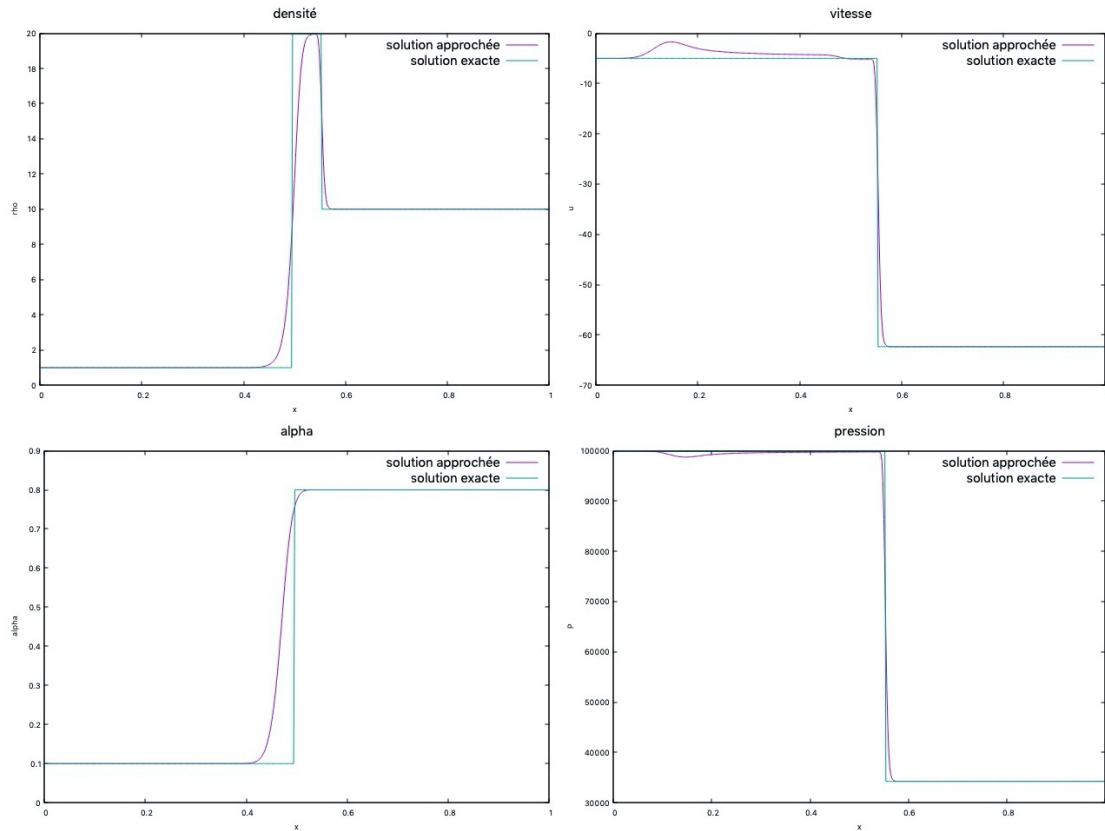


FIGURE 2.3 – Problème de Riemann (1) à $T=0.001$ (Rusanov)

On obtient bien une approximation de la forme attendue. Remarquons tout de même, et ce sera valable pour VFRoe également, que l'onde de gauche est visible numériquement sur les tracés de vitesse et pression, et que l'impact est visible sur toute la partie gauche (clair sur la vitesse).

On trace ci-dessous le log de l'erreur L^1 en fonction du log du pas d'espace. La droite jaune est de pente $1/2$.

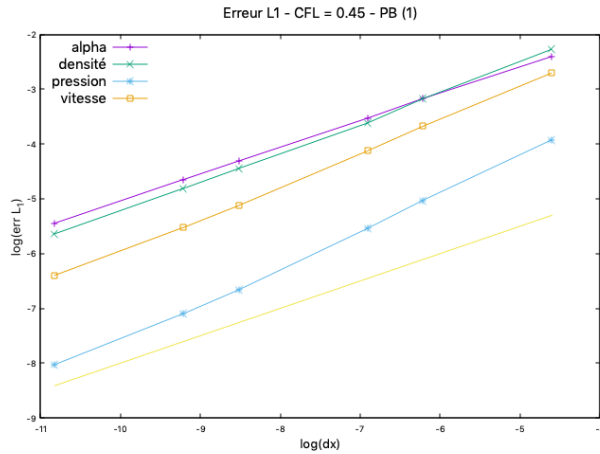


FIGURE 2.4 – Convergence du schéma de Rusanov

Pour mettre en évidence la structure de la solution, c'est-à-dire les deux ondes contact-choc, on représente ici la solution et l'approximation au temps 0.008 :

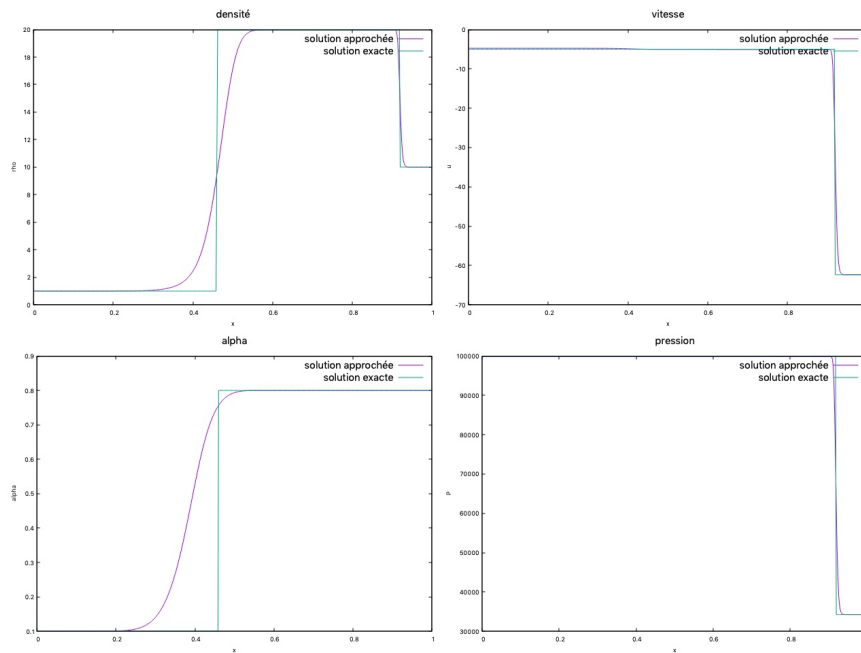


FIGURE 2.5 – Problème de Riemann (1) à $T=0.008$ (Rusanov)

On rappelle que le contact a la vitesse $u_L = -5.0$, ce qui à $T = 0.008$ donne un décalage de 0.040 par rapport à la discontinuité initiale située en $x_0 = 0.5$. Il préserve la vitesse et la pression. Le choc lui, de vitesse environ $\sigma \simeq 52$, ne préserve que les fractions. À $T = 0.008$, on observe un décalage d'environ 0.42. La densité n'étant préservée par aucune de ces deux ondes, on peut confirmer ces vitesses à l'aide de son tracé :

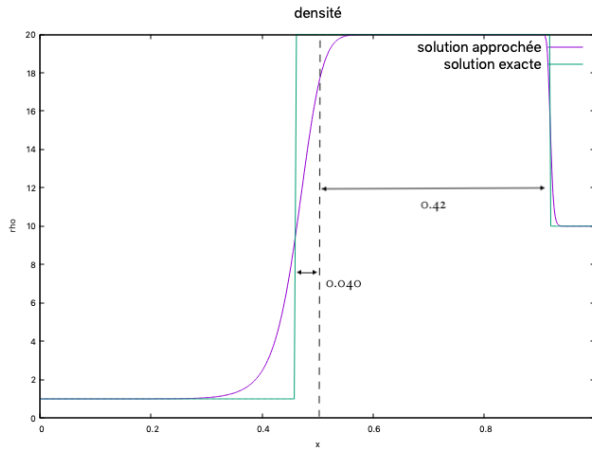


FIGURE 2.6 – Densité à $T=0.008$; Vitesse des ondes

On s'intéresse à présent au schéma de VFRoe :

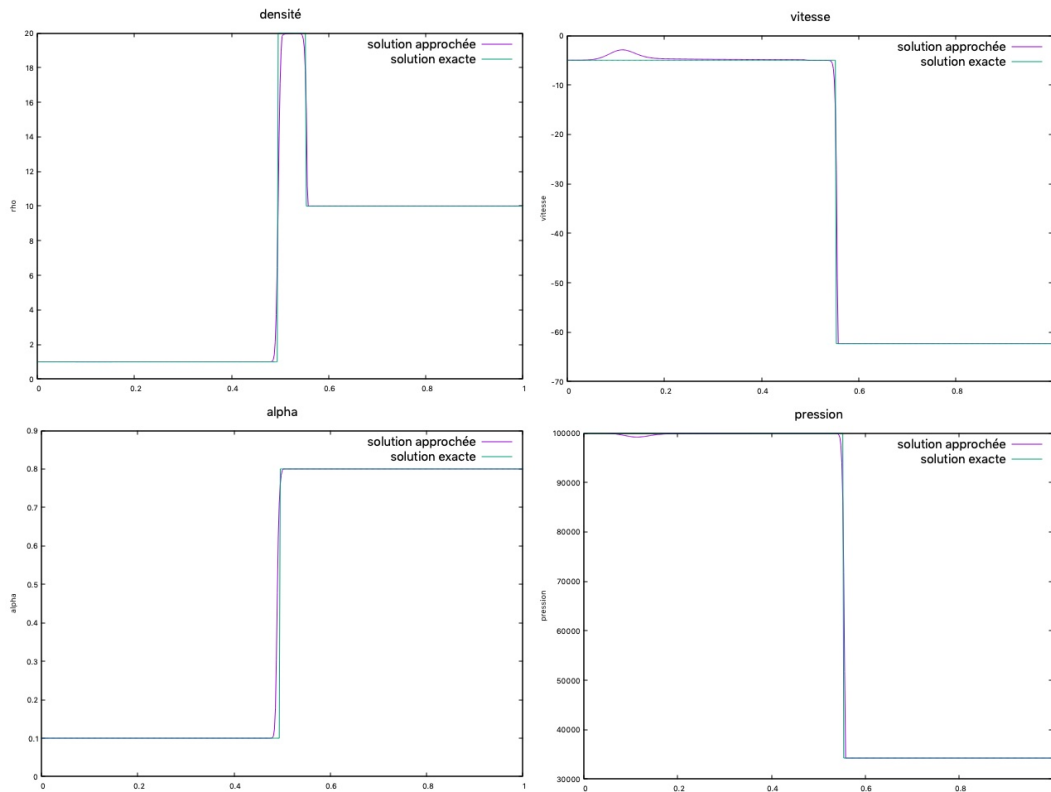


FIGURE 2.7 – Problème de Riemann (1) à $T=0.001$ (VFRoe)

On peut constater que le schéma converge bien à l'ordre $1/2$, avec une erreur plus faible que Rusanov (la droite jaune a une pente $1/2$) :

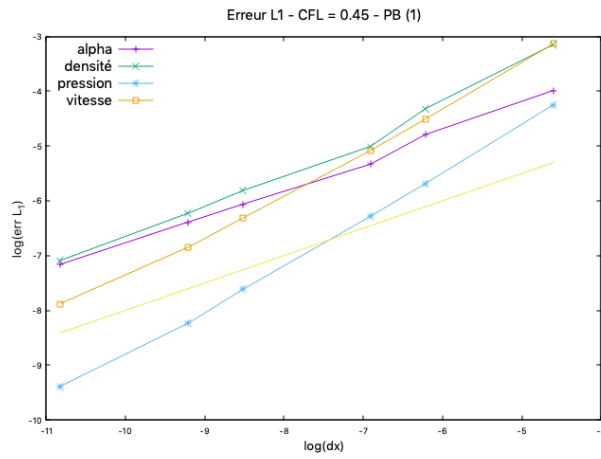


FIGURE 2.8 – Convergence du schéma de VFRoe

Enfin, sur les tracés à 500 points et à CFL égale, l'approximation obtenue par le schéma de VFRoe semble plus proche de la solution celle obtenue par Rusanov, comme on peut le voir en figure (2.9).

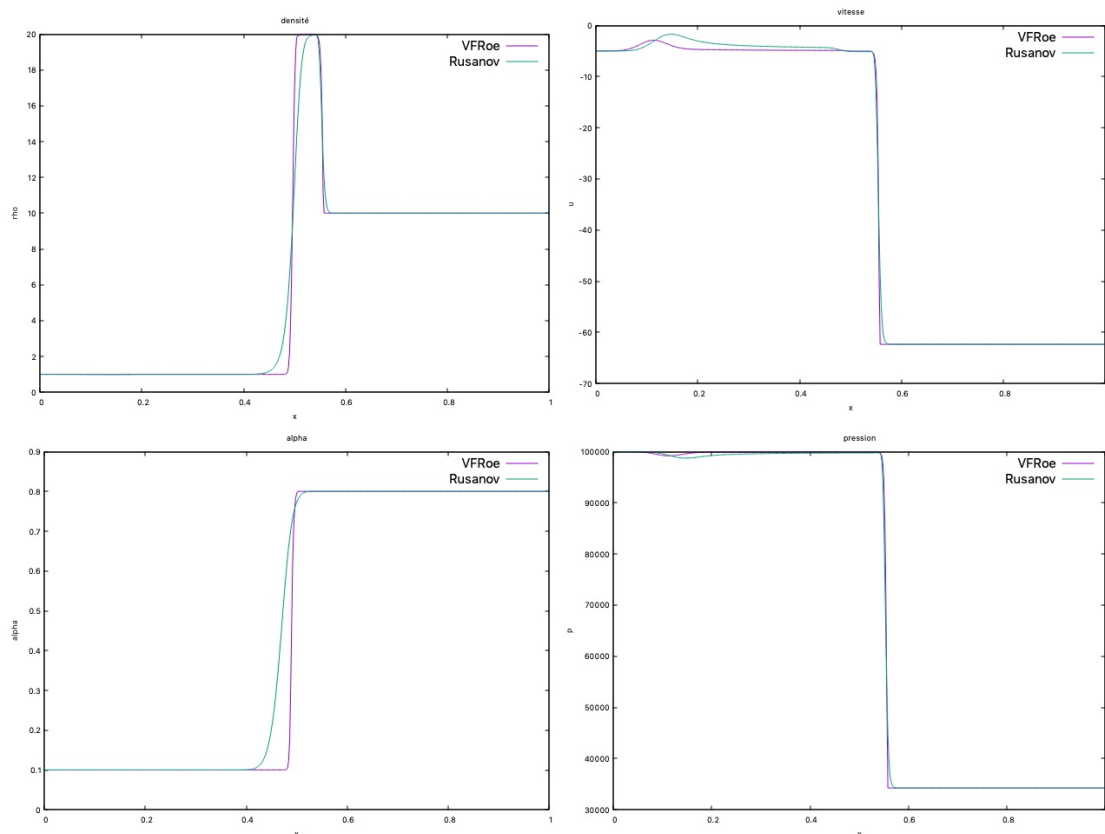


FIGURE 2.9 – Rusanov vs. VFRoe à $T=0.001$, $CFL=0.45$, 500 points

La diffusion numérique est moins importante avec VFRoe qu’avec Rusanov.

