



HAL
open science

Entropie en dynamique des fluides

Hélène Mathis

► **To cite this version:**

Hélène Mathis. Entropie en dynamique des fluides. Analyse numérique [math.NA]. Université de Nantes, 2020. tel-03066757

HAL Id: tel-03066757

<https://hal.science/tel-03066757>

Submitted on 15 Dec 2020

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.

Laboratoire de Mathématiques Jean Leray
Université de Nantes et UMR CNRS 6629

Entropie en dynamique des fluides

Hélène Mathis

Habilitation à diriger des recherches en mathématiques appliquées

Rapporteurs

François Bouchut

Université Paris-Est Marne-la-Vallée

Raphaèle Herbin

Université d'Aix-Marseille

Athanasios Tzavaras

King Abdullah University of Science and Technology

Soutenance le 7 décembre 2020 devant le jury composé de

Christophe Berthon

Université de Nantes

François Bouchut

Université Paris-Est Marne-la-Vallée

Raphaèle Herbin

Université d'Aix-Marseille

Sergey Gavriluk

Université d'Aix-Marseille

Vincent Giovangigli

École Polytechnique

Siegfried Müller

RWTH Aachen

Marie-Hélène Vignal

Université Paul-Sabatier, Toulouse 3

Athanasios Tzavaras

King Abdullah University of Science and Technology

TABLE DES MATIÈRES

Table des matières	3
1 PRÉAMBULE	5
I MODÉLISATION D'ÉCOULEMENTS MULTIPHASIQUES	
2 ÉCOULEMENTS DIPHASIQUES	9
2.1 Thermodynamique de mélange diphasique	9
2.2 Dynamique du fluide : l'approche homogène	15
3 ÉCOULEMENTS COMPRESSIBLES TRIPHASIQUES : MODÉLISATION ET ANALYSE	19
3.1 Thermodynamique et entropie du mélange	19
3.2 Modèles homogènes	21
3.3 Modèle multifluide	23
4 MODÉLISATION D'ÉCOULEMENTS MÉTASTABLES	27
II ANALYSE NUMÉRIQUE	
5 ENTROPIE EN ANALYSE NUMÉRIQUE	41
5.1 Asymptotique diffusive pour le p -système	42
5.2 Techniques d'entropie pour l'analyse numérique de schémas volumes finis	55
6 MÉTHODES NUMÉRIQUES POUR DES PROBLÈMES À INTERFACE	63
6.1 Suivi d'interface liquide-solide par une méthode de projection aléatoire	63
6.2 Couplage et adaptation de modèles hyperboliques	66
7 PUBLICATIONS DE L'AUTEUR	75
8 RÉFÉRENCES	77

PRÉAMBULE

Mes travaux de recherche concernent le développement, l'analyse et l'approximation numérique de systèmes d'équations aux dérivées partielles hyperboliques. Une des applications principales est la modélisation d'écoulements compressibles présentant des transition de phases, liquide-vapeur pour la plupart.

L'entropie est un outil central de mon activité de recherche.

Dans la première partie, traitant de la modélisation de fluides multiphasiques compressibles, j'introduis l'entropie thermodynamique, fonction qui caractérise les caractéristiques thermiques, chimiques et mécaniques d'un fluide. Le postulat suivant, tiré du livre de H. B. Callen [Cal85], en résume les propriétés.

Postulat.([Cal85], Chapitre 1, page 27). *There exists a function (called the entropy S) of the extensive parameters of any composite system, defined for all equilibrium states and having the following property : The values assumed by the extensive parameters in the absence of an internal constraint are those that maximize the entropy over the manifold of constrained equilibrium states.*

Ma démarche s'appuie sur ce postulat et consiste à construire des entropies de fluides multiphasiques par des procédés d'optimisation sous contraintes, puis à en caractériser les propriétés géométriques. Je m'intéresse particulièrement à des contraintes extensives qui permettent de considérer des mélanges complexes liquide-vapeur-gaz.

La connaissance d'une entropie à l'équilibre thermodynamique est cruciale pour la construction et l'analyse des systèmes de lois de conservation qui décrivent la dynamique des fluides compressibles étudiés. De l'entropie thermodynamique est déduite une entropie de Lax pour le système à l'équilibre thermodynamique, c'est-à-dire une fonction convexe des variables conservatives satisfaisant une loi de conservation supplémentaire. Cette entropie nous permet également de construire des systèmes hyperboliques de relaxation, obtenus à partir des systèmes à l'équilibre, formant ainsi une hiérarchie de modèles.

Les Chapitres 2 et 3 reprennent ces étapes d'analyse dans un contexte diphasique et triphasique respectivement. Dans le Chapitre 4, l'hypothèse de convexité de l'entropie est mise en défaut pour permettre la modélisation d'états métastables. Les extrema du problème d'optimisation sous contraintes sont cette fois caractérisés comme les équilibres asymptotiques d'un système dynamique, construit de manière *ad hoc*, de sorte à dissiper l'entropie du mélange.

La seconde partie du manuscrit concerne mes travaux d'Analyse Numérique, où l'on retrouve principalement la notion d'entropie relative. Il s'agit d'un développement au premier ordre de l'entropie, associée au système d'équations aux dérivées partielles qui nous intéresse, autour d'une solution particulière du système. Par convexité de l'entropie, l'entropie relative se comporte comme une norme L^2 permettant de mesurer l'écart entre une solution du système et la solution particulière. On retrouve des techniques d'entropie relative dans de nombreuses références, notamment dans les travaux de Dafermos [Daf79] et DiPerna [DiP79] pour démontrer un résultat d'unicité fort-faible ou dans les travaux de Tzavaras pour étudier l'asymptotique de systèmes hyperboliques de relaxation [Tza05, LT13].

Dans le Chapitre 5 sont présentées des extensions au cadre discret de ces travaux. La méthode d'entropie relative est tout d'abord adaptée à l'analyse d'un schéma préservant l'asymptotique diffusive des solutions du p -système, sur domaine infini et borné. Elle est ensuite utilisée pour démontrer un résultat général de convergence pour une classe de schémas volumes finis explicites appliqués à un système hyperbolique général. Le chapitre se conclut par un travail récent sur le développement d'un schéma volumes finis pour un modèle de semi-conducteurs et son analyse par une méthode d'entropie.

Dans le Chapitre 6 sont présentées des méthodes numériques pour le traitement d'interfaces. Il s'agit d'abord d'interfaces physiques, et plus précisément de fronts de fusion, évoluant par des contraintes thermodynamiques liées à la composition d'un matériau binaire. Il s'agit ensuite d'interfaces parfaitement numériques, déterminées de manière à coupler de manière optimale, dans un sens particulier, deux modèles hyperboliques issus d'une même hiérarchie.

Les travaux présentés dans ce manuscrit ont été réalisés après ma thèse. Lorsque le contexte le nécessite, des références aux travaux de thèse sont faites.

Au gré de ma présentation sont distillées des remarques sur des perspectives possibles de mes travaux, indentifiables par le symbole .

Première partie

MODÉLISATION D'ÉCOULEMENTS MULTIPHASIQUES

 ÉCOULEMENTS DIPHASIQUES

Dans les applications qui nous intéressent, les conditions de pression et température supposent le fluide compressible et soumis à des changements de phase liquide-vapeur [Bar90]. On se restreint à des fluides mono-constituants, on se référera à [HJ04, GM04, BD15] pour des modèles à plusieurs composants réactifs. À l'échelle macroscopique, il n'est pas nécessaire de décrire la dynamique complexe des bulles, gouttes et interfaces présentes dans l'écoulement, on s'amène ainsi à développer des modèles moyennés [Ish75, DP98]. Selon que l'on considère que les deux phases ont la même vitesse ou non, deux types de modèles sont développés dans la littérature : les modèles homogènes [KMB⁺01, BH05, HSo6, AFK07, Faco8, SPA08, FKA12, Hur14] et les modèles multifluides [BN86, GHS04, Gui07, MHR16]. Dans tous les cas, il est impératif de clore les systèmes avec une loi de fermeture décrivant la thermodynamique du problème.

On s'intéresse dans ce chapitre aux modèles homogènes, pour lesquels on doit fournir une loi de pression traduisant l'équilibre thermodynamique du mélange. Dans [11] nous avons repris et unifié une méthodologie simple, développée dans [Cal85, Ja001, BH05, HSo6, Faco8, AFK07, FKA12] et [18, 14], basée sur des outils d'analyse convexe. Elle consiste à exhiber les contraintes extensives du problème et de construire l'entropie thermodynamique du mélange. La loi de fermeture est déduite du second principe de la thermodynamique qui établit que l'équilibre thermodynamique correspond au maximum de l'entropie sous les contraintes. La dynamique compressible du fluide est décrite par un modèle proche des équations d'Euler. L'entropie mathématique du modèle se déduit de l'entropie thermodynamique, dont les propriétés géométriques, en particulier la concavité, permettent d'assurer la stabilité non linéaires des modèles considérés.

Dans la plupart des références, les mélanges sont considérés immiscibles, comme c'est le cas pour un mélange liquide-vapeur. Dans [11], nous étendons le formalisme au cas miscible, qui consisterait en un mélange de deux gaz. Ce chapitre repose essentiellement sur [11] et présente des notations et hypothèses que l'on retrouvera dans la première partie du mémoire.

2.1 THERMODYNAMIQUE DE MÉLANGE DIPHASIQUE

Thermodynamique d'un fluide simple : notations et hypothèses

On considère un fluide de masse $M \geq 0$ et d'énergie interne $E \geq 0$ occupant un volume $V \geq 0$. Notons $\tilde{W} = (M, E)$ et $W = (V, M, E)$. Si le fluide est homogène et au repos, son comportement thermodynamique est décrit par son entropie $W \mapsto S(W)$. La thermodynamique à l'équilibre requiert plusieurs hypothèses sur S .

Hypothèses 1 (Hypothèses extensives [Cal85, Eva04]). L'entropie $S: (\mathbb{R}^+)^3 \rightarrow \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ est telle que

- (i) l'ensemble des états admissibles $C = \{W \in (\mathbb{R}^+)^3 \mid S(W) > -\infty\}$ est un domaine convexe fermé non vide,
- (ii) S est une fonction concave de $W \in C$,
- (iii) S est extensive, i.e. positivement homogène de degré 1

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

- (iv) S semi-continue supérieurement, i.e.

$$\forall W_0 \in C, \quad \limsup_{W \rightarrow W_0} S(W) \leq S(W_0),$$

- (v) S est de classe \mathcal{C}^2 sur C et sa dérivée partielle par rapport à l'énergie est strictement positive

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

Certaines de ces hypothèses peuvent être mises en défaut, par exemple la convexité de C [Jun13, HJ14]. Dans le chapitre 4, on mettra en défaut l'hypothèse (ii) de concavité de l'entropie. En supposant que S est différentiable, elle satisfait la relation différentielle suivante

$$Tds = dE + pdV - \mu dM, \quad (1)$$

que l'on appelle *relation fondamentale extensive de la thermodynamique* ou *relation de Gibbs extensive*. La fonction $W \mapsto T(W)$ désigne la température, $W \mapsto p(W)$ la pression et $W \mapsto \mu(W)$ le potentiel chimique.

Par homogénéité de l'entropie S , on introduit l'entropie intensive spécifique s définie par $s = \frac{1}{M}S(W)$. Il s'agit d'une *loi d'état complète*, déterminée entièrement par le volume spécifique $\tau = V/M$ et l'énergie interne spécifique $e = E/M$, notée $(\tau, e) \mapsto s(\tau, e)$. Le pendant intensif de la relation fondamentale (1) s'écrit alors

$$Tds = de + p d\tau, \quad (2)$$

où désormais la température T et la pression p sont des *lois d'états incomplètes*, fonctions de $w = (\tau, e)$. L'entropie spécifique s satisfait des hypothèses déduites des Hypothèses 1 extensives.

Hypothèses 2 (Hypothèses intensives spécifiques). L'entropie spécifique s est telle que

- (i) le domaine des états admissibles $c = \{w \in (\mathbb{R}^+)^2 \mid s(w) > -\infty\}$ est un ensemble convexe fermé non vide,
- (ii) s est de classe \mathcal{C}^2 sur c telle que

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

- (iii) sa matrice Hessienne est définie négative

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

ce qui implique que s est strictement concave.

Par la suite, nous aurons besoin des variables intensives volumiques, dont l'entropie volumique définie par $\sigma = \frac{1}{V}S(W)$. C'est une loi d'état complète, déterminée par la masse volumique $\rho = M/V = 1/\tau > 0$ et l'énergie interne volumique $\varepsilon = E/V = \rho e$, notée $(\rho, \varepsilon) \mapsto \sigma(\rho, \varepsilon)$.

La relation de Gibbs associée à $\tilde{w} = (\rho, \varepsilon)$ est

$$Td\sigma = d\varepsilon - \mu d\rho, \quad (3)$$

où la température T et le potentiel chimique μ sont des fonctions de \tilde{w} . On observe que $\sigma = \rho s$, de sorte que les propriétés de l'entropie volumique sont similaires aux Hypothèses 2. Les propriétés de stricte concavité des entropies intensives peuvent se déduire de la concavité de l'entropie extensive S (qui n'est pas strictement concave puisqu'elle est positivement homogène de degré 1).

Entropie d'un mélange diphasique immiscible ou miscible

On suppose maintenant le fluide composé de deux phases, indicées par $k \in \mathbb{K} = \{1, 2\}$. Soit $W = (M, V, E)$ l'état de ce fluide. Chaque phase k est entièrement décrite par son entropie extensive phasique S_k , fonction de la masse $M_k \in [0, M]$, du volume $V_k \in [0, V]$ et de l'énergie interne $E_k \in [0, E]$, satisfaisant les Hypothèses 1. On note $W_k = (V_k, M_k, E_k)$ et $\tilde{W}_k = (M_k, E_k)$.

La conservation de la masse et de l'énergie du mélange impose que

$$M = M_1 + M_2, \quad (4)$$

$$E = E_1 + E_2. \quad (5)$$

Selon que les deux phases sont immiscibles ou miscibles, la contrainte de volume diffère. Si les deux phases sont immiscibles, elles sont séparées par une interface de sorte que

$$V = V_1 + V_2. \quad (6)$$

Alors l'état du mélange est donné par $W = W_1 + W_2$. Lorsque les deux phases sont miscibles, elles se mélangent parfaitement et

$$V = V_1 = V_2. \quad (7)$$

On a alors $\tilde{W} = \tilde{W}_1 + \tilde{W}_2$.

Remarque 2.1. *On suppose ici les contraintes saturées. S'il on autorise l'apparition du vide, il faut considérer $V \geq V_1 + V_2$ ou $V_k \leq V$, $k \in \mathbb{K}$. Il s'avère que si les pressions sont strictement positives (de même que les températures dans le cas miscible), les contraintes sont saturées automatiquement [HS06]. On suppose de plus qu'il n'y a pas d'interaction moléculaire entre les deux phases. Sinon on devrait considérer que $V < V_1 + V_2$. C'est par exemple le cas pour un mélange d'alcool et d'eau à pression atmosphérique. Considérer des inégalités de contraintes est une perspective possible. Une autre serait de considérer d'avantage de variables extensives, par exemple l'aire interfaciale [LL69, chap. XV].* 

Caractérisation de l'entropie extensive du mélange

L'entropie du mélange \mathcal{S} est la somme des entropies phasiques S_k . Pour $(W_1, W_2) \in C_1 \times C_2$, elle s'écrit

$$\mathcal{S}(W_1, W_2) = S_1(W_1) + S_2(W_2).$$

Le fluide étant supposé isolé, la seconde loi de la thermodynamique stipule que l'entropie extensive du mélange croît jusqu'à atteindre son maximum, qui caractérise l'équilibre thermodynamique. Selon la miscibilité du mélange, cet équilibre diffère, de même que la concavité de l'entropie intensive du mélange.

Définition 2.1 (Entropie extensive à l'équilibre pour un mélange immiscible). Soit $W = (V, M, E) \in (\mathbb{R}^+)^3$ le vecteur d'état du mélange immiscible. L'entropie à l'équilibre est :

$$S^{\text{immi}}(W) = \max_{(W_1, W_2) \in \Omega^{\text{immi}}} \mathcal{S}(W_1, W_2), \quad (8)$$

où $\Omega^{\text{immi}} = \{ (W_1, W_2) \in C_1 \times C_2 \mid W = W_1 + W_2 \}$.

Définition 2.2 (Entropie du mélange miscible à l'équilibre). Soit $V = V_0 > 0$ le volume fixé du mélange. Soit $\tilde{W} = (M, E) \in (\mathbb{R}^+)^2$ le vecteur d'état du mélange miscible. L'entropie à l'équilibre est :

$$S^{\text{mi}}(V_0, \tilde{W}) = \max_{(\tilde{W}_1, \tilde{W}_2) \in \Omega^{\text{mi}}} \mathcal{S}((V_0, \tilde{W}_1), (V_0, \tilde{W}_2)) \quad (9)$$

où $\Omega^{\text{mi}} = \{ (\tilde{W}_1, \tilde{W}_2) \in \tilde{C}_1 \times \tilde{C}_2 \mid \tilde{W} = \tilde{W}_1 + \tilde{W}_2 \}$.

Dans le cas immiscible, comme dans le cas miscible, les opérations de maximisation de l'entropie de mélange correspondent à des sup-convolutions [HUL01, Roc97]. Elles assurent non seulement l'existence mais aussi la concavité de l'entropie extensive du mélange. En adaptant la démonstration proposée dans [Jun13], il est possible de montrer que $S^{\text{immi}} : C_1 + C_2 \rightarrow \mathbb{R} \cup \{ -\infty \}$ et $S^{\text{mi}} : \tilde{C}_1 + \tilde{C}_2 \rightarrow \mathbb{R} \cup \{ -\infty \}$ sont positivement homogènes de degré 1.

Supposons de plus que les entropies de mélange sont différentiables. Elles vérifient alors une relation de Gibbs extensive définissant la température T , la pression p et le potentiel chimique μ du mélange

$$TdS^\beta = dE + pdV - \mu dM, \quad \text{où } \beta = \{\text{immi}, \text{mi}\}. \quad (10)$$

L'étude des maxima des problèmes d'optimisation (8) et (9) permet de déterminer les propriétés à l'équilibre thermodynamique. On se restreint à une maximisation à l'intérieur du cône de contraintes (on se réfère à [Jun13, HJ14] et [11] pour une caractérisation sur les bords du cône.)

Proposition 2.3 (Équilibre thermodynamique). Lorsque le maximum est atteint à l'intérieur du domaine des contraintes, celui-ci se caractérise par

— l'équilibre thermique

$$T = T_1 = T_2; \quad (11)$$

— dans le cas immiscible, l'équilibre mécanique

$$p = p_1 = p_2, \quad (12)$$

— dans le cas **miscible**, la loi de Dalton [MM09]

$$p = p_1 + p_2; \quad (13)$$

— l'équilibre chimique

$$\mu = \mu_1 = \mu_2, \quad (14)$$

s'il y a transfert de masse entre les deux phases.

Il faut noter que la loi de Dalton, que l'on obtient ici grâce à l'hypothèse de miscibilité (7), n'est valide que pour des gaz idéaux [LL69].

Caractérisation de l'entropie intensive du mélange

Le choix des variables intensives dépend de la miscibilité du mélange. Si le mélange est immiscible, on préfère utiliser les entropies spécifiques phasiques s_k , vérifiant les Hypothèses 2, fonctions de $w_k = (\tau_k, e_k) \in (\mathbb{R}^+)^2$ et satisfaisant une relation de Gibbs phasique

$$T_k ds_k = de_k + p_k d\tau_k. \quad (15)$$

Dans le cas miscible, les variables volumiques sont plus appropriées. On considère alors les entropies volumiques phasiques $\sigma_k = \rho_k s_k$, fonction de $\tilde{w}_k = (\rho_k, \varepsilon_k) \in (\mathbb{R}^+)^2$.

On introduit les fractions de volume α_k , de masse φ_k et d'énergie z_k de la phase $k \in \mathbb{K}$, définies dans $[0, 1]$ par

$$\alpha_k = \frac{V_k}{V}, \quad \varphi_k = \frac{M_k}{M}, \quad z_k = \frac{E_k}{E}. \quad (16)$$

Considérons tout d'abord un mélange immiscible. Chaque phase $k \in \mathbb{K}$ est décrite par son entropie phasique spécifique s_k , satisfaisant les Hypothèses 2, fonction du volume spécifique et de l'énergie interne spécifique, qui satisfait une relation de Gibbs intensive phasique.

Les contraintes extensives (4)-(7) ont leur pendant intensif que l'on traduit en termes de fractions. Les conservations de la masse (4) et de l'énergie (5) donnent

$$1 = \varphi_1 + \varphi_2, \quad (17)$$

$$1 = z_1 + z_2. \quad (18)$$

Dans le cas immiscible, la contrainte de volume (6) est

$$1 = \alpha_1 + \alpha_2. \quad (19)$$

Puisque $\tau_k = \frac{\alpha_k}{\varphi_k} \tau$ et $e_k = \frac{z_k}{\varphi_k} e$, on déduit des conservations de masse et d'énergie que

$$\tau = \varphi_1 \tau_1 + \varphi_2 \tau_2, \quad (20)$$

$$e = \varphi_1 e_1 + \varphi_2 e_2, \quad (21)$$

soit encore

$$w = \varphi_1 w_1 + \varphi_2 w_2. \quad (22)$$

En utilisant l'homogénéité de l'entropie extensive du mélange \mathcal{S} , définie par (2.1), on obtient l'expression de l'entropie du mélange intensive dans le cas immiscible

$$s(\varphi_1, \varphi_2, w_1, w_2) = \varphi_1 s_1(w_1) + \varphi_2 s_2(w_2). \quad (23)$$

L'équilibre thermodynamique est obtenu par maximisation de l'entropie intensive du mélange

$$s^{\text{immi}}(\tau, e) = \max_{\substack{1 = \varphi_1 + \varphi_2 \\ w = \varphi_1 w_1 + \varphi_2 w_2}} (s(\varphi_1, \varphi_2, w_1, w_2)), \quad (24)$$

sous les contraintes (17) et (22). On remarque que l'entropie du mélange correspond à l'enveloppe concave du maximum des entropies intensives phasiques s_k , $k \in \mathbb{K}$. Il s'en suit que l'entropie du mélange est concave, mais pas strictement. Dans une zone correspondant à l'équilibre liquide-vapeur, le graphe de s^{immi} contient une surface réglée, étudiée dans [BH05, HSo6, AFK07, Faco8, FKA12] et [18, 14].

Dans le cas miscible, on choisit de décrire la phase $k \in \mathbb{K}$ par son entropie phasique volumique σ_k , fonction de la masse volumique $\rho_k = \frac{\varphi_k}{\alpha_k} \rho = \frac{1}{\tau_k}$ et de l'énergie interne volumique $\varepsilon_k = \frac{z_k}{\alpha_k} \varepsilon = \frac{z_k}{\alpha_k} \rho e$. Les contraintes intensives de conservation de la masse (17) et de l'énergie (18) sont toujours valides. La contrainte intensive sur le volume se déduit de la contrainte extensive (7) par homogénéité et se traduit par l'égalité des fractions de volumes

$$1 = \alpha_1 = \alpha_2, \quad (25)$$

dont on déduit $\rho = \rho_1 + \rho_2$ et $\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$, soit

$$\tilde{w} = \tilde{w}_1 + \tilde{w}_2. \quad (26)$$

L'entropie intensive du mélange miscible se déduit de l'entropie (2.1) extensive par homogénéité

$$\sigma(\tilde{w}_1, \tilde{w}_2) = \sigma_1(\tilde{w}_1) + \sigma_2(\tilde{w}_2).$$

La maximisation d'entropie s'écrit alors

$$\sigma^{\text{mi}}(\tilde{w}) = \max_{\tilde{w}=\tilde{w}_1+\tilde{w}_2} (\sigma(\tilde{w}_1, \tilde{w}_2)), \quad (27)$$

sous la contrainte (26). Cette fois le processus d'optimisation correspond à une opération de sup-convolution des entropies intensives volumiques phasiques

$$\sigma^{\text{mi}}(\rho, \varepsilon) = \sigma_1 \square \sigma_2(\rho, \varepsilon). \quad (28)$$

On en déduit que l'entropie intensive volumique du mélange est strictement concave [Roc97, HULo1].

En s'appuyant sur la Proposition 2.3, on parvient à caractériser les entropies intensives pour les mélanges diphasiques miscibles et immiscibles.

Proposition 2.4 ([14, 11]). *L'équilibre thermodynamique correspond à l'égalité des températures (11) et des potentiels chimiques (14) (si le transfert de masse est possible).*

Si le mélange est immiscible, l'équilibre mécanique donne l'égalité des pressions phasiques (12) et l'entropie intensive s^{immi} est une fonction concave de (τ, e) satisfaisant la relation de Gibbs intensive

$$Tds^{\text{immi}} = de + pd\tau. \quad (29)$$

Si le mélange est miscible, l'équilibre mécanique correspond à la loi de Dalton (13) et l'entropie volumique du mélange est une fonction strictement concave de (ρ, ε) telle que

$$Td\sigma^{\text{mi}} = d\varepsilon - \mu d\rho. \quad (30)$$

Remarque 2.2. *Les entropies de mélange diphasique correspondent soit à une enveloppe concave de $\max(s_1, s_2)$, dans le cas immiscible, soit à une sup-convolution des entropies phasiques s_k dans le cas miscible. Il s'avère que la transformée de Legendre simplifie ces opérations en opérations $(\max, +)$. Dans [14] nous proposons une construction de lois d'état complètes admissibles pour des mélanges, basée sur l'algèbre $(\max, +)$ et un algorithme de transformée de Legendre rapide.*

Une autre manière de construire de nouvelle loi d'état de mélange est proposée par Mrugala dans [Mrug3], voir aussi [Ben99]. Elle s'appuie à nouveau sur les propriétés géométriques de l'entropie thermodynamique. La relation de Gibbs (2) est en effet une 1-forme à laquelle est associée une structure de contact. Mrugala montre comment construire une loi d'état complète de type van der Waals en appliquant une transformation de contact à une loi complète de gaz parfait. On envisage d'exploiter cette approche pour développer des lois plus générales, éventuellement non convexes.



2.2 DYNAMIQUE DU FLUIDE : L'APPROCHE HOMOGÈNE

Les modèles homogènes supposent l'équilibre cinématique entre les phases. On distingue les modèles homogènes à l'équilibre, qui ont une structure proche de celle des équations d'Euler et nécessitent une loi d'état incomplète comme fermeture. Cette loi d'état est souvent complexe, non explicite voire tabulée [FKA10]. Les modèles homogènes de relaxation permettent de relaxer la loi de fermeture en linéarisant la partie convective du système. La relaxation introduit des termes source qui doivent correctement traduire le retour à l'équilibre thermodynamique.

Modèle homogène à l'équilibre

Supposons le mélange diphasique, immiscible ou miscible, évoluant à la vitesse u . Le modèle homogène à l'équilibre est constitué des lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p^\beta) &= 0, \\ \partial_t(\rho \mathcal{E}) + \partial_x((\rho \mathcal{E} + p^\beta)u) &= 0, \end{aligned} \quad (31)$$

où $\mathcal{E} = \frac{1}{2}u^2 + e$ désigne l'énergie totale. Les variables conservatives $(\rho, \rho u, \rho \mathcal{E})$ sont fonctions du temps et de l'espace $(t, x) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}$. Le système est fermé par la loi de pression p^β , qui doit décrire fidèlement le comportement thermodynamique du mélange diphasique immiscible, dans le cas $\beta = \text{immi}$, ou miscible, dans le cas $\beta = \text{mi}$. Cette loi de fermeture est déduite de l'entropie intensive construite en Section 2.1 par optimisation sous contraintes.

Dans le cas immiscible, on ferme le système avec une loi de pression p^{immi} , fonction de ρ et de e , en accord avec la Proposition 2.4. En pratique, pour déterminer la pression p^{immi} , on construit l'entropie du mélange immiscible (23), dont on annule les dérivées par rapport aux fractions d'énergie, de volume et de masse. On obtient ainsi une expression des potentiels à l'équilibre satisfaisant

$$\begin{cases} T = T_1 = T_2, \\ p^{\text{immi}} = p = p_1 = p_2, \\ \mu = \mu_1 = \mu_2, \end{cases} \quad (32)$$

où T et p sont les température et pression thermodynamiques du mélange diphasique, dérivées partielles de l'entropie du mélange $s^{\text{immi}}(1/\rho, e)$ et satisfaisant la relation de Gibbs (29). Si le calcul de p^{immi} est explicite dans le cas d'un mélange de gaz parfaits [HSo6], ce n'est plus le cas pour un mélange de gaz raides et les calculs sont inexploitablement rapidement [Faco8], notamment lorsqu'on en vient à étudier l'hyperbolicité du système. Pour pallier le problème, on aurait envie d'appliquer le théorème de Godunov-Mock [Moc80] qui stipule qu'un système admettant une entropie mathématique strictement convexe est symétrisable et, par suite, hyperbolique. Il s'avère que l'entropie s^{immi} n'est pas strictement concave. Le théorème de Godunov-Mock ne s'applique pas. Pour étudier l'hyperbolicité du système, on revient à l'étude des valeurs propres de la jacobienne du flux du système. Ces valeurs propres font intervenir la vitesse du son, définie pour tout état $w = (\tau, e)$ par

$$c^2(w) = -\tau^2 T(w)(p(w), -1) H_{s^{\text{immi}}}(w) \begin{pmatrix} p(w) \\ -1 \end{pmatrix},$$

où $H_{s^{\text{immi}}}(w)$ est la matrice hessienne de l'entropie s^{immi} . Conclure à l'hyperbolicité du système revient alors à démontrer que $(p(w), -1) H_{s^{\text{immi}}}(w) (p(w), -1)^t < 0$, pour tout état w . Or, d'après

(24), l'entropie est l'enveloppe concave des entropies phasiques. Elle n'est donc pas strictement concave et plus précisément :

- pour tout état w appartenant à une branche strictement concave de l'entropie de mélange (correspondant à la phase 1 ou 2), on a

$$v^t H_{\text{simmi}}(w)v < 0, \quad \forall v \neq 0,$$

- pour tout état w appartenant à la zone de saturation, il existe un unique vecteur $v(w) \neq 0$, tel que

$$v(w)^t H_{\text{simmi}}(w)v(w) = 0.$$

La difficulté est de signer la vitesse du son dans la zone de saturation. On énonce le résultat suivant.

Théorème 2.5 ([AFK07, Faco8, FKA12]). *Pour tout état w dans la zone de saturation, on a*

$$v(w) \neq (p(w), -1),$$

de sorte que le système (31) est strictement hyperbolique.

Dans le cas miscible, l'équilibre thermodynamique, caractérisé par la Proposition 2.4, satisfait

$$\begin{cases} T = T_1 = T_2, \\ p^{\text{mi}} = p = p_1 + p_2, \\ \mu = \mu_1 = \mu_2, \end{cases} \quad (33)$$

où T , p et μ sont les potentiels thermodynamiques reliés l'entropie du mélange $\sigma^{\text{mi}}(1/\rho, e)$ par la relation de Gibbs (30). On a démontré dans la proposition 2.4 que l'entropie $\sigma^{\text{mi}}(1/\rho, e)$ est strictement concave. On peut alors utiliser cette entropie thermodynamique pour construire une entropie de Lax du système. Le théorème de Godunov-Mock nous permet de conclure de son hyperbolicité.

Théorème 2.6 ([11]). *Considérons le cas miscible et fixons $\beta = \text{mi}$. La fonction strictement convexe $\eta(\rho, u, \mathcal{E}) \mapsto -\sigma(\rho, \rho\mathcal{E} - \rho u^2/2)$ est une entropie de Lax pour le système (31), associée au flux d'entropie $f_\eta(\rho, u, \mathcal{E}) = -u\sigma$. Par conséquent le système (31) est strictement hyperbolique.*

Modèles homogènes de relaxation

Les modèles homogènes à l'équilibre sont difficilement utilisables car il est compliqué d'explicitement les lois de pression p^{immi} et p^{mi} . Si ces calculs sont aisés pour des gaz parfaits, voir [HSo6] ou [18, 14], c'est hors de portée pour des lois d'états plus sophistiquées, dont des lois de gaz raides, et *a fortiori* pour des lois réelles et tabulées [Faco8, FKA10].