2.5 CONCLUSION SUR LE MODÈLE DIPHASIQUE

Ce modèle construit par ajout d’équations d’advection sur les fractions à un système d’Euler permet une première approche des modèles de fluides multiphasiques immiscibles compressibles homogènes à l’équilibre.

Cette construction est relativement simple et constitue un avantage, puisque cela nous a permis d’avoir rapidement des résultats numériques. On peut noter qu’elle dépend fondamentalement de l’hypothèse d’homogénéité du modèle, ce qui limite d’ors et déjà son utilisation.

Pour approfondir un peu cette première étude, il faudrait créer un second cas test, à haute pression cette fois-ci, et également travailler sur l’influence des termes sources, notamment le choix des temps caractéristiques θ . Nous n’avons que vérifié leur bon fonctionnement dans le cas des gaz parfaits. Enfin, il peut être intéressant de se concentrer sur la ghost-wave et l’erreur numérique produite en particulier à cet endroit.

Nous allons donc étudier un modèle triphasique en essayant de lui adapter ce modèle.

CHAPITRE 3

MODÈLE TRIPHASIQUE HOMOGENÈ

On s'intéresse à présent à la modélisation d'un écoulement constitué de trois phases : eau sous formes liquide et vapeur ainsi qu'un gaz autre. On reprend le plan de la partie précédente : thermodynamique, systèmes homogènes, hyperbolicité, numérique.

3.1 DESCRIPTION DU SYSTÈME THERMODYNAMIQUE

A. DESCRIPTION THERMODYNAMIQUE

On considère un système de masse M , de volume V et d'énergie interne E , et l'on indexe les variables correspondant aux différentes phases par l pour la phase liquide, v pour la phase vapeur et g pour la phase gazeuse. On notera $W = (M, V, E)$ le vecteur d'état du système et $W_k = (M_k, V_k, E_k)$ celui de la phase k avec C_k le domaine de définition de l'entropie S_k relative à la phase k , convexe (on demande les mêmes hypothèses que dans le cas diphasique, voir *Hypothèses 1* partie 1.2).

On considère deux cas d'étude : le premier sans transition de phase entre le liquide et la vapeur, et le second avec. Dans les deux situations, on considère que le gaz ne peut échanger de masse avec les autres phases. Enfin, le gaz et la vapeur sont considérés comme miscibles, et le liquide non miscible avec les autres phases.

La conservation de la masse se traduit donc par :

$$M = M_l + M_g + M_v, \tag{3.1}$$

la conservation de l'énergie par :

$$E = E_l + E_g + E_v, \tag{3.2}$$

et enfin, d'après les hypothèses de miscibilité, on a :

$$\begin{cases} V = V_l + V_g, \\ V_g = V_v. \end{cases} \tag{3.3}$$

Comme dans le cas diphasique, on considère qu'il n'y a pas d'apparition de vide, et que les deux phases gazeuses sont parfaitement mélangées (volumes égaux), ce qui implique en particulier que nous les considérons comme des gaz idéaux (qui sont des gaz parfaits dont les capacités thermiques C_p et C_v peuvent varier). Notons que ces relations sur les volumes ne sont pas symétriques, et ce sont elles qui compliquent l'étude en général.

Remarque 10. Absence d'une phase gazeuse.

On se doit d'être prudent avec un cas où une des phases gazeuses vient à disparaître : en effet, physiquement, cela se traduit entre autre par un volume nul, or dans notre modélisation, cela entraînerait la disparition des deux phases gazeuses. On doit donc traiter ces cas en imposant l'annulation de la masse uniquement. Concernant la phase liquide, on a simplement $M_l = V_l = 0$.

B. ENTROPIES EXTENSIVES, CARACTÉRISATION DE L'ÉQUILIBRE THERMODYNAMIQUE

Tout d'abord, rappelons qu'on demande que les entropies phasiques vérifient les Hypothèses 1 vues en partie 1.2 : c'est primordial pour que les définitions à venir soient valables.

Par additivité de l'entropie selon les composants, on peut écrire l'entropie de mélange Σ de la façon suivante : pour $(W_l, W_g, W_v) \in C_l \times C_g \times C_v$,

$$\Sigma(W_l, W_g, W_v) = S_l(W_l) + S_g(W_g) + S_v(W_v).$$

Ainsi, on va pouvoir définir les entropies de mélanges à l'équilibre selon les cas considérés. Dans la suite, NPT signifie "no phase transition" et PT "phase transition".

Definition 3. Soient $M_g \geq 0$ et $W = (M, V, E) \in (\mathbb{R}^+)^3$ le vecteur d'état du système. On définit les entropies de mélange à l'équilibre en distinguant les deux cas suivants :

- s'il n'y a pas de transition de phase, M_l et M_v sont fixées et vérifient (3.1) et on définit :

$$S_{\text{NPT}}(M, V, E, M_l, M_g) := \max_{(W_l, W_g, W_v) \in \Omega_{\text{ext}}^{\text{NPT}}} \Sigma(W_l, W_g, W_v),$$

avec $\Omega_{\text{ext}}^{\text{NPT}} := \{W_k \in C_k, k = l, g, v \text{ tels que (3.2) et (3.3) soient vérifiées}\}$,

- s'il y peut y avoir transition de phase :

$$S_{\text{PT}}(M, V, E, M_g) := \max_{(W_l, W_g, W_v) \in \Omega_{\text{ext}}^{\text{PT}}} \Sigma(W_l, W_g, W_v),$$

avec $\Omega_{\text{ext}}^{\text{PT}} := \{W_k \in C_k, k = l, g, v \text{ tels que (3.1), (3.2) et (3.3) soient vérifiées}\}$

Les entropies de mélange sont bien définies grâce aux hypothèses faites sur les entropies phasiques : les domaines $\Omega_{\text{ext}}^{\text{PT}}$ et $\Omega_{\text{ext}}^{\text{NPT}}$ sont convexes non vides, les semi-continuités supérieures des entropies phasiques entraînent celles des entropies de mélange, qui permettent de s'assurer que le maximum est atteint, voir [15, 8]. Enfin, le maximum est bien unique mais peut être atteint en différents points.

Remarque 11. Notons que les variables des entropies de mélange à l'équilibre sont celles nécessaires à décrire le mélange : en plus de W , on adjoint dans le cas où il n'y a pas de transition de phase M_l et M_g , et donc implicitement M_v . En effet aucune des masses ne peut varier dans ce cas, l'optimisation se fait sur d'autres variables. Dans le cas où il y a transition de phase, M_l n'est plus une variable de S_{PT} , car elle peut varier avec M_v , et la conservation de la masse est alors une contrainte définissant $\Omega_{\text{ext}}^{\text{PT}}$.

On démontre uniquement la concavité de S_{NPT} . Pour des justifications complémentaires, on pourra consulter [10].

Proposition 6. *Les entropies de mélange à l'équilibre sont des fonctions concaves et PH1 en leurs variables.*

Démonstration. Le caractère PH1 résulte de celui de l'entropie de mélange, préservé par passage au maximum.

Démontrons la concavité. On traite le cas où l'on ne considère pas de transition de phase. On notera par souci de lisibilité dans cette preuve $S = S_{\text{NPT}}$. Montrons que, $\forall W = (M, V, E, M_l, M_g) \text{ et } W' = (M', V', E', M'_l, M'_g)$ tels que l'entropie de mélange soit bien définie, $\forall t \in [0; 1]$, on a :

$$tS(W) + (1-t)S(W') \leq S(tW + (1-t)W').$$

Remarquons dans un premier temps que les masses de chaque phase sont fixées, on peut ainsi retirer la dépendance de S en M_l et M_g . De plus, la contrainte sur les volumes des phases miscibles nous permet de remplacer V_g par V_v :

$$\begin{aligned} S(M, V, E) &= \max_{\substack{E=E_l+E_g+E_v \\ V=V_l+V_v}} \Sigma(W_l, (M_g, V_v, E_g), W_v) \\ &= \max_{\substack{E=E_l+E_g+E_v \\ V=V_l+V_v}} S_l(M_l, V_l, E_l) + S_g(M_g, V_v, E_g) + S_v(M_v, V_v, E_v). \end{aligned}$$

Fixons deux états W et W' , ainsi que $t \in [0; 1]$. Soit $\epsilon > 0$, on a par définition du sup qui est ici un max, l'existence de $(V_l^\epsilon, V_v^\epsilon, E_l^\epsilon, E_v^\epsilon, E_g^\epsilon)$ et $(V_l'^\epsilon, V_v'^\epsilon, E_l'^\epsilon, E_v'^\epsilon, E_g'^\epsilon)$ tels que :

$$S(W) - \epsilon \leq S_l(M_l, V_l^\epsilon, E_l^\epsilon) + S_g(M_g, V_v^\epsilon, E_g^\epsilon) + S_v(M_v, V_v^\epsilon, E_v^\epsilon),$$

$$S(W') - \epsilon \leq S_l(M'_l, V_l'^\epsilon, E_l'^\epsilon) + S_g(M'_g, V_v'^\epsilon, E_g'^\epsilon) + S_v(M'_v, V_v'^\epsilon, E_v'^\epsilon).$$

Démontrons alors l'inégalité de concavité voulue :

$$\begin{aligned} t(S(W) - \epsilon) + (1-t)(S(W') - \epsilon) &= tS(W) + (1-t)S(W') - \epsilon \\ &\leq t(S_l(M_l, V_l^\epsilon, E_l^\epsilon) + S_g(M_g, V_v^\epsilon, E_g^\epsilon) + S_v(M_v, V_v^\epsilon, E_v^\epsilon)) \\ &\quad + (1-t)(S_l(M'_l, V_l'^\epsilon, E_l'^\epsilon) + S_g(M'_g, V_v'^\epsilon, E_g'^\epsilon) + S_v(M'_v, V_v'^\epsilon, E_v'^\epsilon)) \\ &\leq tS_l(M_l, V_l^\epsilon, E_l^\epsilon) + (1-t)S_l(M'_l, V_l'^\epsilon, E_l'^\epsilon) \\ &\quad + tS_g(M_g, V_v^\epsilon, E_g^\epsilon) + (1-t)S_g(M'_g, V_v'^\epsilon, E_g'^\epsilon) \\ &\quad + tS_v(M_v, V_v^\epsilon, E_v^\epsilon) + (1-t)S_v(M'_v, V_v'^\epsilon, E_v'^\epsilon). \end{aligned}$$

En utilisant la concavité des entropies phasiques puis la définition de l'entropie d'équilibre, on a :

$$\begin{aligned} t(S(W) - \epsilon) + (1-t)(S(W') - \epsilon) &\leq S_l(t(M_l, V_l^\epsilon, E_l^\epsilon) + (1-t)(M'_l, V_l'^\epsilon, E_l'^\epsilon)) \\ &\quad + S_g(t(M_g, V_v^\epsilon, E_g^\epsilon) + (1-t)(M'_g, V_v'^\epsilon, E_g'^\epsilon)) \\ &\quad + S_v(t(M_v, V_v^\epsilon, E_v^\epsilon) + (1-t)(M'_v, V_v'^\epsilon, E_v'^\epsilon)) \\ &\leq S(tW + (1-t)W'). \end{aligned}$$

Ceci étant vrai pour tout $\epsilon > 0$, on obtient l'inégalité de concavité désirée pour l'entropie de mélange à l'équilibre. \square

Si l'entropie de mélange à l'équilibre (cas NPT) est différentiable par rapport à V et E , on peut définir la température et la pression du mélange à l'équilibre :

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S_{\text{NPT}}}{\partial E}(M, V, E, M_l, M_g), \quad P = T \frac{\partial S_{\text{NPT}}}{\partial V}(M, V, E, M_l, M_g). \quad (3.4)$$

Si de plus S_{NPT} est différentiable par rapport à M, M_l et M_g , on peut définir le potentiel chimique à l'équilibre et les potentiels relatifs aux masses partielles M_l, M_g :

$$\mu = T \frac{\partial S_{\text{NPT}}}{\partial M}(M, V, E, M_l, M_g), \quad \lambda_k = T \frac{\partial S_{\text{NPT}}}{\partial M_k}(M, V, E, M_l, M_g), \quad k = l, g. \quad (3.5)$$

Des détails sur les $(\lambda_k)_{k=l,g}$ sont fournis dans [10]. On a finalement la relation :

$$TdS_{\text{NPT}} = dE + PdV - \mu dM + \lambda_l dM_l + \lambda_g dM_g. \quad (3.6)$$

En procédant similairement, on obtient dans le cas avec transition de phase, puisque M_l n'est plus une variable de S_{PT} :

$$TdS_{\text{PT}} = dE + PdV - \mu dM + \lambda_g dM_g. \quad (3.7)$$

Intéressons nous finalement à l'équilibre thermodynamique : lorsque l'entropie du système atteint son maximum à l'intérieur du domaine, les trois phases sont alors présentes à l'équilibre, et on peut établir la proposition suivante.