Afin de lever la complexité de la loi de pression, celle-ci peut être relaxée. Il s'agit d'augmenter le système en ajoutant des équations de convection sur des variables supplémentaires Y et de modifier la pression de sorte qu'elle dépende de ces nouvelles variables. Des termes de relaxation complètent les équations sur les variables Y . Ils doivent satisfaire le second principe de la thermodynamique et assurer le retour du système à l'équilibre thermodynamique. Le modèle correspond à un système hyperbolique de relaxation, dont l'approximation à pas fractionnaire est plus aisée [Hur14, HHLC15, Hur17].

On détaille la construction dans le cas immiscible, le cas miscible étant similaire. On considère $Y = (\varphi_1, \alpha_1, z_1)$, le système relaxé étant alors

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho Y) + \partial_x(\rho u Y) &= Q, \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p_{\text{rel}}^{\text{immi}}) &= 0, \\ \partial_t(\rho \mathcal{E}) + \partial_x((\rho \mathcal{E} + p_{\text{rel}}^{\text{immi}})u) &= 0, \end{aligned} \tag{34}$$

où la loi d'état est

$$p_{\text{rel}}^{\text{immi}} = p_{\text{rel}}^{\text{immi}}(1/\rho, e, \varphi_1, \alpha_1, z_1). \tag{35}$$

La fonction

$$s : (\tau, e, \varphi_1, \alpha_1, z_1) \mapsto \varphi_1 s_1 \left(\frac{\alpha_1}{\varphi_1} \tau, \frac{z_1}{\varphi_1} e \right) + (1 - \varphi_1) s_2 \left(\frac{1 - \alpha_1}{1 - \varphi_1} \tau, \frac{1 - z_1}{1 - \varphi_1} e \right),$$

définie dans (23), est une entropie de Lax du système qui satisfait

$$ds = \sum_{k \in \mathbb{K}} \frac{z_k}{T_k} de + \sum_{k \in \mathbb{K}} \alpha_k \frac{p_k}{T_k} d\tau + \sum_{k \in \mathbb{K}} \partial_{\varphi_k} s d\varphi_k + \sum_{k \in \mathbb{K}} \partial_{\alpha_k} s d\alpha_k + \sum_{k \in \mathbb{K}} \partial_{z_k} s dz_k.$$

On en déduit la pression et la température du mélange :

$$\begin{aligned} \frac{p_{\text{rel}}^{\text{immi}}(1/\tau, e, \varphi_1, \alpha_1, z_1)}{T(1/\tau, e, \varphi_1, \alpha_1, z_1)} &= \sum_{k \in \mathbb{K}} \alpha_k \frac{p_k \left(\frac{\alpha_k}{\varphi_k} \tau, \frac{z_k}{\varphi_k} e \right)}{T_k \left(\frac{\alpha_k}{\varphi_k} \tau, \frac{z_k}{\varphi_k} e \right)}, \\ \frac{1}{T(1/\tau, e, \varphi_1, \alpha_1, z_1)} &= \sum_{k \in \mathbb{K}} \frac{z_k}{T_k \left(\frac{\alpha_k}{\varphi_k} \tau, \frac{z_k}{\varphi_k} e \right)}, \end{aligned}$$

où les fractions satisfont les contraintes de conservation de la masse (17), de l'énergie (18) et d'immiscibilité (19). Si la relaxation vers l'équilibre est infiniment rapide, on retrouve les fractions à l'équilibre

$$Y^{\text{immi}}(\tau, e) = \operatorname{argmax}_{(\varphi_1, \alpha_1, z_1)} s^{\text{immi}}(\tau, e, \varphi_1, \alpha_1, z_1), \tag{36}$$

de sorte que la pression à l'équilibre satisfait

$$p^{\text{immi}}(\tau, e) = p_{\text{rel}}^{\text{immi}}(\tau, e, Y^{\text{immi}}(\tau, e)). \tag{37}$$

Il n'y a aucun consensus sur la définition des termes sources $Q(Y)$ [Dre83], les seules contraintes étant qu'ils doivent satisfaire le second principe de la thermodynamique et assurer le retour à l'équilibre thermodynamique du mélange. Plusieurs choix sont possibles, citons par exemple [HS06] et [Hur14].

Remarque 2.3. La définition des temps de relaxation est un sujet peu traité dans la littérature. On peut citer [Gav14] pour la détermination du temps de relaxation mécanique d'un écoulement diphasique. Utiliser le même temps λ pour toutes les relaxations est peu réaliste, les auteurs de [KMB⁺01] préconisant d'ordonner les temps de relaxation thermique λ_T , mécanique λ_p et cinétique λ_u selon

$$0 < \lambda_p, \lambda_u \ll \lambda_T.$$

On pourrait envisager de déterminer ces temps de relaxation en revenant à des modèles cinétiques, pour lesquels le temps de retour à l'équilibre thermodynamique est estimé [BBBG20]. 

ÉCOULEMENTS COMPRESSIBLES TRIPHASIQUES : MODÉLISATION ET ANALYSE

Dans [2, 19], nous proposons une extension de la modélisation diphasique, présentée au Chapitre 2, à un mélange triphasique. Alors que la plupart des références concernent des mélanges à trois phases purement immiscibles [Héro7, H16, MHR16, HHM17] (rarement miscibles [Delo3]), on construit dans [19] un modèle original pour un mélange triphasique à deux phases miscibles. On présente ci-dessous la modélisation thermodynamique et l'analyse des modèles homogènes. On constatera que les résultats d'analyse convexe, utilisés au chapitre précédent, ne s'appliquent plus puisque les contraintes de volume ne sont plus symétriques par permutation d'indices. L'hyperbolicité n'est plus déduite des propriétés de concavité de l'entropie thermodynamique mais est démontrée grâce à un résultat de type Godunov-Mock. On propose enfin une extension à un modèle à trois champs issue de [15], pour lequel on exhibe un résultat d'existence locale, basé sur la symétrisation du système.

3.1 THERMODYNAMIQUE ET ENTROPIE DU MÉLANGE

Caractérisation de l'entropie extensive du mélange

On considère un fluide composé de trois phases : un liquide l , sa vapeur v et un gaz g . On note $\mathbb{K} = \{l, g, v\}$. Par abus de langage, on parle du gaz comme d'une troisième phase. Il s'agit en réalité d'un composant différent, qui ne transfère pas de masse ni avec le liquide ni avec la vapeur. Par contre, il peut y avoir transfert de masse entre le liquide et sa vapeur. On choisit de ne pas traiter la transition de phase dans ce chapitre, et renvoie le lecteur à [19].

Soit $W = (M, V, E)$ le vecteur d'état du mélange. Chaque phases décrites par une entropie phasiques extensives S_k , fonction d'un vecteur d'état $W_k \in C_k$, satisfaisant les Hypothèses 1. Les contraintes de conservation de masse et d'énergie donnent

$$M = M_l + M_g + M_v, \quad (38)$$

$$E = E_l + E_v + E_g. \quad (39)$$

Puisqu'il n'y a pas de transition de phase, les masses $M_k, k \in \mathbb{K}$, sont des constantes positives du problème, satisfaisant (38). La vapeur et le gaz sont miscibles et supposés se comporter comme des gaz idéaux. Ils occupent alors le même volume (en supposant à nouveau qu'il n'y a pas de

vide). Le liquide est quant à lui immiscible et partage une interface avec le mélange gazeux. On obtient la contrainte de volume

$$\begin{cases} V = V_l + V_v, \\ V_g = V_v. \end{cases} \quad (40)$$

Contrairement aux contraintes de masse et d'énergie, la contrainte de volume n'est pas invariante par permutation des indices $k \in \mathbb{K}$. Nous allons voir que cette contrainte rend difficile la caractérisation de l'entropie du mélange à l'aide d'opérations classiques d'optimisation convexe, comme c'est le cas en diphasique.

Définition 3.1 (Entropie extensive du mélange triphasique). *Soit $W = (M, V, E) \in (\mathbb{R}^+)^3$ le vecteur d'état du fluide. Soient $M \geq M_k \geq 0$, $k \in \mathbb{K}$, les masses partielles fixées par la contrainte (38). L'entropie extensive du mélange à l'équilibre est*

$$S(M, V, E, M_l, M_g) = \max_{(W_l, W_g, W_v) \in \Omega_{ext}} S_l(W_l) + S_v(W_v) + S_g(W_g), \quad (41)$$

où $\Omega_{ext} = \{W_k \in C_k, k \in \mathbb{K} \mid (38), (39) \text{ et } (40) \text{ sont satisfaites}\}$.

L'opération de maximisation (41) n'est pas une sup-convolution, puisque la contrainte de volume n'est pas invariante par changement d'indice. On ne peut donc pas conclure de la concavité de l'entropie extensive comme dans le cas diphasique. En revanche pour prouver que l'entropie est concave, il suffit de remarquer que l'entropie peut s'écrire comme une transformation linéaire d'une fonction concave. En supposant de plus qu'il s'agit d'une fonction dérivable, elle satisfait une relation de Gibbs du type

$$TdS = dE + pdV - \mu dM + \lambda_l dM_l + \lambda_g dM_g. \quad (42)$$

On peut alors caractériser l'équilibre thermodynamique.

Proposition 3.2 (Équilibre thermodynamique du mélange triphasique, [19], [Quiz0]). *L'équilibre thermodynamique satisfait*

— l'égalité des températures

$$T_l = T_g = T_v, \quad (43)$$

— l'équilibre mécanique impliquant une loi de Dalton sur le mélange gazeux

$$p_l = p_g + p_v. \quad (44)$$

Caractérisation de l'entropie intensive du mélange

Le passage aux variables intensives définit l'entropie du mélange.

$$\begin{aligned} & \sigma(\tau, e, (\varphi_k)_k, (\alpha_k)_k, (z_k)_k) \\ &= \varphi_l s_l \left(\frac{\alpha_l}{\varphi_l} \tau, \frac{z_l}{\varphi_l} e \right) + \varphi_g s_g \left(\frac{\alpha_g}{\varphi_g} \tau, \frac{z_g}{\varphi_g} e \right) + \varphi_v s_v \left(\frac{\alpha_v}{\varphi_v} \tau, \frac{z_v}{\varphi_v} e \right). \end{aligned} \quad (45)$$

La traduction de la contrainte extensive mixte sur les volumes (40) donne

$$\begin{cases} 1 = \alpha_l + \alpha_v, \\ \alpha_g = \alpha_v. \end{cases} \quad (46)$$

Les conservations de la masse (38) et de l'énergie (39) se traduisent par les contraintes de fractions suivantes

$$1 = \varphi_l + \varphi_g + \varphi_v, \quad (47)$$

$$1 = z_l + z_g + z_v. \quad (48)$$

La maximisation de l'entropie du mélange caractérise l'équilibre thermodynamique.

Proposition 3.3 (Entropie intensive du mélange triphasique, [19]). *Soient $\varphi_k \in [0, 1]$ les fractions de masse fixées satisfaisant (47). Soit $(\tau, e) \in (\mathbb{R}^+)^2$ le vecteur d'état du mélange. L'entropie du mélange à l'équilibre est*

$$s(\tau, e, \varphi_l, \varphi_g) = \max_{((\alpha_k)_k, (z_k)_k) \in \Omega_{int}} \sigma(\tau, e, (\varphi_k)_k, (\alpha_k)_k, (z_k)_k), \quad (49)$$

où $\Omega_{int} = \{(\alpha_k, z_k), k \in \mathbb{K} \mid (46) \text{ et } (48) \text{ sont satisfaites}\}$.

L'entropie est une fonction concave de ses arguments comme restriction de l'entropie extensive à un domaine convexe affine. Cependant, elle n'est pas strictement concave par rapport aux fractions.

Proposition 3.4 ([19]). *Soient $\varphi_k \in [0, 1]$ les fractions de masse fixées satisfaisant (47). L'entropie à l'équilibre (49) :*

- ne dépend que de (τ, e) ;
- est strictement concave par rapport à (τ, e) ;
- satisfait une relation de Gibbs intensive : $Tds = de + pd\tau$, où T et p sont les température et pression du mélange à l'équilibre.

Remarque 3.1. *L'étude de l'entropie pour un mélange à N phases se fait aisément, dès lors que les N phases sont toutes miscibles ou immiscibles. Alors les outils d'analyse convexe, telles que la sup-convolution ou la concavification, s'appliquent et leurs propriétés de préservation de concavité nous permettent de conclure directement sur la concavité de l'entropie du mélange.*

Une extension intéressante du travail concerne la généralisation de l'étude sur le modèle triphasique à plusieurs phases avec des contraintes de miscibilité et de transfert de masse mixtes et non identiques par permutation d'indices. 

3.2 MODÈLES HOMOGENES

On adapte les modèles diphasiques étudiés au Chapitre 2.2 dans le cas diphasique. On rappelle que les fractions de masse φ_k sont des constantes positives du problème, satisfaisant la contrainte (47), de sorte qu'il n'y a pas de transfert de masse entre le liquide et sa vapeur. Deux lois de convection des fractions de masse complètent alors le système d'Euler compressible :

$$\begin{cases} \partial_t(\varphi_l \rho) + \partial_x(\varphi_l \rho u) = 0, \\ \partial_t(\varphi_g \rho) + \partial_x(\varphi_g \rho u) = 0, \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathcal{E}) + \partial_x((\rho \mathcal{E} + p)u) = 0. \end{cases} \quad (50)$$

Le système est fermé par la loi de pression $p = p(1/\rho, e, \varphi_l, \varphi_g)$ en accord avec l'équilibre thermodynamique caractérisé par la Proposition 3.2.

On peut montrer que le modèle est hyperbolique en adaptant le théorème de Godunov-Mock [Moc80, GR91]. On considère la fonction

$$\eta : (\varphi_l, \varphi_g, \tau, u, \mathcal{E}) \rightarrow -s(\tau, \mathcal{E} - u^2/2, \varphi_l, \varphi_g).$$

D'après la Proposition 3.4, η est une fonction strictement concave de (τ, e) , à fractions de masse φ_k fixées, mais elle est non strictement concave par rapport à toutes ses variables. Ce n'est donc pas une entropie de Lax et appliquer directement Godunov-Mock n'est pas possible. Nous proposons dans [19] un résultat général pour démontrer l'hyperbolicité de notre système.

Théorème 3.5. Soit $w : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ et $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ définissant le système de lois de conservation suivant :

$$\partial_t w(t, x) + \partial_x f(w)(t, x) = 0,$$

où $w = (w_1, w_2)^t$ avec $w_1 \in \mathbb{R}^l$, $w_2 \in \mathbb{R}^{n-l}$, $f = (0, f_2)^t$ et $f_2 \in \mathbb{R}^{n-l}$. Supposons que $\eta(w)$ est strictement convexe par rapport à w_2 à w_1 fixé telle que

$$\partial_t \eta(w) = 0,$$

et que $\nabla_{w_1} f_2(w) = 0$. Alors le système est hyperbolique.

Pour appliquer le lemme, il faut se placer dans le référentiel de l'écoulement, en coordonnées Lagrangiennes en définissant la dérivée matérielle $D_t v = \partial_t v + u \partial_x v$. On montre que l'entropie $s(\tau, e, \varphi_l, \varphi_g)$ est transportée par le système

$$D_t \eta(w) = 0, \tag{51}$$

de même que les fractions de masse $w_1 = (\varphi_l, \varphi_g)$. La pression p est indépendante des fractions w_1 . Il en résulte que le système est strictement hyperbolique. À noter que dans le cas où la transition de phase entre le liquide et sa vapeur est prise en compte, le lemme ne s'applique pas car l'entropie n'est pas strictement concave par rapport à φ_l . Il faut adapter la preuve de [Faco8], utilisée dans le cas diphasique, voir le Théorème 2.5, et revenir à l'étude des valeurs propres de la jacobienne du flux dans la zone de saturation.

La loi de pression $p = p(1/\rho, e, \varphi_l, \varphi_g)$ reste difficile à expliciter même si les lois phasiques sont simples [2]. On préfère construire un modèle de relaxation en considérant les variables additionnelles $Y = (\alpha_l, z_l, z_g)$:

$$\begin{cases} \partial_t(\varphi_k \rho) + \partial_x(\varphi_k \rho u) = 0, & k = l, g, \\ \partial_t(\rho Y) + \partial_x(\rho u) = Q(Y), \\ \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p_{rel}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathcal{E}) + \partial_x((\rho \mathcal{E} + p_{rel})u) = 0, \end{cases} \tag{52}$$

où la loi de pression est

$$p_{rel} = p_{rel}(1/\rho, e, \varphi_l, \varphi_g, \alpha_l, z_l, z_g). \tag{53}$$

Le système admet pour entropie la fonction $\sigma(\tau, e, (\varphi_k)_k, (\alpha_k)_k, (z_k)_k)$ définie par (45) et satisfaisant la relation de Gibbs intensive

$$Td\sigma = de + p_{rel}d\tau + \sum_{k=l,g} \partial_{\varphi_k} s d\varphi_k + \partial_{\alpha_l} s d\alpha_l + \sum_{k=l,g} \partial_{z_k} s dz_k.$$

On en déduit les expressions des température et pression du mélange :

$$\begin{aligned} \frac{p_{rel}(1/\rho, e, \varphi_l, \varphi_g, \alpha_l, z_l, z_g)}{T(1/\rho, e, \varphi_l, \varphi_g, \alpha_l, z_l, z_g)} &= \sum_{k \in \mathbb{K}} \alpha_k \frac{p_k \left(\frac{\alpha_k}{\varphi_k} \tau, \frac{z_k}{\varphi_k} e \right)}{T_k \left(\frac{\alpha_k}{\varphi_k} \tau, \frac{z_k}{\varphi_k} e \right)}, \\ \frac{1}{T(1/\rho, e, \varphi_l, \varphi_g, \alpha_l, z_l, z_g)} &= \sum_{k \in \mathbb{K}} \frac{z_k}{T_k \left(\frac{\alpha_k}{\varphi_k} \tau, \frac{z_k}{\varphi_k} e \right)}, \end{aligned} \quad (54)$$

sous les contraintes de conservation de masse (47), d'énergie (48) et de volume (46) vérifiées par les fractions.

De même que dans le cas diphasique, un choix possible de termes sources, plébiscités dans [HQ19] dans un cadre immiscible, est

$$Q(Y) = \lambda(Y_{eq}^{NPT}(\tau, e, \varphi_l, \varphi_g) - Y). \quad (55)$$

Remarque 3.2. *Les aspects numériques ne sont pas évoqués dans cette section ni dans la Chapitre 2. Le développement d'une méthode numérique appropriée au modèle (52) est évidemment essentielle pour évaluer sa pertinence par rapport à un modèle triphasique totalement immiscible décrit par un modèle homogène [HQ19] ou multifluide [Héro7]. Une extension de la méthode à pas fractionnaire introduite dans [Hur14] est en cours de développement.* 

3.3 MODÈLE MULTIFLUIDE

L'approche multifluide considère que chaque phase $k \in \mathbb{K}$ évolue à sa propre vitesse u_k et est décrite par sa propre loi complète s_k . Le système correspond alors à un couplage de k systèmes d'Euler, couplés par des termes non conservatifs faisant intervenir des quantités interfaciales. Le modèle est fermé par des termes source de relaxation traduisant le retour du système à l'équilibre thermodynamique et cinétique. Ce type de modèles a fait l'objet de nombreuses études, en particulier dans le cas diphasique, le plus souvent immiscible [BN86, KMB⁺01, CGHSo2, GSo2] et rarement miscible [Del03]. Les modèles à au moins trois phases sont introduits dans [Héro7, MHR16, HHM17, Sal19], les trois dernières références incluant des aspects numériques. Dans [15] est proposé un modèle multifluide pour le mélange à trois phases dont deux miscibles.

Hypothèses de modélisation

Les trois phases $k \in \mathbb{K}$ évoluent désormais à leur vitesse u_k . Puisque les fractions de volume de gaz et de vapeur sont égales, seule une équation de transport de fraction de volume est nécessaire. On considère alors la dynamique du fluide décrite par le vecteur d'état \mathbf{Y}

$$\mathbf{Y} = (\alpha_v, \rho_l, \rho_g, \rho_v, u_l, u_g, u_v, e_l, e_g, e_v) \in (0, 1) \times \mathbb{R}_+^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+^3, \quad (56)$$

satisfaisant l'ensemble d'équations suivant

$$\begin{aligned} \partial_t \alpha_v + v_i(\mathbf{Y}) \partial_x \alpha_v &= \Phi_v(\mathbf{Y}), \\ \partial_t m_k + \partial_x (m_k u_k) &= \Gamma_k(\mathbf{Y}), & k \in \mathbb{K}, \\ \partial_t (m_k u_k) + \partial_x (m_k u_k^2 + \alpha_k p_k) + \pi_k(\mathbf{Y}) \partial_x \alpha_v &= \mathcal{D}_k(\mathbf{Y}), & k \in \mathbb{K}, \\ \partial_t (m_k \mathcal{E}_k) + \partial_x (u_k (m_k \mathcal{E}_k + \alpha_k p_k)) - \pi_k(\mathbf{Y}) \partial_t \alpha_v &= \mathcal{B}_k(\mathbf{Y}), & k \in \mathbb{K}, \end{aligned} \quad (57)$$

où $m_k = \alpha_k \rho_k$ est la masse partielle de la phase k et ρ_k sa masse volumique. L'énergie totale phasique \mathcal{E}_k est donnée par $\mathcal{E}_k = u_k^2/2 + e_k$, où $e_k = e_k(p_k, \rho_k)$ est l'énergie interne phasique. Chaque phase est décrite par son entropie spécifique phasique s_k , satisfaisant les Hypothèses 2, que l'on définit par la suite comme une fonction de la pression p_k et de la masse volumique ρ_k . La vitesse du son c_k de la phase k s'écrit

$$\rho_k c_k^2 = \left(\frac{\partial e_k}{\partial p_k} \right)^{-1} \left(\frac{p_k}{\rho_k} - \rho_k \frac{\partial e_k}{\partial \rho_k} \right). \quad (58)$$

Le système (57) contient des termes non conservatifs dans l'équation de volume et les équations de quantités de mouvement et d'énergies totales. Ces termes font intervenir la vitesse interfaciale v_i et les pressions interfaciales $\pi_k(\mathbf{Y})$. Il s'agit d'en donner une définition afin de clore le système. Ces pressions interfaciales $\pi_k(\mathbf{Y})$ s'annulent lorsque l'on considère l'écoulement moyen

$$\sum_{k \in \mathbb{K}} \pi_k(\mathbf{Y}) = 0. \quad (59)$$

De façon similaire, les termes sources s'annulent lorsque l'on écrit les lois de conservation de la masse du fluide, de son moment et de son énergie totale :

$$\sum_{k \in \mathbb{K}} \Gamma_k(\mathbf{Y}) = 0, \quad \sum_{k \in \mathbb{K}} \mathcal{D}_k(\mathbf{Y}) = 0, \quad \sum_{k \in \mathbb{K}} \mathcal{B}_k(\mathbf{Y}) = 0. \quad (60)$$

L'équation sur la fraction de volume ne fait intervenir que le terme source $\Phi_v(\mathbf{Y})$ associé à la fraction de volume α_v . Cependant, par conservation, on peut déduire les termes de transfert mécanique des deux autres phases $k = l, g$:

$$\Phi_v(\mathbf{Y}) = \Phi_g(\mathbf{Y}) = -\Phi_l(\mathbf{Y}). \quad (61)$$

Le choix de la vitesse interfaciale conditionne la fermeture du système. De façon standard, on postule que

$$v_i(\mathbf{Y}) = \beta_l(\mathbf{Y})u_l + \beta_g(\mathbf{Y})u_g + \beta_v(\mathbf{Y})u_v, \quad (62)$$

avec

$$\begin{cases} \beta_l(\mathbf{Y}) + \beta_g(\mathbf{Y}) + \beta_v(\mathbf{Y}) = 1, \\ \beta_k(\mathbf{Y}) \geq 0, \quad k \in \mathbb{K}. \end{cases} \quad (63)$$

Ce choix est en accord avec l'invariance galiléenne requise par le problème. D'autres choix sont possibles, voir [GHS04] et [Gui07] pour une comparaison.

L'entropie du mélange, introduite dans la Section 3.1 et définie par (45), est désormais fonction du vecteur \mathbf{Y} et s'écrit

$$\eta(\mathbf{Y}) = \sum_{k \in \mathbb{K}} m_k s_k. \quad (64)$$

Les solutions régulières du système (57) satisfont l'identité d'entropie

$$\partial_t \eta(\mathbf{Y}) + \partial_x f_\eta(\mathbf{Y}) + \mathcal{A}_\eta(\mathbf{Y}, \partial_x \mathbf{Y}) = RHS_\eta(\mathbf{Y}), \quad (65)$$

où le flux d'entropie s'écrit $f_\eta(\mathbf{Y}) = \sum_{k \in \mathbb{K}} m_k s_k u_k$. Les termes non-conservatifs sont contenus dans $\mathcal{A}_\eta(\mathbf{Y}, \partial_x \mathbf{Y})$, les termes de retour à l'équilibre thermodynamique et cinétique étant regroupés dans $RHS_\eta(\mathbf{Y})$.

Propriétés du modèle

Dès lors que le choix de définition de la vitesse interfaciale (62)-(63) est fixé, on montre que les lois de fermeture du modèle sont uniquement définies.

Proposition 3.6 (Définition des pressions interfaciales, [15]). *Soit la vitesse interfaciale définie par (62) avec les coefficients β_k satisfaisant (63). Alors les solutions régulières du système (57) satisfont la contrainte de dissipation d'entropie minimale*

$$\mathcal{A}_\eta(\mathbf{Y}, \partial_x \mathbf{Y}) = 0,$$

pour l'unique triplet $(\pi_v(\mathbf{Y}), \pi_g(\mathbf{Y}), \pi_l(\mathbf{Y}))$, solution de

$$\mathbf{C}(\pi_l(\mathbf{Y}) - p_l, \pi_g(\mathbf{Y}) + p_g, \pi_v(\mathbf{Y}) + p_v)^\top = (0, 0, p_v + p_g - p_l)^\top, \quad (66)$$

avec

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{T_l}(\beta_g(\mathbf{Y}) + \beta_v(\mathbf{Y})) & \frac{1}{T_g}\beta_l(\mathbf{Y}) & \frac{1}{T_v}\beta_l(\mathbf{Y}) \\ \frac{1}{T_l}\beta_g(\mathbf{Y}) & -\frac{1}{T_g}(\beta_l(\mathbf{Y}) + \beta_v(\mathbf{Y})) & \frac{1}{T_v}\beta_g(\mathbf{Y}) \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (67)$$

La démonstration repose sur une réécriture astucieuse de la contrainte $\mathcal{A}_\eta(\mathbf{Y}, \partial_x \mathbf{Y}) = 0$. La matrice \mathbf{C} est inversible par positivité stricte des températures. Par conséquent, le vecteur $(\pi_l(\mathbf{Y}) - p_l, \pi_g(\mathbf{Y}) + p_g, \pi_v(\mathbf{Y}) + p_v)^\top$ est défini de manière unique par

$$\begin{aligned} & (\pi_l(\mathbf{Y}) - p_l, \pi_g(\mathbf{Y}) + p_g, \pi_v(\mathbf{Y}) + p_v)^\top \\ &= \frac{p_v + p_g - p_l}{\det(\mathbf{C})} \left(\frac{1}{T_g T_v} \beta_l(\mathbf{Y}), \frac{1}{T_v T_l} \beta_g(\mathbf{Y}), \frac{1}{T_l T_g} \beta_v(\mathbf{Y}) \right)^\top. \end{aligned} \quad (68)$$

Si l'on choisit $v_i(\mathbf{Y}) = u_l$, c'est-à-dire $\beta_l(\mathbf{Y}) = 1$ et $\beta_g(\mathbf{Y}) = \beta_v(\mathbf{Y}) = 0$ dans (62), les pressions interfaciales sont

$$\pi_l(\mathbf{Y}) = p_g + p_v, \quad \pi_g(\mathbf{Y}) = -p_g, \quad \pi_v(\mathbf{Y}) = -p_v. \quad (69)$$

On observe que la pression $\pi_l(\mathbf{Y})$ correspond à une loi de Dalton sur les phases gazeuses. Avec ce choix de vitesse interfaciale, on étudie aisément la structure propre du système convectif.

Proposition 3.7 (Hyperbolicité, [15]). *Le système convectif (57) est hyperbolique avec pour valeurs propres $\lambda_1 = u_g$, $\lambda_2 = u_v$, $\lambda_3 = \lambda_4 = u_l$, $\lambda_{5,6} = u_g \pm c_g$, $\lambda_{7,8} = u_v \pm c_v$, $\lambda_{9,10} = u_l \pm c_l$. Les vecteurs propres à droite associés forment une base de \mathbb{R}^{10} , excepté lorsque les valeurs propres coïncident, c'est-à-dire lorsque*

$$(u_g - u_l)^2 - c_g^2 = 0, \quad \text{ou} \quad (u_v - u_l)^2 - c_v^2 = 0. \quad (70)$$

Remarque 3.3. *La connaissance de la structure propre du système permet d'envisager plus facilement le développement d'une méthode volumes finis pour simuler le système convectif de (57). Pour ce faire on s'appuie sur les méthodes développées pour les modèles multifluides immiscibles [HHM17, Sal19].* 

En contraignant le système relaxé à satisfaire le principe de croissance de l'entropie mathématique $\eta(\mathbf{Y})$, on parvient également à exhiber des contraintes sur $RHS_\eta(\mathbf{Y})$. Les termes de relaxation thermique, cinétique et chimique doivent être positivement proportionnels à l'écart des températures, des vitesses et des potentiels chimiques. Le terme de relaxation mécanique doit être positivement proportionnel à un terme d'équilibre entre la pression de la phase liquide et la loi de Dalton sur les phases gazeuses :

$$\Phi_v(\mathbf{Y})(p_v + p_g - p_l) \geq 0.$$

Remarque 3.4. Le système multifluide (57) et les systèmes homogènes (50) et (52) forment une hiérarchie de modèles, le modèle relaxé (52) étant déduit du système multifluide (57) en y imposant l'équilibre cinétique. Il reste à analyser la stabilité de la limite de relaxation entre ces deux systèmes, en étudiant notamment la condition sous-caractéristique [FL11, MHR16]. 

Considérant le jeu de variables $\mathbf{W} = (\alpha_v, p_g, u_g, p_v, u_v, p_l, u_l, s_g, s_v, s_l) \in \mathbb{R}^{10}$, et en se limitant aux solutions régulières, le système (57) peut s'écrire sous la forme quasilinéaire

$$\partial_t \mathbf{W} + \mathbb{B}(\mathbf{W}) \partial_x \mathbf{W} = 0, \quad (71)$$

pour lequel on démontre le caractère symétrisable.

Théorème 3.8 (Symétrisabilité du système, [15]). *Supposons le système hors résonance, i.e. la contrainte (70) n'est pas satisfaite. Alors le système (71) est symétrisable au sens où il existe*

- une matrice symétrique définie positive $\mathbb{D}(\mathbf{W}) \in \mathbb{R}^{10 \times 10}$
- une matrice symétrique $\mathbb{Q}(\mathbf{W}) = \mathbb{D}(\mathbf{W})\mathbb{B}(\mathbf{W}) \in \mathbb{R}^{10 \times 10}$, $\mathbb{B}(\mathbf{W})$

telles que

$$\mathbb{D}(\mathbf{W}) \partial_t \mathbf{W} + \mathbb{Q}(\mathbf{W}) \partial_x \mathbf{W} = 0.$$

En conséquence du théorème de Kato [Kat75], pour une condition initiale telle que (70) n'est pas satisfaite, il existe une solution régulière locale en temps au problème de Cauchy. Lorsque la condition de résonance (70) n'est pas vérifiée, le temps d'existence de cette solution correspond au temps d'explosion de la norme L^∞ de sa dérivée en espace.

Remarque 3.5. *Pour des systèmes de relaxation ayant une structure conservative, l'existence de solution globale est possible dès lors que la condition de Kawashima-Shizuta est vérifiée [Yon02]. Ici le caractère non-conservatif des équations ne permet pas d'appliquer ce résultat directement. Un travail prospectif, basé sur [BZ11], concerne l'adaptation de la condition de Kawashima-Shizuta au cadre du système (57).* 

 MODÉLISATION D'ÉCOULEMENTS MÉTASTABLES

Il peut arriver que des fluides présentent un retard à la transition de phase. Par exemple, de l'eau (liquide) mise au micro-onde peut être amenée à une température supérieure à la température de saturation. Le fluide devrait être à l'état vapeur mais demeure liquide, comme l'illustre cette vidéo (à partir de la 45ème seconde). On observe clairement que selon la perturbation fournie, le fluide peut rester à l'état liquide ou vaporiser brutalement. Ce comportement, dit métastable, est identifié par Landau et Lifshitz [LL69] :

[...] we must distinguish between metastable and stable equilibrium states. A body in a metastable state may not return to it after a sufficient deviation.

Les états métastables liquide et vapeur sont décrits par certaines lois d'état, notamment les lois d'état cubiques, dont la loi de van der Waals. On propose dans ce chapitre la construction d'un modèle diphasique homogène de relaxation, basée sur la méthodologie du Chapitre 2, présentant des états métastables de la loi de van der Waals.

François James et moi avons proposé et analysé un modèle original dans le cas isotherme [17, 16]. Il repose sur un système dynamique, construit sur la base de l'énergie du mélange, dont les équilibres sont à la fois les états stables et métastables de la loi de van der Waals et un état de saturation décrit par la règle de Maxwell. C'est par l'étude des bassins d'attraction du système que l'on retrouve le caractère métastable du problème. La collaboration s'est poursuivie par le co-encadrement de la thèse d'Hala Ghazi [Gha18], au cours de laquelle nous avons approfondi l'analyse du système dynamique construit [12] et proposé une extension du modèle au cas non-isotherme [13]. Le cas non-isotherme est délicat à présenter car la "lecture" des états métastables dans les diagrammes de phase énergie-volume est ardue. On se réfère à [13] et à [Gha18] pour une étude complète. Le modèle et ses propriétés sont présentés ici dans le cas isotherme, les simulations numériques finales étant issues du cas non-isotherme. À noter que l'on choisit ci-dessous de définir la pression comme une fonction du volume spécifique et non comme une fonction de la masse volumique comme ce le cas dans [16, 17, 12]. Les résultats demeurent similaires.

Loi d'état de van der Waals

En isotherme, une loi d'état complète extensive est l'énergie libre de Helmholtz, fonction de la masse M et du volume V du fluide. Elle satisfait une relation de Gibbs extensive

$$dF = -pdV + \mu dM, \quad (72)$$

et par homogénéité, la relation d'Euler

$$F(M, V) = \nabla F(M, V) \cdot \begin{pmatrix} M \\ V \end{pmatrix} = \mu M - pV. \quad (73)$$

Le passage aux variables spécifiques permet d'exhiber des relations entre l'énergie libre intensive f , le potentiel chimique μ et la pression p , fonctions intensives du volume spécifique $\tau = M/V$

$$p(\tau) = f'(\tau), \quad \mu(\tau) = \tau p(\tau) + f(\tau). \quad (74)$$

Le modèle de van der Waals est présenté d'ordinaire comme une famille de lois de pression $p(\tau)$, paramétrée par la température T [LL69, Cal85]. Les pression p et l'énergie libre de Helmholtz f du modèle de van der Waals réduit sont définies par

$$\begin{aligned} p(\tau) &= \frac{8T}{3\tau - 1} - \frac{3}{\tau^2}, \\ f(\tau) &= \frac{8T}{3\tau} \left(\ln \left(\frac{3}{3\tau - 1} \right) - 1 \right). \end{aligned} \quad (75)$$

pour $1/3 < \tau$. Il existe une température critique T_C , égale à 1 dans le cas réduit, au-dessus de laquelle la pression $p(\tau)$ est une fonction décroissante du volume, et en-dessous de laquelle elle n'est plus monotone. Pour une température sous-critique $T < T_C$, la pression admet deux extrema locaux aux volumes $\tau^- < \tau^+$. Pour $\tau \in [\tau^-, \tau^+]$, la pression est croissante, voir les branches croissantes cyans sur la Figure 1. L'ensemble de ces points, pour toute température $T < T_c$, forme la zone spinodale et correspond à des états physiquement non admissibles.

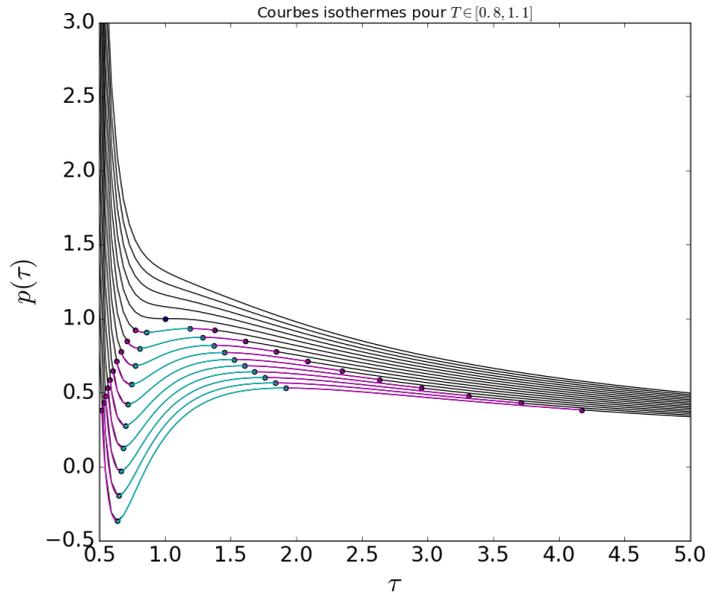


FIGURE 1 – Isothermes de van der Waals pour différentes températures. La zone spinodale, délimitée par le lieu des volumes (τ^-, τ^+) , est indiquée en cyan. Les zones métastables, représentées en magenta, sont délimitées par la zone spinodale et le dôme de saturation.

On se concentre désormais sur la courbe isotherme $T = 0.85 < T_c$, voir Figure 2-haut. Afin de corriger la pression dans la zone spinodale, il est d'usage d'appliquer la loi des aires égales de

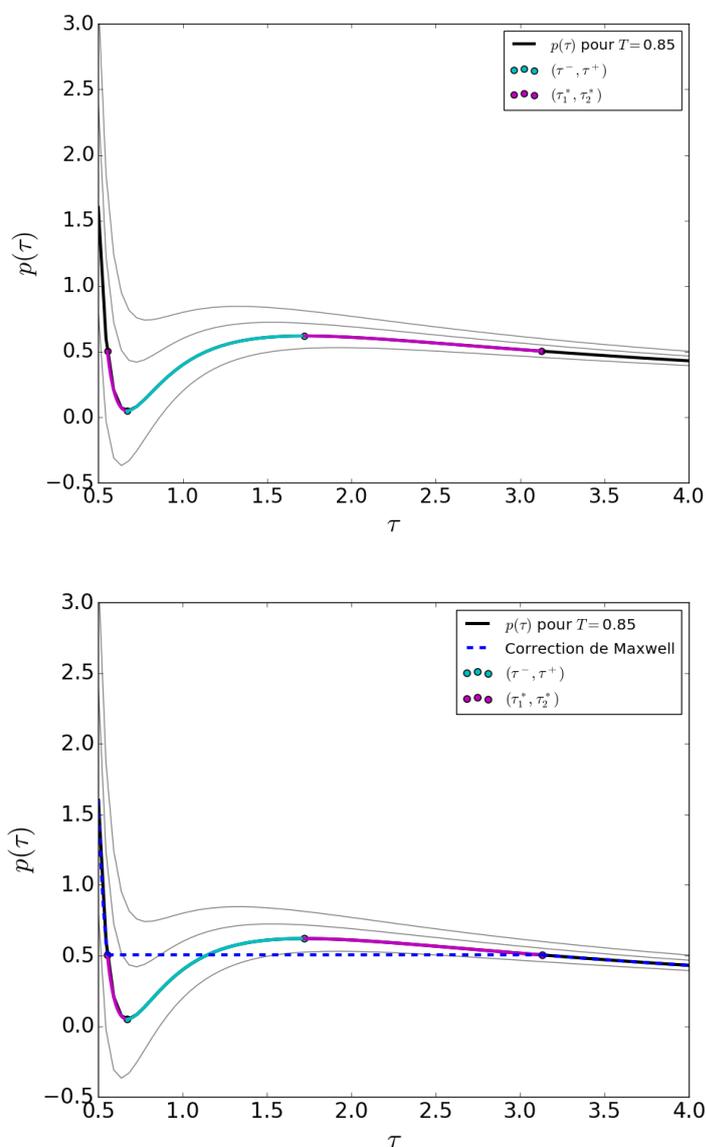


FIGURE 2 – Isotherme sous-critique de van der Waals pour $T = 0.85$. La zone spinodale, délimitée par les volumes (τ^-, τ^+) , est indiquée en cyan. Les états métastables sont indiqués en magenta pour $\tau \in [\tau_1^*, \tau^-)$ et $\tau \in (\tau^+, \tau_2^*]$. La correction de Maxwell (en bas) consiste à remplacer la pression pour $\tau \in [\tau_1^*, \tau_2^*]$ par le segment $p = p^*$ (courbe en pointillés bleus).

Maxwell. Cette construction repose sur le fait que la transition de phase s'opère à température, pression et potentiel chimique constants. Pour une température sous-critique $T < T_c$, la construction détermine de façon unique le triplet $(p^*, \tau_1^*, \tau_2^*)$. La pression est alors corrigée par le segment isobare $p = p^*$ pour $\tau \in [\tau_1^*, \tau_2^*]$, obtenant ainsi une loi de pression globalement décroissante, indiquée par la courbe en pointillés bleus sur la Figure 2-bas. Le lieu des points (τ_1^*, τ_2^*) , pour un ensemble de températures sous-critiques, forme le dôme de saturation, représenté en magenta sur la Figure 1. Les volumes $\tau < \tau_1^*$ (resp. $\tau > \tau_2^*$) désignent des états de liquide stable (resp. de vapeur stable) et métastables pour $\tau \in [\tau_1^*, \tau^-]$ (resp. $\tau \in [\tau^+, \tau_2^*]$), indiqués en magenta en Figure 2. L'inconvénient de la construction de Maxwell est qu'elle rend inatteignables les états métastables.

La Figure 3-haut présente l'énergie libre de Helmholtz pour la température sous-critique $T = 0.85$. Les branches convexes de f pour $\tau < \tau^-$ et pour $\tau > \tau^+$ correspondent aux états stables. La zone spinodale, pour $\tau \in [\tau^-, \tau^+]$, est indiquée en cyan. Les branches convexes magenta désignent les zones métastables liquide et vapeur. La construction de Maxwell revient à construire le segment bleu, qui convexifie globalement l'énergie libre, voir Figure 3-bas. Le segment est tangent au graphe de f aux volumes τ_1^* et τ_2^* avec la pente $p^* = p(\tau_1^*) = p(\tau_2^*)$.

Notre objectif est de construire un modèle capable de capturer tous les états physiquement admissibles du modèle de van der Waals et de sa correction : les états stables liquide et vapeur, les états de saturation et les états métastables. Pour construire ce modèle, on adopte la même approche que dans le Chapitre 2, adapté au cas isotherme. En considérant les deux phases immiscibles, l'équilibre thermodynamique est obtenu par minimisation sous contraintes de l'énergie du mélange diphasique. L'originalité réside dans le fait que l'on suppose cette fois que les deux phases suivent la même loi d'état complète f non convexe. L'item (ii) des Hypothèses 1 est mise en défaut.

Minimisation de l'entropie du mélange

Les deux phases $k = 1, 2$ sont décrites par la même énergie libre de van der Waals f , fonction du volume spécifique τ_k . De manière analogue au Chapitre 2, l'énergie libre du mélange s'écrit

$$\mathcal{F}(\varphi_1, \varphi_2, \tau_1, \tau_2) = \varphi_1 f(\tau_1) + \varphi_2 f(\tau_2), \quad (76)$$

où φ_k désigne la fraction de masse de la phase $k = 1, 2$. Par la suite, on suppose que $\tau_1 < \tau_2$ de sorte que la positivité de fractions de masse φ_k revient à imposer $\tau_1 < \tau < \tau_2$. Pour un état τ du mélange donné, l'équilibre thermodynamique est obtenu par minimisation de l'énergie du mélange sous les contraintes de conservation de la masse (17) et d'immiscibilité (20) :

$$\operatorname{argmin} \{ \mathcal{F}(\varphi_1, \varphi_2, \tau_1, \tau_2), \quad \varphi_1 + \varphi_2 = 1, \quad \tau = \varphi_1 \tau_1 + \varphi_2 \tau_2 \}. \quad (77)$$

Soient λ_φ et λ_τ les multiplicateurs de Lagrange associés aux contraintes. Les conditions d'optimalité de (77) sont :

$$(a) \quad f(\tau_k) + \lambda_\varphi + \lambda_\tau \tau_k = 0, \quad (b) \quad \varphi_k (p(\tau_k) + \lambda_\tau) = 0, \quad k = 1, 2. \quad (78)$$

On en déduit les minima suivants.

Proposition 4.1 (Minima du problème, [Gha18],[16, 17, 12] et [13] dans le cas avec énergie). *Les états d'équilibre thermodynamiques sont*

(i) *Les états stables et métastables*

- $\tau_1 = \tau_2 = \tau$ et φ_k indéterminés,
- $\varphi_1 = 0, \varphi_2 = 1, \tau_2 = \tau > \tau_1$ et τ_1 solution de $f(\tau_1|\tau) = 0$,

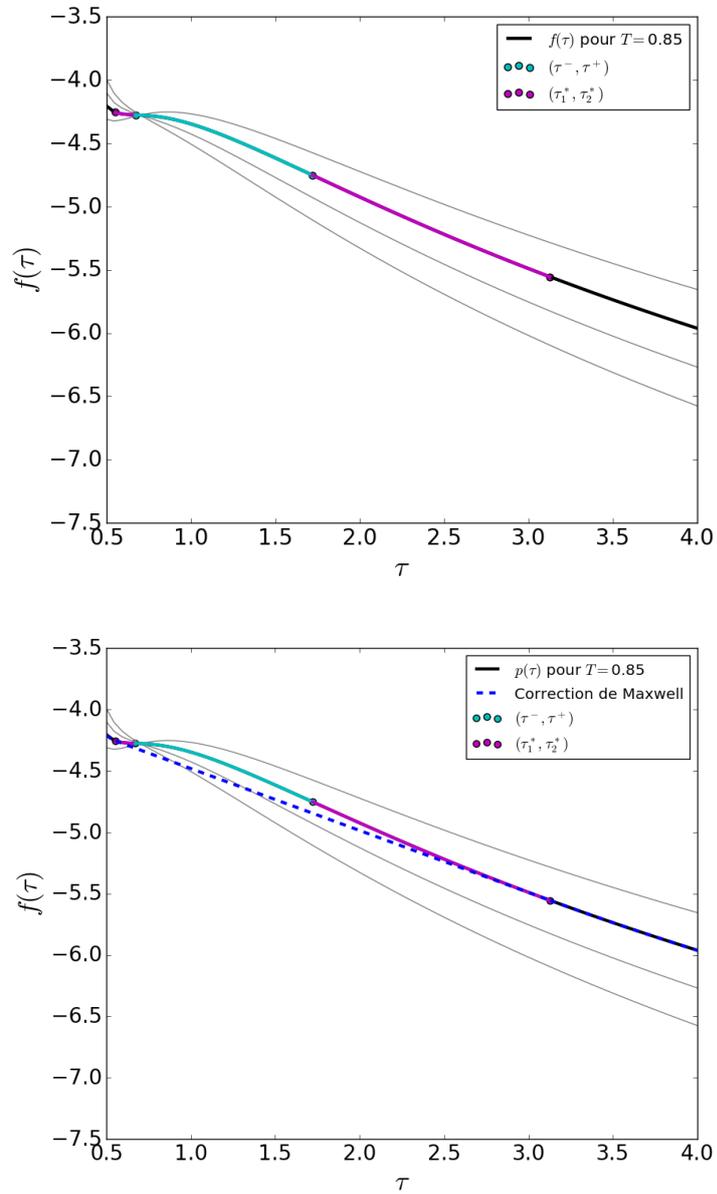


FIGURE 3 – Énergie libre de Helmholtz pour $T = 0.85$. La zone spinodale, délimitée par les volumes (τ^-, τ^+) , est indiquée en cyan. Les états métastables sont indiqués en magenta pour $\tau \in [\tau_1^*, \tau^-]$ et $\tau \in [\tau^+, \tau_2^*]$. La correction de Maxwell (en bas) consiste à convexifier l'énergie sur l'intervalle $[\tau_1^*, \tau_2^*]$ en remplaçant f par le segment en pointillés bleus.

- $\varphi_1 = 1, \varphi_2 = 0, \tau_1 = \tau < \tau_1$ et τ_2 solution de $f(\tau_2|\tau) = 0$,
où $f(a|b) = f(a) - f(b) - p(a)(b - a)$ est l'énergie libre relative de a par rapport à b .
- (ii) Les états de saturation : $\tau_1 = \tau_1^*, \tau_2 = \tau_2^*$ avec φ_k satisfaisant (17) et (20). Les volumes $\tau_1^* < \tau_2^*$ sont uniquement déterminés par l'une de ces deux propriétés équivalentes :
 - égalité des pressions et des potentiels chimiques

$$p(\tau_1^*) = p(\tau_2^*) = p^*, \quad \text{et} \quad \mu(\tau_1^*) = \mu(\tau_2^*) = \mu^*; \quad (79)$$

- loi des aires égales sur la pression

$$\int_0^1 p(\tau_1^* + t(\tau_2^* - \tau_1^*)) dt = p(\tau_1^*) = p(\tau_2^*) = p^*. \quad (80)$$

La minimisation de l'énergie permet donc de retrouver les états d'équilibre attendus : les états stables et métastables liquide et vapeur, les états de saturation obtenus par la construction de Maxwell. Cependant les conditions nécessaires d'optimalité de la Proposition 4.1 incluent tous les états d'équilibre, quelque soit leur stabilité. Cela signifie que tous les états de la courbe isotherme de van der Waals sont atteignables, y compris un état physiquement non admissible de la zone spinodale.

L'étude de la convexité locale de \mathcal{F} dans (76) permettrait de conclure quant à la stabilité locale d'un équilibre. Une autre manière de procéder, utilisée initialement dans [17], est d'introduire un processus de relaxation vers les états d'équilibre en construisant un système dynamique adéquat.

Système dynamique de transition de phase

Pour construire un système dynamique approprié, on cherche à satisfaire deux critères :

- les équilibres en temps long doivent coïncider avec les minima du problème de minimisation (77), caractérisés par la Proposition 4.1,
- l'énergie libre de Helmholtz (76) est dissipée le long des trajectoires.

Puisqu'on a deux contraintes de minimisation, et donc deux degrés de liberté, il s'agit de proposer un système dynamique de dimension 2. Une étude comparative de différents systèmes possibles est effectuée dans [Gha18].

On présente ci-dessous un système différentiel sur les fractions de la phase 1, notée $\mathbf{r} = (\alpha, \varphi)$. On rappelle que les volumes phasiques sont donnés par

$$\tau_1 = \frac{\alpha}{\varphi} \tau, \quad \tau_2 = \frac{1 - \alpha}{1 - \varphi} \tau,$$

qui vérifient $1/3 < \tau_1 < \tau < \tau_2$ par positivité des fractions et définition de la loi de van der Waals réduite. L'énergie libre du mélange \mathcal{F} est maintenant exprimée comme une fonction de \mathbf{r} :

$$\mathcal{F}(\mathbf{r}) = \varphi f(\tau_1(\mathbf{r})) + (1 - \varphi) f(\tau_2(\mathbf{r})). \quad (81)$$

Dissiper l'énergie le long des trajectoires correspond à

$$\frac{d}{dt} \mathcal{F}(\mathbf{r}(t)) = \nabla \mathcal{F}(\mathbf{r}) \cdot \dot{\mathbf{r}}(t) \leq 0.$$

Puisque le gradient de \mathcal{F} est

$$\nabla \mathcal{F}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \tau(p(\tau_2(\mathbf{r})) - p(\tau_1(\mathbf{r}))) \\ \mu(\tau_1(\mathbf{r})) - \mu(\tau_2(\mathbf{r})) \end{pmatrix},$$

un choix naturel de système serait $\dot{\mathbf{r}} = -\nabla\mathcal{F}(\mathbf{r})$. Par positivité de τ , on se limite à considérer

$$\begin{cases} \dot{\alpha} = Q_\alpha(\mathbf{r})(\mathbf{r}) = \alpha(1-\alpha)(p(\tau_1(\mathbf{r})) - p(\tau_2(\mathbf{r}))), \\ \dot{\varphi} = Q_\varphi(\mathbf{r})(\mathbf{r}) = \varphi(1-\varphi)(\mu(\tau_2(\mathbf{r})) - \mu(\tau_1(\mathbf{r}))), \end{cases} \quad (82)$$

les termes multiplicatifs $\alpha(1-\alpha)$ et $\varphi(1-\varphi)$ garantissant le principe du maximum sur les fractions.

Proposition 4.2 (Équilibres du système dynamique, [Gha18] et [13] dans le cas avec énergie). *Les états d'équilibre du système dynamique correspondent*

- (i) *aux états de saturation : $\mathbf{r}^* = (\alpha^*, \varphi^*)$ avec $\alpha^* \neq \varphi^* \in]0, 1[$ tels que $\tau_k^* = \tau_k(\mathbf{r}^*)$, $k = 1, 2$, correspondant à la caractérisation de la Proposition 4.1-(ii). Ces équilibres sont attractifs.*
- (ii) *à l'identification des phases 1 et 2 : $\bar{\mathbf{r}} = (\beta, \beta)$, $\beta \in]0, 1[$ tel que $\tau_1(\bar{\mathbf{r}}) = \tau_2(\bar{\mathbf{r}}) = \tau$. Ces équilibres sont fortement dégénérés.*

On s'intéresse aux bassins d'attraction de ces équilibres, en particulier celui de l'équilibre dégénéré $\bar{\mathbf{r}}$. Pour ce faire, on introduit deux fonctions, l'une indicée par I pour identification, l'autre par S pour saturation :

$$\begin{aligned} G_S(\mathbf{r}) &= \mathcal{F}(\mathbf{r}) - \text{conv}(f)(\tau), \\ G_I(\mathbf{r}) &= \mathcal{F}(\mathbf{r}) - f(\tau), \end{aligned} \quad (83)$$

où $\text{conv}(f)(\tau)$ est la convexifiée de f (dont une définition est donnée en (24), au signe près).

Proposition 4.3 (Bassins d'attraction du système dynamique, [Gha18] et [13] dans le cas avec énergie). *Les bassins d'attraction du système dynamique sont les suivants.*

- (i) *Dans la zone spinodale, pour $\tau \in [\tau_-, \tau_+]$, G_S est une fonction de Lyapunov sur $]0, 1[^2$.*
- (ii) *Dans les zones de liquide ou vapeur stables, pour $\tau \in]1/3, \tau_1^*]$ et $\tau \in [\tau_2^*, +\infty[$, G_I est une fonction de Lyapunov sur $]0, 1[^2$.*

Cela signifie que pour tout état initial dans la zone spinodale, l'équilibre asymptotique correspond à un état de saturation défini par la Proposition 4.2-(i). La Figure 4 représente des trajectoires dans le plan de phase pour une donnée initiale $\mathbf{r}(0)$ (ronds cyans) associée à un état τ appartenant à la zone spinodale. Toutes les trajectoires convergent vers l'état \mathbf{r}^* , représenté par un rond magenta, correspondant à l'équilibre de Maxwell. A contrario, toute donnée initiale $\mathbf{r}(0)$ (ronds cyans) associée à un état τ de liquide ou vapeur stable est préservée par le système (82), comme le montre la Figure 5. Les trajectoires (courbes cyans) convergent vers des états $\bar{\mathbf{r}} = (\beta, \beta)$, représentés par la droite bleue, satisfaisant la Proposition 4.2-(ii).

La caractérisation est moins précise pour un état métastable. Contrairement à la zone spinodale, la fonction G_I est positive dans le voisinage de τ dès lors que τ appartient à une zone de convexité de f . Cela signifie que, pour un état $\tau \in [\tau_1^*, \tau^-[$ ou $\tau \in [\tau^+, \tau_2^*]$, les deux équilibres $\bar{\mathbf{r}}$ et \mathbf{r}^* sont atteignables, selon la donnée initiale $\mathbf{r}(0)$ (ronds cyans ou magentas), comme l'indique la Figure 6. Les deux bassins d'attraction sont séparés par une variété instable, qui traduit justement le caractère métastable du problème. Il n'en est pas moins difficile de caractériser théoriquement et numériquement cette variété, une tentative est proposée dans [12].

Couplage à l'hydrodynamique

Diverses approches ont été mises au point pour modéliser des écoulements métastables. Certaines s'appuient sur loi de van der Waals [Caro4, CFo5, MVo6], d'autres sur des lois réalistes [SPAo8, ZHW10, DLLP19], chacune insistant sur l'hydrodynamique plutôt que sur la relaxation vers

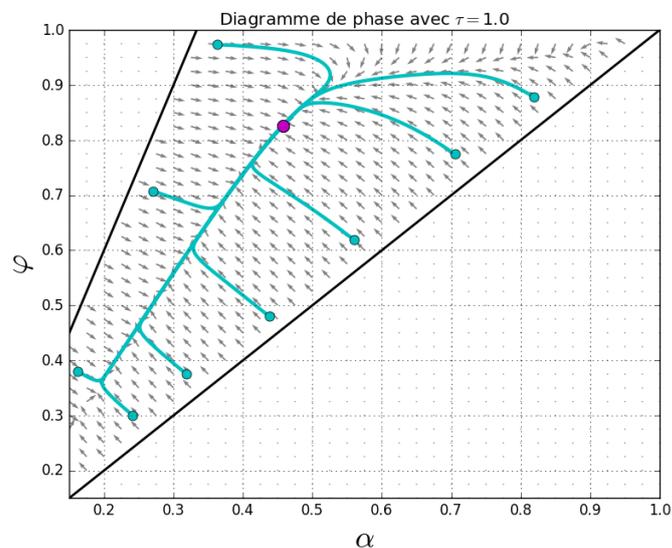


FIGURE 4 – Portrait de phase pour un état τ de la zone spinodale. Le point magenta représente l'état de saturation $\bar{\mathbf{r}}^*$, défini par la Proposition 4.2-(i). Pour toute donnée initiale $\mathbf{r}(0)$, représentée par un rond cyan, les trajectoires (courbes cyans) convergent vers l'état de saturation $\bar{\mathbf{r}}^*$. Les droites noires délimitent le domaine des valeurs admissibles des fractions.

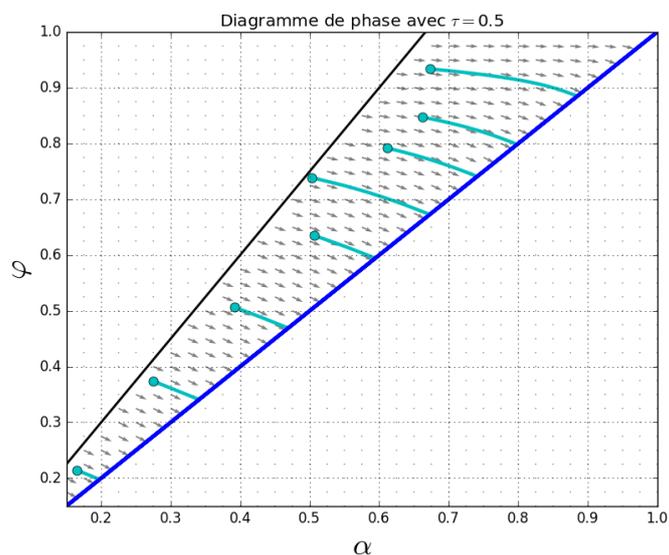


FIGURE 5 – Portrait de phase pour un état τ dans la zone liquide stable. La droite bleue a pour équation $\varphi = \alpha$ et contient tous les états $\bar{\mathbf{r}} = (\beta, \beta)$, satisfaisant la Proposition 4.2-(ii). Pour toute donnée initiale $\mathbf{r}(0)$, représentée par un rond cyan, les trajectoires (courbes cyan) convergent vers un état $\bar{\mathbf{r}}$. Les droites noires délimitent le domaine des valeurs admissibles des fractions.

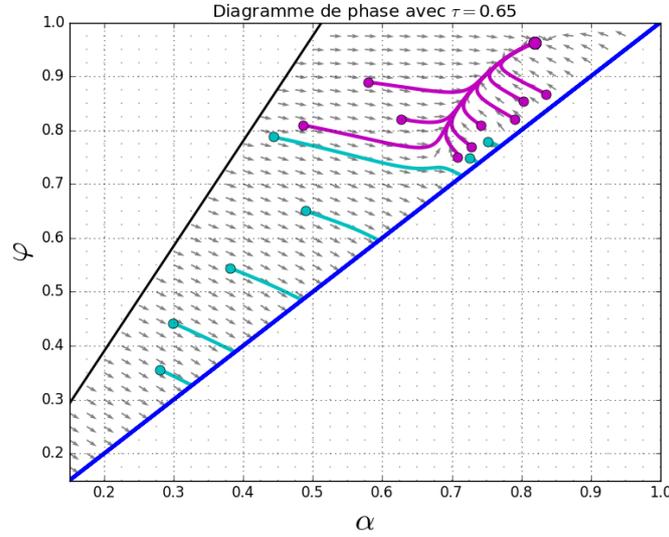


FIGURE 6 – Portrait de phase pour un état τ dans la zone liquide métastable. Deux équilibres sont atteignables selon que la donnée initiale $\mathbf{r}(0)$, représentée par un rond cyan ou magenta selon l'équilibre atteint. Si $\mathbf{r}(0)$ appartient au bassin d'attraction de saturation (ronds magenta), les trajectoires magenta convergent vers l'état de saturation \mathbf{r}^* . Si $\mathbf{r}(0)$ appartient au bassin d'attraction de la phase de liquide métastable (ronds cyans), les trajectoires cyan convergent vers la droite $\varphi = \alpha$ (droite bleue), correspondant à un état $\bar{\mathbf{r}} = (\beta, \beta)$. Les droites noires délimitent le domaine des valeurs admissibles des fractions.

l'équilibre thermodynamique. Notre approche se concentre justement sur la relaxation et utilise le système dynamique comme un terme source de relaxation dans un modèle homogène décrivant la dynamique compressible du fluide. En adaptant le formalisme présenté en Chapitre 2, Section 2.2 au cadre isotherme, on s'amène à considérer le modèle suivant :

$$\begin{cases} \partial_t(\rho\alpha) + \partial_x(\rho u\alpha) = \frac{\rho}{\lambda} Q_\alpha(\mathbf{r}), \\ \partial_t(\rho\varphi) + \partial_x(\rho u\varphi) = \frac{\rho}{\lambda} Q_\varphi(\mathbf{r}), \\ \partial_t(\rho) + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p) = 0. \end{cases} \quad (84)$$

Les deux premières équations traduisent le transport des fractions de masse et de volume $\mathbf{r} = (\alpha, \varphi) \in]0, 1[^2$, avec les termes de relaxation Q_α et Q_φ , donnés en (82), qui traduisent le retour à l'équilibre thermodynamique. Il faut souligner qu'il n'est pas possible de déterminer le modèle homogène à l'équilibre associé au modèle (84). La loi de fermeture à l'équilibre ne peut pas être définie puisqu'elle dépend du processus de relaxation qui portent sur les fractions.