Proposition 7. *Lorsqu'il est atteint à l'intérieur du domaine de contraintes, l'équilibre thermodynamique est caractérisé par :*

· *l'égalité des températures :*

$$T_l = T_g = T_v,$$

· *la loi de Dalton sur les pressions partielles des phases gazeuses :*

$$P_l = P_g + P_v,$$

Enfin, si on considère d'éventuelles transitions de phase liquide-vapeur, on a également l'égalité des potentiels chimiques liquide et vapeur :

$$\mu_l = \mu_v.$$

Démonstration. Les entropies de mélange sont différentiables à l'intérieur de leurs domaines de contraintes Ω_{ext}^{PT} et $\Omega_{ext}^{\text{NPT}}$. L'optimisation étant la même par rapport à l'énergie et au volume, on traite ensemble ces deux cas. Soient $k, k', k'' \in \{l, g, v\}$ deux à deux distincts, on regarde une variation de $E_{k'}$ à E_k fixé. Elle est nulle lorsque Σ atteint son maximum et puisque $dE_{k'} = -dE_{k''}$, on a :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial E_{k'}} = \frac{\partial \Sigma_k}{\partial E_{k'}}(M_k, V_k, E_k) + \frac{\partial \Sigma_{k'}}{\partial E_{k'}}(M_{k'}, V_{k'}, E_{k'}) + \frac{\partial \Sigma_{k''}}{\partial E_{k'}}(M_{k''}, V_{k''}, E_{k''}) = \frac{1}{T_{k'}} - \frac{1}{T_{k''}} = 0.$$

Ainsi, par symétrie des indices, le maximum est atteint pour $T_l = T_v = T_g$. À présent, on optimise par rapport à V_l sous la contrainte (3.5) :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial V_l} = \frac{\partial \Sigma_l}{\partial V_l}(M_l, V_l, E_l) + \frac{\partial \Sigma_g}{\partial V_l}(M_g, V - V_l, E_g) + \frac{\partial \Sigma_{k''}}{\partial V_l}(M_v, V - V_l, E_v) = \frac{P_l}{T_l} - \left(\frac{P_v}{T_v} + \frac{P_g}{T_g} \right) = 0.$$

Or, $T_l = T_v = T_g$ donc on obtient la loi de Dalton sur les pressions partielles. Il reste à traiter le cas où il peut y avoir transition de phase : on optimise alors par rapport à M_l dans Ω_{ext}^{PT} . Puisqu'on a M_g fixée, $dM_l = -dM_v$ et :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial M_l} = \frac{\partial \Sigma_l}{\partial M_l}(M_l, V_l, E_l) + \frac{\partial \Sigma_g}{\partial M_l}(M_g, V_g, E_g) + \frac{\partial \Sigma_{k''}}{\partial M_l}(M - M_l - M_g, V_v, E_v) = \frac{\mu_l}{T_l} - \frac{\mu_v}{T_v} = 0.$$

Enfin, le fait que ces égalités caractérisent l'équilibre résulte de la concavité des entropies de mélange : il ne peut y avoir de point selle. \square

C. CARACTÉRISATION INTENSIVE

L'entropie de mélange intensive s définie par $s = \frac{1}{M}\Sigma$ décrit entièrement le système, avec les variables $\tau = V/M$ et $e = E/M$. On reprend les notations précédemment utilisées pour les fractions ; pour $k \in \{l, g, v\}$,

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

On a alors les volumes spécifiques et les énergies spécifiques des phases :

$$\tau_k = \frac{V_k}{M_k} = \frac{\alpha_k}{y_k}\tau, \quad e_k = \frac{E_k}{M_k} = \frac{z_k}{y_k}e.$$

Les entropies phasiques spécifiques sont définies par $s_k(\tau_k, e_k) = S_k(1, \tau_k, e_k)$ et elles vérifient la relation de Gibbs :

$$T_k ds_k = de_k + P_k d\tau_k. \quad (3.8)$$

Les contraintes extensives se traduisent en les contraintes intensives suivantes :

$$1 = y_l + y_v + y_g, \quad (3.9)$$

$$1 = z_l + z_v + z_g, \quad (3.10)$$

$$\begin{cases} 1 = \alpha_l + \alpha_g \\ \alpha_g = \alpha_v \end{cases}. \quad (3.11)$$

Enfin, l'entropie de mélange s'exprime en fonction des entropies phasiques :

$$\sigma(\tau, e, (\alpha_k)_k, (y_k)_k, (z_k)_k) = y_l s_l \left(\frac{\alpha_l}{y_l}\tau, \frac{z_l}{y_l}e \right) + y_g s_g \left(\frac{\alpha_g}{y_g}\tau, \frac{z_g}{y_g}e \right) + y_v s_v \left(\frac{\alpha_v}{y_v}\tau, \frac{z_v}{y_v}e \right). \quad (3.12)$$

À un couple (τ, e) donné, l'équilibre est atteint lorsque l'entropie intensive σ atteint son maximum (voir hypothèses et propriétés sur les entropies intensives). On peut alors définir les entropies intensives de mélange à l'équilibre dans les deux cas étudiés, la fraction massique du gaz y_g étant toujours fixée.

Proposition 8. *Soit $(\tau, e) \in (\mathbb{R}^+)^2$ le vecteur d'état spécifique du système. Les entropies spécifiques de mélange à l'équilibre s'écrivent :*

- *s'il n'y a pas de transition de phase, y_l et y_v sont fixés et vérifient (3.9) et on définit :*

$$s_{NPT}(\tau, e, y_l, y_g) := \max_{((\alpha_k)_k, (z_k)_k) \in \Omega_{int}^{NPT}} \sigma(\tau, e, (Y_k)_k),$$

avec $\Omega_{int}^{NPT} := \{(\alpha_k)_k, (z_k)_k, k = l, g, v \text{ tels que (3.10) et (3.11) soient vérifiés}\}$

- *s'il peut y avoir transition de phase :*

$$s_{PT}(\tau, e, y_g) := \max_{((y_k)_k, (\alpha_k)_k, (z_k)_k) \in \Omega_{int}^{PT}} \sigma(\tau, e, (Y_k)_k),$$

avec $\Omega_{int}^{PT} := \{(y_k)_k, (\alpha_k)_k, (z_k)_k, k = l, g, v \text{ tels que (3.9), (3.10) et (3.11) soient vérifiés}\}$

De plus, les entropies intensives à l'équilibre sont concaves.

Démonstration. Ces expressions des entropies intensives à l'équilibre se déduisent des versions extensives en divisant par M les relations extensives, et en utilisant l'homogénéité de l'entropie de mélange.

La concavité est préservée par linéarité. \square

On va à présent s'intéresser à des propriétés sur ces entropies et notamment les nuances entre les deux cas.

Proposition 9. *Fixons y_g . Dans le cas sans transition de phase, l'entropie intensive d'équilibre :*

- *dépend uniquement de τ et e ,*
- *est une fonction strictement convexe de (τ, e) ,*
- *vérifie la relation $Tds_{NPT} = de + Pd\tau$, où T et P sont les température et pression d'équilibre.*

Démonstration. Les masses étant fixées, les fractions massiques le sont et, par conséquent, $s_{PT}(\tau, e, y_l, y_g)$ ne dépend que de τ et e .

- On a donc, à couple (τ, e) donné, l'existence des couples $(\tau_k, e_k)_k$ tels que :

$$\begin{cases} e = y_l e_l + y_g e_g + y_v e_v \\ \tau = y_l \tau_l + y_g \tau_g \\ y_v \tau_v = y_g \tau_g \end{cases} \quad (3.13)$$

Montrons que s_{PT} vérifie la relation de Gibbs.

On a, puisque les températures des phases sont égales à l'équilibre, $\forall k \in \{l, g, v\}$,

$$Tds_k = de_k + P_k d\tau_k,$$

ce qui donne, en multipliant par y_k et en sommant :

$$Td \left(\sum_{k=l,g,v} y_k s_k \right) = d \left(\sum_{k=l,g,v} y_k e_k \right) + \sum_{k=l,g,v} y_k P_k d\tau_k.$$

En utilisant la définition de l'entropie de mélange et les relations (3.13), on obtient :

$$Tds_{NPT} = de + P_l d(y_l \tau_l) + P_g d(y_g \tau_g) + P_v d(y_v \tau_v).$$

Or la miscibilité des phases gazeuses implique $y_g \tau_g = y_v \tau_v$, d'où :

$$Tds_{NPT} = de + P_l d(y_l \tau_l) + (P_g + P_v) d(y_g \tau_g).$$

Enfin, la loi de Dalton vérifiée à l'équilibre nous permet de conclure :

$$Tds_{NPT} = de + Pd\tau.$$

- Montrons finalement la stricte concavité : elle découle des strictes concavités des entropies phasiques. Soient y_l, y_v et y_g fixés, montrons que $\forall ((\tau, e), (\tau', e')) \in ((\mathbb{R}^+)^2)^2$ tels que $(\tau, e) \neq (\tau', e')$, on a :

$$s_{NPT}(\tau, e) < s_{NPT}(\tau', e') + \nabla_{(\tau, e)} s_{NPT}(\tau', e') \cdot \begin{pmatrix} \tau - \tau' \\ e - e' \end{pmatrix}.$$

Or, pour chaque couple il existe $(\tau_k, e_k)_k$ et $(\tau'_k, e'_k)_k$ tels que :

$$\begin{aligned} s_{\text{NPT}}(\tau, e) &= y_l s_l(\tau_l, e_l) + y_g s_g(\tau_g, e_g) + y_v s_v(\tau_v, e_v), \\ s_{\text{NPT}}(\tau', e') &= y_l s_l(\tau'_l, e'_l) + y_g s_g(\tau'_g, e'_g) + y_v s_v(\tau'_v, e'_v). \end{aligned}$$

Les entropies phasiques *spécifiques* étant strictement concaves, on a l'inégalité :

$$s_{\text{NPT}}(\tau, e) < \sum_{k=l,g,v} y_k s_k(\tau'_k, e'_k) + y_k \nabla s_k(\tau'_k, e'_k) \cdot \begin{pmatrix} \tau_k - \tau'_k \\ e_k - e'_k \end{pmatrix}.$$

Or, $\nabla s_k(\tau'_k, e'_k) = \frac{1}{T_k(\tau'_k, e'_k)} \begin{pmatrix} 1 \\ P_k(\tau'_k, e'_k) \end{pmatrix}$ et $T_k(\tau'_k, e'_k) = T$ pour tout $k = l, g, v$. L'inégalité se réécrit alors :

$$s_{\text{NPT}}(\tau, e) < s_{\text{NPT}}(\tau', e') + \frac{1}{T}(e - e') + \frac{1}{T}(y_l P_l(\tau_l - \tau'_l) + y_g P_g(\tau_g - \tau'_g) + y_v P_v(\tau_v - \tau'_v)).$$

En utilisant finalement la loi de Dalton et les contraintes volumiques sur les fractions :

$$s_{\text{NPT}}(\tau, e) < s_{\text{NPT}}(\tau', e') + \frac{1}{T}(e - e') + \frac{P}{T}(\tau - \tau'),$$

ce qui nous amène au résultat voulu puisque $\nabla s_{\text{NPT}} = \frac{1}{T} \begin{pmatrix} 1 \\ P \end{pmatrix}$. □

Le cas avec transition de phase est différent, où l'on perd la propriété de stricte convexité de $s = s(\tau, e)$.

Proposition 10. *Fixons y_g . Dans le cas avec transition de phase, l'entropie intensive d'équilibre :*

- dépend uniquement de τ et e ,
- vérifie la relation $T ds_{PT} = de + P d\tau$, où T et P sont les température et pression d'équilibre.

Démonstration. Le raisonnement est similaire à celui de la démonstration précédente. □

3.2 SYSTÈMES HOMOGÈNES À L'ÉQUILIBRE

Dans cette partie on va s'intéresser à différents modèles reposant sur la même base : le système d'équations d'Euler.

Dans un premier temps, on s'intéresse aux modèles homogène à l'équilibre (HEM dans la littérature). Ils portent la dénomination d'homogène pour la même raison que précédemment dans le rapport : on suppose que les trois phases ont une vitesse commune. Le terme équilibre lui, signifie qu'on va utiliser les caractérisations de l'équilibre thermodynamique vues précédemment pour fermer le système. Autrement dit on suppose le fluide à l'équilibre. On se contente d'une brève étude théorique de ces modèles avec l'hyperbolicité, l'étude numérique étant rendue difficile à cause de lois de pression et valeurs propres trop complexes.

Dans un second temps, on propose des modèles homogènes de relaxation, construits à partir des précédents en quittant l'hypothèse d'équilibre, et en ajoutant des équations d'advections avec termes sources sur les fractions. Alors, une étude numérique est envisageable.

3.2.1 MODÈLE HOMOGENÈ À L'ÉQUILIBRE SANS TRANSITION DE PHASE

A. PRÉSENTATION DU MODÈLE

On décrit le fluide avec le système suivant :

$$\begin{cases} \partial_t(y_l\rho) + \partial_x(y_l\rho u) = 0 \\ \partial_t(y_g\rho) + \partial_x(y_g\rho u) = 0 \\ \partial_t\rho + \partial_x\rho u = 0 \\ \partial_t\rho u + \partial_x(\rho u^2 + P) = 0 \\ \partial_t\rho E + \partial_x(\rho E + P)u = 0 \\ E = \frac{1}{2}u^2 + e \\ P_k = P_k(\tau_k, e_k), \quad k = l, g, v \\ y_l + y_g + y_v = 1 \end{cases} \quad (3.14)$$

Le fluide est décrit par sa densité $\rho = 1/\tau$, sa vitesse u et son énergie interne e . On rappelle les relations $E = \frac{u^2}{2} + e$ et $\tau_k = \frac{1}{\rho_k}$.

On rappelle les relations suivantes qui relient l'énergie interne et le volume spécifiques avec les énergies internes et volumes spécifiques phasiques :

$$\begin{cases} e = y_l e_l + y_g e_g + y_v e_v \\ \tau = y_l \tau_l + y_g \tau_g \\ y_v \tau_v = y_g \tau_g \end{cases} \quad (3.15)$$

Le système, constitué de 10 équations, a 17 inconnues qui sont :

$$(\rho, u, E, P, e, (y_k)_k, (\tau_k)_k, (e_k)_k, (P_k)_k).$$

On doit donc adjoindre 7 relations de fermeture : (3.13) en fournit 3, que l'on complète avec les conditions d'équilibre de la Proposition 6 :

$$\begin{cases} T = T_l = T_g = T_v \\ P = P_l = P_g + P_v \end{cases} \quad (3.16)$$

T et P désignant la température et pression du fluide triphasique, avec $P = P(\tau, e, y_l, y_g)$.

Remarque 12. On peut expliciter la loi de pression du mélange à l'équilibre dans le cas de gaz parfaits, ce sera utile plus tard pour vérifier le code.

B. HYPERBOLICITÉ

Proposition 11. *Le système (3.14) est hyperbolique.*

Démonstration. On propose une démonstration différente de celle présentée dans [11] : on effectue un changement de variables sur la partie Euler et advection, puis on étudie la matrice définissant le système obtenu. On réécrit le système (3.14) avec le jeu de variable $W = (y_l, y_g, \tau, u, P)$. On obtient alors le système suivant, équivalent au premier pour des solutions régulières :

$$\begin{cases} \partial_t y_l + u \partial_x y_l = 0 \\ \partial_t y_g + u \partial_x y_g = 0 \\ \partial_t \tau + u \partial_x \tau - \tau \partial_x u = 0 \\ \partial_t u + u \partial_x u + \tau \partial_x P = 0 \\ \partial_t P + \frac{c^2}{\tau} \partial_x u + u \partial_x P = 0 \end{cases} \quad (3.17)$$

où $\frac{c^2}{\tau^2} = P\partial_e P - \partial_\tau P$. Le changement de variable effectué ci-dessus est détaillé en guise d'exemple en annexe C.

On a donc le système quasi-linéaire suivant :

$$\partial_t W + A(W)\partial_x W = 0,$$

$$\text{avec } A(W) = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & -\tau & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u & \tau \\ 0 & 0 & 0 & \frac{c^2}{\tau} & u \end{pmatrix} \text{ et } Sp(A) = \{u-c, u, u+c\}, \text{ dont les sous-espaces propres}$$

sont :

$$E_u = \text{Vect}(e_1, e_2, e_3), \quad E_{u-c} = \text{Vect} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \tau \\ c \\ -\frac{c^2}{\tau} \end{pmatrix}, \quad E_{u+c} = \text{Vect} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \tau \\ -c \\ -\frac{c^2}{\tau} \end{pmatrix},$$

où $(e_i)_{i=1..5}$ désigne la base canonique de \mathbb{R}^5 . Ainsi le système est hyperbolique dès que $c^2 > 0$, qui s'écrit (voir Annexe C) :

$$\frac{c^2}{\tau^2} = P\partial_e P - \partial_\tau P = -T(P^2\partial_{ee} s_{\text{NPT}} - 2P\partial_{\tau e} s_{\text{NPT}} + \partial_{\tau\tau} s_{\text{NPT}}).$$

Mais alors, en utilisant la stricte concavité de s_{NPT} et l'expression :

$$\frac{c^2}{\tau^2} = -T \begin{pmatrix} -1 & P \end{pmatrix} \left(\nabla_{(\tau,e)}^2 s_{\text{NPT}} \right) \begin{pmatrix} -1 \\ P \end{pmatrix}.$$

Où $\left(\nabla_{(\tau,e)}^2 s_{\text{NPT}} \right)$ désigne la matrice hessienne de s_{NPT} , on en conclut que $c^2 > 0$ dès que $T > 0$ puisque cette dernière est définie négative. □

3.2.2 MODÈLE HOMOGENÈME À L'ÉQUILIBRE AVEC TRANSITION DE PHASE

A. PRÉSENTATION DU MODÈLE

On s'intéresse à présent au modèle équivalent avec transition de phase : M_v et M_l interagissent donc, cela se traduit dans le système par la disparition de l'équation de transport en y_l , qui sous-entend une équation de transport en $y_l + y_v$ (pour des solutions régulières, combiner l'équation de transport en y_g avec la conservation de la masse).