Remarque 4.1. On fait le choix ici de décrire la dynamique du fluide par une approche homogène. Il est envisagé de développer un modèle bi-fluide, dans l'esprit de [BN86, GHS02], en tenant compte d'un déséquilibre de vitesse entre les deux phases. 

La pression p s'obtient par l'énergie libre du mélange \mathcal{F} , définie par (81), qui se comporte comme une entropie mathématique pour (84) (excepté qu'elle n'est pas convexe). En exhibant sa dépendance en \mathbf{r} , celle-ci se réécrit

$$\mathcal{F}(\tau, \mathbf{r}) = \varphi f(\tau_1(\mathbf{r})) + (1 - \varphi) f(\tau_2(\mathbf{r})).$$

Elle satisfait une relation de Gibbs

$$d\mathcal{F} = -pd\tau + \frac{\partial\mathcal{S}}{\partial\alpha}d\alpha + \frac{\partial\mathcal{S}}{\partial\varphi}d\varphi,$$

dont on déduit l'expression de la pression

$$p = p(\tau, \mathbf{r}) = \alpha p(\tau_1(\mathbf{r})) + (1 - \alpha)p(\tau_2(\mathbf{r})).$$

L'hyperbolicité du système convectif est conditionnelle. Les valeurs propres de la jacobienne du flux sont $u \pm c(\tau, \mathbf{r})$ où

$$c(\tau, \mathbf{r}) = \sqrt{\varphi p'(\tau_1(\mathbf{r})) + (1 - \varphi)p'(\tau_2(\mathbf{r}))}. \quad (85)$$

L'hyperbolicité est donc garantie pour des triplets (τ, \mathbf{r}) tels que $\varphi p'(\tau_1(\mathbf{r})) + (1 - \varphi)p'(\tau_2(\mathbf{r})) > 0$. C'est notamment le cas lorsque les volumes $\tau_k(\mathbf{r})$, $k = 1, 2$ sont dans les domaines de convexité de l'énergie libre f . Lorsque la relaxation est prise en compte, pour un temps de relaxation λ non nul, il est évident qu'elle a une influence sur les domaines invariants d'hyperbolicité du système [Hof85].

Proposition 4.4 (Domaine invariant d'hyperbolicité, [17]). *Soit $\Omega = \{ \mathbf{v} = (\rho, \mathbf{r}) \mid c(\tau, \mathbf{r}) \in \mathbb{R} \}$ un domaine de l'espace des états de bord lipschitzien. Soit $\mathbb{I}(\mathbf{v})$ une indicatrice régularisée du domaine Ω . Soit \mathbf{v} une solution régulière de (84), telle que $\lim_{x \rightarrow +\infty} \mathbf{v}(\cdot, x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \mathbf{v}(\cdot, x)$. Si $\langle (Q_\alpha, Q_\varphi)^t(\mathbf{v}), \nabla_{\mathbf{v}} \mathbb{I}(\mathbf{v}) \rangle \leq 0$, alors Ω est un domaine invariant d'hyperbolicité.*

Ainsi les domaines invariants d'hyperbolicité sont contenus dans les bassins d'attraction du système dynamique. Cela signifie que le terme source a tendance à garantir l'hyperbolicité, en confinant les solutions dans les domaines d'hyperbolicité.

Simulation numérique dans le cadre non-isotherme

L'extension au cadre non-isotherme s'opère de la même manière en étudiant la maximisation de l'entropie (23) que l'on réécrit

$$s(\varphi_1, \varphi_2, \tau_1, \tau_2, e_1, e_2) = \varphi_1 s(\tau_1, e_1) + \varphi_2 s(\tau_2, e_2),$$

où s est l'entropie de van der Waals non-isotherme, fonction de (τ, e) . On construit un système dynamique similaire sur les fractions $\mathbf{r} = (\alpha, \varphi, \xi)$, dont les équilibres attractifs sont décrits par un équivalent des Propositions 4.2 et 4.3, ainsi qu'un système homogène (34) où le terme source Q coïncide avec le système dynamique.

L'approximation numérique du modèle homogène de relaxation est réalisée par une méthode volume fini à pas fractionnaire pour gérer la relaxation. Les Figures 7 et 8 sont tirées de [13] et présentent la compression d'un état de vapeur métastable. Initialement on considère un état constant en espace. La masse volumique et la pression initiale correspondent un état métastable vapeur. On choisit initialement des valeurs distinctes pour les fractions (α, φ, ξ) , toujours constantes en espace. La compression est obtenue en imposant une valeur initiale discontinue de la vitesse, la discontinuité étant fixée en $x = 0.5$. On impose une vitesse nulle à droite de la discontinuité. On observe pour un temps $t = 0.1s$ l'apparition d'une "bulle" au centre du domaine. Lorsque la vitesse est initialement faible à gauche de la discontinuité, on observe que les valeurs de fractions coïncident au sein de la bulle. On se place dans le cadre de la Proposition 4.2-(ii) : les fractions vérifient $\mathbf{r}(t, x) = \bar{\mathbf{r}}(x)$ et la bulle contient un état de vapeur métastable. Lorsque la compression est suffisamment importante, on observe que les valeurs de fractions sont différentes au sein de la bulle. Elle correspondent à d'un état à saturation $\mathbf{r}(t, x) = \mathbf{r}^*(x)$ qui mènent à l'égalité des températures et pression, voir Proposition 4.2-(i).

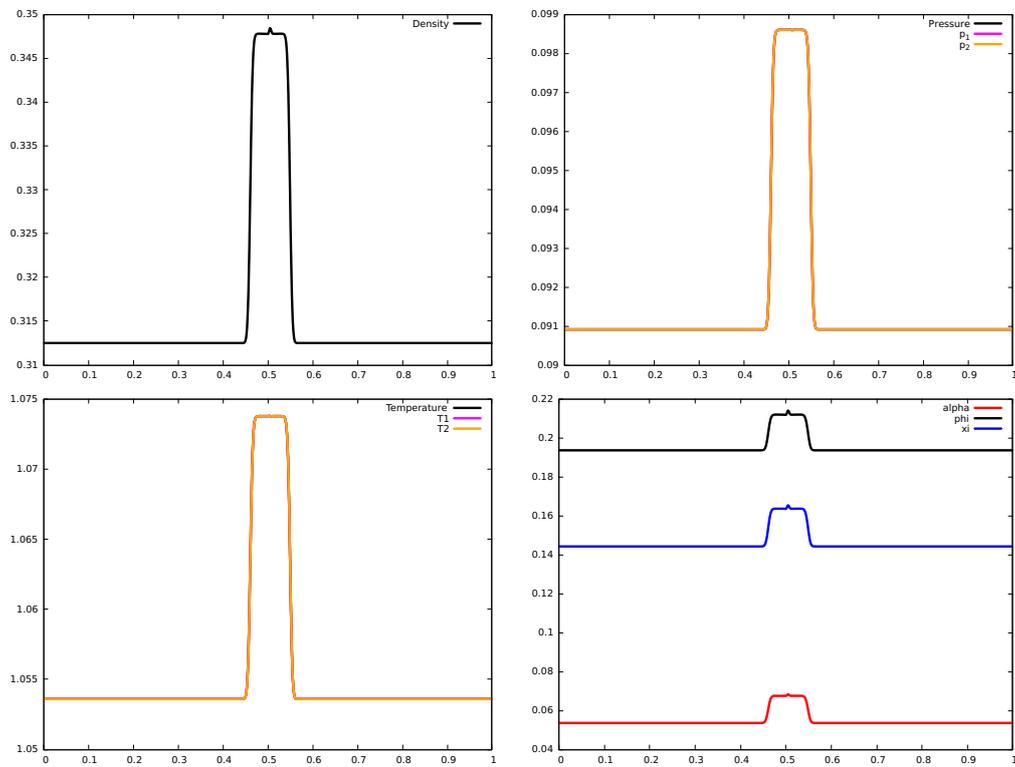


FIGURE 7 – Faible compression d'un état métastable vapeur. De haut en bas : masse volumique, pression, température et fractions en fonction de x .

Remarque 4.2. Il s'avère que le système non-isotherme est capable de capturer des états surcritiques [13], ce qui est un point important pour des applications industrielles. Pour améliorer le modèle, il s'agirait alors de considérer des lois plus physiques, telles que Soave-Redlich-Kwong [Soa72] ou the Peng-Robinson [PR76]. L'approximation numérique devrait également être optimisée puisqu'on se limite à ce jour à une intégration explicite, et donc peu stable, du terme de relaxation. Une intégration semi-implicite ou d'ordre élevé est à privilégier. 

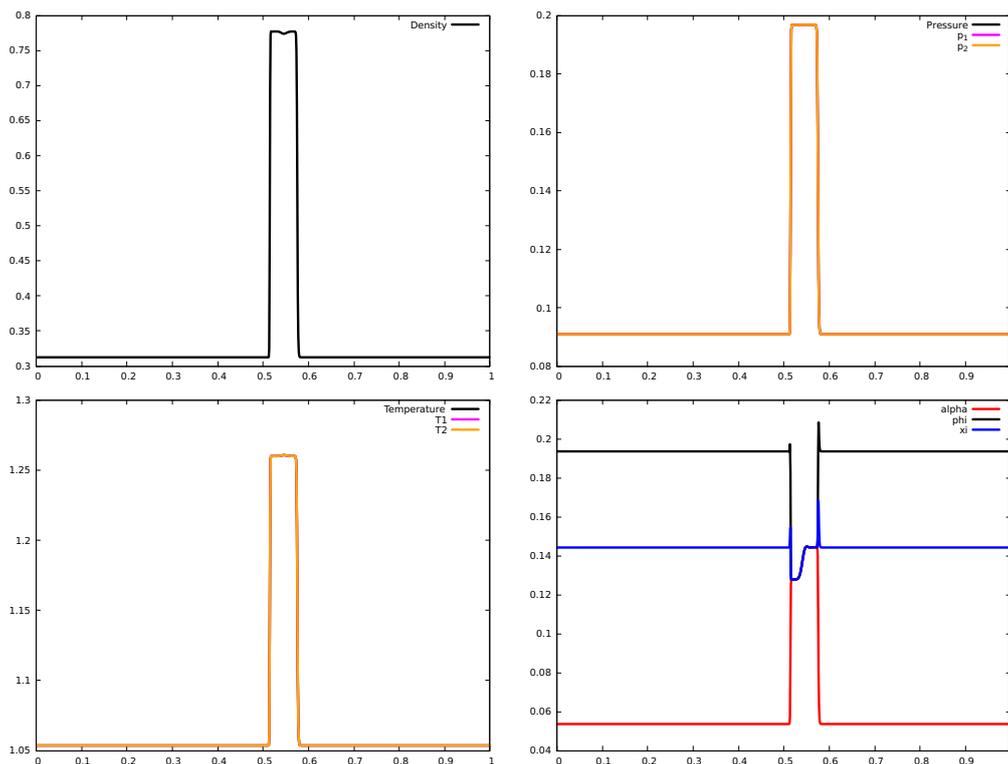


FIGURE 8 – Forte compression d'un état métastable vapeur. De haut en bas : masse volumique, pression, température et fractions en fonction de x .

Deuxième partie

ANALYSE NUMÉRIQUE

ENTROPIE EN ANALYSE NUMÉRIQUE

Nous nous intéressons dans ce chapitre à l'analyse numérique de méthode volumes finis pour des systèmes d'équations aux dérivées partielles munies d'une entropie. Notre marotte est d'adapter au niveau discret des méthodes d'analyse de ces systèmes en exploitant les propriétés de l'entropie.

La première section regroupe des résultats obtenus sur l'approximation du p -système avec friction. Si l'on note λ le paramètre d'échelle, il est aisé de démontrer formellement que les solutions du p -système avec friction convergent vers les solutions de l'équation des milieux poreux à la limite $\lambda \rightarrow 0$. L'étude de l'asymptotique et de la structure entropique de ces systèmes est notamment étudiée dans [BHN07]. Il est possible de démontrer la convergence et d'exhiber des vitesses de convergence sur domaine infini [LT13] ou borné [GS07] en utilisant une entropie dite relative. Du point de vue numérique, il est nécessaire de développer des schémas numériques robustes uniformément en λ . On qualifie ce type de schémas de *schémas préservant l'asymptotique*, notion introduite par S. Jin [Jin12].

Dans [3] nous analysons un schéma semi-discret en temps et démontrons une vitesse de convergence en $\mathcal{O}(\lambda^4)$, vitesse établie dans le cadre continu par Lattanzio et Tzavaras [LT13]. L'outil clef est l'entropie relative qui se comporte comme une norme L^2 de la différence d'une solution du p -système et d'une solution de l'équation des milieux poreux. Nous construisons une identité d'entropie relative discrète dont nous parvenons à contrôler les résidus liés à la diffusion numérique.

Le cas de schémas totalement discrets fait l'objet des paragraphes suivants. Dans [6] nous proposons un schéma préservant l'asymptotique diffusive pour le p -système. Nous analysons dans [22, 23] la convergence de ce schéma sur domaine borné. À nouveau, l'entropie relative est au cœur des démonstrations, permettant d'estimer l'écart de la solution approchée du p -système à une solution approchée de problème parabolique limite satisfaisant des conditions aux bords appropriées.

Dans un cadre plus général, nous avons à nouveau utilisé l'entropie relative pour étudier la convergence d'un schéma volumes finis, explicite en temps, vers la solution forte d'un problème hyperbolique [8]. Ce travail, basé sur le formalisme théorique [Daf10, Chapitre 5, Section 5.3], étend une analyse établie dans [RJ05]. Un résultat clef est une estimation de type BV -faible qui quantifie la dissipation numérique.

Pour finir nous présentons le développement et l'analyse d'un schéma volumes finis implicite pour un modèle de transport d'énergie [5, 4]. La construction du schéma s'appuie sur la symétrisation du système par les variables entropiques et nous permet de construire deux schémas équivalents.

En jouant avec l'équivalence des schémas, on parvient à établir la dissipation en temps de l'entropie discrète. Des estimations supplémentaires nous permettent de démontrer l'existence d'une solution au schéma par un argument de degré topologique, et par suite l'existence d'une solution au problème continu.

5.1 ASYMPTOTIQUE DIFFUSIVE POUR LE p -SYSTÈME

Le p -système avec friction admet en temps long une asymptotique diffusive. Il s'agit d'un système hyperbolique de relaxation qui décrit un fluide de volume spécifique τ , évoluant à la vitesse u , et soumis à une force de friction de paramètre $\sigma > 0$:

$$\begin{cases} \partial_t \tau - \partial_x v = 0, & (t, x) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}, \\ \partial_t v + \partial_x p(\tau) = -\sigma v. \end{cases} \quad (86)$$

Pour assurer la stabilité du système, la loi de fermeture p du système (86) satisfait les hypothèses suivantes

Hypothèses 3. Soit $\tau_* > 0$ un volume de référence fixé arbitrairement. La loi de pression $p \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}_+^*)$ est telle que

- (i) $p(\tau) > 0$ et $p'(\tau) < 0$,
- (ii) si $\tau \geq \tau_*$ alors il existe c tel que $p(\tau) \geq c > 0$,
- (iii) il existe $\gamma > 0$ tel que $p(\tau) = \tau^{-\gamma} + o(\tau^{-\gamma})$ pour $\tau \rightarrow +\infty$.

Par la suite, on exclut l'apparition du vide en considérant le domaine des états admissibles

$$\Omega = \{w = {}^t(\tau, v); \tau > 0, v \in \mathbb{R}\}.$$

Les solutions faibles du système (86) satisfont l'inégalité d'entropie suivante

$$\partial_t \eta(\tau, v) + \partial_x \psi(\tau, v) \leq -\sigma v^2 \leq 0, \quad (87)$$

où l'entropie est définie par

$$\eta(\tau, v) = \frac{v^2}{2} - P(\tau), \quad (88)$$

associée au flux d'entropie ψ défini par

$$\psi(\tau, u) = u p(\tau). \quad (89)$$

La quantité $-P(\tau)$ désigne l'énergie interne, définie par

$$P(\tau) = \int_{\tau_*}^{\tau} p(s) ds, \quad (90)$$

qui est une fonction convexe de τ d'après les Hypothèses 3-(i). De fait l'entropie η est également une fonction convexe de (τ, v) .

L'étude du comportement en temps long de systèmes hyperboliques remonte aux travaux de Hsiao et Liu [HL92]. Ils considèrent le modèle d'Euler isentropique avec friction dont les solutions w tendent vers les solutions $\bar{w} = (\bar{\tau}, \bar{v})^t$ de l'équation des milieux poreux

$$\begin{cases} \partial_t \bar{\tau} + \frac{1}{\sigma} \partial_{xx} p(\bar{\tau}) = 0, & (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+. \\ \partial_x p(\bar{\tau}) = -\sigma \bar{u}. \end{cases} \quad (91)$$

En manipulant les solutions auto-similaires de l'équation parabolique limite, dans [vDP77, vDP77], les auteurs van Duyn et Peletier parviennent à exhiber un taux de convergence en temps $\|(w - \bar{w})(t)\|_{L^\infty} = O(1)t^{-1/2}$ pour $w \in \Omega$. Le taux de convergence peut être amélioré en utilisant des techniques d'estimations d'énergie, [Nis96, NWY00]. Dans un cadre plus général, des taux de convergence en temps sont obtenus pour des systèmes hyperboliques dissipatifs [BHN07] sous la condition de Kawashima-Shizuta [Kaw87]. Cependant il semble difficile d'adapter ces techniques au cadre discret.

Afin d'étudier le comportement en temps long et un régime de forte friction, il est d'usage de poser le changement d'échelle $t \mapsto t/\lambda > 0$ et $v^\lambda = \lambda u^\lambda$ (on se réfère à [Mei10] pour la justification des changements d'échelles). On se ramène ainsi à l'analyse des solutions $w = (\tau^\lambda, u^\lambda)$ du système

$$\begin{cases} \partial_t \tau^\lambda - \partial_x u^\lambda = 0, \\ \lambda^2 \partial_t u^\lambda + \partial_x p(\tau^\lambda) = -\sigma u^\lambda. \end{cases} \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+, \quad (92)$$

L'entropie associée diffère de (88) puisqu'elle dépend du paramètre d'ordre

$$\eta^\lambda(\tau^\lambda, u^\lambda) = \lambda^2 \frac{(u^\lambda)^2}{2} - P(\tau^\lambda), \quad (93)$$

les solutions faibles de (92) satisfaisant l'inégalité d'entropie suivante

$$\partial_t \eta^\lambda(\tau^\lambda, u^\lambda) + \partial_x \psi(\tau^\lambda, u^\lambda) \leq -\sigma (u^\lambda)^2 \leq 0. \quad (94)$$

D'un point de vue numérique, il s'agit d'utiliser un schéma numérique pour le système (92) préservant l'asymptotique au sens où le schéma doit être stable et consistant avec les solutions du système (92) pour tout $\lambda > 0$, et, à la limite $\lambda \rightarrow 0$, doit converger vers un schéma numérique stable et consistant avec les solutions du modèle parabolique limite (91). Cela signifie, en particulier, que si le schéma pour le modèle (92) est explicite, alors sa contrainte de CFL pour $\lambda > 0$ est de la forme $\Delta t \leq C\Delta x$ et qu'elle doit dégénérer à la limite vers une contrainte de la forme $\Delta t \leq C\Delta x^2$. De nombreuses références traitent de tels schémas, citons à titre d'exemple [Jin99, JPT98, GT02, GT03, FBD11].

Vitesse de convergence d'un schéma semi-discret préservant l'asymptotique diffusive

L'asymptotique en temps long de schémas numériques fait l'objet de nombreux travaux. Dans le cadre de schémas volumes finis pour des problèmes hyperboliques, on peut citer par exemple [JPT98, BLT13, CGK13, BDF12a, BT16]. Dans [3] nous avons estimé la vitesse de convergence de schémas volumes finis pour le p -système (92). Notre analyse s'appuie sur les travaux de Lattanzio et Tzavaras [LT13] qui déterminent une vitesse de convergence polynomiale en λ des solutions $(\tau^\lambda, u^\lambda)$ de (92) vers les solutions $(\bar{\tau}, \bar{u})$ de (91). La démonstration repose sur l'étude de l'entropie relative du système (92). L'entropie relative est définie comme un développement de Taylor de l'entropie (93) par rapport à un état $(\bar{\tau}, \bar{u})$, solution de (91) (on omet l'exposant λ des solutions w du p -système (92) pour plus de lisibilité) :

$$\begin{aligned} \eta^\lambda(\tau, u | \bar{\tau}, \bar{u}) &= \eta^\lambda(\tau, u) - \eta^\lambda(\bar{\tau}, \bar{u}) - \nabla \eta^\lambda(\bar{\tau}, \bar{u}) \cdot \begin{pmatrix} \tau - \bar{\tau} \\ u - \bar{u} \end{pmatrix}, \\ &= \frac{\lambda^2}{2} (u - \bar{u})^2 - P(\tau | \bar{\tau}), \end{aligned} \quad (95)$$

où

$$P(\tau | \bar{\tau}) = P(\tau) - P(\bar{\tau}) - p(\bar{\tau})(\tau - \bar{\tau}). \quad (96)$$

Par convexité de l'entropie η , l'entropie relative $\eta(w|\bar{w})$ se comporte comme $\|w - \bar{w}\|_{L^2(\mathbb{R})}$, ce qui en fait un outil approprié pour étudier la convergence. Son évolution est régie par une équation aux dérivées partielles dont Lattanzio et Tzavaras [LT13] déduisent un taux de convergence sur l'estimateur d'erreur positif

$$\phi^\lambda(t) = \int_{\mathbb{R}} \eta^\lambda(\tau^\lambda, u^\lambda | \bar{\tau}, \bar{u}) dx. \quad (97)$$

Considérant une solution régulière $(\bar{\tau}, \bar{u})$ du modèle parabolique (91) et une solution forte entropique du p -système (92), sous certaines hypothèses, dont les Hypothèses 3 et des hypothèses de régularité sur les dérivées de la pression $p(\bar{\tau})$, on montre qu'il existe une constante C , dépendant de T , p et $\bar{\tau}$, telle que

$$\phi^\lambda(t) \leq C(\phi^\lambda(0) + \lambda^4), \quad t \in [0, T].$$

De plus si $\phi^\lambda(0) \rightarrow 0$ quand $\lambda \rightarrow 0$, alors

$$\sup_{t \in [0, T]} \phi^\lambda(t) \rightarrow 0, \quad \text{quand } \lambda \rightarrow 0.$$

La convergence s'opère en λ^4 . La démonstration repose sur l'intégration en espace et en temps de l'identité vérifiée par l'entropie relative, dont les termes sont contrôlés de sorte à appliquer un lemme de Grönwall pour obtenir l'estimation finale. Les outils techniques (intégration en temps et espace, inégalités de Young et de Cauchy-Schwarz...) s'utilisent facilement au niveau discret. Il s'agit donc d'appliquer les mêmes étapes de démonstration à un schéma volumes finis préservant l'asymptotique pour le p -système (92). On se limite dans [3] à une discrétisation en espace, le schéma étant continu en temps, le cas complètement discrétisé étant traité dans [Bul19, BBBC19]. Le problème est posé en domaine infini, pour lequel on considère un maillage uniforme, de pas Δx , définissant les mailles $(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})_{i \in \mathbb{Z}}$, centrées en $x_i = i\Delta x$, pour $i \in \mathbb{Z}$. Sur chaque maille, les solutions semi-discrétisées du modèle (92) sont des fonctions du temps constantes par maille $w_i(t) = (\tau_i(t), u_i(t))$. La discrétisation en espace est réalisée par un solveur de Riemann approché de type HLL [HLVL83a] :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tau_i &= \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1} - u_{i-1}) + \frac{\mu}{2\Delta x} (\tau_{i+1} - 2\tau_i + \tau_{i-1}), \\ \frac{d}{dt} u_i &= \frac{\mu}{2\Delta x} (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) - \frac{1}{2\lambda^2 \Delta x} (p(\tau_{i+1}) - p(\tau_{i-1})) - \frac{\sigma}{\lambda^2} u_i, \end{aligned} \quad (98)$$

où $\mu = \sup_{t \in (0, T)} \max_{i \in \mathbb{Z}} (\sqrt{-p'(\bar{\tau}_i)})$.

Lorsque $\lambda \rightarrow 0$, le schéma limite obtenu est consistant avec l'équation des milieux poreux (91) :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \bar{\tau}_i &= \frac{1}{2\Delta x} (\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_{i-1}) + \frac{\mu}{2\Delta x} (\bar{\tau}_{i+1} - 2\bar{\tau}_i + \bar{\tau}_{i-1}), \\ \sigma \bar{u}_i &= -\frac{p(\bar{\tau}_{i+1}) - p(\bar{\tau}_{i-1})}{2\Delta x} \end{aligned} \quad (99)$$

Il s'agit tout d'abord de donner une définition discrète de l'entropie relative (95)

$$\begin{aligned} \eta_i^\lambda(t) &= \eta^\lambda(\tau_i, u_i | \bar{\tau}_i, \bar{u}_i)(t) \\ &= \frac{\lambda^2}{2} (u_i(t) - \bar{u}_i(t))^2 - P(\tau_i(t) | \bar{\tau}_i(t)). \end{aligned} \quad (100)$$

En manipulant les schémas (98) et (99), on obtient l'identité discrète d'entropie relative.

Proposition 5.1 (Inégalité d'entropie relative, [3]). Soit $(\bar{\tau}_i, \bar{u}_i)_{i \in \mathbb{Z}}$ issu d'une solution régulière du schéma pour le modèle limite (99) et soit $(\tau_i, u_i)_{i \in \mathbb{Z}}$ une solution du schéma pour le p -système (98). L'entropie relative η_i^λ , définie par (100), vérifie l'équation d'évolution suivante :

$$\begin{aligned} \frac{d\eta_i^\lambda}{dt} + \frac{1}{\Delta x}(\psi_{i+1/2} - \psi_{i-1/2}) &= -\sigma(u_i - \bar{u}_i)^2 \\ &+ \frac{1}{\sigma} \frac{p(\bar{\tau}_{i+2}) - 2p(\bar{\tau}_i) + p(\bar{\tau}_{i-2})}{(2\Delta x)^2} p(\tau_i | \bar{\tau}_i) \\ &+ \frac{\lambda^2}{\sigma} (u_i - \bar{u}_i) \frac{d}{dt} \left(\frac{p(\bar{\tau}_{i+1}) - p(\bar{\tau}_{i-1})}{2\Delta x} \right) \\ &+ R_i^u + R_i^\tau, \end{aligned} \quad (101)$$

où $\psi_{i+1/2}$ correspond à une approximation du flux d'entropie relative à l'interface $x_{i+1/2}$

$$\psi_{i+1/2} = \frac{1}{2}(u_i - \bar{u}_i)(p(\tau_{i+1}) - \bar{p}(\bar{\tau}_{i+1})) + \frac{1}{2}(u_{i+1} - \bar{u}_{i+1})(p(\tau_i) - p(\bar{\tau}_i)),$$

et R_i^u et R_i^τ sont des résidus numériques sur la vitesse et le volume spécifique.

Il s'agit d'une adaptation discrète de l'identité d'entropie relative à laquelle s'ajoutent les termes résiduels R_i^u et R_i^τ liés à la viscosité numérique. Comme dans le cas continu, on intègre cette identité de sorte à construire une inégalité vérifiée par l'estimateur $\phi^\lambda(t)$ défini comme une intégrale discrète de l'entropie relative

$$\phi^\lambda(t) = \sum_{i \in \mathbb{Z}} \Delta x \eta_i^\lambda(t). \quad (102)$$

Nous démontrons un contrôle des termes de façon similaire au cas continu. Pour les termes de viscosité numérique, on obtient les estimations faisant intervenir des normes discrètes de la solution régulière du modèle parabolique (99), notées $\|D_{xy} \cdot\|_{L^p(\mathbb{R} \times [0, \infty))}$ ou $\|\tilde{D}_{xy} \cdot\|_{L^p(\mathbb{R} \times [0, \infty))}$.

Proposition 5.2 ([3]). Soit $K, K' < +\infty$ deux constantes positives. Supposons $\|D_{xx}\bar{u}\|_{L^2(\mathbb{R} \times [0, \infty))}^2 \leq K$, alors pour tout $\theta \in \mathbb{R}_+^*$, on a

$$\int_0^t \sum_{i \in \mathbb{Z}} \Delta x R_i^u ds \leq \frac{\mu\theta}{2} \int_0^t \sum_{i \in \mathbb{Z}} \Delta x (u_i - \bar{u}_i)^2 ds + \frac{\lambda^4 \mu \Delta x}{2\theta} \|D_{xx}\bar{u}\|_{L^2(\mathbb{R} \times [0, \infty))}^2. \quad (103)$$

De plus si $\|D_{xx}\bar{\tau}\|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty))} \leq K'$ et $\|D_x\bar{\tau}\|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty))} < K'$, alors il existe une constante positive C telle que

$$\int_0^t \sum_{i \in \mathbb{Z}} \Delta x R_i^\tau ds \leq \mu \left(C \Delta x \|D_{xx}\bar{\tau}\|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty))} + C \|D_x\bar{\tau}\|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty))} \right) \int_0^t \phi^\lambda(s) ds. \quad (104)$$

Chacun de ces termes peut être majoré par l'estimateur, après application de formules de Young et de Cauchy-Schwarz. Le théorème de convergence s'obtient in fine par une application du lemme de Grönwall discret.

Théorème 5.3 ([3]). Soit $\bar{w}_i(t) = (\bar{\tau}_i(t), \bar{u}_i(t))_{i \in \mathbb{Z}}$ issu d'une solution régulière du schéma limite (99) définie sur le domaine $\mathbb{R} \times [0, T)$. On suppose qu'il existe $K < +\infty$ tel que

$$\begin{aligned} \|\tilde{D}_{tx}p(\bar{\tau})\|_{L^2(\mathbb{R} \times [0, \infty))} &\leq K, & \|\tilde{D}_{xx}p(\bar{\tau})\|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty))} &\leq K \\ \|D_{xx}\bar{\tau}\|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty))} &\leq K, & \|D_x\bar{\tau}\|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, \infty))} &\leq K, & \|D_{xx}\bar{u}\|_{L^2(\mathbb{R} \times [0, \infty))} &\leq K. \end{aligned}$$

Soit $w_i(t) = (\tau_i(t), u_i(t))_{i \in \mathbb{Z}}$ une solution du schéma pour le p -système (98) telle que $\phi^\lambda(0) < +\infty$. On a alors

$$\phi^\lambda(t) \leq B(\phi^\lambda(0) + \lambda^4), \quad t \in [0, T], \quad (105)$$

où B est une constante positive, dépendant de T , de la loi de pression p et de la solution \bar{w}_i . De plus si $\phi^\lambda(0) \rightarrow 0$ quand $\lambda \rightarrow 0$, alors $\sup_{t \in [0, T]} \phi^\lambda(t) \rightarrow 0$ quand $\lambda \rightarrow 0$.

Les hypothèses de régularité sur la pression p sont exactement les mêmes que celles requises par Lattanzio et Tzavaras [LT13]. Les hypothèses supplémentaires sont nécessaires pour le contrôle des termes de viscosité numériques mais sont peu restrictifs puisqu'ils requièrent une régularité attendue sur la solution du problème parabolique (91). La vitesse de convergence obtenue est identique à la vitesse théorique. Cette estimation semble optimale. À titre d'exemple, le schéma semi-implicite proposé dans [JPT98] satisfait cette estimation. La convergence en λ^4 est illustrée en Figure 9 pour une donnée initiale $\tau_0(x)$ discontinue (en haut) et continue (en bas). La donnée initiale de la vitesse $u_0(x)$ est définie de façon compatible avec la limite diffusive pour éviter toute couche limite.

Remarque 5.1. Dans [LT13], la méthode d'entropie relative est appliquée à d'autres modèles admettant une limite diffusive. Cependant la méthode n'est pas formalisée pour un système général, comme c'est le cas pour l'asymptotique hyperbolique [Tza05]. Pourtant la structure de relaxation est définie de façon générale dans [BHN07, BLT13]. En établissant le pendant discret de ce formalisme, et donc une structure générale de schémas volumes finis préservant l'asymptotique, on pourrait exploiter la méthode d'entropie relative pour étudier la convergence de tels schémas. 

Élaboration d'un schéma préservant l'asymptotique

Lorsque seul le comportement en temps long est étudié, le changement d'échelle $t \mapsto t/\lambda$ appliqué au p -système initial (86) donne

$$\begin{cases} \lambda \partial_t \tau - \partial_x u = 0, \\ \lambda \partial_t u + \partial_x p(\tau) = -\frac{\sigma}{\lambda} u. \end{cases} \quad (106)$$

Lorsque λ tend vers zéro, le système limite associé est encore l'équation des milieux poreux mais la vitesse limite \bar{u} est nulle :

$$\begin{cases} \lambda \partial_t \bar{\tau} + \frac{1}{\sigma} \partial_{xx} p(\bar{\tau}) = 0, \\ \bar{u} = 0. \end{cases} \quad (107)$$

Diverses approches permettent de construire un schéma préservant l'asymptotique diffusive du p -système (106). Dans [BT11, CCG⁺10] les schémas asymptotiquement préservants construits sont des schémas de relaxation. L'approche utilisée dans [6] combine cette approche à celle proposée dans [GL96b, GL96a] pour l'élaboration d'un schéma équilibre permettant de traiter le terme source par un solveur de Riemann approché. On obtient ainsi le même schéma que celui proposé dans [BT11] et [CCG⁺10] dans le cas du système linéaire de Goldstein-Taylor. Pour $i \in \mathbb{Z}$ et $n \in \mathbb{N}$, le schéma s'écrit

$$\begin{aligned} \tau_i^{n+1} &= \tau_i^n - \frac{\Delta t}{\lambda L_\lambda \Delta x} \left[\frac{u_{i-1}^n - u_{i+1}^n}{2} + \frac{1}{2a} (-2p(\tau_i^n) + p(\tau_{i+1}^n) + p(\tau_{i-1}^n)) \right], \\ u_i^{n+1} &= u_i^n - \frac{\Delta t}{\lambda L_\lambda \Delta x} \left[\frac{p(\tau_{i+1}^n) - p(\tau_{i-1}^n)}{2} + \frac{a}{2} (2u_i^n - u_{i-1}^n - u_{i+1}^n) \right] - \frac{\sigma \Delta t}{\lambda^2 L_\lambda} u_i^n, \end{aligned} \quad (108)$$

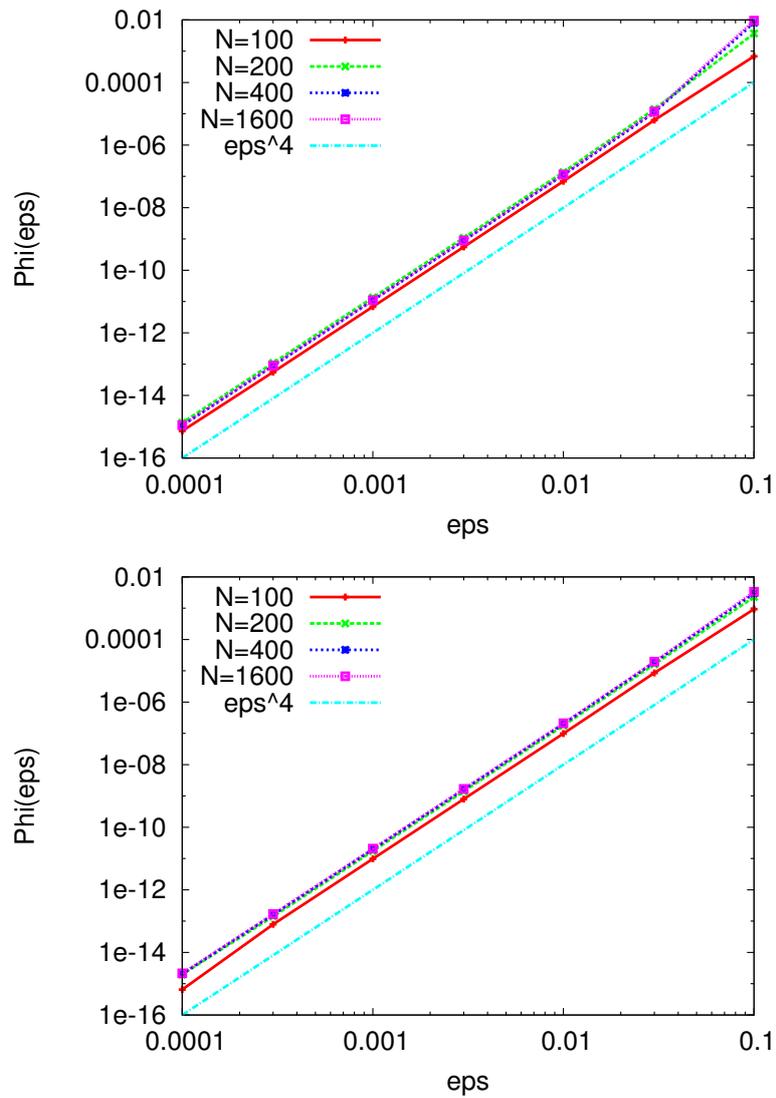


FIGURE 9 – Convergence en λ un schéma semi-implicite préservant l'asymptotique diffusive du p -système (92). Donnée initiale $\tau_0(x)$ discontinue (en haut) et continue (en bas). En fonction du nombre de mailles N , on observe une convergence polynomiale en λ^4 .

où $L_\lambda = 1 + \frac{\sigma\Delta x}{2\lambda a}$. Le paramètre $a > 0$ est fixé par la condition de Whitham [Bou04b] qui sera explicitée ultérieurement. La non linéarité du schéma rend difficile l'étude de sa stabilité. Cependant on peut illustrer rapidement que sa contrainte de stabilité est très restrictive. Supposons que $\forall i \in \mathbb{Z}$, $\tau_i^n = \underline{\tau}$ et $u_i^n = \underline{u}$, où $\underline{\tau}$ et \underline{u} sont deux constantes positives. Alors le schéma (108) s'écrit

$$\forall i \in \mathbb{Z}, \quad \tau_i^{n+1} = \underline{\tau}, \quad u_i^{n+1} = \left(1 - \frac{\sigma\Delta t}{\lambda^2 L_\lambda}\right) \underline{u}.$$

Cela correspond à la discrétisation explicite de l'équation différentielle

$$\begin{cases} \tau'(t) = 0, \\ u'(t) = -\frac{\sigma}{\lambda} u. \end{cases}$$

De fait, une condition nécessaire de stabilité L^2 est $\frac{\sigma\Delta t}{2\lambda^2 L_\lambda} \leq 1$. On observe ainsi que $\Delta t \rightarrow 0$ quand $\lambda \rightarrow 0$ de sorte que le schéma (108) ne préserve pas l'asymptotique. Il s'avère qu'une simple implication du terme source permet de palier le problème. On obtient le schéma

$$\begin{aligned} \tau_i^{n+1} &= \tau_i^n - \frac{\Delta t}{\lambda L_\lambda \Delta x} \left[\frac{u_{i-1}^n - u_{i+1}^n}{2} + \frac{1}{2a} (-2p(\tau_i^n) + p(\tau_{i+1}^n) + p(\tau_{i-1}^n)) \right], \\ u_i^{n+1} &= u_i^n - \frac{\Delta t}{\lambda L_\lambda \Delta x} \left[\frac{p(\tau_{i+1}^n) - p(\tau_{i-1}^n)}{2} + \frac{a}{2} (2u_i^n - u_{i-1}^n - u_{i+1}^n) \right] - \frac{\sigma\Delta t}{\lambda^2 L_\lambda} u_i^{n+1}. \end{aligned} \quad (109)$$

L'étude de la stabilité non linéaire, au sens de la décroissance de l'entropie discrète, permet de conclure que la condition de stabilité du schéma ne dépend pas de λ de sorte que le schéma préserve l'asymptotique.

Proposition 5.4 ([6]). *Sous la condition de Whitham*

$$a^2 \geq 2 \max_{n \in \mathbb{N}} \max_{i \in \mathbb{Z}} \left(-P'(\tau_i^n), -P'(\tau_{i+1/2}^{n,\pm}) \right), \quad (110)$$

où les quantités $\tau_{i+1/2}^{n,\pm}$ sont définis par

$$\tau_{i+1/2}^{n,-} = \tau_i^n + \frac{1}{a} (u_{i+1/2}^n - u_i^n), \quad \tau_{i+1/2}^{n,+} = \tau_{i+1}^n + \frac{1}{a} (u_{i+1}^n - u_{i+1/2}^n),$$

et la condition CFL

$$\frac{2a\Delta t}{\Delta x \left(\lambda + \frac{\sigma\Delta x}{2a} \right)} \leq 1, \quad (111)$$

la solution $(\tau_i^{n+1}, u_i^{n+1})_{i \in \mathbb{Z}}$ du schéma (109) assure la décroissance de l'entropie relative $\eta^\lambda(\tau, u | \tau_*, 0)$

$$\sum_{i \in \mathbb{Z}} \eta^\lambda(\tau_i^{n+1}, u_i^{n+1} | \tau_*, 0) \Delta x \leq \sum_{i \in \mathbb{Z}} \eta^\lambda(\tau_i^n, u_i^n | \tau_*, 0) \Delta x. \quad (112)$$

On remarque que la condition (111) est satisfaite pour tout $\lambda > 0$ dès lors que

$$\Delta t \leq \frac{\sigma\Delta x^2}{4a^2}. \quad (113)$$

On obtient à la limite $\lambda \rightarrow 0$ un schéma consistant avec l'équation des milieux poreux (107).

Proposition 5.5 ([6]). *Sous la condition de Whitham (110), la condition CFL (113), pour tout $i \in \mathbb{Z}$, la limite du schéma (109) quand $\lambda \rightarrow 0$ est*

$$\begin{aligned}\bar{\tau}_i^{n+1} &= \bar{\tau}_i^n - \frac{\Delta t}{\sigma \Delta x^2} [-2p(\bar{\tau}_i^n) + p(\bar{\tau}_{i-1}^n) + p(\bar{\tau}_{i+1}^n)], & \forall n \geq 1, \\ \bar{\tau}_i^1 &= \tau_i^0 - \frac{\Delta t}{\sigma \Delta x^2} [-2p(\tau_i^0) + p(\tau_{i-1}^0) + p(\tau_{i+1}^0) + a(u_{i-1}^0 - u_{i+1}^0)].\end{aligned}\tag{114}$$

Il est possible de montrer que le schéma limite (114) converge vers l'unique solution faible de (107) en démontrant sa stabilité L^1 . Il s'en suit que le schéma (109) préserve l'asymptotique diffusive sur domaine infini. Ce travail étant donc au cadre non linéaire l'étude de Gosse et Toscani [GT02].

Convergence du schéma préservant l'asymptotique (109) sur domaine borné

Dans [6], la question du couplage entre les modèles (106) et (107) au travers d'une interface fixe est abordée. Le schéma (109), étant uniformément stable et consistant en λ , est utilisé de part et d'autre de l'interface de couplage pour résoudre les modèles (106) et (107). A l'interface, des conditions de couplage sont imposées. Nous avons examiné diverses conditions : conditions de Dirichlet sur les quantités transmises et résolution d'un demi-problème de Riemann à l'interface de couplage. En fonction de la valeur de λ , une couche limite apparaît, comme on peut le voir sur la Figure 10. Une façon de corriger cette couche limite est de comprendre comment le schéma (109) se comporte sur domaine borné, et sous quelles conditions aux bords du domaine, il préserve l'asymptotique diffusive. C'est l'objet des travaux [22, 23].

Dans le cas continu, Golse et Salvarani [GS07] ont étudié la convergence sur domaine borné du système de Carleman vers la solution de l'équation de la chaleur linéaire. À réécriture près, le système de Carleman correspond système hyperbolique linéaire de Goldstein-Taylor, pour lequel Nicolas Therme et moi avons adapté le travail de Golse et Salvarani au cadre discret [22], dans le cadre de son post-doctorat financé par l'ANR Achylles¹.

Nous avons étendu l'analyse et l'analyse numérique au cas non linéaire en considérant le p -système (106) posé sur le domaine espace-temps $\Omega = (0, 1) \times (0, T)$. Nous appellerons par la suite conditions mixtes les conditions initiales et conditions aux bords associées au modèle (106). Celles considérées dans [GS07] sont les suivantes

$$\begin{cases} \tau(0, x) = \tau_0(x) \in L^\infty(0, 1), & u(0, x) = u_0(x) \in L^\infty(0, 1), \\ (p(\tau) + au)(t, 0) = \varphi^-(t), & (p(\tau) - au)(t, 1) = \varphi^+(t), & t > 0, \\ \varphi^\pm \in W^{1,\infty}([0, T]), & \varphi^\pm(t) > 0, & t > 0. \end{cases}\tag{115}$$

Outre les Hypothèses 3, on suppose qu'il existe un volume τ^* et deux constantes m et M , tels que $\forall \tau \in [\tau_*, \tau^*]$

$$m \leq |p'(\tau)| \leq M.\tag{116}$$

A la limite $\lambda \rightarrow 0$, l'équation des milieux poreux est munie des conditions mixtes suivantes

$$\begin{cases} \tau(0, x) = \tau_0(x), & x \in (0, 1), \\ p(\bar{\tau})(t, 0) = \varphi^-(t), & p(\bar{\tau})(t, 1) = \varphi^+(t), & t \in (0, T). \end{cases}\tag{117}$$

1. L'ANR ACHyLLES (ANR-14-CE25-0001-03), portée par Rodolphe Turpault entre 2014 et 2018, portait sur l'étude de schémas numériques préservant l'asymptotique en temps long pour des systèmes hyperboliques de lois de conservation avec termes sources.

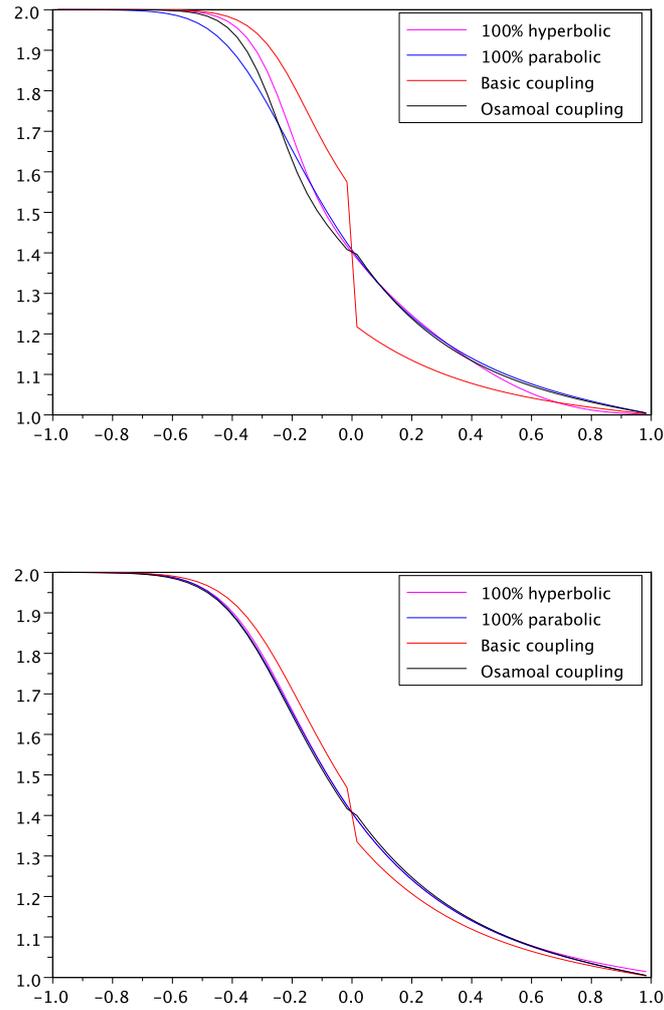


FIGURE 10 – Profil du volume τ pour $\lambda = 0.4$ (haut) et $\lambda = 0.1$ (bas). L'interface, placée en $x = 0$, couple le modèle hyperbolique (à gauche de l'interface) et parabolique (à droite de l'interface)

L'analyse de convergence repose à nouveau sur un méthode d'entropie relative. Cette fois, l'entropie relative est construite par rapport à une solution du problème parabolique limite, appelée profil, satisfaisant les conditions limites (117). Un exemple de profil est

$$\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} (x, t) = \begin{pmatrix} p^{-1}(\varphi^+(t))x + p^{-1}(\varphi^-(t))(1-x) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \forall x \in (0, 1), \quad (118)$$

l'entropie relative associée étant

$$\begin{aligned} \eta^\lambda(\tau, u|f, 0) &= \eta^\lambda(\tau, u) - \eta^\lambda(f, 0) - \nabla \eta^\lambda(f, 0) \cdot \begin{pmatrix} \tau - f \\ u - 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{(u\lambda)^2}{2} - P(\tau|f), \end{aligned} \quad (119)$$

où $P(\tau|f)$ est défini en (96). À nouveau, la convexité de l'entropie η^λ et les hypothèses 3 et (116) assure que $\eta^\lambda(\tau, u|f, 0) \geq \frac{u^2}{2} + \frac{K}{2}(\tau - f)^2$, si bien qu'obtenir des estimations d'entropie relative permet de contrôler la norme $\|u\|_{L^2(0,1)} + \|\tau - f\|_{L^2(0,1)}$. L'évolution de l'entropie relative est donnée par le résultat suivant.

Proposition 5.6 (Identité d'entropie relative, [GS07]). *Soit (τ, u) une solution de (106) et $(f, 0)$ donné par (118). L'entropie relative $\eta^\lambda(\tau, u|f, 0)$ satisfait*

$$\frac{d}{dt} \int_0^1 \eta^\lambda(\tau, u|f, 0) dx + \frac{\sigma}{\lambda^2} \int_0^1 (u)^2 dx \leq \int_0^1 (\tau - f) \partial_t p(f) dx - \int_0^1 \frac{u}{2} \partial_x p(f) dx. \quad (120)$$

Les estimations sont obtenues sur l'estimateur

$$\Gamma(t) = \int_0^1 \frac{(u)^2}{2} + \frac{m}{2} (\tau - f)^2 dx. \quad (121)$$

Proposition 5.7 ([GS07]). *Soit $(\tau^\lambda, u^\lambda)$ une solution du problème (106) pour les conditions (115). Soit (f, g) un profil donné par (118). Alors*

$$\Gamma(t) + \frac{\sigma}{\lambda^2} \int_0^t \int_0^1 (u^\lambda)^2 dx dt \leq (\Gamma(0) + At) e^t, \quad (122)$$

où la constante A dépend de la régularité des dérivées en espace et en temps de la pression $p(f)$.

Dans le cas linéaire continu, cette estimation permet d'établir la convergence faible quand $\lambda \rightarrow 0$ des solutions du système de Carleman vers les solutions de l'équation de la chaleur linéaire. D'autres estimations, obtenues par compacité par compensation, sont nécessaires pour établir la convergence forte. Démontrer la convergence au niveau discret ne requiert pas de telles estimations puisque l'on tire partie de la dimension finie du problème discret.

On considère désormais L mailles sur le domaine $[0, 1]$ et N itérations en temps sur l'intervalle $[0, T]$. Afin d'obtenir l'identité discrète d'entropie relative, nous proposons une reformulation du le schéma (109) en introduisant les opérateurs discrets suivants

$$\partial_x^- \alpha_i^n = \frac{\alpha_i^n - \alpha_{i-1}^n}{\Delta x}, \quad \partial_x^+ \alpha_i^n = \frac{\alpha_{i+1}^n - \alpha_i^n}{\Delta x}, \quad \partial_t \alpha_i^n = \frac{\alpha_i^{n+1} - \alpha_i^n}{\Delta t}. \quad (123)$$

Ils permettent de symétriser le schéma (109) de la façon suivante

$$\begin{aligned} \partial_t \tau_i^n + \frac{1}{2a\lambda L_\lambda} (\partial_x^+ (p(\tau_i^n) - au_i^n) - \partial_x^- (p(\tau_i^n) + au_i^n)) &= 0, \\ \partial_t u_i^n + \frac{1}{2\lambda L_\lambda} (\partial_x^+ (p(\tau_i^n) - au_i^n) + \partial_x^- (p(\tau_i^n) + au_i^n)) + \frac{\sigma}{\lambda^2 L_\lambda} u_i^{n+1} &= 0. \end{aligned} \quad (124)$$

L'entropie relative discrète correspond à une discrétisation directe de (119) et s'écrit $\eta_i^{\lambda,n} = \frac{(u_i^n)^2}{2} - P(\tau_i^n | f_i^n)$, où le profil discret f_i^n est défini par

$$f_i^n = (1 - i\Delta x)p^{-1}(\varphi^-(t^n)) + (i\Delta x)p^{-1}(\varphi^+(t^n)). \quad (125)$$

Proposition 5.8 (Identité d'entropie relative discrète, [23]). *L'entropie relative discrète $\eta_i^{\lambda,n}$ satisfait l'identité*

$$\begin{aligned} & \delta_t \eta_i^{\lambda,n} + \delta_x \Psi_i^n + \frac{\sigma}{\lambda^2 L_\lambda} (u_i^{n+1})^2 + T_i^n \\ &= (\tau_i^n - f_i^n) \delta_t p(f_i^n) + \frac{1}{2a\lambda L_\lambda} (p(\tau_i^n) - p(f_i^n)) (\delta_x^+ p(f_i^n) - \delta_x^- p(f_i^n)) \\ & - \frac{1}{2\lambda L_\lambda} u_i^{n+1} (\delta_x^+ p(f_i^n) + \delta_x^- p(f_i^n)) + C_i^n, \end{aligned} \quad (126)$$

où Ψ_i^n désigne le flux d'entropie relative discret et T_i^n et C_i^n sont des termes de restes.

Le reste T_i^n regroupe des termes positifs dus à la diffusion numérique en temps et en espace. Le terme C_i^n contient des termes faisant intervenir les dérivées de la pression $p(f)$. Par des inégalités de Young, on parvient à le borner positivement par la régularité de $p(f)$, la friction σ , la condition de Whitham a et les paramètres de discrétisation Δx et Δt . Ce contrôle repose sur une hypothèse de stabilité modifiée du schéma. On suppose qu'il existe $\delta \in (0, 1)$ tel que

$$\Delta t \leq \left(\frac{1 - \delta}{1 + \delta} \right) \frac{\sigma \Delta x^2}{8a^2}. \quad (127)$$

Par intégration discrète, on construit l'estimateur

$$\Gamma^n = \sum_{i=1}^{L-1} \Delta x \eta_i^{\lambda,n},$$

qui, en utilisant les estimations précédentes, satisfait l'inégalité suivante

$$\delta_t \Gamma^n + \sum_{i=1}^{L-1} \Delta x \delta_x \Psi_i^n + \frac{1}{2\lambda^2 L_\lambda} \sum_{i=1}^{L-1} \Delta x (u_i^{n+1})^2 \leq \Gamma^n + R,$$

le résidu R faisant intervenir la régularité de $p(f)$, la friction σ , la condition de Whitham a et les paramètres de discrétisation Δx et Δt . Le choix des conditions aux bords (115) assure que le terme de flux s'annule. Une intégration en temps discrète et un lemme de Grönwall discret nous amène au résultat suivant.

Théorème 5.9 ([23]). *Sous les hypothèses 1, soit (u_i^n, τ_i^n) , $i = 0, \dots, L$, $n = 0, \dots, N$, la solution du schéma (109) muni des conditions mixtes (117) discrètes. Supposons qu'il existe une constante K telle que $\|\delta_t p(f)\|_{L^\infty((0,1) \times [0,T])} \leq K$ et $\|\delta_{xx} p(f)\|_{L^\infty((0,1) \times [0,T])} \leq K$. Si la condition de stabilité (127) est satisfaite, alors, pour tout $i = 1, \dots, L-1$ et $n = 0, \dots, N-1$, u_i^{n+1} tend vers 0 quand $\lambda \rightarrow 0$ et τ_i^{n+1} tend vers la solution $\bar{\tau}_i^{n+1}$ du schéma limite (114) muni des conditions aux bords*

$$P(\bar{\tau}_0^n) = \varphi^-(t^n), \quad P(\bar{\tau}_L^n) = \varphi^+(t^n). \quad (128)$$

Les résultats numériques présentés en Figure attestent la convergence du schéma sur le domaine $[0, 1]$ pour des conditions aux bords satisfaisant les contraintes (115) et différentes valeurs de λ (notée ε pour l'occasion).

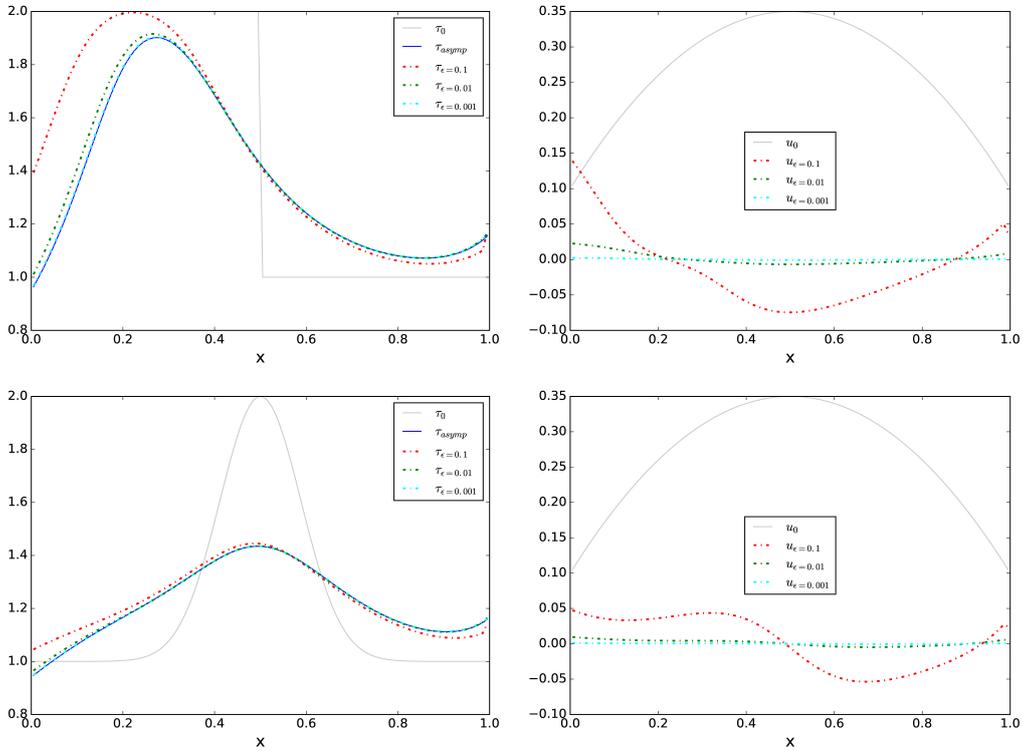


FIGURE 11 – Profil de volume τ (à gauche) et de vitesse u (à droite) en fonction de λ (noté ϵ ici), pour une donnée initiale discontinue (en haut) et continue (en bas).

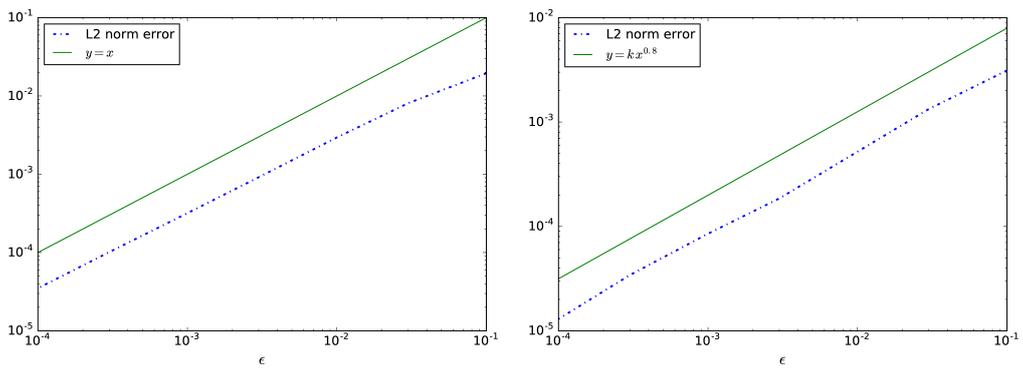


FIGURE 12 – Convergence en λ (noté ϵ ici) pour une donnée initiale discontinue (à gauche) et continue (à droite).

Remarque 5.2. Un point qu'il reste encore à démontrer est la convergence en $O(\lambda)$ observée numériquement, voir Figure 12. Une autre perspective est d'utiliser le schéma et les conditions aux bords appropriées (115) pour réaliser le couplage entre le p -système et l'équation des milieux poreux au travers d'une interface fixe ou mobile. Les résultats préliminaires sont encourageants comme le montre la Figure 13. On y voit le profil du volume spécifique τ obtenu par le couplage des modèles (106) et (107) au travers d'une interface fixée en $x = 0$. La courbe bleue (τ_{para}) correspond à la solution du modèle (107) et la courbe verte (τ_{hyp}) à la solution du p -système (106) sur le domaine $[-1, 1]$. Les courbes hachurées correspondent aux schémas couplés. Les courbes rouge ($\tau_{osamoal}$) et cyan (τ_{basic}) sont obtenues par les stratégies de couplage que nous avons étudiées dans [6]. La courbe hachurée noire ($\tau_{thethis}$) est obtenue en imposant à l'interface les conditions (115) pour le p -système et (117) pour l'équation des milieux poreux. Utiliser les conditions aux bords bien préparées permet manifestement de diminuer la couche limite résultant des couplages proposés dans [6]. 

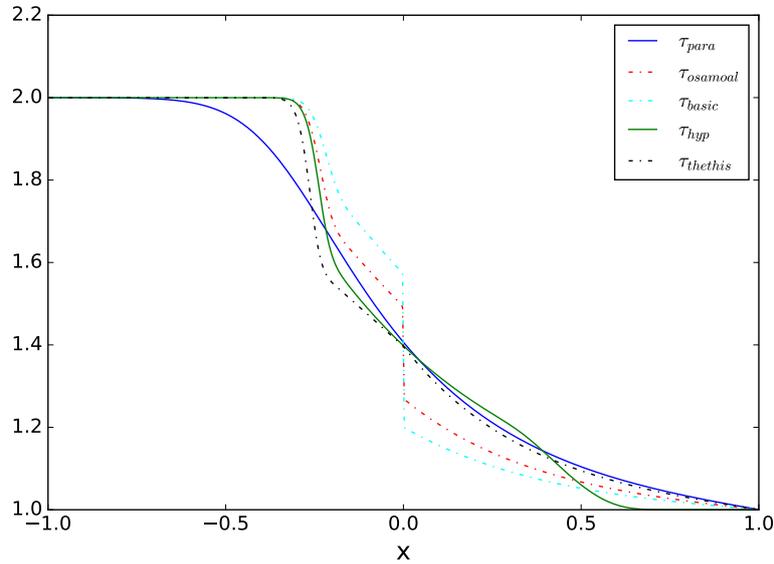


FIGURE 13 – Profil du volume spécifique τ pour le couplage entre le p -système et l'équation des milieux poreux au travers d'une interface fixée en $x = 0$. La courbe bleue (τ_{para}) correspond à la solution du modèle (107) et la courbe verte (τ_{hyp}) à la solution du p -système (106). Les courbes hachurées correspondent aux schémas couplés.