Le système considéré est alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(y_g \rho) + \partial_x(y_g \rho u) = 0 \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0 \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + P) = 0 \\ \partial_t(\rho E) + \partial_x((\rho E + P)u) = 0 \\ E = \frac{1}{2}u^2 + e \\ P_k = P_k(\tau_k, e_k), \quad k = l, g, v \\ y_l + y_g + y_v = 1 \end{array} \right. \quad (3.18)$$

On a alors un système de 9 équations avec 17 inconnues :

$$(\rho, u, E, P, e, (y_k)_k, (\tau_k)_k, (e_k)_k, (P_k)_k).$$

Notons tout de suite que la fermeture du système sera identique au cas sans transition de phase, l'égalité des potentiels chimiques à l'équilibre étant la relation de fermeture supplémentaire. Ces relations sont donc en détail :

$$\begin{cases} e = y_l e_l + y_g e_g + y_v e_v \\ \tau = y_l \tau_l + y_g \tau_g \\ y_v \tau_v = y_g \tau_g \end{cases}, \quad (3.19)$$

ainsi que :

$$\begin{cases} T = T_l = T_g = T_v \\ P = P_l = P_g + P_v \\ \mu_l = \mu_v \end{cases}. \quad (3.20)$$

B. HYPERBOLICITÉ

Contrairement au cas sans transition de phase, l'entropie d'équilibre s_{PT} n'est pas strictement concave ce qui complique la démonstration, toutefois le système est hyperbolique.

Proposition 12. *Le système (3.18) est hyperbolique.*

Démonstration. On peut réécrire le système sous forme quasi-linéaire $\partial_t W + A(W)\partial_x W = 0$ avec $W = (y_g, \tau, u, P)$ et :

$$A(W) = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & -\tau & 0 \\ 0 & 0 & u & \tau \\ 0 & 0 & \frac{c^2}{P} & u \end{pmatrix}, \quad Sp(A) = \{u - c, u, u + c\}.$$

□

La matrice $A(W)$ est diagonalisable (même argument que dans le cas sans transition de phase) dès lors que $c^2 > 0$. Mais s_{PT} n'étant pas strictement concave, sa matrice hessienne n'est pas définie négative. Dans le domaine où $(\tau, e) \mapsto s_{PT}(\tau, e)$ est strictement concave, on raisonne comme précédemment. Pour le reste, une preuve est donnée dans [11], avec des détails des calculs dans [5]. On démontre alors que $c^2 > 0$ dès que $T > 0$.

C. INCONVÉNIENTS DE CES MODÈLES

Bien qu'hyperboliques, ces modèles sont difficiles à utiliser en pratique. Ceci en dû en grande partie à la complexité des lois de pressions qui peuvent présenter des défauts de régularité ce qui mène à des ondes composites dans la résolution du problème de Riemann, voir par exemple [16].

Indépendamment du problème ci-dessus, la complexité de ces lois rend déjà le calcul des valeurs propres de la jacobienne du flux difficile, et la résolution d'un problème de Riemann également, ce qui nous est nécessaire pour construire un cas test et faire une étude numérique.

On va donc approcher ces modèles par d'autres, plus accessibles numériquement.

3.3 SYSTÈMES HOMOGENÈS DE RELAXATION

Ces modèles (dits "HRM") sont basés sur les précédents, auxquels on adjoint des équations de transport sur les fractions avec termes sources.

Le fluide n'est plus considéré à l'équilibre, ainsi l'entropie du système est l'entropie hors-équilibre, et la pression dépendra de l'ensemble des fractions.

Pour assurer le retour à l'équilibre, les équations de transport ajoutées contiennent des termes sources qui ont pour rôle de faire tendre le système vers l'équilibre.

Il faudra construire ces termes sources de façon cohérente physiquement, c'est-à-dire de façon à satisfaire la croissance de l'entropie.

Numériquement, on utilisera une méthode de splitting similaire à ce que l'on a fait dans le cas diphasique.

Remarque 13. On attire l'attention du lecteur sur le fait que dorénavant, le vecteur Y désigne les fractions rajoutées au système précédent.

3.3.1 MODÈLE HRM SANS TRANSITION DE PHASE

A. PRÉSENTATION DU MODÈLE

Notre choix se porte sur $Y = (\alpha_l, z_l, z_g)$.

On modélise l'évolution de Y par une équation de transport de vitesse u . Remarquons que ceci reste cohérent pour α_l car il n'y a pas d'échange de masse entre les phases liquide et vapeur (qui entraîneraient entre autre des variations de volume). Ainsi on considère :

$$\partial_t Y + u \partial_x Y = \Gamma(\tau, e, Y).$$

En combinant cette équation avec l'équation de conservation de la masse, on a pour des solutions régulières :

$$\partial_t(\rho Y) + \partial_x(\rho u Y) = \rho \Gamma(\tau, e, Y). \quad (3.21)$$

Ainsi, le modèle HRM s'écrit en variables conservatives :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\rho y_k) + \partial_x(\rho u y_k) = 0, \quad k = l, g \\ \partial_t(\rho \alpha_l) + \partial_x(\rho u \alpha_l) = \Gamma_1 \\ \partial_t(\rho z_l) + \partial_x(\rho u z_l) = \Gamma_2 \\ \partial_t(\rho z_g) + \partial_x(\rho u z_g) = \Gamma_3 \\ \partial_t \rho + \partial_x \rho u = 0 \\ \partial_t \rho u + \partial_x(\rho u^2 + P) = 0 \\ \partial_t \rho E + \partial_x(\rho E + P)u = 0 \end{array} \right. , \quad (3.22)$$

avec la loi de pression calculée à partir de l'entropie du mélange $\sigma = \sigma(\tau, e, y_l, y_g, Y) = \sum_k y_k \sigma_k$ vue en (3.12) :

$$\frac{1}{T(\tau, e, y_l, y_g, Y)} = \sum_{k=l,g,v} \frac{z_k}{T_k \left(\frac{\alpha_k}{y_k} \tau, \frac{z_k}{y_k} e \right)}, \quad (3.23)$$

$$P(\tau, e, y_l, y_g, Y) = T(\tau, e, y_l, y_g, Y) \sum_{k=l,g,v} \alpha_k \frac{P_k \left(\frac{\alpha_k}{y_k} \tau, \frac{z_k}{y_k} e \right)}{T_k \left(\frac{\alpha_k}{y_k} \tau, \frac{z_k}{y_k} e \right)}. \quad (3.24)$$

Enfin, on conserve les contraintes habituelles sur les fractions (3.9), (3.10), (3.11) énoncées au début de la partie.

Concernant l'hyperbolicité du système, le système s'écrit :

$$\partial_t W + A(W)\partial_x W = 0,$$

$$\text{avec } A(W) = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{pmatrix} \text{ où } A_1 = uI_5, A_2 = A_3 = 0 \text{ et } A_4 = \begin{pmatrix} u & -\tau & 0 \\ 0 & u & \tau \\ 0 & \frac{c^2}{\tau} & u \end{pmatrix}.$$

Ainsi, $Sp(A) = Sp(A_4) = \{u - c, u, u + c\}$, et les sous-espaces propres associés sont :

$$E_u = \text{Vect}(e_1, e_2, e_3, e_4, e_5), \quad E_{u-c} = \text{Vect} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \tau \\ c \\ -\frac{c^2}{\tau} \end{pmatrix}, \quad E_{u+c} = \text{Vect} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \tau \\ -c \\ -\frac{c^2}{\tau} \end{pmatrix},$$

où $(e_i)_{i=1..8}$ désigne la base canonique de \mathbb{R}^8 . Ainsi le système est hyperbolique dès que $c^2 > 0$, mais l'argument utilisé dans le cas du modèle HEM ne tient plus ici. Cependant, on peut exprimer la pression en fonction des entropies phasiques (voir Annexe C) de cette façon :

$$\frac{c^2}{T\tau^2} = - \sum_k (-\alpha_k Pz_k) \nabla_{(\tau_k, e_k)} s_k \begin{pmatrix} -\alpha_k \\ Pz_k \end{pmatrix}.$$

Puisque les entropies phasiques sont strictement concaves, leurs hessiennes sont définies négatives. Ainsi pour tout état du système, au moins un des termes de la somme ci-dessus est strictement négatif (on ne peut avoir tous les (α_k) nuls simultanément par exemple). Finalement, $c^2 > 0$, et le système est hyperbolique.

On peut définir une entropie de Lax pour ce système à partir de l'entropie de mélange σ . On rappelle tout d'abord qu'on a la relation :

$$Td\sigma = de + Pd\tau + T \sum_{k=l,g} \partial_{y_k} s dy_k + \partial_{\alpha_l} s d\alpha_l + T \sum_{k=l,g} \partial_{z_k} s dz_k. \quad (3.25)$$

Proposition 13. *En notant $W = (\rho, \rho u, \rho E, \rho y_l, \rho y_g, \rho \alpha_l, \rho z_l, \rho z_g)$ le vecteur des variables conservatives, la fonction $W \mapsto \eta(W) = -\rho\sigma(W)$ est une entropie de Lax pour le système (3.22).*

Démonstration. Remarquons d'abord qu'on sait que σ est concave en fonction des variables $(\tau, e, y_l, y_g, \alpha_l, z_l, z_g)$ en tant que somme de fonctions concaves. On peut en fait montrer que cette concavité est équivalente à la concavité de $W \mapsto \rho\sigma(W)$, voir [2, 3].

Ayant la convexité de η , il suffit de montrer qu'il existe une fonction Q telle que, pour des solutions régulières, on ait :

$$\partial_t \eta(W) + \partial_x Q(W) = 0. \quad (3.26)$$

Or, il est facile de vérifier que pour une telle solution, on a la relation $\partial_t \sigma + u\partial_x \sigma = 0$, qui donne en la combinant avec l'équation de conservation de masse :

$$\partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u \sigma) = 0.$$

Les solutions faibles vérifient alors $\partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u \sigma) \geq 0$, et donc :

$$-\partial_t(\rho u) - \partial_x(\rho u \sigma) \leq 0.$$

En prenant $Q(W) = -\rho u \sigma$, on a un couple voulu :

$$\partial_t \eta(W) + \partial_x Q(W) \leq 0.$$

□

B. CHOIX DES TERMES SOURCES

On propose ici deux choix de termes sources pour $\partial_t Y + u \partial_x Y = 0$, le premier étant similaire à ce qu'on a vu dans la partie diphasique, voir [6], le second étant un choix provenant du critère de production d'entropie, voir [11].

Notons $Y_{\text{NPT}}^{\text{eq}} = (\alpha_l^{\text{NPT}}, z_l^{\text{NPT}}, z_g^{\text{NPT}})$ le vecteur de fractions correspondant à l'équilibre thermodynamique à (τ, e, y_l, y_g) donnés. On le définit donc naturellement par :

$$Y_{\text{NPT}}^{\text{eq}} = \arg \max_{(\alpha_l, z_l, z_g)} \sigma(\tau, e, y_l, y_g, \alpha_l, z_l, z_g). \quad (3.27)$$

On peut en particulier en déduire la loi de pression à l'équilibre :

$$P_{\text{NPT}}^{\text{eq}}(\tau, e, y_l, y_g) = P(\tau, e, y_l, y_g, Y_{\text{NPT}}^{\text{eq}}(\tau, e, y_l, y_g)). \quad (3.28)$$

Ainsi on peut définir le terme source Γ dépendant d'un paramètre $\lambda > 0$:

$$\Gamma = \frac{Y_{\text{NPT}}^{\text{eq}}(\tau, e, y_l, y_g) - Y}{\lambda}. \quad (3.29)$$

Une fois de plus, faire tendre λ vers 0 correspond à un système qui tend rapidement vers l'équilibre.

Il est par contre nécessaire que ce terme source satisfasse la critère de production d'entropie. On a, pour des solutions régulières :

$$\begin{aligned} \partial_t \sigma + u \partial_x \sigma &= \partial_{\alpha_l} \sigma (\partial_t \alpha_l + u \partial_x \alpha_l) \\ &\quad + \partial_{z_l} \sigma (\partial_t z_l + u \partial_x z_l) + \partial_{z_g} \sigma (\partial_t z_g + u \partial_x z_g) \\ &= \partial_{\alpha_l} \sigma \Gamma_1 + \partial_{z_l} \sigma \Gamma_2 + \partial_{z_g} \sigma \Gamma_3 \\ &= \nabla_Y \sigma \cdot \Gamma \\ &= \lambda \nabla_Y \sigma \cdot (Y_{\text{NPT}}^{\text{eq}}(\tau, e, y_l, y_g) - Y), \end{aligned}$$

puisque $\Gamma = \frac{Y_{\text{NPT}}^{\text{eq}}(\tau, e, y_l, y_g) - Y}{\lambda}$. Par concavité de σ , on a :

$$\partial_t \sigma + u \partial_x \sigma \geq \lambda (\sigma(\tau, e, y_l, y_g, Y_{\text{NPT}}^{\text{eq}}) - \sigma(\tau, e, y_l, y_g, Y)),$$

et par définition de $Y_{\text{NPT}}^{\text{eq}}$, on en conclut :

$$\partial_t \sigma + u \partial_x \sigma \geq 0.$$

On a ainsi construit un premier terme source satisfaisant les conditions sur l'entropie du système. Néanmoins, ainsi défini, le paramètre de relaxation λ est commun aux trois fractions, ce

qui signifie que les temps de relaxation pour les équilibres mécanique et thermique sont identiques, cela n'a *a priori* pas de raisons d'être le cas.

On propose alors l'alternative donnée dans [11], utilisant le fait que $\partial_t \sigma + u \partial_x \sigma = \nabla_Y \sigma \cdot \Gamma$. Choisissons :

$$\Gamma = \nabla_Y \sigma(\tau, e, y_l, y_g, Y). \quad (3.30)$$

Puisque $|\nabla_Y \sigma|^2 \geq 0$, la croissance de l'entropie est satisfaite, et on peut choisir des paramètres $(\lambda_i)_{i=1,2,3}$ distincts en la conservant :

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \lambda_1 \partial_{\alpha_l} \sigma \\ \lambda_2 \partial_{z_l} \sigma \\ \lambda_3 \partial_{z_g} \sigma \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

En effet, on a :

$$\partial_t \sigma + u \partial_x \sigma = \nabla_Y \sigma \cdot \Gamma \geq \min(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) |\nabla_Y \sigma|^2 \geq 0$$

3.3.2 MODÈLE HRM AVEC TRANSITION DE PHASE

La construction est similaire au modèle précédent, la différence repose sur l'ajout d'un terme source à l'équation d'advection de la fraction en masse liquide. Ainsi on prend ici $Y = (y_l, \alpha_l, z_l, z_g)$.

Le modèle HRM s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_t Y + u \partial_x Y = \Gamma \\ \partial_t y_g + u \partial_x y_g = 0 \\ \partial_t \rho + \partial_x \rho u = 0 \\ \partial_t \rho u + \partial_x (\rho u^2 + P) = 0 \\ \partial_t \rho E + \partial_x (\rho E + P) u = 0 \end{cases} \quad (3.32)$$

La loi de pression est encore donnée par (3.24), et on a, comme précédemment, une entropie de Lax qui s'obtient à partir de l'entropie de mélange.

Pour le choix des termes sources, on note $Y_{\text{PT}}^{\text{eq}} = (y_l^{\text{NPT}}, \alpha_l^{\text{NPT}}, z_l^{\text{NPT}}, z_g^{\text{NPT}})$ le vecteur de fractions correspondant à l'équilibre thermodynamique à (τ, e, y_l, y_g) donnés. On le définit encore par :

$$Y_{\text{PT}}^{\text{eq}} = \arg \max_{(y_l, \alpha_l, z_l, z_g)} \sigma(\tau, e, y_l, y_g, \alpha_l, z_l, z_g). \quad (3.33)$$

On a alors la loi de pression à l'équilibre :

$$P_{\text{PT}}^{\text{eq}}(\tau, e, y_g) = P(\tau, e, y_l^{\text{NPT}}, y_g, \alpha_l^{\text{NPT}}, z_l^{\text{NPT}}, z_g^{\text{NPT}}). \quad (3.34)$$

Ainsi, on définit comme dans le cas sans transition de phase, les deux possibilités de termes sources :

$$\Gamma = \frac{Y_{\text{NPT}}^{\text{eq}}(\tau, e, y_g) - Y}{\lambda}, \quad (3.35)$$

avec $\lambda > 0$ un paramètre de relaxation.

Remarque 14. Ce type de terme source a déjà été vu en diphasique. Il nécessite de calculer $Y_{\dot{e}g}$ à (τ, e, y_g) donnés. Ce calcul se compliquant en triphasique, nous nous sommes tournés d'abord vers le second type de termes sources présenté ci-dessous, qui ne fait pas appel à des fractions à l'équilibre mais au gradient en Y de l'entropie physique du système.

Ainsi on considère :

$$\Gamma = \nabla_Y \sigma(\tau, e, y_l, y_g, \alpha_l, z_l, z_g), \quad (3.36)$$

$$\Gamma = \begin{pmatrix} s_l - \tau_l \frac{P_l}{T_l} - \frac{e_l}{T_l} - s_v + \tau_v \frac{P_v}{T_v} + \frac{e_v}{T_v} \\ \tau \left(\frac{P_l}{T_l} - \left(\frac{P_g}{T_g} + \frac{P_v}{T_v} \right) \right) \\ e \left(\frac{1}{T_l} - \frac{1}{T_v} \right) \\ e \left(\frac{1}{T_g} - \frac{1}{T_v} \right) \end{pmatrix}. \quad (3.37)$$

En utilisant (1.7), on peut exprimer la première coordonnée de Γ par :

$$\partial_{y_l} \sigma = -\frac{\mu_l}{T_l} + \frac{\mu_v}{T_v}.$$

On peut alors pondérer chacun des termes sources de façon indépendante avec des $(\lambda_i)_{i=1,\dots,4}$.

3.4 SCHÉMA NUMÉRIQUE

L'étude numérique des modèles d'Euler homogènes de relaxation est basée sur celle présentée dans le cas diphasique. Ainsi, on sera plus succinct sur la présentation des schémas numériques, qui est similaire. On va par contre s'attarder sur les difficultés spécifiques au cas triphasique.

On étudiera ensuite le cas avec transition de phase.

A. CALCUL DE LA VITESSE DU SON POUR UN MÉLANGE DE GAZ RAIDES

Commençons par détailler une manière de calculer la vitesse du son c . On utilise la formule suivante, vue précédemment et détaillée en annexe :

$$\frac{c^2}{\tau^2} = -T(P^2 \partial_{ee} s - 2P \partial_{\tau e} s + \partial_{\tau\tau} s), \quad (3.38)$$

avec $s = s_{\text{NPT}}$ ou $s = s_{\text{PT}}$ selon le cas étudié.

On a donc besoin de P et T d'une part, et des dérivées partielles secondes de s . On explicite ces termes avec des variables que l'on peut exprimer :

$$\frac{\partial^2 s}{\partial \tau^2} = \sum_k \alpha_k \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{P_k}{T_k} \right), \quad \frac{\partial^2 s}{\partial e^2} = \sum_k z_k \frac{\partial}{\partial e} \left(\frac{1}{T_k} \right), \quad \frac{\partial^2 s}{\partial \tau \partial e} = \sum_k z_k \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{1}{T_k} \right). \quad (3.39)$$

De la définition de l'entropie d'un gaz raide (2.15), on rappelle les expressions des pressions et températures partielles :

$$P_k(\tau, e, (Y_k)_k) = \frac{z_k}{\alpha_k} \frac{e}{\tau} (\gamma_k - 1) - \Pi_k \gamma_k, \quad T_k(\tau, e, (Y_k)_k) = \frac{\frac{z_k}{y_k} e - \Pi_k \frac{\alpha_k}{y_k} \tau}{C_k}. \quad (3.40)$$

Ainsi, on peut calculer tous les termes de (3.39) et connaître c . On donne ici les expressions trouvées en fonction de (τ, e, Y_k) :

$$\frac{P_k}{T_k} = C_k \frac{\frac{z_k}{\alpha_k} \frac{e}{\tau} (\gamma_k - 1) - \Pi_k \gamma_k}{\frac{z_k}{y_k} e - \Pi_k \frac{\alpha_k}{y_k} \tau}$$

$$\partial_\tau \left(\frac{P_k}{T_k} \right) = C_k \frac{\left(\frac{z_k}{\alpha_k} (\gamma_k - 1) e \frac{1}{\tau^2} \right) \left(\Pi_k \frac{\alpha_k}{y_k} \tau - \frac{z_k}{y_k} e \right) + \left(\frac{z_k}{y_k} \frac{e}{\tau} (\gamma_k - 1) - \Pi_k \gamma_k \right) \left(\Pi_k \frac{\alpha_k}{y_k} \right)}{\left(\frac{z_k}{y_k} e - \Pi_k \frac{\alpha_k}{y_k} \tau \right)^2}$$

$$\partial_e \left(\frac{1}{T_k} \right) = -C_k \frac{z_k}{y_k} \frac{1}{\left(\frac{z_k}{y_k} e - \Pi_k \frac{\alpha_k}{y_k} \tau \right)^2}$$

$$\partial_\tau \left(\frac{1}{T_k} \right) = C_k \frac{\alpha_k}{y_k} \frac{1}{\left(\frac{z_k}{y_k} e - \Pi_k \frac{\alpha_k}{y_k} \tau \right)^2}$$

On conclut avec (3.38) et (3.39).

B. CHANGEMENT DE VARIABLE P/e

Le changement se fait de la même façon que dans le cas diphasique, avec deux difficultés supplémentaires : les calculs, même directs, seront plus complexes, et l'obtention de e à partir de P demande la résolution d'une équation polynômiale du troisième degré.

- Connaissant e , on obtient P grâce aux expressions de (3.40) et (3.24) :

$$P(\tau, e, (Y_k)_k) = \frac{\alpha_l P_l T_g T_v + \alpha_g P_g T_l T_v + \alpha_v P_v T_g T_l}{z_l T_g T_v + z_g T_l T_v + z_v T_g T_l}. \quad (3.41)$$

- Dans le sens inverse, il faut résoudre l'équation suivante en e :

$$(z_l T_g T_v + z_g T_l T_v + z_v T_g T_l) P = \alpha_l P_l T_g T_v + \alpha_g P_g T_l T_v + \alpha_v P_v T_g T_l. \quad (3.42)$$

On peut observer dans (3.40) que T_k a y_k au dénominateur, ainsi les termes ci-dessus ont des produits de fractions massiques au dénominateur. Pour simplifier les expressions, on multiplie l'équation (3.42) par $y_l y_g y_v$ pour avoir un dénominateur commun, et ainsi on résout :

$$-(z_l T_g T_v + z_g T_l T_v + z_v T_g T_l) P + \alpha_l P_l T_g T_v + \alpha_g P_g T_l T_v + \alpha_v P_v T_g T_l) y_l y_g y_v = 0, \quad (3.43)$$

équation que l'on écrit à l'aide des coefficients :

$$Ae^3 + Be^2 + Ce + D = 0.$$

1. Calcul des coefficients

On remarque la symétrie des expressions : il y a deux types de termes, ceux en $\alpha_k P_k T_{k'} T_{k''}$, et ceux en $z_k T_{k'} T_{k''}$. Ensuite, on distingue les différentes contributions : celles en e^3 , celles en e^2 , celles en e et les coefficients constants.

On donne ici les expressions de chaque type de terme comme polynôme en e :

$$\begin{aligned}
z_k T_{k'} T_{k''} (y_k y_{k'} y_{k''}) &= \frac{z_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} z_{k'} z_{k''} e^2 \\
&\quad - \frac{z_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} (z_{k'} \alpha_{k''} \Pi_{k''} + z_{k''} \alpha_{k'} \Pi_{k'}) \tau e \\
&\quad + \frac{z_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} \alpha_{k'} \alpha_{k''} \Pi_{k'} \Pi_{k''} \tau^2, \\
\alpha_k P_k T_{k'} T_{k''} (y_k y_{k'} y_{k''}) &= \frac{z_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} (\gamma_k - 1) z_{k'} z_{k''} \frac{1}{\tau} e^3 \\
&\quad - \frac{\alpha_k}{C_{k'} C_{k''}} \left(\Pi_k \gamma_k y_k z_{k'} z_{k''} + \frac{z_k y_k}{\alpha_k} (\gamma_k - 1) (z_{k'} \Pi_{k''} \alpha_{k''} + z_{k''} \Pi_{k'} \alpha_{k'}) \right) e^2 \\
&\quad + \frac{\alpha_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} \left(\frac{z_k}{\alpha_k} (\gamma_k - 1) \Pi_{k'} \alpha_{k'} \Pi_{k''} \alpha_{k''} + \Pi_k \gamma_k (z_{k'} \Pi_{k''} \alpha_{k''} + z_{k''} \Pi_{k'} \alpha_{k'}) \right) \tau e \\
&\quad - \frac{\alpha_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} \Pi_k \gamma_k \alpha_{k'} \Pi_{k'} \alpha_{k''} \Pi_{k''} \tau^2.
\end{aligned}$$

Insistons sur le fait que ces expressions ne sont pas factorisées : dans l'implémentation, on calcule les coefficients du polynôme constitué par (3.43), on choisit donc de faire apparaître chaque terme très clairement. On obtient ainsi les coefficients suivants :

$$\begin{aligned}
A &= - \sum_{k,k',k''} \underbrace{\frac{z_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} (\gamma_k - 1) z_{k'} z_{k''} \frac{1}{\tau}}_{\text{provient de } z_k P_k T_{k'} T_{k''}} \\
B &= \left(\sum_{k,k',k''} \underbrace{\frac{z_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} z_{k'} z_{k''}}_{\text{provient de } z_k T_{k'} T_{k''}} \right) - \left(\sum_{k,k',k''} \underbrace{- \frac{\alpha_k}{C_{k'} C_{k''}} \left(\Pi_k \gamma_k y_k z_{k'} z_{k''} + \frac{z_k y_k}{\alpha_k} (\gamma_k - 1) (z_{k'} \Pi_{k''} \alpha_{k''} + z_{k''} \Pi_{k'} \alpha_{k'}) \right)}_{\text{provient de } z_k P_k T_{k'} T_{k''}} \right) \\
C &= - \left(\sum_{k,k',k''} \underbrace{\frac{z_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} (z_{k'} \alpha_{k''} \Pi_{k''} + z_{k''} \alpha_{k'} \Pi_{k'}) \tau}_{\text{provient de } z_k T_{k'} T_{k''}} \right) + \\
&\quad \left(\sum_{k,k',k''} \underbrace{\frac{\alpha_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} \left(\frac{z_k}{\alpha_k} (\gamma_k - 1) \Pi_{k'} \alpha_{k'} \Pi_{k''} \alpha_{k''} + \Pi_k \gamma_k (z_{k'} \Pi_{k''} \alpha_{k''} + z_{k''} \Pi_{k'} \alpha_{k'}) \right) \tau}_{\text{provient de } z_k P_k T_{k'} T_{k''}} \right) \\
D &= - \left(\sum_{k,k',k''} \underbrace{\frac{z_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} \alpha_{k'} \alpha_{k''} \Pi_{k'} \Pi_{k''} \tau^2}_{\text{provient de } z_k T_{k'} T_{k''}} \right) P - \sum_{k,k',k''} \underbrace{\frac{\alpha_k y_k}{C_{k'} C_{k''}} \Pi_k \gamma_k \alpha_{k'} \Pi_{k'} \alpha_{k''} \Pi_{k''} \tau^2}_{\text{provient de } \alpha_k P_k T_{k'} T_{k''}}
\end{aligned}$$

2. Résolution de l'équation

Notre principal problème est de trouver la plus grande racine, puisque c'est elle qui maximise l'énergie. On programme donc une dichotomie dont les bornes de départ dépendent des coefficients du polynôme. On aurait pu étudier les coefficients et peut être conclure sur des propriétés remarquables, mais les expressions sont très complexes.

Choix des bornes de la dichotomie

Notons les bornes de départ de la dichotomie par X_{inf} et X_{sup} . On distingue deux cas :

- L'équation admet une unique solution : elle est positive, on peut prendre $X_{inf} = 0$.
- L'équation admet 3 solutions : pour éviter de faire converger la dichotomie vers la première ou deuxième racine, on choisit X_{inf} comme le second point d'annulation de la dérivée (qui existe nécessairement dans ce cas, voir Figure 3.10).

Dans les deux cas, on choisira $X_{sup} = X_{inf} + N$, avec N très grand.

Un algorithme simple consiste à calculer le discriminant et s'il est positif ou nul, choisir X_{inf} comme le deuxième point d'annulation de la dérivée. En cas de non convergence, on recommence avec $X_{inf} = 0$.