5.2 TECHNIQUES D'ENTROPIE POUR L'ANALYSE NUMÉRIQUE DE SCHÉMAS VOLUMES FINIS

Dans les deux paragraphes suivants, on étudie des schémas volumes finis en adoptant le formalisme présenté dans [EGHoo]. On rappelle les notations ci-dessous, en tentant de les unifier au maximum. On définit le maillage par une famille \mathcal{T} d'ouverts polygonaux notés K ou L et une famille \mathcal{E} d'arêtes, notées σ ou σ_{KL} . On distinguera éventuellement les arêtes de bords qui admettent des conditions de type Dirichlet \mathcal{E}^D et Neumann \mathcal{E}^N . L'ensemble des cellules voisines à une maille K est noté $\mathcal{N}(K)$ et l'ensemble de ses arêtes est \mathcal{E}_K . La normale sortante de la maille K vers la maille L est notée n_{KL} . On désigne par la même notation m la mesure d'une maille $m(K)$ et la mesure d'une arête $m(\sigma)$. On étudie des schémas basés sur une approximation à deux points des flux, qui nécessitent de se restreindre à des maillages admissibles au sens de [EGHoo, Définition 9.1] pour gérer les éventuels termes de gradient. Considérer un maillage régulier signifie que

$$m(K) \leq ah^d \quad \text{et} \quad \sum_{L \in \mathcal{N}(K)} m(\sigma_{KL}) \leq \frac{h^{d-1}}{a}, \quad \forall K \in \mathcal{T},$$

pour $a > 0$ une constante traduisant la régularité du maillage. On note $\tau_\sigma = m(\sigma)/d_\sigma$ le coefficient de transmissibilité, où d_σ est la distance du bord de la maille à son centre.

Pour traiter les termes de gradient, on introduit pour chaque maille $K \in \mathcal{T}$ et chaque arête $\sigma \in \mathcal{E}_K$, la quantité

$$D_{K,\sigma} \mathbf{v} = v_{K,\sigma} - v_K, \quad D_\sigma \mathbf{v} = |D_{K,\sigma} \mathbf{v}|,$$

où $v_{K,\sigma}$ désigne la valeur dans la maille voisine ou bien la valeur au bords.

Estimation d'erreur pour l'approximation de solutions fortes de systèmes hyperboliques

Considérons un problème de Cauchy pour un système de m lois de conservation

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) + \sum_{\alpha=1}^d \partial_\alpha f_\alpha(u)(x, t) = 0, & x \in \mathbb{R}^d, t \in [0, T], T > 0, \\ u(x, 0) = u_0(x) \in \Omega, & \forall x \in \mathbb{R}^d, \end{cases} \quad (129)$$

où Ω est le domaine des état admissibles.

Hypothèses 4. On associe au système (129) est un couple entropie-flux (η, ξ_α) satisfaisant les hypothèses suivantes :

1. il existe deux constantes $\beta_1 \geq \beta_0 > 0$ telles que $\text{spec}(\nabla_u^2 \eta(u)) \subset [\beta_0; \beta_1]$, pour tout $u \in \bar{\Omega}$;
2. le flux d'entropie $\xi \in C^2(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^d)$ satisfait, pour $\alpha \in \{1, \dots, d\}$, $\nabla_u \xi_\alpha = (\nabla_u \eta)^T \nabla_u f_\alpha$.

Une solution forte de (129) satisfait le système au sens classique, l'entropie associée satisfaisant alors une égalité

$$\partial_t \eta(u) + \sum_{\alpha=1}^d \partial_\alpha \xi_\alpha(u) = 0 \quad \text{dans } \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+. \quad (130)$$

Cependant, même si la donnée initiale u_0 est régulière, il est connu que les solutions de (129) peuvent présenter des discontinuités en temps fini. Le cadre approprié d'analyse est alors celui des solutions faibles $u \in L^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+; \cdot)$ vérifiant pour tout $\phi \in C_c^1(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+; \mathbb{R}^n)$

$$\iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+} u \partial_t \phi \, dx dt + \int_{\mathbb{R}^d} u_0 \phi(\cdot, 0) \, dx + \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+} \sum_{\alpha=1}^d f_\alpha(u) \partial_\alpha \phi \, dx dt = 0. \quad (131)$$

Parmi celles-ci, on se restreint aux solution faibles entropiques satisfaisant (131) et pour tout $\psi \in C_c^1(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+; \mathbb{R}_+)$,

$$\iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+} \eta(u) \partial_t \psi \, dx dt + \int_{\mathbb{R}^d} \eta(u_0) \psi(\cdot, 0) \, dx + \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+} \sum_{\alpha=1}^d \xi_\alpha(u) \partial_\alpha \psi \, dx dt \geq 0. \quad (132)$$

Les travaux de Dafermos [Daf79] et DiPerna [DiP79] ont permis d'établir un résultat d'unicité fort-faible : s'il existe une solution forte au problème (129), alors toute solution faible entropique coïncide avec cette solution forte. Un travail similaire est proposé dans [Tza05] pour comparer les solutions d'un système hyperbolique de relaxation avec les solutions de le système à l'équilibre associé. Ce résultat repose sur des estimations d'entropie relative. Celle-ci est définie comme le développement au premier ordre de l'entropie η en $u \in \Omega$ relativement à $v \in \Omega$:

$$\eta(v|u) = \eta(v) - \eta(u) - (\nabla_u \eta(u))^T (v - u),$$

associée au flux $\psi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^d$:

$$\psi_\alpha(v|u) = \xi_\alpha(v) - \xi_\alpha(u) - (\nabla_u \eta(u))^T (f_\alpha(v) - f_\alpha(u)), \quad \forall \alpha \in \{1, \dots, d\}.$$

Cette entropie relative satisfait

$$\partial_t \eta(v|u) + \sum_{\alpha=1}^d \partial_\alpha \psi_\alpha(v|u) \leq - \sum_{\alpha=1}^d (\partial_\alpha u)^T Z_\alpha(v, u) \quad (133)$$

où

$$Z_\alpha(v, u) = \nabla_u^2 \eta(u) (f_\alpha(v) - f_\alpha(u) - (\nabla_u f_\alpha(u))^T (v - u)).$$

L'hypothèse de convexité de l'entropie η , donnée en Hypothèses 4-1, assure que l'entropie relative se comporte comme $|v - u|^2$. À partir de l'inégalité (133) et d'un lemme de Grönwall, on en déduit une estimation de stabilité L_{loc}^2 , pour tout $r > 0$:

$$\int_{|x| < r} |v(x, T) - u(x, T)|^2 dx \leq C(T, u) \int_{|x| < r + L_f T} |v_0(x) - u_0(x)|^2 dx. \quad (134)$$

La constante $C(T, u)$ dépend de la régularité de u , de sorte que l'estimation explose à l'apparition d'une discontinuité. Le temps T correspond donc au temps d'existence de solution forte.

Nous avons transposé au niveau discret ces éléments de la démonstration, ce qui nous a permis de quantifier l'erreur commise par une approximation volumes finis. L'originalité de ce travail est que l'on considère une méthode explicite en temps, le cas implicite étant traité dans [RJ05]. Le schéma volumes finis considéré repose sur des flux numériques G_{KL} à l'interface des mailles K et L ne dépend que des états dans ces mailles. Ceux-ci doivent satisfaire des hypothèses établies dans dans [Bou04a].

Hypothèses 5. Pour tout $(K, L) \in \mathcal{T}^2$, $L \in \mathcal{N}(K)$, le flux numérique $G_{KL} \in C^2(\Omega \times \Omega; \mathbb{R}^m) : (u, v) \rightarrow G_{KL}(u, v)$

(i) est consistant : $G_{KL}(u, u) = f(u) \cdot n_{KL}$, $\forall u \in \Omega$;

(ii) est conservatif : $G_{KL}(u, v) = -G_{LK}(v, u)$, $\forall (u, v) \in \Omega^2$;

(iii) préserve les états admissibles par interface, au sens où il existe $\lambda^* > 0$ tel que, pour tout $\lambda > \lambda^*$, pour tout $K \in \mathcal{T}$ et pour tout $L \in \mathcal{N}(K)$

$$u - \frac{1}{\lambda} [G_{KL}(u, v) - f(u) \cdot n_{KL}] \in \Omega, \quad \forall (u, v) \in \Omega^2.$$

Afin d'étudier la stabilité non linéaire du schéma, on considère également qu'il existe un flux numérique d'entropie ξ_{KL} , conservatif au sens des Hypothèses 5-(ii). Une hypothèse essentielle sur les flux numériques est d'imposer qu'ils vérifient des inégalités d'entropie par interface [Bouo4a], c'est à-dire que, pour tout $\lambda \geq \lambda^* > 0$, pour tout couple $(u, v) \in \Omega^2$

$$\xi_{KL}(u, v) - \xi(u) \cdot n_{KL} \leq -\lambda \left(\eta(u - \frac{1}{\lambda} [G_{KL}(u, v) - f(u) \cdot n_{KL}]) - \eta(u) \right). \quad (135)$$

Le schéma volumes finis considéré est alors défini par

$$\frac{u_K^{n+1} - u_K^n}{\Delta t} m(K) + \sum_{L \in \mathcal{N}(K)} m(\sigma_{KL}) G_{KL}(u_K^n, u_L^n) = 0, \quad \forall K \in \mathcal{T}, n \geq 0, \quad (136)$$

avec la donnée initiale

$$u_K^0 = \frac{1}{m(K)} \int_K u_0(x) dx, \quad \forall K \in \mathcal{T}.$$

Sous les Hypothèses 5, et si le pas de temps est contraint par la condition CFL

$$\Delta t \leq \frac{a^2}{\lambda^*} h, \quad (137)$$

alors la solution discrète $u_h : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^m$, définie comme $u_h(x, t) = u_K^n$, pour $(x, t) \in K \times [t_n, t_{n+1})$, est bornée à valeurs dans Ω et satisfait des inégalités d'entropie locales

$$m(K) \frac{\eta(u_K^{n+1}) - \eta(u_K^n)}{\Delta t} + \sum_{L \in \mathcal{N}(K)} \xi_{KL}(u_K^n, u_L^n) \leq 0, \quad \forall K \in \mathcal{T}, \forall n \geq 0.$$

Nous estimons l'erreur commise entre la solution forte u du problème de Cauchy (129) et la solution approchée u_h en établissant le contrôle de $\eta(u_h|u)$. Puisque u_h est une solution approchée, elle ne satisfait pas exactement la formulation faible ni la formulation faible entropique. Des termes d'erreur, liés à la dissipation numérique, apparaissent dans ces formulations. Nous les décrivons en terme de mesures de Radon, étendant au cadre système le formalisme utilisé dans [CH99, CHCo1] dans le cas scalaire.

La démonstration repose sur une hypothèse de stabilité plus restrictive que (137). On suppose qu'il existe $\zeta \in (0, 1)$ tel que

$$\frac{\lambda^* \Delta t}{a^2 h} \leq (1 - \zeta) \frac{\beta_0}{\beta_1}. \quad (138)$$

Proposition 5.10 (Estimation BV faible, [8]). *Supposons les Hypothèses 5 sur le schéma numérique et la condition CFL restrictive (138) satisfaites. Alors il existe une constante C , indépendante de h , telle que*

$$\sum_{n=0}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T} \cap B(0, r)} \sum_{L \in \mathcal{N}(K)} |\sigma_{KL}| |G_{KL}(u_K^n, u_L^n) - f(u_K^n) \cdot n_{KL}| \leq \frac{C}{\sqrt{h}}. \quad (139)$$

Cela signifie que la semi-norme BV du flux numérique est contrôlée et n'explose pas trop vite. De ce résultat, on déduit successivement, une propriété de dissipation d'entropie par interfaces, puis des estimations BV faible sur le flux d'entropie numérique et par suite sur u_h et $\eta(u_h)$.

Ces estimations permettent de construire des mesures de Radon qui contrôlent les erreurs numériques dans les formulations faibles (131) et (132) discrètes. Il est alors possible d'établir une inégalité d'entropie relative discrète qui nous amène au résultat suivant.

Théorème 5.11 ([8]). *Soit une solution forte de (129) et soit u_h la solution approchée définie par le schéma (136). Sous les Hypothèses 5 et la condition CFL restrictive (138), il existe une constante $C > 0$ ne dépendant que de $T, r, \Omega, a, \lambda^*, u_0, G_{KL}, \eta$ et f , mais pas de h , telle que*

$$\int_0^T \int_{B(0, r+s(T-t))} |u - u_h|^2 dx dt \leq C\sqrt{h}.$$

Schéma pour le transport d'énergie

Le modèle de transport d'énergie, dérivé du modèle de Boltzmann par une méthode aux moments [Jüno1], décrit le flux d'électrons dans un semi-conducteur, soumis à des effets diffusifs, électriques et thermiques. Un axe de recherche de l'ANR MoHyCon² concerne l'approximation par un schéma volumes finis à deux points d'un modèle de transport d'énergie constitué des équations de conservation de la densité d'électrons ρ_1 et de l'énergie interne ρ_2 , couplées à une équation de Poisson décrivant le potentiel électrique V . Ces quantités sont fonctions des variables entropiques $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$, où $u_1 = \mu/T$ et $u_2 = -1/T$ avec μ est le potentiel chimique et T la température. Le problème est posé sur un ouvert borné de \mathbb{R}^d ($d \geq 1$) décrivant la géométrie du semi-conducteur. Pour un temps $T_{max} > 0$ donné, le modèle de transport d'énergie s'écrit sur $\Omega \times (0, T_{max})$

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_1(\mathbf{u}) + \sum_{\alpha=1}^d \partial_\alpha J_1(\mathbf{u}, V) &= 0, \\ \partial_t \rho_2(\mathbf{u}) + \sum_{\alpha=1}^d \partial_\alpha J_2(\mathbf{u}, V) &= \nabla V \cdot J_1(\mathbf{u}, V) + W(\mathbf{u}), \\ -\lambda^2 \Delta V &= C(x) - \rho_1(\mathbf{u}), \end{aligned} \tag{140}$$

avec λ^2 la longueur de Debye, J_1 et J_2 désignant les densités de courant d'énergie et d'électron

$$\begin{aligned} J_1(\mathbf{u}, V) &= -L_{11}(\mathbf{u})(\nabla u_1 + u_2 \nabla V) - L_{12}(\mathbf{u}) \nabla u_2, \\ J_2(\mathbf{u}, V) &= -L_{21}(\mathbf{u})(\nabla u_1 + u_2 \nabla V) - L_{22}(\mathbf{u}) \nabla u_2, \end{aligned} \tag{141}$$

où $\mathbb{L}(\mathbf{u}) = (L_{ij}(\mathbf{u}))_{1 \leq i, j \leq 2}$ est une matrice symétrique uniformément définie positive. Le modèle est complété de conditions aux bords de type Dirichlet et/ou Neumann selon le dispositif. Les principaux résultats sur le modèle (140)-(141) sont établis dans [DGJ97, Jüno1] : existence d'une solution, régularité, comportement en temps long et unicité des états d'équilibre.

Les résultats sont établis sous les hypothèses suivantes.

Hypothèses 6. *La densité $\rho \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^2; \mathbb{R}^2)$*

(i) *est monotone de sorte qu'il existe $c_0 > 0$ tel que*

$$(\rho(\mathbf{u}) - \rho(\mathbf{v})) \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \geq c_0 |\mathbf{u} - \mathbf{v}|^2,$$

pour $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^2$,

(ii) *dérive d'un potentiel $\chi \in C^1(\mathbb{R}^2; \mathbb{R})$ strictement convexe tel que $\rho(\mathbf{u}) = \nabla_{\mathbf{u}} \chi(\mathbf{u})$.*

La démonstration de l'existence d'une solution à (140)-(141) repose d'abord sur la reformulation du système en variables dites entropiques, qui permettent de symétriser le système. Le second ingrédient des démonstrations est l'entropie S du système, fonction du temps t , définie par

$$S(t) = \int_{\Omega} \left[\rho(\mathbf{u}) \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{u}^D) - (\chi(u) - \chi(\mathbf{u}^D)) \right] dx - \frac{\lambda^2}{2} u_2^D \int_{\Omega} |\nabla(V - V^D)|^2 dx, \tag{142}$$

2. L'ANR MoHyCon (ANR-17-CE40-0027-01), portée par Marianne Bessemoulin-Chatard jusqu'en 2022, concerne le développement et l'analyse de méthodes numériques pour des modèles multi-échelles de semiconducteurs.

où \mathbf{u}^D et V^D sont les conditions aux bords de type Dirichlet. Par convexité de χ , et sous réserve que $u_2^D < 0$, l'entropie est une fonction convexe et positive pour tout temps.

On peut montrer la décroissance en temps de l'entropie en utilisant le système symétrisé associé à (140)-(141). De la dissipation d'entropie sont déduites des estimations *a priori* sur le potentiel V et les quantités \mathbf{u} et entropiques \mathbf{w} qui permettent, à terme, d'établir l'existence d'au moins une solution à (140)-(141).

Plusieurs travaux présentent schémas numériques pour les modèles de transport d'énergie [DJP00, HJP04, CH05], mais l'analyse de convergence n'y est pas traitée. Le travail [5], étendu dans [4], propose le développement et l'analyse d'un schéma volumes finis à deux points, implicite, pour le modèle (140)-(141). Afin d'en faire l'analyse, on souhaite adapter au niveau discret les étapes de démonstrations faites dans [DGJ97]. Nous construisons un schéma dont la structure s'appuie sur la symétrisation du système (140)-(141) et qui permet d'établir la dissipation d'entropie discrète.

Une première difficulté réside dans l'approximation du terme d'effet Joule $\nabla V \cdot J_1$, qui doit faciliter les calculs (intégration par partie discrète notamment) tout en étant consistante. La reformulation proposée dans [CCC19]

$$\nabla V \cdot J_1 = \sum_{\alpha=1}^d \partial_\alpha (V J_1) - V \sum_{\alpha=1}^d \partial_\alpha J_1,$$

permet d'écrire le schéma suivant pour $n \geq 0$ et $K \in \mathcal{T}$:

$$\begin{aligned} m(K) \frac{\rho_{1,K}^{n+1} - \rho_{1,K}^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{1,K,\sigma}^{n+1} &= 0, \\ m(K) \frac{\rho_{2,K}^{n+1} - \rho_{2,K}^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{2,K,\sigma}^{n+1} &= m(K) W_K^{n+1} r \\ &+ \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} V_\sigma^{n+1} \mathcal{F}_{1,K,\sigma}^{n+1} - V_K^{n+1} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{1,K,\sigma'}^{n+1}, \\ -\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D_{K,\sigma} V^{n+1} &= m(K) (C_K - \rho_{1,K}^{n+1}), \end{aligned} \quad (143)$$

où

$$\rho_{i,K}^{n+1} = \rho_i(\mathbf{u}_K^{n+1}), \quad i = 1, 2 \text{ et } W_K^{n+1} = W(\mathbf{u}_K^{n+1}) \text{ pour tout } K \in \mathcal{T}.$$

Les flux numériques sont

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{1,K,\sigma}^{n+1} &= -\tau_\sigma \left(L_{11,\sigma}^n (D_{K,\sigma} \mathbf{u}_1^{n+1} + u_{2,\sigma}^{n+1} D_{K,\sigma} \mathbf{V}^{n+1}) + L_{12,\sigma}^n D_{K,\sigma} \mathbf{u}_2^{n+1} \right), \\ \mathcal{F}_{2,K,\sigma}^{n+1} &= -\tau_\sigma \left(L_{12,\sigma}^n (D_{K,\sigma} \mathbf{u}_1^{n+1} + u_{2,\sigma}^{n+1} D_{K,\sigma} \mathbf{V}^{n+1}) + L_{22,\sigma}^n D_{K,\sigma} \mathbf{u}_2^{n+1} \right), \end{aligned} \quad (144)$$

où la matrice $\mathbb{L}_\sigma^n = (L_{ij,\sigma}^n)_{1 \leq i,j \leq n}$ est définie par

$$\mathbb{L}_\sigma^n = \mathbb{L} \left(\frac{u_K^n + u_{K,\sigma}^n}{2} \right) \quad \text{pour tout } K \in \mathcal{T}, \sigma \in \mathcal{E}_K.$$

Comme dans le cas continu, un changement de variables permet de symétriser le système. On introduit les inconnues discrètes $\mathbf{w}_K^n = (w_{1,K}^n, w_{2,K}^n)$ et $\mathbf{b}_K^n = (b_{1,K}^n, b_{2,K}^n)$ définies par

$$\begin{aligned} w_{1,K}^n &= u_{1,K}^n + u_{2,K}^n V_K^n, & w_{2,K}^n &= u_{2,K}^n, \\ b_{1,K}^n &= \rho_{1,K}^n, & b_{2,K}^n &= \rho_{2,K}^n - \rho_{1,K}^n V_K^n. \end{aligned} \quad (145)$$

On obtient ainsi le schéma volumes finis à deux points implicite suivant

$$\begin{aligned} m(K) \frac{b_{1,K}^{n+1} - b_{1,K}^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{1,K,\sigma}^{n+1} &= 0, \\ m(K) \frac{b_{2,K}^{n+1} - b_{2,K}^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{2,K,\sigma}^{n+1} &= m(K) \tilde{W}_K^{n+1} - m(K) \frac{V_K^{n+1} - V_K^n}{\Delta t} b_{1,K}^n, \\ -\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D_{K,\sigma} V^{n+1} &= m(K) (C_K - b_{1,K}^{n+1}), \end{aligned} \quad (146)$$

où les flux numériques sont donnés par

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{1,K,\sigma}^{n+1} &= \mathcal{F}_{1,K,\sigma}^{n+1}, \quad \forall K \in \mathcal{T}, \forall \sigma \in \mathcal{E}_K, \\ \mathcal{G}_{2,K,\sigma}^{n+1} &= \mathcal{F}_{2,K,\sigma}^{n+1} - V_\sigma^{n+1} \mathcal{F}_{1,K,\sigma}^{n+1}, \quad \forall K \in \mathcal{T}, \forall \sigma \in \mathcal{E}_K, \end{aligned} \quad (147)$$

et $\tilde{W}_K^{n+1} = W_K^{n+1} = \tilde{W}(w_K^{n+1})$.

Proposition 5.12 (Équivalence des schémas, [5, 4]). *Considérons le schéma (143)-(144) pour lequel on définit les termes $(V_\sigma^{n+1})_{\sigma \in \mathcal{E}, n \geq 0}$ et $(u_{2,\sigma}^{n+1})_{\sigma \in \mathcal{E}, n \geq 0}$ par l'une des approximations suivantes :*

— *Cas centré. Pour tout $\sigma \in \mathcal{E}$ et $n \geq 0$, on pose :*

$$u_{2,\sigma}^{n+1} = \frac{u_{2,K}^{n+1} + u_{2,K,\sigma}^{n+1}}{2} \quad \text{et} \quad V_\sigma^{n+1} = \frac{V_K^{n+1} + V_{K,\sigma}^{n+1}}{2}. \quad (148)$$

— *Cas décentré. Pour tout $\sigma \in \mathcal{E}$ et $n \geq 0$, on pose :*

$$u_{2,\sigma}^{n+1} = \begin{cases} u_{2,K,\sigma}^{n+1} & \text{si } D_{K,\sigma} V^{n+1} > 0, \\ u_{2,K}^{n+1} & \text{si } D_{K,\sigma} V^{n+1} \leq 0, \end{cases} \quad \text{et} \quad V_\sigma^{n+1} = \min(V_K^{n+1}, V_{K,\sigma}^{n+1}). \quad (149)$$

Alors dans les deux cas, le schéma (143)-(144) est équivalent au schéma (146)-(147) dès lors que

$$\mathbb{D}_\sigma^* = (\mathbb{P}_\sigma^{n+1})^T \mathbb{L}^n \mathbb{P}_\sigma^{n+1} \quad \text{avec} \quad \mathbb{P}_\sigma^{n+1} = \begin{pmatrix} 1 & -V_\sigma^{n+1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

En exploitant l'équivalence des schémas, nous démontrons la décroissance de l'entropie discrète. Celle-ci est définie, pour $(u_K^n = (u_{1,K}^n, u_{2,K}^n)^T, V_K^n)_{K \in \mathcal{T}, n \geq 0}$ la solution du schéma (143)-(144), avec (148) ou (149), par

$$S^n = \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) \left[\rho_K^n \cdot (u_K^n - u_K^D) - (\chi(u_K^n) - \chi(u_K^D)) \right] - \frac{\lambda^2}{2} u_2^D \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma (D_\sigma(\mathbf{V}^n - \mathbf{V}^D))^2. \quad (150)$$

Proposition 5.13 (Inégalité d'entropie discrète, [5, 4]). *Supposons satisfaites les hypothèses (6). Supposons de plus que*

$$W(\mathbf{u})(u_2 - u_2^D) \leq 0, \quad \text{et} \quad u_2^D < 0.$$

Soit $(u_K^n = (u_{1,K}^n, u_{2,K}^n)^T, V_K^n)_{K \in \mathcal{T}, n \geq 0}$ une solution du schéma (143)-(144), avec (148) ou (149). L'entropie discrète satisfait l'inégalité suivante pour tout $n \geq 0$,

$$\begin{aligned} \frac{S^{n+1} - S^n}{\Delta t} &\leq - \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma (D_{K,\sigma} \mathbf{w}^{n+1})^T \mathbb{D}_\sigma^* D_{K,\sigma} \mathbf{w}^{n+1} \\ &\quad + \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) W_K^{n+1} (w_{2,K}^{n+1} - w_{2,K}^D) \leq 0, \end{aligned} \quad (151)$$

où $D_{K,\sigma} \mathbf{w}^{n+1} = (D_{K,\sigma} \mathbf{w}_1^{n+1}, D_{K,\sigma} \mathbf{w}_2^{n+1})^T$.

Il s'en suit que l'entropie S^n est bornée pour tout $n \geq 0$ par sa valeur initiale S^0 . De sorte que la dissipation est contrôlée par

$$\sum_{n=0}^N \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_{\sigma} (D_{K,\sigma} \mathbf{w}^{n+1})^T \mathbb{D}_{\sigma}^* D_{K,\sigma} \mathbf{w}^{n+1} \leq S^0.$$

On en déduit des estimations L^2 discrètes sur w . Des estimations similaires sont démontrées dans [Lis20] pour une extension DDFV du schéma.

Remarque 5.3. *D'autres estimations a priori sur la solution peuvent être déterminées. En utilisant un argument de degré topologique et ces estimations, nous démontrons l'existence d'une solution au schéma [4]. Il nous reste à exhiber des résultats de compacité pour en déduire à terme la convergence du schéma.*



On présente en Figure 14 les profils de température $-1/u_2$ et de potentiel électrostatique V pour une diode ballistique. Les résultats sont obtenus par le schéma primal. Les tests réalisés en dimension 1 montrent qu'il n'y a pas d'avantages à utiliser le schéma dual plutôt que primal, puisque celui-ci nécessite plus d'itérations de la méthode de Newton.

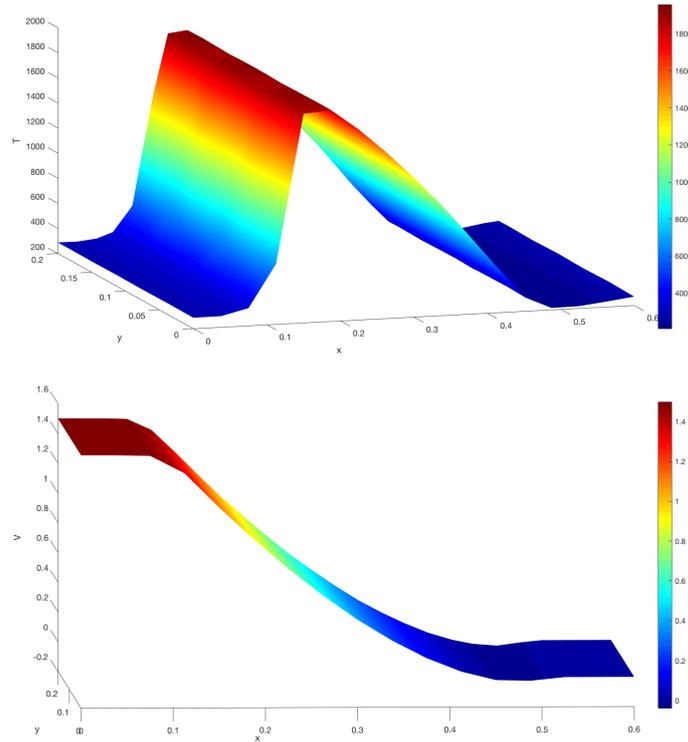


FIGURE 14 – Profils de la température $-1/u_2$ et de potentiel électrostatique V pour une diode ballistique, obtenus par le schéma primal.

Ce dernier chapitre regroupe des méthodes numériques développées pour gérer des interfaces. À l'occasion d'une collaboration avec Sabrina Carpy, du Laboratoire de Planétologie et Géodynamique et les membres du projet Exprodil, nous nous sommes intéressées à la simulation numérique de fronts de fusion liquide-glace. La méthode numérique volumes finis que l'on propose dans [9, 10] est de type Lagrange-projection. L'étape lagrangienne repose sur un schéma équilibre, pour lequel on construit des flux numériques non conservatifs en accord avec l'équilibre thermodynamique complexe à l'interface liquide-glace. On privilégie une projection aléatoire qui a fait ses preuves dans un contexte compressible [1].

Les interfaces étudiées en Section 6.2 sont purement numériques. Il s'agit d'interface de couplage entre deux modèles hyperboliques, issus d'une même hiérarchie de systèmes de relaxation, comme ceux vus au Chapitre 2. De telles interfaces de couplage ont été étudiées par les membres du LRC Manon [ACC⁺08, ACC⁺05, ACC⁺07]. Elles sont supposées fixes, en espace et en temps, découpant le domaine de calcul en zones où l'un ou l'autre modèle de la hiérarchie est résolu. Les travaux [21, 20, 7] étendent ces méthodes à des interfaces de couplage évoluant en temps et en espace. Nous proposons une décomposition automatique du domaine de calcul, basé sur la dérivation d'un estimateur discret, qui assure un compromis entre complexité de résolution et précision.

6.1 SUIVI D'INTERFACE LIQUIDE-SOLIDE PAR UNE MÉTHODE DE PROJECTION ALÉATOIRE

Ganymède est un satellite de glace de Jupiter qui admet une hydrosphère. L'hydrosphère est composée d'un océan d'eau liquide, séparée du noyau de Ganymède par une couche de glace haute pression et de la surface par une couche de glace terrestre. Les avis divergent quant aux positions de ces interfaces et à l'impact de la composition de l'océan sur leur déplacements [SCK⁺10]. Cette question de la fusion/solidification d'un matériau binaire s'avère être au cœur de la physique des alliages [VMC04, Vol08, WSA84, AWS85], dont on s'est inspirées dans les travaux [9, 10].

Problème de Stefan et équilibre liquidus–solidus

On considère l'alliage binaire d'un solvant A et d'un soluté B de concentration c . On suppose le problème unidimensionnel, de sorte que le domaine $\Omega = [0, +\infty[$ est décomposé en une zone liquide $\Omega_l(t) := \{(t, x) | t > 0, s(t) < x\}$ et une zone solide $\Omega_s(t) := \{(t, x) | t > 0, x < s(t)\}$,

séparées par une interface $s(t)$ évoluant en temps. Le modèle consiste en des équations de diffusion sur la température $T(t, x)$ et la concentration $c(t, x)$. Elles sont déduites de la conservation de l'énergie et de la loi de Fourier d'une part et de la conservation de la masse et de la loi de Fick d'autre part :

$$\begin{aligned}\rho \partial_t (c_{p,k} T_k) - \partial_x (K_k \partial_x T_k) &= 0, \\ \partial_t c_k - \partial_x (D_k \partial_x c_k) &= 0,\end{aligned}\tag{152}$$

pour $(t, x) \in \Omega_k(t)$, les coefficients $c_{p,k}$, K_k et D_k étant supposés constants.