L'algorithme fonctionne, mais peut amener beaucoup de calculs inutiles (un choix du nombre d'itération maximum pertinent est important pour limiter ces pertes de temps). Rappelons la forme de l'équation :

$$f(e) = Ae^3 + Be^2 + Ce + D = 0 \quad (3.44)$$

Le polynôme dérivé est $3Ae^2 + 2Be + C$, qui a pour discriminant $\Delta = 4B^2 - 12AC = 4(B^2 - 3AC)$. La Figure 3.10 illustre le cas de l'équation qui admet 3 solutions, on choisira alors $X_{inf} = \frac{-2B + \sqrt{\Delta}}{6A}$:

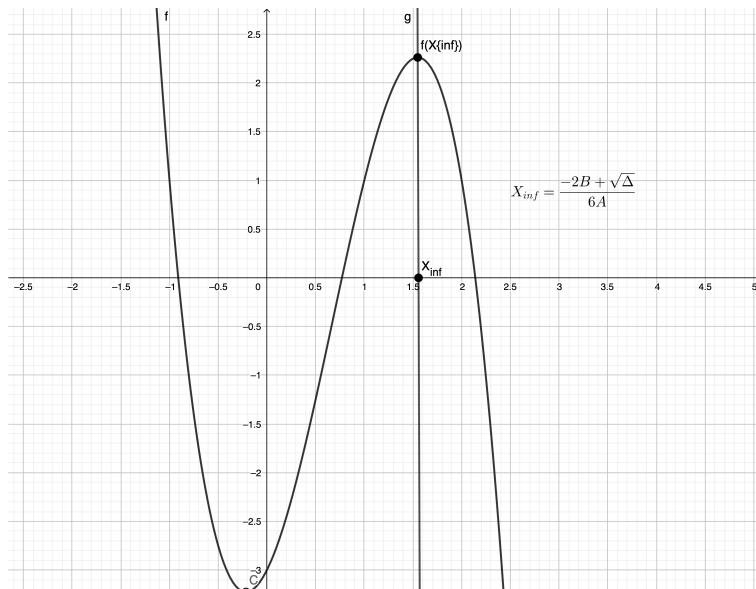


FIGURE 3.10 – Choix de la borne inf de la dichotomie

Pour conclure sur ce changement de variable, la différence principale, et loin d'être négligeable en coût de calcul, est le passage de la résolution d'une équation polynômiale de degré 2 (diphase) à la résolution d'une équation polynômiale de degré 3 (triphase). Autrement dit, on passe d'un calcul direct à une, voire deux dichotomies.

C. RÉOLUTION DES TERMES SOURCES

Tout d'abord, la prise en compte des termes sources se fait de la même façon que dans le cas diphase, et ainsi on se ramène à résoudre le système suivant d'EDO :

$$\begin{cases} d_t y_l = \Gamma_1(t, Y(t)) \\ d_t \alpha_l = \Gamma_2(t, Y(t)) \\ d_t z_l = \Gamma_3(t, Y(t)) \\ d_t z_g = \Gamma_4(t, Y(t)) \\ d_t \tau = 0 \\ d_t u = 0 \\ d_t e = 0 \end{cases} . \quad (3.45)$$

On résout en fait un problème de Cauchy avec pour condition initiale les fractions calculées à l'étape de convection. On rappelle les notations utilisées : $Y^{n+1,*}$ est l'état dit intermédiaire, calculé à l'étape de convection (notre donnée initiale pour l'EDO). Puisque masse volumique et énergie se conservent, le problème de Cauchy est :

$$\begin{cases} \partial_t Y(t) = \Gamma(t, Y(t)) \\ Y(0) = Y^{n+1,*} \end{cases} , \quad (3.46)$$

que l'on résout sur l'intervalle $[0; \Delta t]$, où Δt est le pas de temps du schéma volumes finis. Pour cela, on utilise un schéma d'Euler explicite dans un premier temps :

$$Y^{n+1} = Y^n + \delta t^n \Gamma(t^n, Y^n),$$

avec δt^n le pas de temps à la n-ème itération. Pour une équation différentielle scalaire $d_t y = F(t, y(t))$, on peut choisir un pas de temps borné par $\frac{1}{|\partial_y F|}$. On étend ce genre de CFL à notre cas ainsi :

$$\delta t^n = \frac{1}{\max \left| \frac{\partial \Gamma_i}{\partial Y_i}(t^n, Y^n) \right|}.$$

On prendra garde au fait que $\delta t^n \leq \Delta t$.

On peut résumer le fonctionnement ainsi : À chaque nouvel état calculé par la partie convective, il existe un équilibre vers lequel le système tend naturellement. On calcule le gradient de l'entropie pour cet état, puis la résolution de l'EDO modifie l'état en le rapprochant de l'équilibre qui lui est associé.

3.5 RÉSULTATS NUMÉRIQUES

3.5.1 VALIDATION DE LA PARTIE CONVECTIVE

On considère un problème de Riemann pour tester le modèle avec un schéma de Rusanov.

A. PROBLÈME DE RIEMANN (1)

Ce problème de Riemann a la même structure que celui étudié dans le cas diphasique. Fixons les paramètres suivants :

$$C_v = 2.0, \gamma_v = 1.5, \Pi_v = 1500, C_g = 1.5, \gamma_g = 1.45, \Pi_g = 1250, C_l = 1.0, \gamma_l = 1.4, \Pi_l = 1000$$

Notons qu'on a choisi les constantes relatives au gaz entre celles de l'eau liquide et l'eau vapeur. Comme en diphasique, on écrit les valeurs calculées en gras, les autres sont celles que l'on a fixé. Le choc est de vitesse $\sigma = 52.143515999467077 \text{ m.s}^{-1}$. La structure du problème reste la même qu'en diphasique :

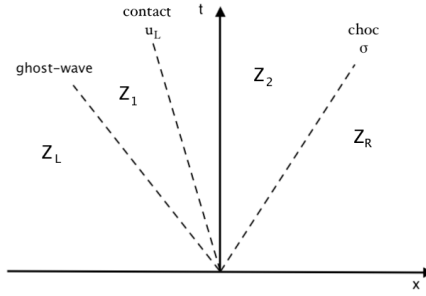


FIGURE 3.11 – Structure du problème de Riemann (1)

On a alors les états suivants :

| | $Z_L = Z_1$ | Z_2 | Z_R |
|------------|-------------|-------------|----------------------------|
| y_l | 0.1 | 0.8 | 0.8 |
| y_g | 0.5 | 0.1 | 0.1 |
| α_l | 0.1 | 0.7 | 0.7 |
| z_l | 0.1 | 0.6 | 0.6 |
| z_g | 0.5 | 0.2 | 0.2 |
| τ | 1.0 | 0.05 | 0.1 |
| u | -5.0 | -5.0 | -62.143515999467063 |
| P | 10^5 | 10^5 | 34692.372572069871 |

On utilise un schéma de Rusanov, la CFL est de 0.45 avec un départ progressif (voir partie 2.4) et 500 points en espace sur 01.

On ne détaille pas les valeurs calculées, mais simplement le tracé des solutions obtenues et l'erreur L^1 :

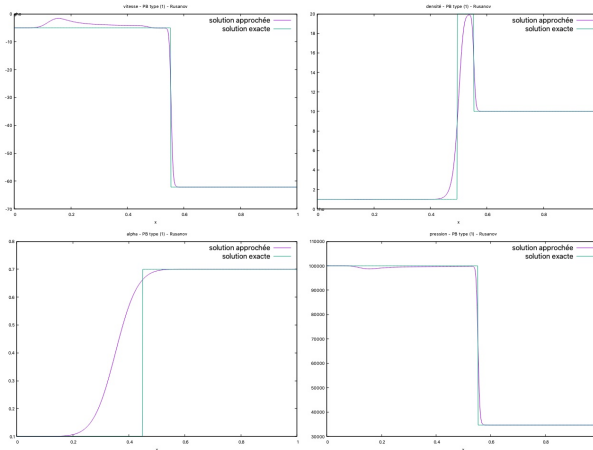


FIGURE 3.12 – Solutions au problème de Riemann - Schéma de Rusanov

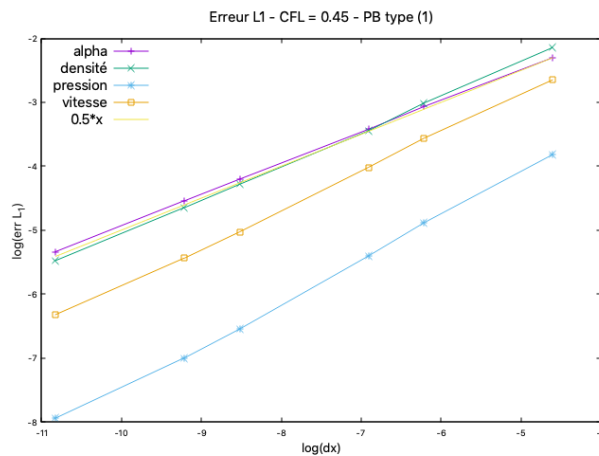


FIGURE 3.13 – Erreur L^1 - Schéma de Rusanov

Le schéma fournit des approximations aux allures attendues sur la figures 3.12. C'est confirmé par le tracé des erreurs en 3.13, où l'on constate que les pentes des différentes erreurs sont très proches de $1/2$.

3.5.2 OBSERVATIONS SUR LA RÉOLUTION DES TERMES SOURCES

Nous avons tout d'abord comparé les résultats du schéma d'Euler Explicite avec une résolution de l'EDO sous Python (type *odeint*), et les résultats concordent. Nous mettons ici en avant quelques résultats et tentons d'en tirer des conclusions : en effet, contrairement à la partie convective, on ne connaît pas de solution exacte au problème de Riemann.

Remarque 15. Insistons sur le fait qu'il s'agit d'observations, et d'interprétations ayant pour but de confirmer dans un premier temps l'apport des termes sources. Une étude plus rigoureuse est nécessaire par la suite.

Les tracés suivants sont effectués à partir du cas test présenté dans la section précédente, en ajoutant la partie termes sources. La CFL est fixée à 0.45, et on travaille avec 500 points sur 01. La valeur λ est commune à tous les λ_i , on observera les résultats pour $\lambda = 1, 3, 5, 8$.

A. RÉSULTATS SUR LES FRACTIONS

Observons tout d'abord l'impact des termes sources sur les fractions sur lesquelles ils portent.

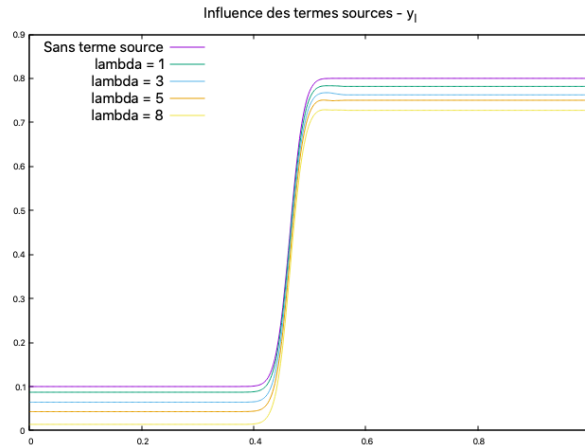


FIGURE 3.14 – Impact du choix des poids λ sur la fraction de masse liquide

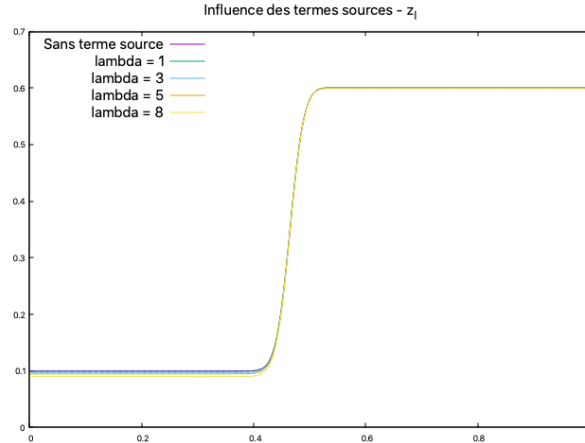


FIGURE 3.15 – Impact du choix des poids λ sur la fraction d'énergie liquide

On constate que dans la Figure 3.13, les variations de λ sont très nettes. C'est probablement dû au fait que l'état d'équilibre comparé à l'état initial est plus proche en énergie qu'en masse, mais il est difficile d'interpréter ceci. De plus, l'état gauche est plus sujet aux variations de λ que l'état droit. On peut supposer que ce dernier est plus proche de l'équilibre qui lui est associé que l'état gauche du sien.

Le comportement en α_l est similaire à celui en z_l , on représente un zoom sur l'état gauche en Figure 3.16.

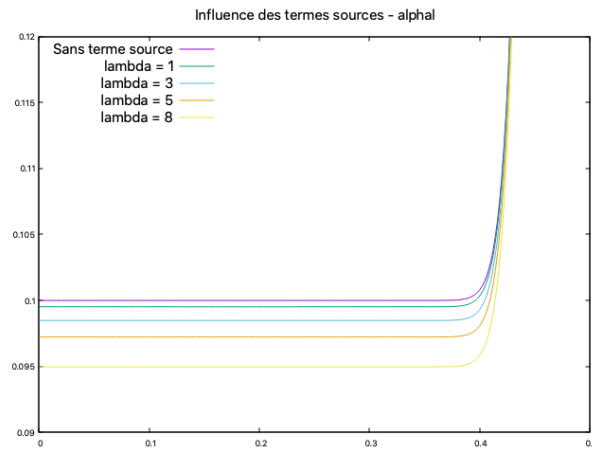


FIGURE 3.16 – Impact du choix des poids λ sur la fraction de volume liquide

On constate toujours que plus λ est grand, plus le système est attiré vers un état d'équilibre, pour lequel les fractions liquides seraient apparemment plus faibles que l'état initial de ce problème de Riemann.

Enfin, on constate que la masse gazeuse n'est *a priori* (il faudrait le confirmer précisément) pas modifiée par l'ajout des termes sources. C'est cohérent puisque y_g n'est soumis qu'à une équation de transport, ainsi sa quantité ne se voit pas modifiée.

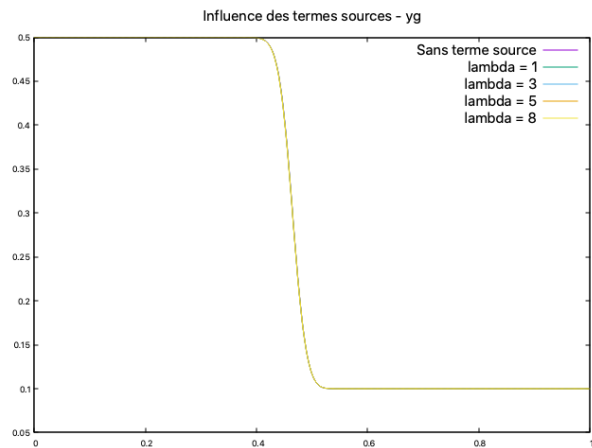


FIGURE 3.17 – Impact du choix des poids λ sur la fraction de masse gazeuse

Précisons que des zooms sur le tracé ne montrent pas de différence. Par contre, les variables globales du système (τ, u, P) se voient modifiées par l'ajout de termes sources.

B. RÉSULTATS SUR LES VARIABLES GLOBALES DU SYSTÈME

On constate que le système dans sa globalité subit l'influence des termes sources. On l'illustre ci-dessous sur les variables τ et u , mais il en est de même pour la pression. Le volume massique est représenté à gauche, avec un zoom sur la crête en bas, et la vitesse est à gauche, avec un zoom sur l'état gauche en bas (où la ghost-wave est mise en évidence).

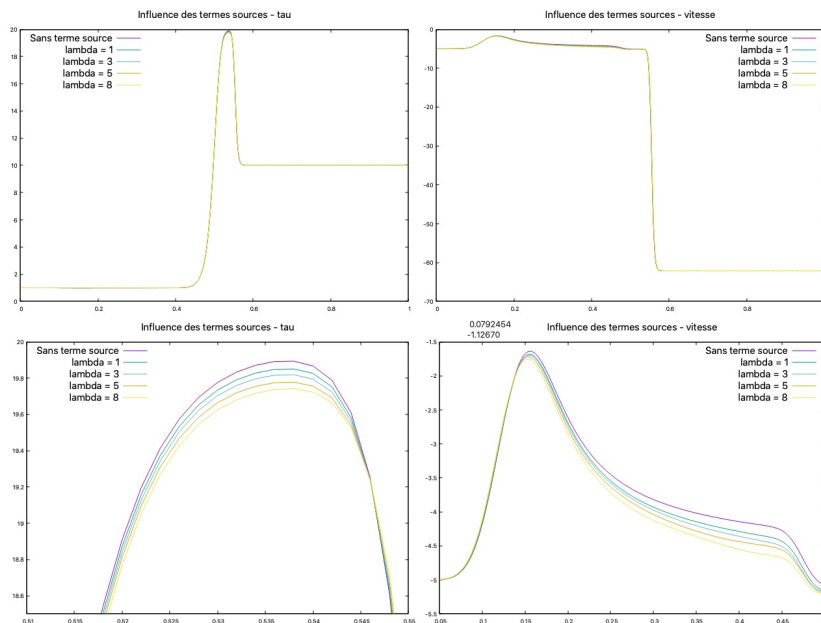


FIGURE 3.18 – Impact du choix des poids λ sur τ et u

3.6 CONCLUSION SUR LES MODÈLES TRIPHASIQUES

Après avoir étudié les modèles homogènes à l'équilibre, on a présenté les modèles de relaxation, plus propices à une étude numérique. L'hyperbolicité du modèle HRM sans transition de phase a été démontrée, mais pas celle du HRM avec transition de phase, ce que nous devons reprendre.

Cependant, c'est ce modèle qu'on a brièvement étudié lorsque l'on a ajouté à la partie convective les termes sources. Ceux-ci ont apporté une contribution satisfaisante, mais leur étude, assez difficile par manque de solution exacte, est un point qu'il faut approfondir sérieusement.

Dans l'ensemble, les résultats numériques obtenus pour le modèle HRM sont convaincants, et il s'agit à présent de confirmer les observations.

Pour aller plus loin, on peut étudier le comportement asymptotique du système d'EDO afin de déterminer l'équilibre vers lequel tend le système, et confirmer cette évolution avec le modèle. On peut également étudier les différents comportements du système en choisissant des poids (λ_i) différents.

CONCLUSION

Le travail présenté ici est une première approche de la modélisation des écoulement multiphasiques. Après avoir abordé les notions de thermodynamique nécessaires au sujet, nous avons traité le cas diphasique pour se familiariser avec le sujet.

Celui-ci, en plus du choix d'une loi de gaz raide, nous a permis de nous confronter aux difficultés propres aux systèmes multiphasiques : calculs de pression, énergie, vitesse du son plus complexes, recherche de l'équilibre thermodynamique, gestion des termes sources... Cette première étude menée à son terme nous a permis de mieux aborder le cas triphasique.

Bien que la structure du système en triphasique soit similaire à celle du diphasique, l'ajout d'une troisième phase avec contrainte de miscibilité ont considérablement compliqué les calculs d'une manière générale, comme nous l'avons mentionné au long du rapport.

Nous avons pu mettre en oeuvre le schéma complet, avec des résultats satisfaisants. Néanmoins, plusieurs choses sont à approfondir. Premièrement nous avons testé nos schémas sur un seul problème de Riemann, un deuxième avec une autre configuration d'ondes serait bienvenu. Ensuite, il faut déterminer un cas test réaliste pour valider le code. Cette étape nécessite une étude bibliographique importante. Enfin, la partie termes sources dans ce dernier cas peut être approfondie, d'abord pour s'assurer de son bon fonctionnement dans des situations plus variées, et également pour étudier son comportement de façon plus précise.

ANNEXE A

SCHÉMA DE ROE AVEC LES VARIABLES (Y, τ, u, P)

La première étape consiste à effectuer le changement de variable. En utilisant les règles de dérivation, et en considérant $e = e(\tau, P, Y)$, on peut ré-écrire le système convectif avec le jeu de variables voulu comme :

$$\partial_t V + A(V)\partial_x V = 0$$

Avec $A(V) = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{pmatrix}$ avec $(A_i)_{i=1..4}$ des matrices 3x3 telles que :

$$A_2 = A_3 = 0, \quad A_1 = uI_3, \quad A_4 = \begin{pmatrix} u & -\tau & 0 \\ 0 & u & \tau \\ 0 & \frac{c^2}{\tau} & u \end{pmatrix},$$

où $\frac{c^2}{\tau} = \tau \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)^{-1} (P + \frac{\partial e}{\partial \tau})$. On peut alors définir $\gamma = \frac{c^2}{\tau P}$. On étudie les éléments propres de A_4 , et on obtient que pour $\lambda_1 = u - c$, $\lambda_2 = u$ et $\lambda_3 = u + c$, on a :

$$v_1 = \begin{pmatrix} \tau \\ c \\ -\gamma P \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_3 = \begin{pmatrix} \tau \\ -c \\ -\gamma P \end{pmatrix}$$

Ce qui permet d'en déduire les éléments propres de A : son spectre est le même que celui de A_4 , et ses vecteurs propres sont :

$$r_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad r_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad r_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad r_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \tau \\ c \\ -\gamma P \end{pmatrix}, \quad r_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad r_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \tau \\ -c \\ -\gamma P \end{pmatrix},$$

Avec $r_{1,2,3,5}$ vecteurs propres pour $\lambda_2 = u$, r_4 vecteur propre pour $\lambda_1 = u - c$ et r_6 vecteur propre pour $\lambda_3 = u + c$. Il faut finalement déterminer les coefficients $(\bar{\gamma}_i)_{i=1..6}$ solutions de $\Delta V = \sum_i \bar{\gamma}_i \bar{r}_i$. La résolution est directe pour $i = 1, 2, 3$, et la partie restante du système s'écrit :

$$\begin{cases} \Delta\tau = \bar{\tau}(\gamma_4 + \gamma_6) + \gamma_5 \\ \Delta u = \bar{c}(\gamma_4 - \gamma_6) \\ \Delta P = -\bar{\gamma}\bar{P}(\gamma_4 + \gamma_6) \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

On obtient les expression suivantes :

$$\begin{cases} \gamma_4 = \frac{1}{2\bar{c}^2}(\bar{c}\Delta u - \bar{\tau}\Delta P) \\ \gamma_6 = \gamma_4 - \frac{\Delta u}{\bar{c}} \\ \gamma_5 = \Delta\tau - \bar{\tau}(\gamma_4 + \gamma_6) \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

ANNEXE B

RECHERCHE D'UNE FRACTION D'ÉQUILIBRE

On s'intéresse ici à la validation de notre code et à certaines propriétés relatives à ce problème.

B.1 PRINCIPE DE L'ALGORITHME

Chaque fonction nécessaire est codée en fonction de τ , e , Y_{eq} : potentiels, entropies, pressions, températures... Ainsi que z_{eq} et y_{eq} en fonction de α_{eq} .

En effet, α_{eq} est notre inconnue, la dichotomie opère sur elle : pour chaque α_{eq} donné, on calcule y_{eq} et z_{eq} puis on peut calculer $\mu_l - \mu_v$. On écrit également un fichier contenant les valeurs pour tracer $\alpha_{eq} \mapsto \mu_l - \mu_v$.

B.2 CAS DIPHASIQUE POUR DES GAZ PARFAITS

La difficulté étant de vérifier le code, une première étape consiste à le faire pour des gaz parfaits.

On fixe donc $\Pi_k = 0$ et $C_k = 1$, pour $k = l, v$.

Les entropies phasiques s'écrivent alors simplement :

$$s_k(\tau, e) = \ln(e_k) + (\gamma_k - 1)\ln(\tau_k)$$

L'entropie de mélange s'écrit d'après (2.18) :

$$\begin{aligned} s(\tau, e, Y) = \ln e + & \overbrace{(y\gamma_l + (1-y)\gamma_v - 1)}^{\gamma(y)} \ln \tau \\ & + (\gamma_l - 1)y \ln \alpha + (\gamma_v - 1)(1-y) \ln(1 - \alpha) \\ & - \gamma_l y \ln y - \gamma_v (1-y) \ln(1-y) \\ & + y \ln z + (1-y) \ln(1-z) \end{aligned}$$

Avec $\gamma(y) = y\gamma_l + (1-y)\gamma_v$

À l'équilibre, l'entropie atteint son maximum et donc ses dérivées partielles s'annulent.

$$\cdot \quad \partial_z s(\tau, e, Y) = 0 \iff y = z,$$

$$\cdot \partial_\alpha s(\tau, e, Y) = 0 \iff \alpha = \frac{\gamma_l - 1}{\gamma - 1} y,$$

On obtient alors une expression de $\partial_y s(\tau, e, y)$ ne dépendant plus de α et z . Il suffit de résoudre $\partial_y s(\tau, e, y) = 0$ avec :

$$s_y(\tau, e, y) = (\gamma_l - \gamma_v) \left(\ln\left(\frac{\tau}{\gamma - 1}\right) - 1 \right) + (\gamma_l - 1)\ln(\gamma_l - 1) - (\gamma_v - 1)\ln(\gamma_v - 1)$$

Premièrement, on peut vérifier si le résultat donné par notre algorithme nous donne une solution de $\partial_y s = 0$, et comparer avec une résolution sous Python par exemple.

Deuxièmement, on peut s'intéresser aux influences de τ et e . On remarque d'abord que e n'apparaît pas dans l'équation résolue : dans les entropies, Π_k est en facteur de l'énergie (on renvoie à la remarque 7), donc dans le cas des gaz parfaits, e n'intervient pas dans les valeurs des entropies.

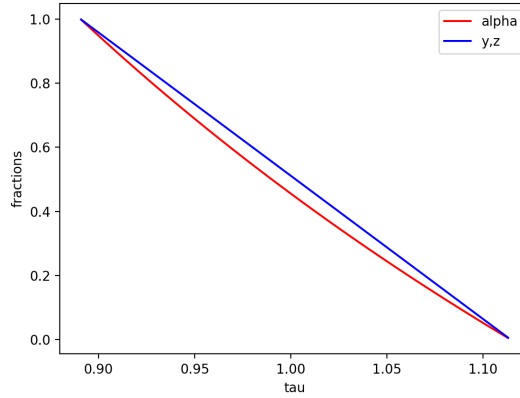


FIGURE B.19 – Fractions à l'équilibre en fonction de τ (pour des gaz parfaits)

On constate qu'on obtient une valeur non triviale de y pour $\tau \in]0.891 ; 1.113[$, à 10^{-3} près. On représente ici les fractions obtenues en fonction de τ sur cet intervalle.

Pour $\tau > 1.113$, l'équilibre correspond à une seule phase gazeuse (masse volumique faible), et pour $\tau < 0.891$, l'équilibre correspond à une seule phase liquide (masse volumique importante).

$$Y_{eq} = Y_{eq}(\tau)$$

B.3 CAS TRIPHASIQUE POUR DES GAZ PARFAITS

On s'intéresse au cas avec transition de phase. Rappelons que l'on cherche $Y_{\acute{e}q} = (y_l, \alpha_l, z_l, z_g)$ à (τ, e, y_g) fixés.

On impose les conditions d'équilibre valides à l'intérieur du domaine :

$$\begin{cases} T = T_l = T_g = T_v \\ P = P_l = P_g + P_v \\ \mu_l = \mu_v \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

· Égalité des températures : puisque $T_k = e_k$, on a directement $e = e_l = e_v = e_g$. De plus,

$$e_k = \frac{z_k}{y_k} e \implies z_k = y_k$$

Ainsi, on connaît (z_k) dès qu'on connaît (y_k) . Il ne reste que y_l et α_l à déterminer.

· Égalité des pressions : puisque $P_k = \frac{(\gamma_k - 1)e_k}{\tau_k}$, on obtient après manipulations une expression de y_l en fonction de α_l :

$$y_l = \frac{(\gamma_g - \gamma_v)y_g + (\gamma_v - 1)}{\gamma_l - 1 + \alpha_l(\gamma_v - \gamma_l)} \alpha_l.$$

Il ne reste qu'à utiliser cette expression dans l'égalité sur les potentiels chimiques pour obtenir une équation en α_l .

· Égalité des potentiels chimiques : en utilisant $\mu_k = e_k + P_k \tau_k - T_k s_k$, on obtient après simplifications, l'équation :

$$(\gamma_l - 1)(1 - \ln(\alpha_l) - \ln(y_l(\alpha_l))) - (\gamma_v - 1)(1 - \ln(1 - \alpha_l) - \ln(1 - y_g - y_l(\alpha_l))) + (\gamma_v - \gamma_l) \ln \tau = 0,$$

où $y_l(\alpha_l)$ est donnée par l'expression précédente. On a donc une équation en α_l , permettant de calculer le vecteur des fractions à l'équilibre $Y_{\acute{e}q}$.

Afin de vérifier la validité des termes sources implémentés, on peut étudier l'évolution de $Y_{\acute{e}q}$ selon τ et y_g . Comme dans le cas diphasique, l'énergie interne n'intervient pas dans notre équation.