La position de l'interface $s(t)$ est donnée par la condition de Stefan qui définit la vitesse de déplacement de l'interface de manière proportionnelle au saut du flux de chaleur à l'interface

$$\rho L \dot{s}(t) = K_s \partial_x T(t, s(t)^-) - K_l \partial_x T(t, s(t)^+),\tag{153}$$

où L est la chaleur latente de solidification. La notation $s(t)^-$ correspond à la limite à gauche $x \rightarrow s(t)$ avec $x < s(t)$ (*i.e.* dans la phase solide) et $s(t)^+$ est la limite à droite $x \rightarrow s(t)$ avec $x > s(t)$ (*i.e.* dans la phase liquide). Le saut de concentration à l'interface se déduit de la loi de conservation par une relation de type Rankine–Hugoniot :

$$\dot{s}(t)(c(t, s(t)^+) - c(t, s(t)^-)) = D_s \partial_x c(t, s(t)^-) - D_l \partial_x c(t, s(t)^+).\tag{154}$$

La fusion d'un matériau binaire est décrit par un diagramme de phase liquidus–solidus, illustré en Figure 15. Lorsque l'on considère un alliage binaire, entre un solvant A et un soluté B de concentration c , la température à l'interface $T_m(c)$ dépend de la concentration, qui est discontinue à l'interface. Le diagramme illustre dans quelle phase, liquide (l) ou solide (s), doit être le mélange

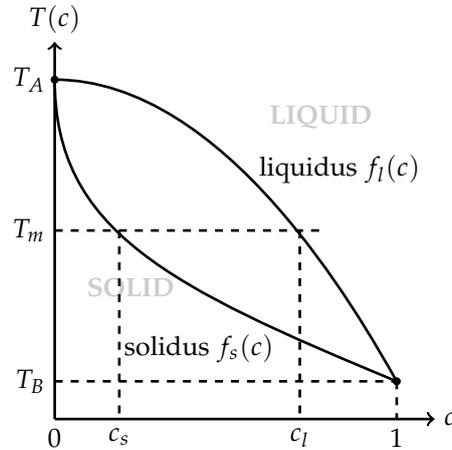


FIGURE 15 – Diagramme de phase dans le plan (c, T) d'un mélange binaire de deux composants A et B . La courbe solidus $f_s(c)$ représente la température de fusion de la phase solide, la courbe liquidus $f_l(c)$ représente la température de solidification de la phase liquide en fonction de la concentration c . Ces courbes délimitent les zones solide et liquide. A la température T_m , la concentration est discontinue au front de fusion.

des composants A et B , selon la concentration c et la température $T(c)$. La courbe supérieure, dite courbe liquidus, correspond à la température de solidification du liquide en fonction de la concentration c et est donnée par $f_l : c \in [0, 1] \mapsto T \in [T_A, T_B]$. La courbe du bas, dite solidus, est définie par $f_s : c \in [0, 1] \mapsto T \in [T_A, T_B]$ et représente la température de fusion de la phase solide en fonction de la concentration. On émet les hypothèses suivantes.

Hypothèses 7. Les fonctions $f_k : c \in [0, 1] \mapsto T \in [T_A, T_B]$, $k = l, s$, sont telles que

- (i) $f_s(0) = f_l(0) = T_A$ et $f_s(1) = f_l(1) = T_B$,
- (ii) f_s et f_l sont des fonctions strictement croissantes ou décroissantes de la concentration,
- (iii) il n'existe pas de concentration $\bar{c} \in]0, 1[$ telle que $f_s(\bar{c}) = f_l(\bar{c})$, i.e. on se limite aux mélanges non eutectiques.

À la température $T_B < T_m < T_A$ le courbe liquidus (resp. courbe solidus) intersecte la droite $T = T_m$ au point c_l (resp. c_s). Le diagramme liquidus–solidus permet de fermer le système (152)-(154) par une contrainte de continuité de la température et de discontinuité de la concentration à l'interface :

$$T(t, s(t)) = T_m(t) = f_s(c(t, s(t)^-)) = f_l(c(t, s(t)^+)). \quad (155)$$

Méthode de projection avec échantillonnage aléatoire

D'ordinaire les méthodes privilégiées pour simuler le problème (152)-(155) sont des méthodes de type Level Set [CMOS97, BDF12b, TGP15], qui préservent la raideur de l'interface. Il existe aussi de nombreuses références sur des approches à interfaces diffuses, dites enthalpiques [Vol87, Volo8]. En tirant partie du caractère unidimensionnel du problème, on peut simplifier les modèles (152)-(155) sous la forme suivante

$$\begin{aligned} \rho \partial_t (c_p T) - \partial_x (K \partial_x T) &= - \left(\rho L + \rho T_m (c_{p,s} - c_{p,l}) \right) \dot{s}(t) \delta_0(x - s(t)), \\ \partial_t c - \partial_x (D \partial_x c) &= 0, \end{aligned} \quad (156)$$

avec $(c_p, K, D) = (c_{p,s}, K_s, D_s) \mathbb{1}_{0 \leq x < s(t)} + (c_{p,l}, K_l, D_l) \mathbb{1}_{x > s(t)}$. Les contraintes à l'interface sont maintenant modélisées par un terme source ponctuel, la notation $\delta_0(\cdot)$ désignant une masse de Dirac, de sorte que le terme source dans (156) est singulier et uniquement actif à l'interface $s(t)$. Le calcul des relations de Rankine-Hugoniot pour (156) à l'interface $s(t)$ permet de retrouver les contraintes de Stefan (153), de saut de concentration (154) et d'équilibre liquidus–solidus (155). Le traitement des contraintes d'interface par des relations de saut, au niveau continu, se retrouvent dans diverses références dont [Viso9] et [AWS85]. Du point de vue numérique, le traitement d'un terme source ponctuel est étudié dans [ALTS10] et mène à la construction d'un schéma équilibre. Dans [9, 10], la méthode est couplée à un algorithme de suivi d'interface par une approche lagrangienne avec projection aléatoire [1].

L'algorithme général est le suivant.

1. *Initialisation.* Soient l'approximation constante par maille de la température $(T_i^n)_{i \in \mathbb{Z}}$ et de la concentration $(c_i^n)_{i \in \mathbb{Z}}$ au temps t^n . L'interface est positionnée sur une interface du maillage $s^n = x_{I^n+1/2}$ et se déplace à vitesse v^n .
2. *Étape Lagrangienne.*
 - a) *Loin de l'interface s^n .* On calcule les températures \tilde{T}_i^{n+1} et concentrations \tilde{c}_i^{n+1} , $\forall i \neq I^n, I^n + 1$, avec des schémas conservatifs usuels.
 - b) *De part et d'autres de l'interface s^n .* Les flux numériques doivent tenir compte du terme source ponctuel et du déplacement de l'interface. Dans le cas de la concentration, le flux numérique doit être consistant avec le flux lagrangien à l'interface $-D \partial_x c - v c$ et satisfaire la contrainte liquidus–solidus (155). Un exemple de flux numérique de concentration est

$$g_{c,v}^*(c_0^n, c_1^n) = -D_l \frac{c_1^n - \bar{c}}{\Delta x / 2} - v \bar{P}(x_{1/2} + v \Delta t / 2), \quad (157)$$

où \bar{c} est la racine de la fonction

$$\begin{aligned} \bar{H}(c) = c(D_l - \frac{v}{2}(\Delta x + v\Delta t)) + f_s^{-1} \circ f_l(c)(D_s + \frac{v}{2}(\Delta x - v\Delta t)) \\ - c_1^n(D_l - v^2\Delta t/2) - c_0^n(D_s - v^2\Delta t/2), \end{aligned} \quad (158)$$

et $\bar{P}(x) = c_0^n + \frac{\bar{c} - c_0^n}{\Delta x/2}(x - x_0)$. La quantité \bar{c} est une approximation de la concentration $c(t, s(t)^+)$ et la fonction \bar{H} est construite de sorte que la contrainte liquidus–solidus (155) est satisfaite à l’interface.

Proposition 6.1 ([10]). *Soient $(c_i^0)_{i \in \mathbb{Z}}$ telles que $0 \leq c_i^0 \leq 1, \forall i \in \mathbb{N}$. Supposons les Hypothèses 7 sur le diagramme liquidus–solidus satisfaites. Sous la condition de stabilité*

$$\Delta t \leq \min \left(2 \frac{\max(D_s, D_l)}{v^2}, \frac{\Delta x^2}{3 \min(D_l, D_s)} \right), \quad (159)$$

il existe une unique concentration $\bar{c} \in [0, 1]$ solution de $\bar{H}(x) = 0$ et le schéma volumes finis, utilisant le flux (157)-(158) à l’interface, garantit $0 \leq \bar{c}_i^{n+1} \leq 1, \forall i \in \mathbb{Z}$.

3. Etape de projection aléatoire.

a) On construit une suite pseudo aléatoire $y^n \in (0, \Delta x)$ de van der Corput [Col79, Col82, HJ14].

b) On projette l’interface s^{n+1} selon le signe de $y^n + v^n \Delta t$. Par exemple, si $v^n > 0$, alors

$$\begin{cases} (T_I^{n+1}, c_I^{n+1}) & = (\tilde{T}_I^{n+1}, \tilde{c}_I^{n+1}) \\ (I^{n+1}, T_{I^{n+1}}^{n+1}, c_{I^{n+1}}^{n+1}) & = \begin{cases} (I^n + 1, \tilde{T}_{I^n}^{n+1}, \tilde{c}_{I^n}^{n+1}) & \text{si } y^n < v^n \Delta t \\ (I^n, \tilde{T}_{I^n+1}^{n+1}, \tilde{c}_{I^n+1}^{n+1}) & \text{sinon.} \end{cases} \end{cases}$$

c) La vitesse v^{n+1} de l’interface est mise à jour en accord avec le saut de concentration

$$v^{n+1} = \left(D_l \frac{c_{I^{n+1}}^n - \bar{c}^n}{\Delta x/2} - D_s \frac{\underline{c}^n - c_I^n}{\Delta x/2} \right) / (\bar{c}^n - \underline{c}^n), \quad (160)$$

où \underline{c}^n est une approximation de $c(t, s(t)^-)$ déduite du diagramme liquidus–solidus.

On présente en Figure 16 la comparaison entre une solution exacte de (152)-(155) et les profils de température et de concentration. On observe que le saut de concentration est parfaitement préservé tandis que la continuité de la température est garantie. La température à l’interface satisfait l’équilibre liquidus–solidus (linéaire dans ce cas), voir Figure 17. Le caractère aléatoire de la projection est visible en Figure 17-haut, dans le profil de la position de l’interface en temps.

Remarque 6.1. *En nous basant sur [HJ11], nous avons étendu la méthode à la dimension deux dans [10]. Il est cependant connu que le modèle (152) n’est pas bien posé en dimension supérieure [Vis09]. Pour palier le problème, il est nécessaire d’ajouter des termes croisés (effet Soret et Dufour) au modèle. Il s’avère que l’analyse proposée dans [Vis09] repose sur une description diffuse de l’interface. Il faut donc envisager de développer une nouvelle méthode numérique pour ce type d’interface, tenant compte de la thermodynamique du problème à interface diffuse, respectant l’équilibre liquidus–solidus illustré en Figure 15. *

6.2 COUPLAGE ET ADAPTATION DE MODÈLES HYPERBOLIQUES

Les interfaces étudiées dans ce chapitre sont purement numériques. Il s’agit d’interfaces de couplage entre deux modèles hyperboliques, issus d’une même hiérarchie de relaxation, comme

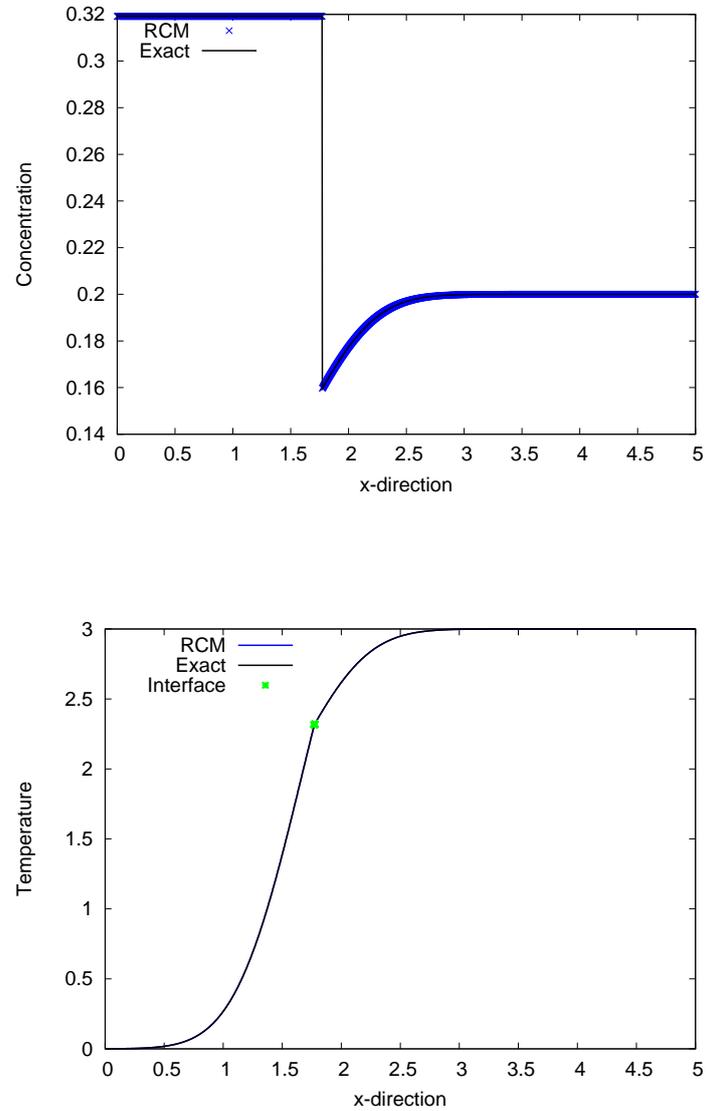


FIGURE 16 – Comparaison de la méthode de projection aléatoire (RCM) avec une solution exacte du problème (152)-(155) pour un équilibre liquidus–solidus linéaire : profils de concentration (haut) et de température (bas) en espace.

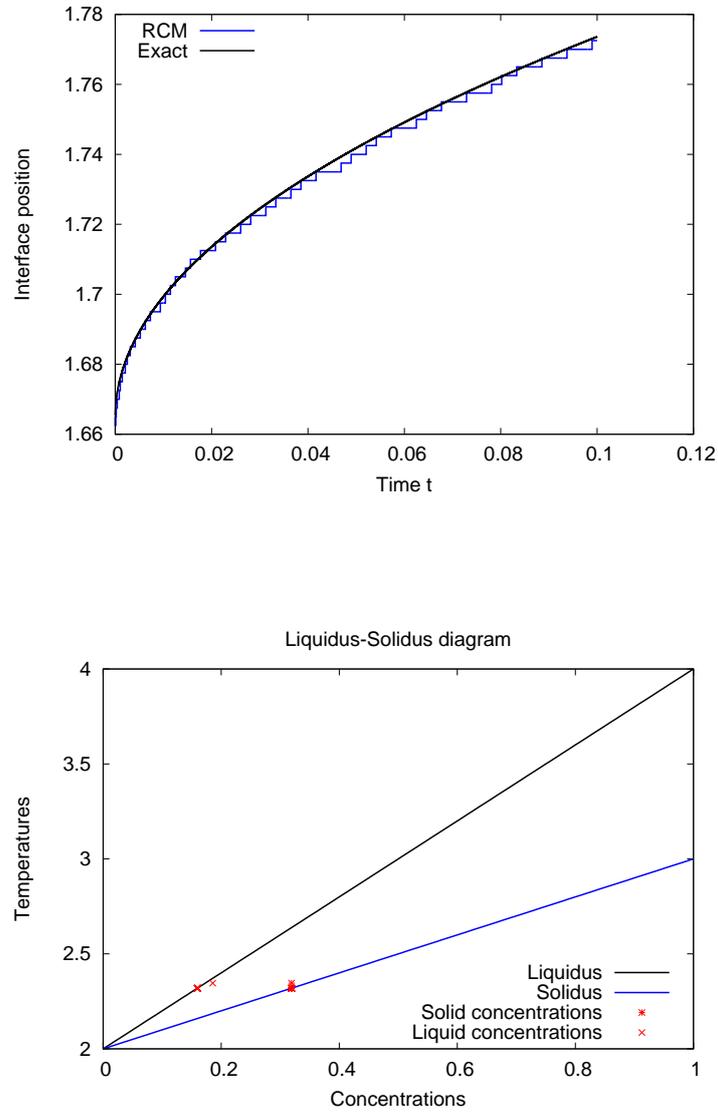


FIGURE 17 – Comparaison de la méthode de projection aléatoire (RCM) avec une solution exacte du problème (152)-(155) pour un équilibre liquidus–solidus linéaire : position de l’interface en temps (haut), concentrations \underline{c} et \bar{c} et correspondance avec le diagramme liquidus–solidus (bas).

ceux vus en Partie 1. L'adaptation de modèles, présentée dans ce paragraphe, a pour but de réduire la complexité du calcul CFD en résolvant autant que possible le modèle le moins précis de la hiérarchie, tout en conservant la précision du modèle le plus fin de la hiérarchie. Il s'agit donc de déterminer un indicateur de position de ces interfaces de couplage, en espace et en temps, de sorte à minimiser l'erreur due au couplage.

On résume par la suite l'algorithme d'adaptation dynamique que nous avons développé dans [21, 20] et énonçons ses principales propriétés. Nous avons réalisé l'analyse numérique de la méthode dans [7], où l'on étudie l'algorithme d'adaptation entre une loi de conservation non linéaire et une équation différentielle ordinaire. On peut dans ce cas exhiber un estimateur optimal.

Système de lois de conservation et relaxation hyperbolique

On se place dans le cadre de [CLL94] en considérant le un système hyperbolique de relaxation

$$\begin{aligned}\partial_t u + \sum_{\alpha=1}^d \partial_\alpha f_1^\alpha(u, v) &= 0, \\ \partial_t v + \sum_{\alpha=1}^d \partial_\alpha f_2^\alpha(u, v) &= \frac{1}{\lambda} r(u, v),\end{aligned}\tag{161}$$

où le vecteur $(u, v)(t, x) : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^d \rightarrow \Omega$, où $\Omega \subset \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^{n-k}$ est le domaine convexe des états admissibles. Le système (161) désigne par la suite le *modèle fin*. On introduit une application continue $v_{eq}(u)$, caractérisant la variété d'équilibre, telle que $r(u, v_{eq}(u)) = 0$, pour tout état u admissible et l'on suppose que l'application $v \mapsto r(u, v)$ est un C^1 -difféomorphisme sur le voisinage de $v_{eq}(u)$. Lorsque λ est petit, les solutions de (161) sont proches de l'équilibre, de sorte que l'on s'amène à considérer le modèle

$$\partial_t u + \sum_{\alpha=1}^d \partial_\alpha f_1^\alpha(u, v_{eq}(u)) = 0,\tag{162}$$

désigné comme *modèle grossier*.

On peut exhiber un premier indicateur en considérant les solutions régulières du modèle fin et en y injectant le développement de Chapman–Enskog

$$v = v_{eq}(u) + \lambda v_1 + \mathcal{O}(\lambda^2).$$

Lorsque λ tend vers 0, on retrouve formellement le modèle grossier à l'équilibre (162). Ainsi le correcteur du premier ordre v_1 est un indicateur de l'erreur entre une solution du modèle fin et solution du modèle grossier.

Le développement de Chapman–Enskog n'étant valide que pour des solutions régulières et dans un voisinage de la variété d'équilibre, la quantité $\|\lambda v_1\|$ ne mesure que la régularité locale de la solution. De plus il faut pouvoir détecter les solutions constantes en espace. Il est alors nécessaire de considérer la distance à la variété d'équilibre $\|v - v_{eq}(u)\|$, qui mesure, en quelque sorte, la régularité en temps. L'indicateur qui nous intéresse est donc $\mathcal{E} = \max(\lambda \|v_1\|, \|v - v_{eq}(u)\|)$, et dépend du temps et de l'espace.

Schémas numériques et indicateur discret

L'idée consiste à exhiber un indicateur en réalisant un développement de Chapman–Enskog au niveau discret, en injectant dans le schéma volumes finis pour le modèle fin (161). On considère

une méthode à pas fractionnaire. Supposons connue une approximation $Z_K^n = (u_K^n, v_K^n)$, pour tout $K \in \mathcal{T}$, au temps t^n . Entre le temps t^n et un temps intermédiaire $t^{n+1,-}$, la partie convective est approchée par

$$\begin{aligned} u_K^{n+1,-} &= u_K^n - \frac{\Delta t}{m(K)} \sum_{L \in \mathcal{N}(K)} m(\sigma_{KL}) F_1(Z_K^n, Z_L^n, n_{KL}), \\ v_K^{n+1,-} &= v_K^n - \frac{\Delta t}{m(K)} \sum_{L \in \mathcal{N}(K)} m(\sigma_{KL}) F_2(Z_K^n, Z_L^n, n_{KL}), \end{aligned} \quad (163)$$

où les flux numériques F_1 et F_2 sont consistants avec les flux f_1 et f_2 du modèle fin (161). Cette approximation est ensuite utilisée comme donnée initiale pour résoudre le terme source par un schéma d'Euler implicite :

$$\begin{aligned} u_K^{n+1} &= u_K^{n+1,-}, \\ v_K^{n+1} &= v_K^{n+1,-} + \frac{\Delta t}{\lambda} r(u_K^{n+1}, v_K^{n+1}). \end{aligned} \quad (164)$$

Le schéma du modèle grossier (162) se dérive du schéma (163)-(164). La première étape est identique. La seconde se résume à projeter v sur l'équilibre. Le schéma résultant s'écrit

$$\begin{aligned} u_K^{n+1} &= u_K^n - \frac{\Delta t}{m(K)} \sum_{L \in \mathcal{N}(K)} m(\sigma_{KL}) F_1(Z_K^n, Z_L^n, n_{KL}), \\ v_K^{n+1} &= v_{eq}(u_K^{n+1}). \end{aligned} \quad (165)$$

Un développement de Chapman–Enskog discret injecté dans le schéma numérique (163)-(164) permet d'obtenir le correcteur d'ordre 1 discret.

Proposition 6.2 (Chapman-Enskog discret, [21, 20]). *Soit le schéma numérique (163)-(164). Alors, aux termes d'ordre λ^2 près, on a*

$$v_K^{n+1} = v_{eq}(u_K^{n+1}) + \lambda v_{1,K}^{n+1}, \quad (166)$$

où

$$v_{1,K}^{n+1} = \frac{\left(\nabla_v r(u_K^{n+1}, v_{eq}(u_K^{n+1})) \right)^{-1}}{m(K)} \sum_{L \in \mathcal{N}(K)} m(\sigma_{KL}) \left[F_2(\text{Pr}(Z_K^n), \text{Pr}(Z_L^n), n_{KL}) + \nabla v_{eq}(\bar{u})^T F_1(\text{Pr}(Z_K^n), \text{Pr}(Z_L^n), n_{KL}) \right], \quad (167)$$

où l'opérateur Pr est défini $\text{Pr} : (u, v)^t \mapsto (u, v_{eq}(u))^t$ et \bar{u} satisfait

$$\nabla v_{eq}(\bar{u})^t (u^{n+1} - u^n) = v_{eq}(u^{n+1}) - v_{eq}(u^n).$$

Le terme $v_{1,K}^{n+1}$ est une approximation d'ordre 1 de v_1 au temps t^{n+1} dans la maille K .

On complète l'indicateur par la distance à la variété d'équilibre au temps t^n , de sorte à définir l'indicateur \mathcal{E}_K^{n+1} au temps t^{n+1} par

$$\mathcal{E}_K^{n+1} := \max(\lambda \|\bar{v}_{1,K}^{n+1}\|, \|v_K^n - v_{eq}(u_K^n)\|). \quad (168)$$

Algorithme d'adaptation de modèles

L'adaptation de modèles est opérée à chaque itération t^n . On suppose connue une décomposition du domaine de calcul : le domaine $\mathcal{D}_f(t^n) \times (t^n, t^{n+1})$ réfère aux zones où le modèle fin (161) est résolu, $\mathcal{D}_c(t^n) \times (t^n, t^{n+1})$ aux zones du modèle grossier (162).

Soit Z_K^n une solution connue dans la maille K au temps t^n . Soit θ un seuil d'erreur donné.

- A) Pour toute maille $K \in \mathcal{T}$, calculer l'indicateur \mathcal{E}_K^{n+1} donné par (168).
- B) Pour une maille $K \in \mathcal{T}$, si $[|\mathcal{E}_K^{n+1}| > \theta]$ alors $K \in \mathcal{D}_f(t^n)$; sinon $K \in \mathcal{D}_c(t^n)$.
- C) À cette étape, $\overline{\mathcal{D}_f(t^n)} \cup \overline{\mathcal{D}_c(t^n)} = \mathcal{D}$.
 Pour toute cellule $K \in \mathcal{T}$:
- Si $[K \in \mathcal{D}_f(t^n)$ et pour toute maille $L \in \mathcal{N}(K), L \in \mathcal{D}_f(t^n)]$, alors Z_K^{n+1} est déterminé par le schéma (163)-(164).
 - Si $[K \in \mathcal{D}_c(t^n)$ et pour tout $L \in \mathcal{N}(K), L \in \mathcal{D}_c(t^n)]$, alors Z_K^{n+1} par le schéma numérique (165).
 - Sinon, calculer Z_K^{n+1} par une condition de couplage.

Différentes stratégies de couplage ont été étudiées [Cae06, ACC⁺07]. Soit K une maille du domaine fin $\mathcal{D}_f(t^n)$ et L sa voisine dans le domaine grossier $\mathcal{D}_c(t^n)$. Alors à l'arête e_{KL} , le choix retenu est d'imposer $(u_L^n, v_{eq}(u_L^n))$ comme condition de Dirichlet au modèle fin et u_K^n comme condition de Dirichlet au modèle grossier. Cela revient à imposer au sens faible la continuité de u et $v = v_{eq}(u)$ au travers de l'interface, voir [GR04, GLTR05].

Cette méthode adaptative satisfait certaines propriétés.

Proposition 6.3 ([20]). (i) *La méthode d'adaptation (A–B–C) est conservative par rapport à u .*

(ii) *Si la condition initiale (u_0, v_0) est un état constant à l'équilibre, alors pour toute maille $K \in \mathcal{T}$ et $n \geq 0$, la méthode adaptative préserve cette solution constante.*

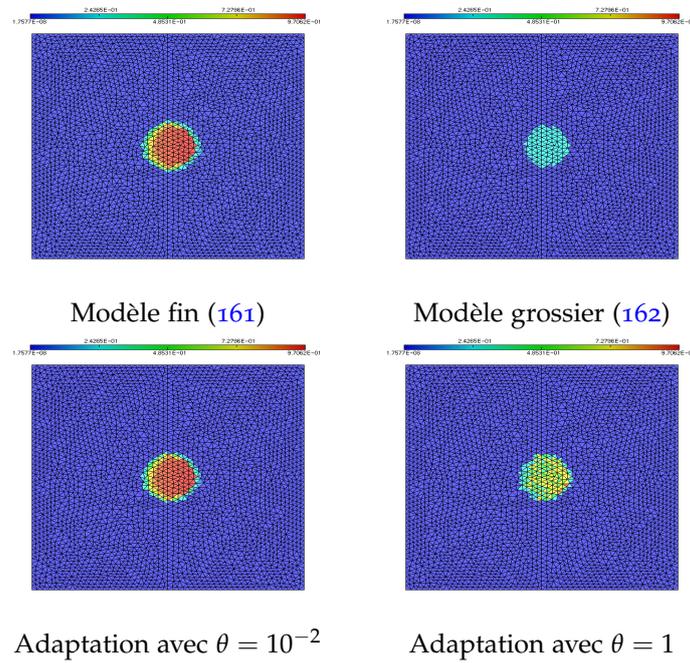
On peut également démontrer plus de propriétés sur la méthode d'adaptation continue en espace. Notamment si le schéma (163)-(164) est entropique au sens de [HLvL83b], alors la méthode d'adaptation (A–B–C) est entropique au sens où

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \eta(Z_K^{n+1}) \leq \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \eta(Z_K^n), \quad (169)$$

où $\eta(Z)$ est l'entropie associée au modèle fin (161).

Les Figures 18 à 21 présentent une illustration de la méthode appliquée à des modèles de transition de phase liquide-vapeur. Le modèle grossier que l'on considère correspond au modèle homogène à l'équilibre (31), présenté au Chapitre 2, fermé par la loi de pression pour un mélange immiscible de gaz parfaits [HS06]. Le modèle fin correspond à un modèle de relaxation semblable au modèle (34). La pression est relaxée en introduisant un déséquilibre chimique, décrit par la fraction de masse φ . Comme on a pu le voir dans la Proposition 2.4 du Chapitre 2, l'entropie du système homogène à l'équilibre n'est pas strictement convexe et le terme source s'annule à saturation. L'application $v \mapsto r(u, v)$ n'est pas inversible et le développement de Chapman-Enskog ne donne pas un système dissipatif dans tout le domaine. Ces modèles ne satisfont donc pas les hypothèses requises. La méthode d'adaptation fournit cependant des résultats concluant comme on peut l'observer.

Le cas test correspond à une interaction de faible intensité entre une bulle de vapeur dans un milieu liquide et un choc planaire. Le choc impacte la bulle, rebondit puis impacte encore une fois la bulle. Les Figures 18 et 19 représentent la fraction de masse. Chaque graphique présente les solutions obtenues par le modèle fin, le modèle grossier et le modèle adapté pour deux valeurs du seuil. Le modèle grossier fournit une solution très différente du modèle fin : il ne détecte pas la bulle qui disparaît après la seconde interaction. Les résultats du modèle adapté avec $\theta = 10^{-2}$ sont comparables à ceux du modèle fin. En Figure 20 est présentée la décomposition entre domaine fin et domaine grossier. Pour $\theta = 10^{-2}$, le domaine fin est restreint à la bulle, tandis que pour $\theta = 1$, seules quatre mailles, situées au centre de la bulle initiale, sont traitées avec le modèle fin. La

FIGURE 18 – Fraction de masse φ après la première interaction

convergence de la méthode d'adaptation par rapport à la solution du modèle fin est étudiée en Figure 21. On trace la différence entre la fraction de masse obtenue avec le modèle adapté et celle obtenue par le modèle fin. Cette différence tend vers zéro quand $\theta \rightarrow 0$. L'erreur entre modèle fin et modèle grossier majore l'erreur du modèle d'adaptation.

Remarque 6.2. Comme nous l'avons vu en Remarque 5.2 du Chapitre 5, les techniques utilisées pour coupler deux systèmes hyperboliques d'une même hiérarchie ne s'adaptent pas telles quelles à l'asymptotique diffusivo [23]. Nous envisageons d'adapter ce type de méthodes de décomposition de domaine à des modèles de semi-conducteurs. Dans la veine de [FR15], nous envisageons de développer un algorithme d'adaptation de modèles pour coupler l'équation de Boltzmann et l'équation de transport d'énergie [Jüno1].