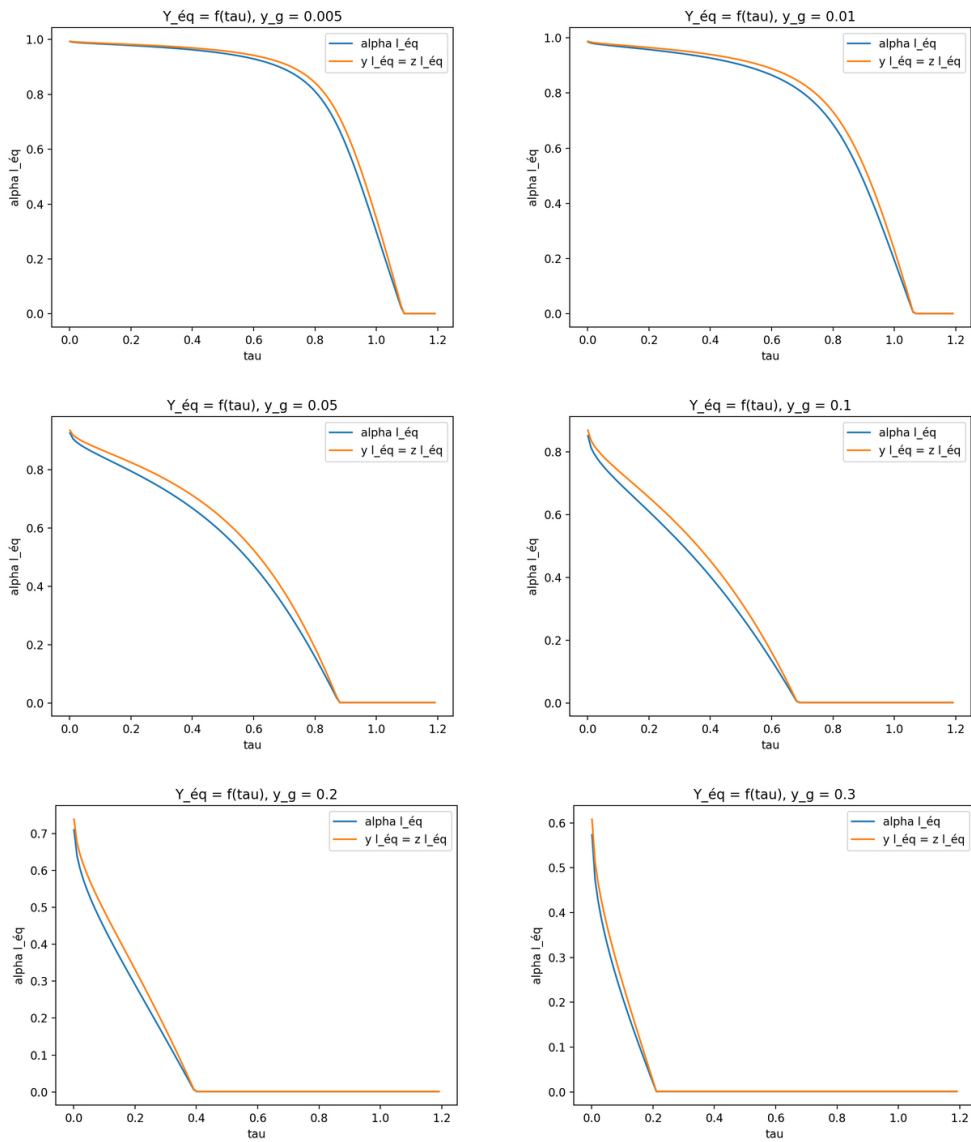


FIGURE B.20 – $Y_{\text{eq}} = Y_{\text{eq}}(\tau)$ pour quelques fractions de masse gazeuse y_g

On constate que plus la phase gazeuse est présente, plus l'intervalle pour τ dans lequel on peut trouver des fractions d'équilibre non triviales (non 0 ou 1) est restreint. On aurait pu également représenter les fractions de la phase vapeur.

Puis on peut tracer l'évolution des trajectoires des fractions du système d'EDO résolu dans la partie termes sources :

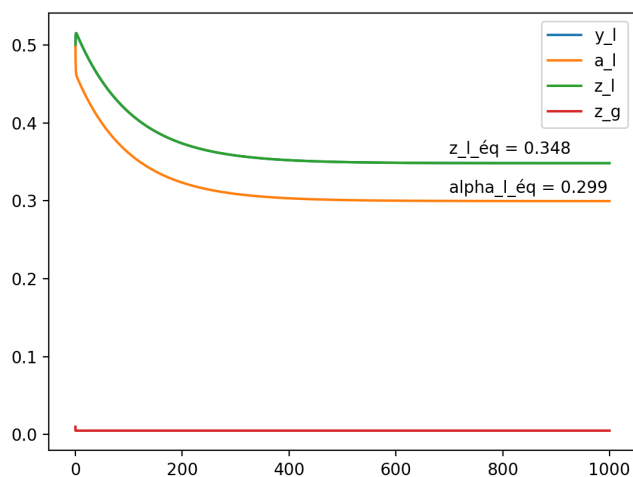


FIGURE B.21 – Trajectoires de $Y_{\acute{e}q}$ pour $\tau = 1$ et $y_g = 0.005$

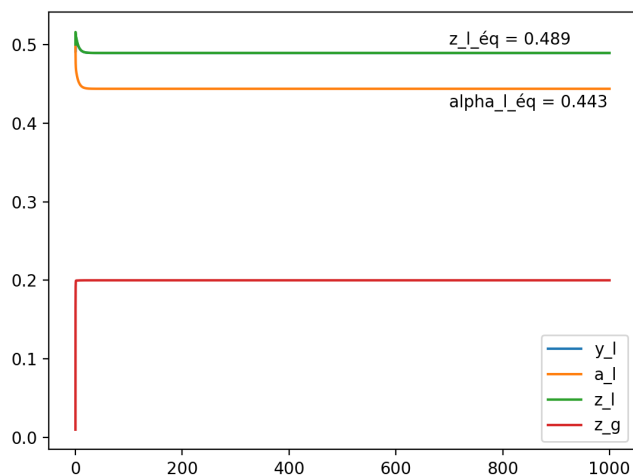


FIGURE B.22 – Trajectoires de $Y_{\acute{e}q}$ pour $\tau = 0.1$ et $y_g = 0.2$

Pour chaque exemple, on a indiqué sur le graphe les fractions d'équilibre trouvées par la méthode présentée, que l'on peut retrouver sur les courbes à la page précédente pour les valeurs de (τ, y_g) correspondantes.

ANNEXE C

DÉRIVATIONS D'ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES

C.1 CHANGEMENT DE VARIABLE DU SYSTÈME (3.14)

Le choix de changement de variables conservatives - primitives est effectué plusieurs fois dans ce travail, on en présente donc un exemple. Pour des solutions régulières, on traite les 5 équations définissant (3.14), que l'on rappelle ici :

Système conservatif :

$$\begin{cases} \partial_t(\rho y_l) + \partial_x(y_l \rho u) = 0 \\ \partial_t(\rho y_g) + \partial_x(y_g \rho u) = 0 \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0 \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + P) = 0 \\ \partial_t(\rho E) + \partial_x((\rho E + P)u) = 0 \end{cases} .$$

- Les deux premières sont identiques, considérons par exemple celle en y_l :

$$\begin{aligned} \partial_t(y_l \rho) + \partial_x(y_l \rho u) &= \rho \partial_t y_l + y_l \partial_t \rho + y_l \partial_x \rho u + \rho u \partial_x y_l \\ &= \rho \partial_t y_l + \rho u \partial_x y_l = 0, \end{aligned}$$

en utilisant l'équation de conservation de la masse. En divisant par $\rho \neq 0$, on obtient :

$$\partial_t y_l + u \partial_x y_l = 0, \quad \partial_t y_g + u \partial_x y_g = 0. \tag{C.1}$$

- Équation de conservation de la masse :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_x \rho u &= \partial_t \frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau} \partial_x u + \partial_x u \frac{1}{\tau} \\ &= -\frac{1}{\tau^2} \partial_t \tau + \frac{1}{\tau} \partial_x u - \frac{u}{\tau^2} \partial_x \tau = 0, \end{aligned}$$

soit au final :

$$\partial_t \tau + u \partial_x \tau - \tau \partial_x u = 0. \tag{C.2}$$

· Pour la 4e équation, on a :

$$\begin{aligned}\partial_t \rho u + \partial_x(\rho u^2 + P) &= \rho \partial_t u + u \partial_t \rho + \rho u \partial_x u + u \partial_x \rho u + \partial_x P \\ &= \frac{1}{\tau} \partial_t u + \frac{u}{\tau} \partial_x u + \partial_x P,\end{aligned}$$

et donc :

$$\partial_t u + u \partial_x u + \tau \partial_x P = 0.$$

· Enfin pour la dernière équation, on utilisera que $\rho u \partial_t u + \rho u^2 \partial_x u + u \partial_x P = 0$, que l'on a d'après le calcul précédent. Ainsi :

$$\begin{aligned}\partial_t \rho E + \partial_x(\rho u E + u P) &= E \partial_t \rho + \rho \partial_t E + E \partial_x \rho u + \rho u \partial_x E + u \partial_x P + P \partial_x u \\ &= \rho \partial_t \left(e + \frac{u^2}{2} \right) + \rho u \partial_x \left(e + \frac{u^2}{2} \right) + u \partial_x P + P \partial_x u \\ &= \rho \partial_t e + \rho u \partial_t u + \rho u \partial_x e + \rho u^2 \partial_x u + u \partial_x P + P \partial_x u \\ &= \rho \partial_t e + \rho u \partial_x e + P \partial_x u.\end{aligned}$$

En multipliant l'équation par τ , on a donc :

$$\partial_t e + u \partial_x e + \tau P \partial_x u = 0.$$

Explicitons à présent $\partial_t P$ pour obtenir une équation en pression :

$$\begin{aligned}\partial_t P &= \partial_t \tau \partial_\tau P + \partial_t e \partial_e P + \partial_t y_l \partial_{y_l} P + \partial_t y_g \partial_{y_g} P \\ &= (\tau \partial_x u - u \partial_x \tau) \partial_\tau P - (u \partial_x e + \tau P \partial_x u) \partial_e P - u \partial_x y_l \partial_{y_l} P - u \partial_x y_g \partial_{y_g} P \\ &= (\tau \partial_\tau P - \tau P \partial_e P) \partial_x u - \underbrace{(\partial_x \tau \partial_\tau P + \partial_x e \partial_e P + \partial_x y_l \partial_{y_l} P + \partial_x y_g \partial_{y_g} P)}_{\partial_x P} u,\end{aligned}$$

ce qui nous donne alors :

$$\partial_t P + (\tau P \partial_e P - \tau \partial_\tau P) \partial_x u + u \partial_x P = 0,$$

et donc par définition de c :

$$\partial_t P + \frac{c^2}{\tau} \partial_x u + u \partial_x P = 0.$$

On a donc le système suivant, équivalent à (3.14) pour des solutions régulières :

$$\begin{cases} \partial_t y_l + u \partial_x y_l = 0 \\ \partial_t y_g + u \partial_x y_g = 0 \\ \partial_t \tau + u \partial_x \tau - \tau \partial_x u = 0 \\ \partial_t u + u \partial_x u + \tau \partial_x P = 0 \\ \partial_t P + \frac{c^2}{\tau} \partial_x u + u \partial_x P = 0 \end{cases}.$$

C.2 EXPRESSIONS DE LA VITESSE DU SON

Proposition 14. *On a la relation :*

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

Démonstration. En effet, on a en utilisant les définitions de la pression et de la température :

$$\begin{aligned} P\partial_e P - \partial_\tau P &= P\partial_e(T\partial_\tau s) - \partial_\tau(T\partial_\tau s) \\ &= P\partial_e T\partial_\tau s + PT\partial_{\tau e}s - \partial_\tau T\partial_\tau s - T\partial_{\tau\tau}s \\ &= P\partial_e \left(\frac{1}{\partial_e s} \right) \partial_\tau s + PT\partial_{\tau e}s - \partial_\tau \left(\frac{1}{\partial_e s} \right) \partial_\tau s - T\partial_{\tau\tau}s \\ &= P \frac{-\partial_{ee}s}{(\partial_e s)^2} \partial_\tau s + PT\partial_{\tau e}s + \partial_\tau \frac{\partial_{\tau e}s}{(\partial_e s)^2} \partial_\tau s - T\partial_{\tau\tau}s \\ &= PT^2(-\partial_{ee}s)\partial_\tau s + PT\partial_{\tau e}s + T^2\partial_{\tau e}s\partial_\tau s - T\partial_{\tau\tau}s \\ &= -P^2T\partial_{ee}s + PT\partial_{\tau e}s + PT\partial_{\tau e}s - T\partial_{\tau\tau}s \\ &= -T(P^2\partial_{ee}s - 2P\partial_{\tau e}s + \partial_{\tau\tau}s) \end{aligned}$$

□

Proposition 15. *On a, dans le cas triphasique la relation suivante :*

$$\frac{c^2}{T\tau^2} = - \sum_{k=l,g,v} (-\alpha_k Pz_k) \nabla_{(\tau_k, e_k)} s_k \begin{pmatrix} -\alpha_k \\ Pz_k \end{pmatrix}.$$

Démonstration. On repart de l'expression de la Proposition 14 et on exprime les dérivées partielles de s avec celles des $(s_k)_k$.

□

BIBLIOGRAPHIE

- [1] H. B. Callen. *Thermodynamics And An Introduction To Thermostatistics*. Wiley, 1985.
- [2] J.-P. Croisille. *Contribution à l'étude théorique et à l'approximation par éléments finis du système hyperbolique de la dynamique des gaz multidimensionnelle et multiespèces*. PhD thesis, Université Paris VI, 1991.
- [3] P.-A. E. Godlewski. *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*. Springer, 1995.
- [4] G. Faccanoni. *Étude d'un modèle fin de changement de phase liquide-vapeur. Contribution à l'étude de la crise d'ébullition*. PhD thesis, Ecole Polytechnique X, 2008.
- [5] S. K. G. Allaire, G. Faccanoni. A strictly hyperbolic equilibrium phase transition model. *C. R. Math. Acad. Sci.*, 344 :135–140, 2007.
- [6] O. Hurisse. Application of an homogeneous model to simulate the heating of two-phase flows. *Int. J. Finite Vol.*, 66 :37, 2014.
- [7] O. Hurisse. Numerical simulations of steady and unsteady two-phase flows using a homogeneous model. *Comput. Fluids*, 152 :83–103, 2017.
- [8] C. L. J.-B. Hiriart-Urruty. *Fundamentals of Convex Analysis. Abridged version of it Convex analysis and minimization algorithms*. Springer-Verlag, 2001.
- [9] B. Z. J. Douchet. *Calcul différentiel et intégral. Fonctions réelles d'une ou de plusieurs variables réelles*. PPUR, Enseignement des mathématiques, 2018.
- [10] J. Jung. *Schémas numériques adaptés aux accélérateurs multicoeurs pour les écoulements bifluïdes*. PhD thesis, Université de Strasbourg, 2013.
- [11] H. Mathis. A thermodynamically consistent model of a liquid-vapor fluid with a gas. *ESAIM : M2AN*, 53 :63–84, 2019.
- [12] H. M. P. Helluy. Pressure laws and fast legendre transform. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 21(4) :745–775, 2011.
- [13] H. M. S. M. P. Helluy, J.-M. Hérard. A simple parameter-free entropy correction for approximate riemann solvers. *Comptes Rendus Mécanique*, 388 :493–498.
- [14] N. S. P. Helluy. Relaxation models of phase transition flows. *ESAIM : M2AN*, 40 :331–352, 2006.
- [15] R.T. Rockafellar. *Convex Analysis*. Princeton Landmarks in Mathematics. Princeton University Press, Princeton, NJ, 1997.

- [16] P. H. T. Barberon. Finite volume simulation of cavitating flows. *Comput. Fluids*, 34 : 832–858, 2005.
- [17] P. H. T. Barberon. Finite volume simulation of cavitating flows. *Computers and Fluids*, 34 : 832–858, 2005.
- [18] J.-M. H. T. Gallouet. A sequel to a rough godunov scheme. application to real gases. *Computers Fluids*, 29 :813–847, 2000.