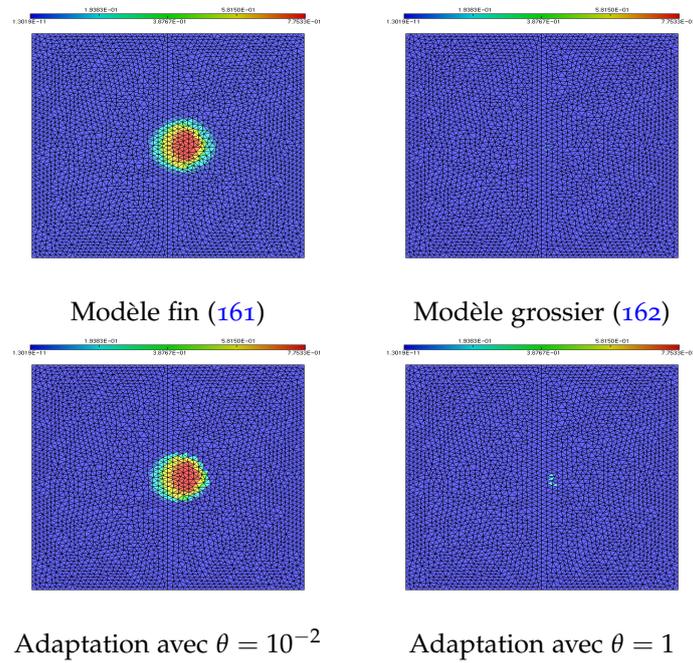


FIGURE 19 – Fraction de masse φ après la deuxième interaction

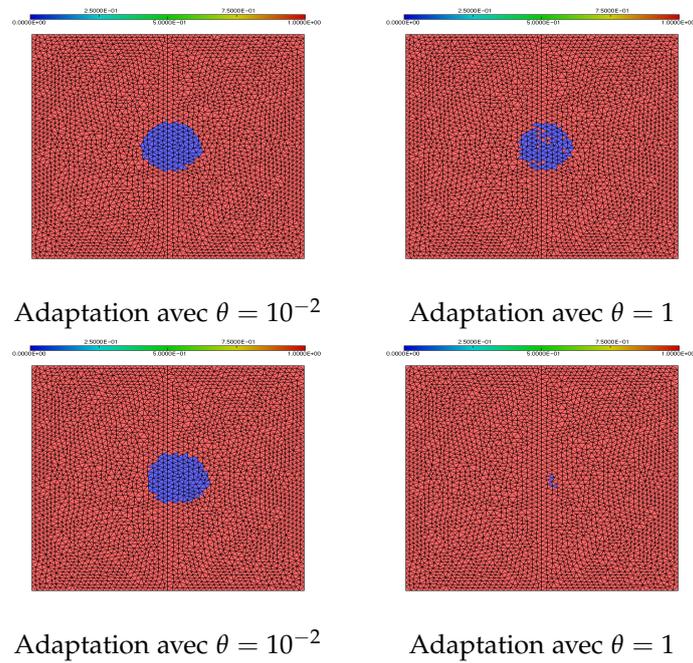
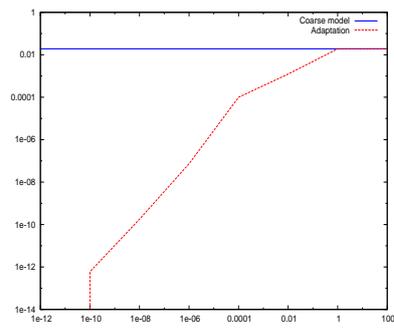


FIGURE 20 – Partition du domaine de calcul entre domaine grossier (rouge) et domaine fin (bleu) après la première interaction (haut) et après la seconde interaction (bas)

FIGURE 21 – Erreur en norme L^1 entre le modèle fin et le modèle adapté en fonction du seuil θ

PUBLICATIONS DE L'AUTEUR

- [1] M. BACHMANN, P. HELLUY, J. JUNG, H. MATHIS et S. MÜLLER : Random sampling remap for compressible two-phase flows. *Comput. & Fluids*, 86:275–283, 2013.
- [2] M. BACHMANN, S. MÜLLER, P. HELLUY et H. MATHIS : A simple model for cavitation with non-condensable gases. In *Hyperbolic problems—theory, numerics and applications. Volume 1*, volume 17 de *Ser. Contemp. Appl. Math. CAM*, pages 289–296. World Sci. Publishing, Singapore, 2012.
- [3] C. BERTHON, M. BESSEMOULIN-CHATARD et H. MATHIS : Numerical convergence rate for a diffusive limit of hyperbolic systems : p -system with damping. *SMAI J. Comput. Math.*, 2:99–119, 2016.
- [4] M. BESSEMOULIN-CHATARD, C. CHAINAIS-HILLAIRET et H. MATHIS : Numerical schemes for semiconductors energy-transport models. En préparation.
- [5] M. BESSEMOULIN-CHATARD, C. CHAINAIS-HILLAIRET et H. MATHIS : Numerical schemes for semiconductors energy-transport models. In *Finite volumes for complex applications IX—methods and theoretical aspects*. 2020.
- [6] BOULANGER, A.-C., CANCÈS, C., MATHIS, H., SALEH, K. et SEGUIN, N. : Osamoal : Optimized simulations by adapted models using asymptotic limits. *ESAIM : Proc.*, 38:183–201, 2012.
- [7] C. CANCÈS, F. COQUEL, E. GODLEWSKI, H. MATHIS et N. SEGUIN : Error analysis of a dynamic model adaptation procedure for nonlinear hyperbolic. *Communications in Mathematical Sciences*, 14(1):1–30, 2016.
- [8] C. CANCÈS, H. MATHIS et N. SEGUIN : Error estimate for time-explicit finite volume approximation of strong solutions to systems of conservation laws. *SIAM Journal of Numerical Analysis (SINUM)*, 54(2):1263–1287, 2016.
- [9] S. CARPY et H. MATHIS : Approximation d'interface liquide-solide dans l'hydrosphère de ganymède par un schéma de type glimm. In *Rencontres du non linéaire*, 2016.
- [10] S. CARPY et H. MATHIS : Modeling binary alloy solidification by a random projection method. *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 35(2):733–760, 2019.
- [11] G. FACCANONI et H. MATHIS : Admissible equations of state for immiscible and miscible mixtures. In *Workshop on Compressible Multiphase Flows : derivation, closure laws, thermodynamics*, volume 66 de *ESAIM Proc. Surveys*, pages 1–21. EDP Sci., Les Ulis, 2019.

- [12] H. GHAZI, F. JAMES et H. MATHIS : Vapour-liquid phase transition and metastability. In *Workshop on Compressible Multiphase Flows : derivation, closure laws, thermodynamics*, volume 66 de *ESAIM Proc. Surveys*, pages 22–41. EDP Sci., Les Ulis, 2019.
- [13] H. GHAZI, F. JAMES et H. MATHIS : A Nonisothermal thermodynamical model of liquid-vapor interaction with metastability. Accepted in *Discrete Contin. Dyn. Syst.-B*, 2020.
- [14] P. HELLUY et H. MATHIS : Pressure laws and fast Legendre transform. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 21(4):745–775, 2011.
- [15] J.-M. HÉRARD et H. MATHIS : A three-phase flow model with two miscible phases. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 53(4):1363–1389, 2019.
- [16] F. JAMES et H. MATHIS : Modeling phase transition and metastable phases. In *Finite volumes for complex applications VII. Elliptic, parabolic and hyperbolic problems*, volume 78 de *Springer Proc. Math. Stat.*, pages 865–872. Springer, Cham, 2014.
- [17] F. JAMES et H. MATHIS : A relaxation model for liquid-vapor phase change with metastability. *Commun. Math. Sci.*, 14(8):2179–2214, 2016.
- [18] H. MATHIS : *Étude théorique et numérique des écoulements avec transition de phase*. Thèse de doctorat, Institut de Recherche Mathématique Avancée, Université de Strasbourg, Strasbourg, 2010. Thèse, Université Louis Pasteur, Strasbourg, 2010.
- [19] H. MATHIS : A thermodynamically consistent model of a liquid-vapor fluid with a gas. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 53(1):63–84, 2019.
- [20] H. MATHIS, C. CANCÈS, E. GODLEWSKI et N. SEGUIN : Dynamic model adaptation for multiscale simulation of hyperbolic systems with relaxation. *J. of Scientific Computing*, 63(3):821–861, 2015.
- [21] H. MATHIS et N. SEGUIN : Model adaptation for hyperbolic systems with relaxation. In *Finite volumes for complex applications VI. Problems & perspectives. Volume 1, 2*, volume 4 de *Springer Proc. Math.*, pages 673–681. Springer, Heidelberg, 2011.
- [22] H. MATHIS et N. THERME : Numerical convergence for a diffusive limit of the Goldstein-Taylor system on bounded domain. In *Finite volumes for complex applications VIII—methods and theoretical aspects*, volume 199 de *Springer Proc. Math. Stat.*, pages 225–233. Springer, Cham, 2017.
- [23] H. MATHIS et N. THERME : An asymptotic preserving scheme for hyperbolic problems with diffusive limit on bounded domain. En préparation.

RÉFÉRENCES

- [ACC⁺05] A. AMBROSO, C. CHALONS, F. COQUEL, E. GODLEWSKI, F. LAGOUTIÈRE, P.-A. RAVIART et N. SEGUIN : Coupling of multiphase flow models. *In Proceedings of the Eleventh International Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics (NURETH)*, 2005.
- [ACC⁺07] A. AMBROSO, C. CHALONS, F. COQUEL, E. GODLEWSKI, F. LAGOUTIÈRE, P.-A. RAVIART et N. SEGUIN : The coupling of homogeneous models for two-phase flows. *Int. J. Finite Volumes*, 4(1):1–39, 2007.
- [ACC⁺08] A. AMBROSO, C. CHALONS, F. COQUEL, E. GODLEWSKI, F. LAGOUTIÈRE, P.-A. RAVIART et N. SEGUIN : Coupling of general Lagrangian systems. *Math. Comp.*, 77(262):909–941, 2008.
- [AFK07] G. ALLAIRE, G. FACCANONI et S. KOKH : A strictly hyperbolic equilibrium phase transition model. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 344(2):135–140, 2007.
- [ALTS10] B. ANDREIANOV, F. LAGOUTIÈRE, T. TAKAHASHI et S. SEGUIN : Small solids in an inviscid fluid. *Netw. Heterog. Media*, 5:385–404, 2010.
- [AWS85] V. ALEXIADES, D. G. WILSON et A. D. SOLOMON : Macroscopic global modeling of binary alloy solidification processes. *Quart. Appl. Math.*, 43(2):143–158, 1985.
- [Bar90] J. BARTAK : A study of the rapid depressurization of hot water and the dynamics of vapour bubble generation in superheated water. *Int. J. Multiph. Flow*, 16(5):789–98, 1990.
- [BBBC19] S. BULTEAU, C. BERTHON et M. BESSEMOULIN-CHATARD : Convergence rate of an asymptotic preserving scheme for the diffusive limit of the p -system with damping. *Commun. Math. Sci.*, 17(6):1459–1486, 2019.
- [BBBG20] A. BONDESAN, L. BOUDIN, M. BRIANT et B. GREC : Stability of the spectral gap for the boltzmann multi-species operator linearized around non-equilibrium maxwell distributions. *Commun. Pure Appl. Anal.*, 19:2549–2573, 2020.
- [BD15] D. BOTHE et W. DREYER : Continuum thermodynamics of chemically reacting fluid mixtures. *Acta Mech.*, 226(6):1757–1805, 2015.
- [BDF12a] C. BUET, B. DESPRÉS et E. FRANCK : Design of asymptotic preserving finite volume schemes for the hyperbolic heat equation on unstructured meshes. *Numerische Mathematik*, 122(2):227–278, 2012.
- [BDF12b] C. BUI, Ch. DAPOGNY et P. FREY : An accurate anisotropic adaptation method for solving the level set advection equation. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 2012.

- [Ben99] L. BENAYOUN : *Méthodes géométriques pour l'étude de systèmes thermodynamiques and la génération d'équations d'état*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1999.
- [BH05] T. BARBERON et P. HELLUY : Finite volume simulation of cavitating flows. *Computers and Fluids*, 34(7):832–858, 2005.
- [BHN07] S. BIANCHINI, B. HANOZET et R. NATALINI : Asymptotic behavior of smooth solutions for partially dissipative hyperbolic systems with a convex entropy. *Comm. Pure Appl. Math.*, 60(11):1559–1622, 2007.
- [BLT13] C. BERTHON, P.G. LEFLOCH et R. TURPAULT : Late-time/stiff-relaxation asymptotic-preserving approximations of hyperbolic equations. *Math. Comp.*, 82:831–860, 2013.
- [BN86] M. R. BAER et J. W. NUNZIATO : A two phase mixture theory for the deflagration to detonation (ddt) transition in reactive granular materials. *Int. J. Multiphase Flow*, 12(6):861–889, 1986.
- [Bou04a] F. BOUCHUT : *Nonlinear stability of finite volume methods for hyperbolic conservation laws and well-balanced schemes for sources*. Frontiers in Mathematics. Birkhäuser Verlag, Basel, 2004.
- [Bou04b] F. BOUCHUT : A reduced stability condition for nonlinear relaxation to conservation laws. *J. Hyperbolic Differ. Equ.*, 1(1):149–170, 2004.
- [BT11] C. BERTHON et R. TURPAULT : Asymptotic preserving HLL schemes. *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 27(6):1396–1422, 2011.
- [BT16] F. BLACHÈRE et R. TURPAULT : An admissibility and asymptotic-preserving scheme for systems of conservation laws with source term on 2D unstructured meshes. *J. Comput. Phys.*, 315:98–123, 2016.
- [Bul19] S. BULTEAU : *Development and analysis of numerical schemes asymptotic preserving in linear and nonlinear diffusion regimes*. Theses, Université de Nantes, Faculté des sciences and des techniques, octobre 2019.
- [BZ11] K. BEAUCHARD et E. ZUAZUA : Large time asymptotics for partially dissipative hyperbolic systems. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 199(1):177–227, 2011.
- [Cae06] F. CAETANO : *Sur certains problèmes de linéarisation and de couplage pour les systèmes hyperboliques non linéaires*. Thèse de doctorat, Université Pierre and Marie Curie–Paris 6, France, 2006.
- [Cal85] H. B. CALLEN : *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics, second edition*. Wiley and Sons, 1985.
- [Car04] F. CARO : *Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide vapeur*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique X, 2004.
- [CCC19] C. CALGARO, C. COLIN et E. CREUSÉ : A combined finite volume - finite element scheme for a low-Mach system involving a Joule term. *AIMS Mathematics*, 5(1):311–331, 2019.
- [CCG⁺10] C. CHALONS, F. COQUEL, E. GODLEWSKI, P.-A. RAVIART et N. SEGUIN : Godunov-type schemes for hyperbolic systems with parameter-dependent source. The case of Euler system with friction. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 20(11):2109–2166, 2010.
- [CF05] A. CORLI et H. FAN : The Riemann problem for reversible reactive flows with metastability. *SIAM J. Appl. Math.*, 65(2):426–457 (electronic), 2004/05.
- [CGHS02] F. COQUEL, T. GALLOUËT, J.-M. HÉRARD et N. SEGUIN : Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 334(10):927–932, 2002.

- [CGK13] C. CHALONS, M. GIRARDIN et S. KOKH : Large time step and asymptotic preserving numerical schemes for the gas dynamics equations with source terms. *SIAM J. Sci. Comput.*, 35(6):A2874–A2902, 2013.
- [CH99] C. CHAINAIS-HILLAIRET : Finite volume schemes for a nonlinear hyperbolic equation. Convergence towards the entropy solution and error estimate. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 33(1):129–156, 1999.
- [CH05] C. CHAINAIS-HILLAIRET : Finite volume schemes for two dimensional drift-diffusion and energy-transport models. In *Finite volumes for complex applications IV*, pages 13–22. ISTE, London, 2005.
- [CHCo1] C. CHAINAIS-HILLAIRET et S. CHAMPIER : Finite volume schemes for nonhomogeneous scalar conservation laws : error estimate. *Numer. Math.*, 88(4):607–639, 2001.
- [CLL94] G. Q. CHEN, C. D. LEVERMORE et T. P. LIU : Hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms and entropy. *Comm. Pure Appl. Math.*, 47(6):787–830, 1994.
- [CMOS97] S. CHEN, B. MERRIMAN, S. OSHER et P. SMEREKA : A simple level set method for solving stefan problems. *J. Comp. Phys.*, 1997.
- [Col79] P. COLELLA : *An analysis of the effect of operator splitting and of the sampling procedure on the accuracy of Glimm's method*. ProQuest LLC, Ann Arbor, MI, 1979. Thesis (Ph.D.)–University of California, Berkeley.
- [Col82] P. COLELLA : Glimm's method for gas dynamics. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 3(1):76–110, 1982.
- [Daf79] C. M. DAFERMOS : The second law of thermodynamics and stability. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 70(2):167–179, 1979.
- [Daf10] C. M. DAFERMOS : *Hyperbolic conservation laws in continuum physics*, volume 325 de *Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences]*. Springer-Verlag, Berlin, third édition, 2010.
- [Del03] S. DELLACHERIE : Relaxation schemes for the multicomponent Euler system. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 37(6):909–936, 2003.
- [DGJ97] P. DEGOND, S. GÉNIEYS et A. JÜNGEL : A system of parabolic equations in nonequilibrium thermodynamics including thermal and electrical effects. *J. Math. Pures Appl.* (9), 76(10):991–1015, 1997.
- [DiP79] R. J. DiPERNA : Uniqueness of solutions to hyperbolic conservation laws. *Indiana Univ. Math. J.*, 28(1):137–188, 1979.
- [DJP00] P. DEGOND, A. JÜNGEL et P. PIETRA : Numerical discretization of energy-transport models for semiconductors with nonparabolic band structure. *SIAM J. Sci. Comput.*, 22(3):986–1007, 2000.
- [DLLP19] M. DE LORENZO, Ph. LAFON et M. PELANTI : A hyperbolic phase-transition model with non-instantaneous EoS-independent relaxation procedures. *J. Comput. Phys.*, 379:279–308, 2019.
- [DP98] D. A. DREW et S. PASSMAN : *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer, New-York, 1998.
- [Dre83] D.A. DREW : Mathematical modeling of two-phase flow. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 15:261–291, 1983.
- [EGH00] R. EYMARD, T. GALLOUËT et R. HERBIN : Finite volume methods. In *Handbook of numerical analysis, Vol. VII*, Handb. Numer. Anal., VII, pages 713–1020. North-Holland, Amsterdam, 2000.

- [Eva04] L. C. EVANS : A survey of entropy methods for partial differential equations. *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)*, 41(4):409–438, 2004.
- [Fac08] G. FACCANONI : *Étude d'un modèle fin de changement de phase liquide-vapeur. Contribution à l'étude de la crise d'ébullition*. Thèse de doctorat, École Polytechnique, 2008.
- [FBD11] E. FRANCK, C. BUET et B. DESPRÉS : Asymptotic preserving finite volumes discretization for non-linear moment model on unstructured meshes. In *Finite volumes for complex applications, VI (Prague, 2011)*, pages 467–474. Springer, 2011.
- [FKA10] G. FACCANONI, S. KOKH et G. ALLAIRE : Approximation of liquid-vapor phase transition for compressible fluids with tabulated eos. *Comptes Rendus Mathématique*, 348(7):473 – 478, 2010.
- [FKA12] G. FACCANONI, S. KOKH et G. ALLAIRE : Modelling and simulation of liquid-vapor phase transition in compressible flows based on thermodynamical equilibrium. *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.*, 46(5):1029–1054, 2012.
- [FL11] T. FLÅTTEN et H. LUND : Relaxation two-phase flow models and the subcharacteristic condition. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 21(12):2379–2407, 2011.
- [FR15] F. FILBET et T. REY : A hierarchy of hybrid numerical methods for multiscale kinetic equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 37(3):A1218–A1247, 2015.
- [Gav14] S. GAVRILYUK : The structure of pressure relaxation terms : the one-velocity case. Rapport technique, EDF, H-I83-2014-0276-EN, 2014.
- [Gha18] H. GHAZI : *Modelling compressible flows with phase transition and metastable states*. Theses, Université de Nantes, novembre 2018.
- [GHS02] T. GALLOUËT, J.-M. HÉRARD et N. SEGUIN : Some recent finite volume schemes to compute euler equations using real gas eos. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 39(12):1073–1138, 2002.
- [GHS04] T. GALLOUËT, J.-M. HÉRARD et N. SEGUIN : Numerical modeling of two-phase flows using the two-fluid two-pressure approach. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 14(5):663–700, 2004.
- [GL96a] L. GOSSE et A.-Y. LEROUX : Un schéma-équilibre adapté aux lois de conservation scalaires non-homogènes. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 323(5):543–546, 1996.
- [GL96b] J. M. GREENBERG et A.-Y. LEROUX : A well-balanced scheme for the numerical processing of source terms in hyperbolic equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33(1):1–16, 1996.
- [GLTR05] E. GODLEWSKI, K.-C. LE THANH et P.-A. RAVIART : The numerical interface coupling of nonlinear hyperbolic systems of conservation laws. II. The case of systems. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 39(4):649–692, 2005.
- [GM04] V. GIOVANGIGLI et M. MASSOT : Entropic structure of multicomponent reactive flows with partial equilibrium reduced chemistry. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 27(7):739–768, 2004.
- [GR91] E. GODLEWSKI et P.-A. RAVIART : *Hyperbolic systems of conservation laws*. Mathématiques & Applications, Ellipses, 1991.
- [GR04] E. GODLEWSKI et P.-A. RAVIART : The numerical interface coupling of nonlinear hyperbolic systems of conservation laws. I. The scalar case. *Numer. Math.*, 97(1):81–130, 2004.
- [GS02] S. GAVRILYUK et R. SAUREL : Mathematical and numerical modeling of two-phase compressible flows with micro-inertia. *J. Comput. Phys.*, 175(1):326–360, 2002.

- [GS07] F. GOLSE et F. SALVARANI : The nonlinear diffusion limit for generalized Carleman models : the initial-boundary value problem. *Nonlinearity*, 20(4):927–942, 2007.
- [GT02] L. GOSSE et G. TOSCANI : An asymptotic-preserving well-balanced scheme for the hyperbolic heat equations. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 334(4):337–342, 2002.
- [GT03] L. GOSSE et G. TOSCANI : Space localization and well-balanced schemes for discrete kinetic models in diffusive regimes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 41(2):641–658 (electronic), 2003.
- [Gui07] V. GUILLEMAUD : *Modelling and numerical simulation of two-phase flows using the two-fluid two-pressure approach*. Theses, Université de Provence - Aix-Marseille I, mars 2007.
- [H16] J.-M. HÉRARD : A class of compressible multiphase flow models. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 354(9):954–959, 2016.
- [Héro7] J.-M. HÉRARD : A three-phase flow model. *Math. Comput. Modelling*, 45(5-6):732–755, 2007.
- [HHLC15] P. HELLUY, O. HURISSE et E. LE COUPANEC : Verification of a two-phase flow code based on an homogeneous model. *Int. J. Finite Vol.*, EDF Special Workshop:24, 2015.
- [HHM17] E. HAN, M. HANTKE et S. MÜLLER : Efficient and robust relaxation procedures for multi-component mixtures including phase transition. *J. Comput. Phys.*, 338:217–239, 2017.
- [H]04] K. HUTTER et K. JÖHNK : *Continuum methods of physical modeling*. Springer-Verlag, Berlin, 2004. Continuum mechanics, dimensional analysis, turbulence.
- [H]11] P. HELLUY et J. JUNG : A coupled well-balanced and random sampling scheme for computing bubble oscillations. In *Congrès National de Mathématiques Appliquées et Industrielles*, volume 35 de *ESAIM Proc.*, pages 245–250. EDP Sci., Les Ulis, 2011.
- [H]14] P. HELLUY et J. JUNG : Interpolated pressure laws in two-fluid simulations and hyperbolicity. In *Finite volumes for complex applications. VII. Methods and theoretical aspects*, volume 77 de *Springer Proc. Math. Stat.*, pages 37–53. Springer, Cham, 2014.
- [H]Po4] S. HOLST, A. JÜNGEL et P. PIETRA : An adaptive mixed scheme for energy-transport simulations of field-effect transistors. *SIAM J. Sci. Comput.*, 25(5):1698–1716, 2004.
- [HL92] L. HSIAO et T.-P. LIU : Convergence to nonlinear diffusion waves for solutions of a system of hyperbolic conservation laws with damping. *Comm. Math. Phys.*, 143(3):599–605, 1992.
- [HLVL83a] A. HARTEN, P. D. LAX et B. VAN LEER : On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Review*, 25(1):35–61, 1983.
- [HLvL83b] A. HARTEN, P. D. LAX et B. van LEER : On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Rev.*, 25(1):35–61, 1983.
- [Hof85] D. HOFF : Invariant regions for systems of conservation laws. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 289(2):591–610, 1985.
- [HQ19] O. HURISSE et L. QUIBEL : A homogeneous model for compressible three-phase flows involving heat and mass transfer. In *Workshop on Compressible Multiphase Flows : derivation, closure laws, thermodynamics*, volume 66 de *ESAIM Proc. Surveys*, pages 84–108. EDP Sci., Les Ulis, 2019.
- [HS06] P. HELLUY et N. SEGUIN : Relaxation models of phase transition flows. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 40(2):331–352, 2006.
- [HUL01] J.-B. HIRIART-URRUTY et C. LEMARÉCHAL : *Fundamentals of convex analysis*. Grundlehren Text Editions. Springer-Verlag, Berlin, 2001.

- [Hur14] O. HURISSE : Application of an homogeneous model to simulate the heating of two-phase flows. *Int. J. Finite Vol.*, 11:37, 2014.
- [Hur17] O. HURISSE : Numerical simulations of steady and unsteady two-phase flows using a homogeneous model. *Comput. & Fluids*, 152:88–103, 2017.
- [Ish75] M. ISHII : *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Eyrolles, Paris, 1975.
- [Jao01] S. JAOUEN : *Étude mathématique and numérique de stabilité pour des modèles hydrodynamiques avec transition de phase*. Thèse de doctorat, Université Pierre and Marie Curie-Paris 6, France, 2001.
- [Jin99] S. JIN : Efficient asymptotic-preserving (AP) schemes for some multiscale kinetic equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(2):441–454 (electronic), 1999.
- [Jin12] S. JIN : Asymptotic preserving (AP) schemes for multiscale kinetic and hyperbolic equations : a review. *Riv. Math. Univ. Parma (N.S.)*, 3(2):177–216, 2012.
- [JPT98] S. JIN, L. PARESCHI et G. TOSCANI : Diffusive relaxation schemes for multiscale discrete-velocity kinetic equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35(6):2405–2439, 1998.
- [Jün01] A. JÜNGEL : *Quasi-hydrodynamic semiconductor equations*, volume 41 de *Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications*. Birkhäuser Verlag, Basel, 2001.
- [Jun13] J. JUNG : *Schémas numériques adaptés aux accélérateurs mutlicoeurs pour les écoulements bifluïdes*. Thèse de doctorat, Université de Strasbourg, 2013.
- [Kat75] T. KATO : The Cauchy problem for quasi-linear symmetric hyperbolic systems. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 58(3):181–205, 1975.
- [Kaw87] S. KAWASHIMA : Large-time behavior of solutions of the discrete Boltzmann equation. *Comm. Math. Phys.*, 109(4):563–589, 1987.
- [KMB⁺01] A.K. KAPILA, R. MENIKOFF, J.B. BDZIL, S.F. SON et D.S. STEWART : Two-phase modelling of ddt in granular materials : reduced equations. *Phys. Fluids*, 13:3002–3024, 2001.
- [Lis20] G. LISSONI : DDFV schemes for semiconductors energy-transport models. Proceedings of ALGORITHMY, 2020.
- [LL69] L. LANDAU et E. LIFSCHITZ : *A Course of theoretical physics, vol 5, Statistical Physics, ch 8*. Pergamon Press, 1969.
- [LT13] C. LATTANZIO et A.E. TZAVARAS : Relative entropy in diffusive relaxation. *SIAM J. Math. Anal.*, 45(3):1563–1584, 2013.
- [Mei10] M. MEI : Best asymptotic profile for hyperbolic p -system with damping. *SIAM J. Math. Anal.*, 42(1):1–23, 2010.
- [MHR16] S. MÜLLER, M. HANTKE et P. RICHTER : Closure conditions for non-equilibrium multi-component models. *Contin. Mech. Thermodyn.*, 28(4):1157–1189, 2016.
- [MM09] I. MÜLLER et W. H. MÜLLER : *Fundamentals of thermodynamics and applications*. Springer-Verlag, Berlin, 2009.
- [Moc80] M. S. MOCK : Systems of conservation laws of mixed type. *Journal of Differential Equations*, 37(1):70–88, 1980.
- [Mru93] R. MRUGALA : Continuous contact transformations in thermodynamics. *Reports on Mathematical Physics*, 33(1):149 – 154, 1993.
- [MV06] S. MÜLLER et A. VOSS : The riemann problem for the euler equations with nonconvex and nonsmooth equation of state : Construction of wave curves. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 28(2):651–681, 2006.

- [Nis96] K. NISHIHARA : Convergence rates to nonlinear diffusion waves for solutions of system of hyperbolic conservation laws with damping. *J. Differential Equations*, 131(2):171 – 188, 1996.
- [NWy00] K. NISHIHARA, W. WANG et T. YANG : L_p -convergence rate to nonlinear diffusion waves for p -system with damping. *J. Differential Equations*, 161(1):191–218, 2000.
- [PR76] D.-Y. PENG et D. B. ROBINSON : A new two-constant equation of state. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 15(1):59–64, 1976.
- [Qui20] L. QUIBEL : *Simulation of water-vapor two-phase flows with non-condensable gas*. Theses, Université de Strasbourg, septembre 2020.
- [RJ05] C. ROHDE et V. JOVANOVIĆ : Finite-volume schemes for friedrichs systems in multiple space dimensions : a priori and a posteriori error estimates. *Numer. Meth. P.D.E.*, 21(1):104–131, 2005.
- [Roc97] R. T. ROCKAFELLAR : *Convex analysis*. Princeton Landmarks in Mathematics. Princeton University Press, Princeton, NJ, 1997. Reprint of the 1970 original, Princeton Paperbacks.
- [Sal19] K. SALEH : A relaxation scheme for a hyperbolic multiphase flow model—Part I : Barotropic EOS. *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.*, 53(5):1763–1795, 2019.
- [SCK⁺10] F. SOHL, M. CHOUKROUN, J. KARGEL, J. KIMURA, R. PAPPALARDO, S. VANCE et M. ZOLOTOV : Subsurface water oceans on icy satellites : Chemical composition and exchange processes. *Space Science Reviews*, 2010.
- [Soa72] G. SOAVE : Equilibrium constants from a modified redlich-kwong equation of state. *Chemical Engineering Science*, 27(6):1197 – 1203, 1972.
- [SPA08] R. SAUREL, F. PETITPAS et R. ABGRALL : Modelling phase transition in metastable liquids : application to cavitating and flashing flows. *J. Fluid Mech.*, 607:313–350, 2008.
- [TGP15] M. THEILLARD, F. GIBOU et T. POLLOCK : A sharp computational method for the simulation of the solidification of binary alloys. *J. Sci. Comput.*, 63(2):330–354, 2015.
- [Tza05] A. E. TZAVARAS : Relative entropy in hyperbolic relaxation. *Commun. Math. Sci.*, 3(2):119–132, 2005.
- [vDP77] C. J. van DUYN et L. A. PELETIER : Asymptotic behaviour of solutions of a nonlinear diffusion equation. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 65(4):363–377, 1977.
- [vDP77] C. J. van DUYN et L. A. PELETIER : A class of similarity solutions of the nonlinear diffusion equation. *Nonlinear Anal.*, 1(3):223–233, 1976/77.
- [Vis09] A. VISINTIN : Phase transitions and glass formation in binary alloys. *SIAM J. Math. Anal.*, 41(5):1725–1756, 2009.
- [VMCo4] V.R. VOLLER, A. MOUCHMOV et M. CROSS : An explicit scheme for coupling temperature and concentration fields in solidification models. *Applied Mathematical Modelling*, 28(1):79 – 94, 2004. *Mathematical Modelling in Metals Processing*.
- [Vol87] V.R. VOLLER : An implicit enthalpy solution for phase change problems : with application to a binary alloy solidification. *Applied Mathematical Modelling*, 11(2):110 – 116, 1987.
- [Vol08] V.R. VOLLER : A numerical method for the rubinstein binary-alloy problem in the presence of an uncer-cooled liquid. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(2):696 – 706, 2008.
- [WSA84] D. G. WILSON, A. D. SOLOMON et V. ALEXIADES : A model of binary alloy solidification. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 20(6):1067–1084, 1984.

- [Yon02] W.-A. YONG : Basic structures of hyperbolic relaxation systems. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A*, 132(5):1259–1274, 2002.
- [ZHW10] A. ZEIN, M. HANTKE et G. WARNECKE : Modeling phase transition for compressible two-phase flows applied to metastable liquids. *J. Comp. Phys.*, 229:1964–2998, 2010.